

ModMat Lyon 2015
8-9 janvier 2015
INSA de Lyon – Université Lyon 1
Lieu : Bibliothèque Marie Curie de l'INSA de Lyon

Jeudi 8 janvier 2015

9h30-10h Accueil des participants

Session 1 : Défauts dans les solides

10h00-10h20: D. Kandaskalov (IM2NP Aix-Marseille) Etude DFT de la formation de cavités dans le fer-cc.

10h20-10h40: T. Schuler (SRMP Saclay) Impact thermodynamique et cinétique des amas lacunes-solutés (C, N, O) dans le fer- α .

10h40-11h00: D. Connetable (CIRIMAT Toulouse) First-principles study and thermodynamic model of vacancy-hydrogen clusters in nickel.

11h00-11h20: Y. Ferro (PIIM Aix-Marseille) Hydrogen diffusion and vacancies formation in tungsten: DFT and statistical models

11h20-11h40: E. Clouet (SRMP Saclay) Modélisation ab-initio de la mobilité des dislocations vis dans le zirconium et le titane

REPAS

Session 2 : Réponse mécanique

13h40-14h00: N. Fillot (LAMCOS INSA-Lyon) From continuum to molecular scale in modelling elastohydrodynamic lubrication

14h00-14h20: S. Brochard (Pprime Poitiers) Simulations à l'échelle atomique de la plasticité de nano-objets de silicium

14h20-14h40: P. Carrez (UMET Lille) Plasticité de la perovskite $MgSiO_3$ sous pression: Etude atomique des propriétés de coeur des dislocations [100] et [010]

14h40-15h00: C. Varvenne (EPFL Lausanne) Durcissement par solution solide dans les alliages à haute entropie de structure CFC

15h00-15h20: M. Perez (MATEIS INSA-Lyon) Multiscale approach to steel design.

15h20-16h00: Pause

Session 3 : Structure, matériaux pour l'énergie

16h00-16h20: S. Merabia (ILM Lyon) Nanoscale heat transport across superlattices: effects of the interfacial roughness and partial amorphisation of the solids

16h20-16h40: R. Poloni (Simap Grenoble) Computational design of metal-organic frameworks for CO₂ capture

16h40-17h00: G. Ferlat (IMPMC Paris) Energétique dans les polymorphes de la silice (SiO₂) et du trioxyde de bore (B₂O₃): de la DFT au QMC

17h00-17h20: L. Pedesseau (INSA Rennes) Atomistic modelling of multibandgaps and multivalleys hybrid perovskites for photovoltaic applications

17h20-17h40: L. Shi (CEA Cadarache) First-principles investigation of charged point defects and fission gases in CeO₂

20h

DÎNER Victoria Hall

Vendredi 9 janvier

Session 4 : Dynamique et transitions de phases

08h30-08h50: V. Stutzmann(CEA Bruyères-le-Châtel) Etude ab-initio des transitions de phases du titane

08h50-09h10: A. Mafety (IMPIC Paris) Glaces d'ammoniac monohydraté sous haute pression par méthodes ab initio

09h10-09h30: Y. Magnin(Aix-Marseille) DIAGRAMMES DE PHASES DE NANOPARTICULES NI-C PAR SIMULATION NUMÉRIQUE

09h30-09h50: A. M. Saitta (IMPIC Paris) Miller experiments in atomistic computer simulations

09h50-10h10: B. Dorado(CEA Bruyères-le-Châtel) Phonons dans les matériaux à base d'actinides et application au calcul ab initio des coefficients de diffusion

10h10-10h50: Pause

Session 5 : Surfaces-Interfaces

10h50-11h10: C. Noguera(INSP Paris) Electronic structure scenarios at stoichiometric polar/polar interfaces.

