

Responsable :
Martine Logé
☎ 01 69 08 51 67

SEMINAIRE



Service de Recherches de Métallurgie Physique
DEN/DANS/DMN

Bibliothèque du SRMP – Bâtiment 520 – Pièce 109

***Simulations Monte Carlo dans l'ensemble Grand Canonique :
lacunes surabondantes en volume et lacunes thermiques
dans un joint de flexion***

Dôme TANGUY

CNRS UMR 5146, Ecole des Mines de Saint-Etienne

J'expliquerai brièvement le principe des simulations MC avec nombre de particules variable, en citant principalement le travail de Swope dans les milieux denses. Je présenterai ensuite l'algorithme que nous utilisons, qui est inspiré de ce travail, mais qui utilise simplement un réseau de référence et une décomposition en cellules de Voronoi. Je montrerai deux exemples : la simulation des populations de clusters VHn (n hydrogène dans une lacune) dans Al et la simulation de lacunes thermiques dans le joint de flexion symétrique $\Sigma=33$ (554) [110], toujours dans Al.

Mardi 13 janvier 2009 à 10h30

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