

Responsable :
Fabien BRUNEVAL
■ 01 69 08 43 49



énergie atomique • énergies alternatives

SEMINAIRE



Service de Recherches de Métallurgie Physique

DEN/DANS/DMN

Salle de réunion du SRMP – Bâtiment 520 – Pièce 109

Screw dislocation Kink Dynamics Model in BCC Iron Based on First-Principles and Molecular Dynamics Calculations

Mitsuhiro Itakura

***Center for Computational Science & e-System
Japan Atomic Energy Agency***

Nucleation and migration of kinks of screw dislocation in BCC iron is simulated using the Langevin dynamics. Static parameters such as Peierls potential and line tension coefficient are derived from first-principles calculations, while dynamic parameters such as effective mass and viscosity coefficient are derived from molecular dynamics simulations. We show that the jerky motion of screw dislocations observed in low-temperature in-situ observation experiments can be possibly attributed to the reflection of kinks at the terminating points of the screw dislocations.

Lundi 23 janvier 2012 à **14h**

N.B : *Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance – les visiteurs de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre : Tel : 01 69 08 66 64 – Fax : 01 69 08 68 67*

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
Centre de Saclay - Bât 520 - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex - France
Service de Recherches de Métallurgie Physique
Séminaires - Martine Logé : Tél. : 01 69 08 51 67 – Fax. : 01 69 08 68 67



Etablissement public à caractère industriel et commercial
R.C.S. PARIS B 775 685 019

ISO 14001
BUREAU VERITAS
Certification