11h10-11h30: D. Forster(ILM Lyon) Nanoparticules de platine sur substrats graphitiques et rôle des forces de dispersion

11h30-11h50: F. Cleri (IEMN Lille) SHOULD MOLECULAR LATTICES ALWAYS BE THE MOST DENSELY PACKED ?

11h50-12h10: G. Roma (SRMP Saclay) Adsorption de selenium sur Mo(110) : stabilité et influence du sodium sur la cinétique

12h10-12h30: E. Gaudry(IJL Nancy) Surfaces d'approximants de quasicristaux décagonaux: Al₁₃Co₄ et Al₅Co₂

12h30-14h00: repas

Session 6 : Amorphes

14h00-14h20: S. Ispas (L2C Montpellier) First-principles modelling of complex silicate glasses

14h20-14h40: G. Molnar(ILM Lyon) Microplasticity of MD-modeled sodium silicate glasses

14h40-15h00: N. Richard(CEA Bruyères-le-Châtel) Etude théorique des propriétés des défauts et des dopants dans SiO₂ amorphe.

15h00-15h30: Pause

Session 7 : Nucléation-Croissance

15h30-15h50: H.T. Le(INSP Paris) Molecular dynamics simulations of epitaxial growth of thin silicon films from the deposition of hydrogenated silicon clusters

15h50-16h10: J. Lam (ILM Lyon) Nucleation of nanoparticles: a microscopic approach based on quantum thermochemistry

16h10-16h30: O. Pierre-Louis(ILM Lyon) Solid-state wetting and dewetting

16h30-16h50: F. Legoll(ENPC Paris) Dynamique effective pour des coordonnées de réaction lente

16h50-17h10: H. Bulou (IPCMS Strasbourg) Whispering gallery modes in nanostructures : a way to force the electron to hug the walls (of potential)

17h10-17h30: CONCLUSIONS

Etude DFT de la formation de cavités dans le fer-cc

D. Kandaskalov¹, C. Mijoule², D. Connétable²

¹Aix-Marseille Université, CNRS, IM2NP UMR 7334, Campus de Saint-Jérôme, Avenue Escadrille Normandie Niemen, Case 142, F-13397 Marseille, France

²CIRIMAT, Ecole Nationale d'Ingénieurs en Arts Chimiques et Technologiques, 4, allée Emile Monso - BP 44362 31030 Toulouse Cedex 4, France

dmytro.kandaskalov@im2np.fr

Les systèmes cristallins réels ne sont jamais des cristaux parfaits. Ils présentent toujours de nombreux défauts. Les propriétés physiques et chimiques macro- et microscopiques des systèmes (élasticité, plasticité, fragilité, stabilité, mobilité etc.) sont très souvent directement reliées à la présence et à la nature de ces défauts. L'étude expérimentale de défauts ponctuels est limitée par l'étude de la formation de monolacunes. Ainsi la modélisation à l'échelle atomique est un outil indispensable dans l'étude de la formation de multilacunes dans les matériaux dont les métaux.

Notre étude théorique consiste dans l'investigation des paramètres énergétiques et géométriques de formation de multilacunes V_n $n=1-15$ dans le volume du Fe-cc et sur ses surfaces Fe(100) et Fe(110) dans le cas de monolacunes [1-2]. Deuxièmement, nous avons modélisé les énergies de formation des grandes cavités symétriques (cubique, octaédrique, rhombododécaédrique) en fonction de leur taille [2]. Notre choix de code est VASP : GGA-PAW-PW91. La taille de la supercellule est de 128 atomes.

L'étude des monolacunes (l'énergie d'activation et coefficient de diffusion) nous a permis de valider notre méthodologie en comparant avec les résultats expérimentaux [3]. L'énergie de formation de monolacune est surestimée, mais elle est en accord avec les autres travaux théoriques [4-5].

