

Mercredi 30 Avril 2014 à 10h30

Salle de réunion du DMN « PLUTON » – Bâtiment 520 - Pièce 19

Suivre la cinétique atomique de matériaux vitreux et complexes sur des temps macroscopiques avec ART cinétique

Normand Mousseau

*Département de physique Université de Montréal
CNRS et LPTMC
Université Pierre et Marie Curie*

Les mécanismes de diffusion et de relaxation des matériaux complexes à l'échelle atomique demeurent encore largement incompris tant d'un point de vue théorique qu'expérimental. Comment, en effet, suivre le mouvement des atomes sur des temps pertinents pour comprendre le vieillissement, la propagation des fractures et l'autoassemblage ?

Si des méthodes numériques existent depuis plusieurs décennies pour l'étude de la cinétique des systèmes simples, tels que la croissance de métal sur métal, la simulation sur des temps longs des matériaux complexes — verres, matériaux sous bombardement ionique, croissance de semi-conducteurs, etc. — s'avère beaucoup plus complexe.

Dans ce séminaire, je présente ART cinétique, un algorithme de Monte Carlo cinétique hors réseau avec construction du catalogue d'événements à la volée. Cette méthode nous a permis de simuler au niveau atomique et sur plus d'une seconde la cinétique de relaxation d'une boîte de silicium implanté comptant 30 000 atomes et de reproduire et de comprendre les expériences de nanocalorimétrie sur le même système. Nous avons également appliqué ART cinétique à plusieurs autres problèmes dont la relaxation de défauts sur des temps longs dans le silicium amorphe et la cinétique d'agrégation de lacunes dans le fer.

Ce travail a été réalisé en collaboration avec Laurent Karim Béland, Peter Brommer, Fedwa El-Mellouhi, Jean-François Joly et Laurent Lewis.

Références:

F. El-Mellouhi, N. Mousseau and L.J. Lewis, Phys. Rev. B 78 153202 (2008).

P. Brommer and N. Mousseau, Phys. Rev. Lett. 108 219601 (2012).

L.K. Béland, Y. Anahory et al., Phys. Rev. Lett. 111 105502 (2013).

Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance, et ceux 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
DEN/DANS/DMN Service de Recherches de Métallurgie Physique
Centre de Saclay – Bât. 520 - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex – France

