



université
PARIS-SACLAY

LIDYL

LABORATOIRE INTERACTIONS, DYNAMIQUES ET LASERS

LIDYL-UMR 9222

CEA, CNRS, Université Paris-Saclay

SEMINAIRE LIDYL

Christian ANGELIE, Jean-Maik SOUDAN

Groupe Dynamique Réactionnelle

**Le Vendredi 24 Juin 2016 à 10h30
- Bâtiment 522 - Salle 138**

«Etude théorique d'agrégats de fer: transition solide-liquide et structures solides amorphes ou cristallines»

On présente de nouveaux résultats théoriques sur des agrégats de fer étudiés au moyen de deux outils. D'une part l'interaction des atomes est représentée par un potentiel classique de haut niveau du type MEAM, tenant compte de façon complexe de l'environnement de chaque atome par les distances des voisins, les angles de cisaillement, et des coefficients d'écrantage. D'autre part, la thermodynamique est explorée par un algorithme Monte Carlo d'histogramme plat permettant de balayer des intervalles larges en surmontant plus aisément les barrières de potentiel. Cet algorithme fournit la densité d'états $g(E)$ du système et permet de calculer toutes les données thermodynamiques, et en particulier la température de fusion de l'agrégat. Les études récentes ont surtout porté sur la série des agrégats 13, 55, 147 et 309 atomes qui correspondent aux nombres magiques des structures icosaèdres mais aussi cuboctaèdres. Il a été montré que l'icosaèdre est bien la forme la plus stable pour cette série. La transition cuboctaèdre \leftrightarrow icosaèdre a été analysée (mécanisme de Buckminster Fuller-Mackay), révélant une quasi absence de barrière énergétique dans le sens \rightarrow . De plus, il est apparu que l'agrégat 147 atomes a un comportement particulier: il est impossible de revenir du liquide vers l'icosaèdre, le système se piégeant inéluctablement dans un état amorphe. Cette difficulté à atteindre l'ergodisme dépend de façon critique de la taille de l'agrégat. L'agrégat 38 atomes formés initialement dans une structure fcc relaxe ainsi vers un état fondamental par une cascade lente de 6 états intermédiaires métastables. La courbe de température de fusion en fonction de la taille de l'agrégat a été complétée par ces résultats, révélant un écart très net à la loi de Pawlow d'une décroissance en $1/R$: la température de fusion remonte fortement pour les petits agrégats par rapport à cette loi. Ceci manifeste la thermodynamique des petits systèmes avec les effets de surface et de courbure.

Formalités d'entrée :

Visiteur U.E. : Se faire connaître au moins 48 heures à l'avance pour l'établissement de votre autorisation d'entrée sur le Centre de Saclay.

Visiteur hors U.E. : Se faire connaître au moins 4 jours à l'avance pour les formalités d'entrée et se faire accompagner par un agent CEA.

Sans autorisation, vous ne pourrez entrer sur le Centre de Saclay. Tél. : 33.1.69.08.74.09- Fax : 33.1.69.08.76.39 - email : caroline.lebe@cea.fr ou veronique.gerecny@cea.fr
Dans TOUS LES CAS, se munir d'une pièce d'identité (passeport et carte d'identité - pas de permis de conduire)