L'étude des lacunes V_n ($n=2-4$) nous a montré que les défauts les plus compacts sont les plus stables. Dans le cas de bilacunes, les bilacunes de deuxième et premier voisinage (2NN et 1NN) sont les plus stables. Par la suite les défauts compacts plus grands sont constitués de l'ensemble des bilacunes 1NN et 2NN. Nous avons montré que les défauts V_n ($n=4-10$) grandissent sous la forme de tuyaux qui représentent la concaténation perpendiculaire de bilacunes 2NN. Pour la taille $n=11-15$, les défauts volumiques deviennent plus stables et la forme de défaut V_{15} est rhombododécaèdre.

L'étude de similarités de constitution de défauts V_n ($n=1-15$) nous a permis de modéliser les défauts symétriques de la plus grande taille en se basant sur le fait que l'énergie de formation d'un défaut est l'énergie de formation de surface du défaut donné. Nous avons étudié trois familles de défauts: cubique, octaédrique, rhombododécaédrique. Nous avons montré que le plus stable d'entre eux est le défaut rhombododécaédrique.

1. D. Kandaskalov, C. Mijoule, D. Connétable, *J. Nucl. Mat.* **441**, 168 (2013).
2. D. Kandaskalov. Thèse de Doctorat. Etude théorique de défauts ponctuels et complexes dans les métaux : application au fer-cc et nickel-cfc. INP Toulouse (2013).
3. L. De Schepper, D. Segers, L. Dorikens-Vanpraet G Knuyt, LM Stals and P. Moser, *Phys. Rev. B* **27**, 5257 (1983)
4. T. Ohnuma, N. Soneda, and M. Iwasawa, *Acta Materialia* **57**, 5947 (2009).
5. C. Domain, and C.S. Becquart, *Phys. Rev. B* **65**, 024103 (2002).

Impact thermodynamique et cinétique des amas lacunes-solutés (C, N, O) dans le fer- α .

Thomas Schuler, Maylise Nastar

CEA, DEN, Service de Recherches de Métallurgie Physique, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

Le fer- α de très haute pureté contient toujours une certaine quantité d'impuretés dont la concentration est typiquement inférieure à 1 appm et donc difficile à quantifier de manière précise. Parmi ces impuretés, le carbone, l'azote et l'oxygène sont susceptibles d'avoir une influence importante sur certaines propriétés du matériau à cause de leur très forte énergie de liaison avec les lacunes. A l'équilibre thermique, la solution solide est très diluée à la fois en solutés et en lacunes, mais ces deux entités sont tout de même capables de former, dans certaines conditions de température et de concentration, des amas lacunes-solutés en quantité non-négligeable. Notre travail a pour but d'étudier l'impact de ces amas lacunes-solutés sur les propriétés thermodynamiques et cinétiques de la solution solide de fer- α .

L'énergie de formation des lacunes dans le fer- α est une quantité difficilement mesurable. Les quelques données existantes ne sont pas en accord avec les résultats des calculs DFT. Nous expliquons que la présence de très faibles quantités d'impuretés (notamment oxygène) dans les échantillons expérimentaux modifie les concentrations d'équilibre de lacunes de plusieurs ordres de grandeurs. Nos résultats analytiques (issus de développements basse température [1-2]) dans une solution solide multi-composants comprenant les trois impuretés C, N et O sont en accord quantitatif avec des mesures par rotation de spin de muons [3]. Par cette comparaison, nous mettons également en avant le caractère non-arrhénien de l'évolution en température de l'énergie de formation des lacunes, dû à la présence des impuretés.

D'un point de vue cinétique, nous étudions les couplages de flux entre les lacunes et différents solutés interstitiels (C, N et O). Dans des situations hors d'équilibre (irradiation, broyage, trempe...) où des sursaturations de défauts ponctuels sont créées dans la solution solide, ces couplages de flux peuvent permettre d'expliquer des phénomènes de ségrégation d'impuretés au niveau des puits de défauts. Ces calculs sont effectués grâce à la méthode de champ moyen auto-cohérent [4-5] car les méthodes de type Monte Carlo cinétique sont inadaptées aux systèmes que nous calculons. Des simulations Monte Carlo cinétique ont tout de même permis de vérifier le champ moyen auto-cohérent sur d'autres cas.

