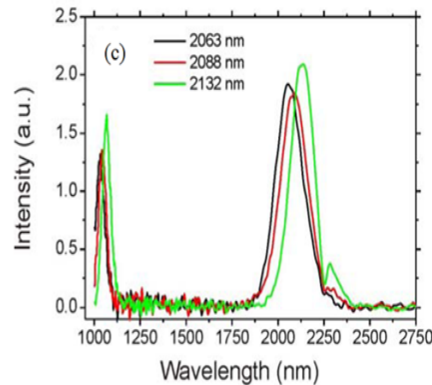
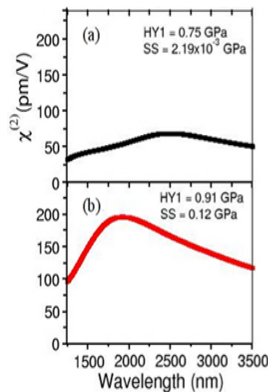




Comment créer de nouvelles sources de lumière ou des commutateurs ultra-rapides à faible coût ?

Contact : Valérie Vénier. T : 01 69 33 36 91

Notre objectif est de mettre au point des dispositifs optiques capables de générer, convertir et moduler la lumière, par exemple dans des réseaux de fils de silicium. Pour cela il faut parvenir à doubler la fréquence de la lumière incidente, même à très faible puissance lumineuse, grâce à des processus optiques non-linéaires du second ordre. Malheureusement la centro-symétrie des cristaux de silicium interdit ces processus de second ordre, il faut donc modifier leurs propriétés optiques. L'idée a consisté à briser la symétrie du cristal en lui appliquant une contrainte inhomogène pour déformer la structure cristalline à l'échelle atomique. La réponse optique du matériau contraint a été simulée de façon *ab initio* par les chercheurs de l'European Theoretical Spectros-



a) b) Résultats de la simulation pour la susceptibilité du second ordre pour différentes valeurs de la contrainte.
c) Mesure de la génération de seconde harmonique pour trois longueurs d'onde du faisceau pompe.

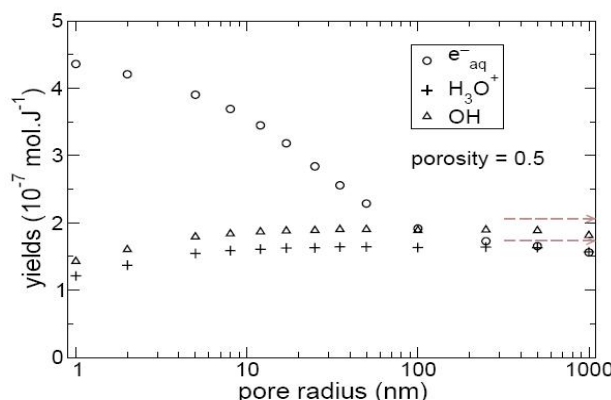
copy Facility (LSI), dans le formalisme de la fonctionnelle de la densité dépendant du temps. La symétrie du réseau massif a été brisée en modifiant la position des atomes de Si dans le réseau. Par ailleurs, les mesures de transmission optique réalisées à Trento et Brescia ont montré clairement la génération d'un signal de seconde harmonique en accord qualitatif avec les simulations numériques (figure). L'efficacité de conversion ainsi obtenue est comparable à celle des meilleurs cristaux non-linéaires couramment utilisés comme LiNbO_3 . L'application d'une contrainte sur le cristal de Si ouvre de nouvelles fonctionnalités, permettant d'envisager le développement de circuits intégrés basés sur les non-linéarités au second ordre de Si.

Cimap Radiolyse de l'eau en milieu confiné

Contact : Benoît Gervais. T : 02 31 45 47 93

La radiolyse de l'eau en milieu confiné est un phénomène important dans l'endommagement sous rayonnements ionisants des matériaux contenant des petites inclusions d'eau, comme les bétons. L'effet du confinement est un phénomène complexe qui peut être étudié à l'aide de matériaux modèles comme les silices poreuses, au sein desquelles les pores de dimension nanométrique sont remplis d'eau. On peut également observer ces effets de confinement en immergeant des sphérules nanométriques en concentration élevées dans de l'eau. L'équipe simulation du CIMAP a réalisé une simulation des effets de la radiolyse sur de tels systèmes dans le cadre de l'ANR RADICO en collaboration avec le laboratoire de radiolyse du CEA Saclay et l'université de Lyon.

Nous avons montré que le large excès d'électrons solvatés, observé expérimentalement, doit son origine à la position relative des bandes de conduction de la silice et de l'eau, qui favorise



Simulation de l'évolution des rendements initiaux d'électrons, d'hydronium et d'hydroxyle en fonction du rayon des pores pour une porosité de 0,5. Les flèches indiquent la valeur correspondante pour l'eau pure non confinée, corrigée de l'effet de porosité.

le transfert des électrons éjectés sous rayonnement vers la phase aqueuse, à une échelle de temps de l'ordre de quelques picosecondes. Comme illustré sur la figure, cela conduit à une forte variation du rendement d'électrons solvatés en fonction de la taille des pores. Ainsi le confinement a pour effet d'augmenter jusqu'à un facteur 2 ce rendement, lorsque le diamètre devient inférieur à 50 nm. Ce travail se poursuit avec l'étude de la recombinaison à l'interface eau-silice des trous et des excitons créés dans la silice.