Références

- [1] Ducastelle, *Order and Phase Stability in Alloys*, North-Holland (1991)
- [2] Barouh, Schuler *et al.*, Phys. Rev. B **90**, 054112 (2014)
- [3] Fürderer *et al.*, Mat. Science Forum **15-18**, 125-130 (1987)
- [4] Nastar, Phil. Mag. **85**, 3767 (2005)
- [5] Garnier *et al.*, Phys. Rev. B **88**, 134201 (2013)

First-principles study and thermodynamic model of vacancy-hydrogen clusters in nickel

Y. Wang^{1,2}, D. Tanguy², and D. Connétable^{1,*}

¹*CIRIMAT, UMR 5085, ENSIACET, Toulouse*

²*Institut Lumière Matière, UMR 5306, Université Lyon 1-CNRS, Villeurbanne*

* damien.connetable@ensiacet.fr

The interactions of hydrogen (H) with point defects in metals have been intensively studied in the past [1]. The complex interplay between the H atoms and the micro-structure can lead to physically based damage models in H generating environments. Furthermore, Fukai shown [1] that the H atoms could be at the origin of the superabundant vacancies (SAVs) observed in several metals (Nb, Ni) and play an important role in the environmental degradation of Ni-based alloys (H embrittlement). The formation of H-vacancy complexes simultaneously increases both the concentration of vacancies and the total hydrogen content in the metal. That such a phenomenon can have a very significant effect, becomes apparent, e.g., in the case of Ni, where it leads to the formation of up to approximately 20% of vacancies in a hydrogen-rich atmosphere. [2,3].

In Ni, ion implantation [4] was used to study deuterium (D)-vacancy interactions. This process creates all sorts of point defect-hydrogen clusters at low temperature, the most stable being vacancy-hydrogen clusters. Ion channeling showed that the preferred H position in the vacancy is the octahedral site, which enables multiple occupancy. Moreover, binding energies were measured from thermal desorption data by simulating D release with parametrized diffusion equations including trapping. [3,5]

To analyze such experimental data, it has been widely shown in the literature that interstitial hydrogen atoms can be generally trapped by various types of defects: point defects, voids, vacancies, solutes, precipitates, dislocations grain-boundaries. We will thus present a reliable theoretical study of the formation of V_Hn clusters combining *ab initio* results and thermodynamic model.

References

Journal of Alloys and Compounds **614** (2014) 211-220,
acta mater **78** (2014) 135.

[1] Y. Fukai "The Metal-Hydrogen System: Basic Bulk Properties", Springer-Verlag Berlin (2003).

[2] Y. Fukai et N. Okuma, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 1640

[3] Y. Fukai, *J. Alloys Comp.* **356-357** (2003) 263.

[4] F. Besenbacher, J. Bottiger and S.M. Myers, *J. Appl. Phys.* **53** (1982) 3536.

[5] Y. Fukai, M. Mizutani, S. Yokota, M. Kanazawa, Y. Miura and T. Watanabe, *J. Alloys Compounds* **356-357** (2003) 270

ABSTRACT

ModMat-2015

Hydrogen diffusion and vacancies formation in tungsten: DFT and statistical models

Y. Ferro^{*a}, N. Fernandez^a, and D. Kato^b^a Aix-Marseille Université, 13397 Marseille cedex 20, France^b National Institute for Fusion Science (NIFS), Toki, Gifu 509-5292, JapanEmail address of corresponding author: yves.ferro@univ-amu.fr

The interaction of hydrogen with tungsten and vacancies is investigated by mean of Density Functional Theory (DFT). Because DFT is limited to small models of about one hundred atoms at zero temperature, this work is complemented by a statistical approach with the aim to yield temperature dependent data that can be directly compared with macro-scale thermodynamic and kinetic experimental data.

It follows that DFT data are included in a statistical model based on transition state theory and thermodynamic. Such model allows revising the solubility and diffusivity of hydrogen in tungsten. The discrepancy between the experimental diffusion coefficient from Frauenfelder *et al*¹ and other DFT results² is understood and two diffusion regimes are proposed depending on the temperature.

The trapping of multiple hydrogen atoms in tungsten vacancies is also investigated. The hydrogen population in vacancies and the vacancy concentration in tungsten are shown to depend on the temperature. TDS spectra are simulated using simple kinetic laws; despite the simplicity of the model, the agreement is good agreement with experimental results recorded on single crystalline samples^{3,4}.

¹ R. Frauenfelder, *J. Vac. Sci. Technol.*, 6 (1969) 388

² K. Heinola, T. Ahlgren *J. Appl. Phys.*, 107 (2010) 113531

³ O. V. Ogorodnikova, T. Schwarz-Selinger, K. Sugiyama, T. Dürbeck and W. Jacob, *Phys. Scr.* T138 (2009) 014053

⁴ M. Poon, A.A. Haasz, J.W. Davis, *Journal of Nuclear Materials* 374 (2008) 390.

* yves.ferro@univ-amu.fr

Modélisation ab initio de la mobilité des dislocations vis dans le zirconium et le titane

Emmanuel Clouet¹, Nermine Chaari¹ et David Rodney²

1. CEA, DEN, Service de Recherche de Métallurgie Physique, F-91191 Gif-sur-Yvette
2. Institut Lumière Matière, Université Lyon 1, CNRS, UMR 5306, F-69622 Villeurbanne

Le développement du calcul ab initio, grâce aux progrès des méthodes numériques et à l'augmentation des puissances de calcul accessibles, permet désormais de simuler des systèmes de taille suffisante pour contenir des dislocations. Ceci autorise la modélisation à l'échelle atomique de la plasticité dans des matériaux pour lesquels les potentiels interatomiques sont encore peu fiables. C'est le cas par exemple des métaux de transition de structure cristallographique hexagonale compacte (hc), dont le titane et le zirconium.

Le titane et le zirconium ont un comportement plastique a priori similaire lié à leur structure cristallographique et à leur structure électronique voisine. En particulier, la plasticité dans ces deux métaux est contrôlée par les dislocations vis glissant principalement dans les plans prismatiques de la maille hc, le glissement pouvant être également dévié par activation thermique dans les plans pyramidaux ou les plans basaux. Nous avons modélisé par calculs ab initio la structure de cœur de la dislocation vis dans ces deux métaux de transition et étudié ses différents modes de glissement.

Dans le zirconium, la dislocation vis se dissocie dans le plan prismatique en deux parties purement vis. Ceci conduit à un glissement facile dans le plan de dissociation, avec une faible valeur de la contrainte de Peierls, i.e. la contrainte nécessaire pour faire glisser la dislocation sans activation thermique [1]. Nous avons également calculé avec la méthode NEB la barrière d'énergie pour que cette même dislocation vis migre dans un plan prismatique voisin de son plan d'habitat en glissant soit dans un plan pyramidal, soit dans un plan basal [2]. Les deux modes de glissement présentent la même barrière d'énergie, d'amplitude beaucoup plus importante que pour le glissement prismatique, et font appel au même mécanisme. Dans les deux cas, la dislocation passe par une configuration intermédiaire métastable, où la dislocation présente un étalement pyramidal. Cet étalement s'explique par l'existence d'une faute d'empilement métastable dans ce plan, faute dont la structure correspond à une macule élémentaire d'épaisseur égale à deux plans atomiques.

Les mêmes configurations sont obtenues pour la dislocation vis dans le titane, mais avec une stabilité relative inversée par rapport au zirconium, l'état fondamental de la dislocation correspondant à un étalement pyramidal. Ceci conduit à un glissement principalement prismatique, opérant par un mécanisme de blocage-déblocage, tel que proposé initialement par Farenc et al. sur la base de leurs essais de traction in situ au MET [3,4]. Pour glisser, la dislocation doit tout d'abord être activée dans sa configuration prismatique. Le glissement peut alors s'effectuer sur plusieurs vallées de Peierls avant que la dislocation ne retombe dans sa position bloquante, i.e. la configuration étalée dans le plan pyramidal.

[1] E. Clouet, Phys. Rev. B **86**, 144104 (2012).

[2] N. Chaari, E. Clouet et D. Rodney, Phys. Rev. Lett. **112**, 075504 (2014).

[3] S. Farenc, D. Caillard et A. Couret, Acta Metall. Mater. **41**, 2701 (1993).

[4] S. Farenc, D. Caillard et A. Couret, Acta Metall. Mater. **43**, 3669 (1995).

From continuum to molecular scale in modelling elastohydrodynamic lubrication

Nicolas Fillot
LAMCOS

INSA-Lyon

`nicolas.fillot@insa-lyon.fr`

Abstract

This presentation proposes an original approach in modelling elastohydrodynamic lubrication (EHL), combining a classical model derived from continuum mechanics and a nanoscale investigation carried out by Molecular Dynamics simulations. In particular, nanoscale slip is numerically quantified and a semi-analytical model for surface slip variation with pressure, film thickness and sliding velocity is presented. A composite model involving both continuum mechanics and nanoscale effects allows for a better understanding of simple formation and offers a new basis towards a physically based friction prediction. This tentative represents a new direction towards a more realistic modelling of lubricated contacts with ultra thin film for the present industrial needs.

Simulations à l'échelle atomique de la plasticité de nano-objets de silicium

Sandrine Brochard, Julien Guénoilé, Firas Abed El Nabi, Julien Godet, Laurent Pizzagalli

L'étude des propriétés physiques des nano-objets présente un intérêt à la fois fondamental et technologique. Lors de la dernière décennie, l'attention portée en particulier aux propriétés mécaniques de ces objets s'est considérablement amplifiée, suite au développement des tests de déformation de nanopiliers et nano-fils. Les travaux expérimentaux ont ainsi montré des modifications surprenantes de leurs propriétés mécaniques par rapport aux matériaux massifs. Un exemple typique est la transition fragile – ductile aux basses dimensions observée pour plusieurs matériaux semi-conducteurs : alors que ces matériaux sont fragiles sous forme massive à température ambiante, ils deviennent ductiles sous forme de nano-objet. La compréhension, voire le contrôle de ces propriétés constituent un enjeu majeur notamment pour le développement des applications utilisant ces nano-objets (micro-nano-électronique, NEMS).

Parallèlement aux expériences, les simulations à l'échelle atomique sont particulièrement bien adaptées pour investiguer les propriétés mécaniques des nano-objets, mettant le plus souvent en jeu des mécanismes élémentaires. La taille des systèmes considérés permet de surcroît une comparaison de plus en plus directe entre expériences et simulations à l'échelle atomique. Dans ce contexte, nous avons examiné la réponse à la déformation de nano-objets de silicium au moyen de simulations à l'échelle atomique. Nous avons choisi le silicium, largement considéré comme un matériau semi-conducteur modèle, et pour lequel il existe un grand nombre de potentiels interatomiques robustes pouvant être utilisés en dynamique moléculaire classique. Néanmoins, pour les matériaux covalents tels que le silicium, la modélisation des interactions atomiques avec des potentiels semi-empiriques reste délicate, comme nous l'illustrerons ; quand cela est possible, la comparaison avec des calculs *ab initio* apparaît alors opportune.

Durant cette présentation, nous décrirons les résultats obtenus lors de la déformation de nano-objets de silicium sous différentes sollicitations, montrant un large éventail de mécanismes (voir par exemple figure 1). Parmi ceux-ci, nous détaillerons un mécanisme de plasticité non usuel, dont nous expliquerons l'origine identifiée comme une conséquence indirecte des petites dimensions des systèmes considérés.

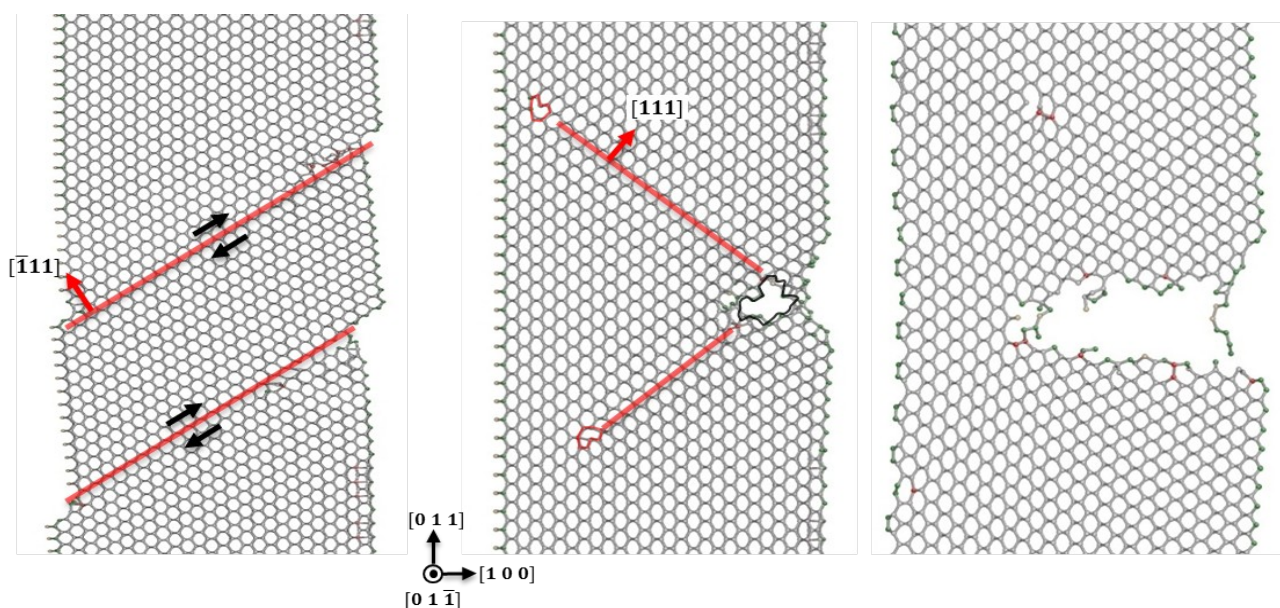


Figure 1 : différents mécanismes (plasticité conventionnelle et fracture) observés lors de la déformation en tension de nanofils de silicium.

Plasticité de la perovskite MgSiO_3 sous pression: Etude atomique des propriétés de cœur des dislocations [100] et [010]

Ph. Carrez, P. Hirel, A. Kraych et P. Cordier

UMET, UMR 8207, Equipe Physique des Minéraux

Université de Lille 1

Face au défi expérimental de réaliser des expériences de déformation dans les conditions extrêmes du manteau terrestre (pression ≤ 140 GPa, température $\leq 3000\text{K}$, très faibles vitesses de déformation $\approx 10^{-15} \text{ s}^{-1}$), l'équipe de Physique des Minéraux de l'UMET (financée dans le cadre d'un projet ERC www.rheoman.eu) propose une approche basée sur la modélisation multiéchelles de la plasticité des minéraux du manteau terrestre.

Pour cette seconde réunion plénière du GDR ModMat, nous proposons de discuter des méthodes utilisées pour la détermination des propriétés de cœur des dislocations dans la perovskite MgSiO_3 (silicate de structure orthorhombique). Nous aborderons pour cela deux exemples relatifs à :

- La mobilité à l'échelle atomique des dislocations vis de vecteur de Burgers [100]
- Les interactions défauts ponctuels / cœur de dislocation coin de vecteur de Burgers [100]

La mobilité des dislocations vis sera déterminée à partir de calculs de type NEB (Nudge Elastic Band) du potentiel de Peierls ainsi que de calculs d'enthalpie de formation de paires de décrochements. Nous verrons enfin comment le caractère ionique des potentiels Buckingham utilisés influent sur les enthalpies d'interaction entre défauts et dislocation.

Durcissement par solution solide dans les alliages à haute entropie de structure CFC

C. Varvenne, A. Luque Gomez, S. I. Rao, W. A. Curtin

*Laboratory for Multiscale Mechanics Modeling, IGM – STI
Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, CH-1015 Lausanne, Suisse*

Le concept des alliages à haute entropie a permis d'accéder à une nouvelle classe de matériaux aux propriétés uniques, qui n'auraient pu être atteintes par les techniques classiques de micro-alliage. En particulier, les alliages à haute entropie possèdent d'excellentes propriétés mécaniques, typiquement comparables à celles des verres métalliques, mais leur structure cristalline leur confère une meilleure ductilité [1]. Augmenter le nombre de constituants dans ces matériaux tend à améliorer leurs propriétés mécaniques ainsi que leur évolution avec la température. Jusqu'à présent, il n'existe cependant pas de théorie développée pour décrire et prédire ces effets pour cette classe d'alliage.

Nous présentons ici une généralisation aux solutions solides multi-composants fortement concentrées du modèle de durcissement précédemment proposé par *Leyson et al.* [2]. Notre modèle, fondé sur une approche de milieu effectif moyen, permet de prédire les barrières énergétiques pour le glissement d'une dislocation, la contrainte critique d'écoulement à température nulle ainsi que son évolution avec la température. Un résultat intéressant de ce modèle est que la grandeur pilotant le durcissement de l'alliage est la valeur moyenne de l'effet de taille au carré des éléments d'alliages, et non le nombre d'élément d'alliage en lui-même.

Une modélisation « auto-cohérente » sur un système modèle en potentiel empirique sera présentée, permettant la validation d'un modèle simplifié reposant sur un faible nombre de paramètres directement mesurables en DFT. Les contraintes critiques d'écoulement prédites seront ensuite confrontées aux résultats expérimentaux du groupe d'*E. George* (University of Tennessee).

[1] Y. Zhang, T.T. Zuo, Z. Tang, M.C. Gao, K.A. Dahmen, P.K. Liaw, Z.P. Lu, *Prog. Mat. Sci.* **61**, 1 (2014).

[2] G. P. M. Leyson, L. G. Hector Jr. And W. A. Curtin , *Acta Materialia* **60**, 3873-3884, (2012)

Multiscale approach to steel design.

Michel Pérez
MATEIS

INSA-Lyon

`michel.perez@insa-lyon.fr`

Abstract

We present here a multi-scale modelling approach to steel design: from ab-initio to Finite Element Methods. This approach will be illustrated on far-from-equilibrium phases, obtained after FeC coatings on a steel sheet. Ab initio techniques are used to construct an interatomic FeC potential for Molecular Dynamics simulations. Resulting potential energy landscapes serve as entry parameters for Atomic Kinetic Monte-Carlo, which, itself, predicts long-term microstructure evolution kinetics. Then, Mean Field precipitation and diffusion models provide solute content and phase fractions evolutions at different location of the component. Finally, this information is used to get the constitutive relation at each node of a Finite Element mechanical calculation. Modelling results are validated with various experimental techniques from the atomic scale (Tomographic Atom Probe) to the specimen scale (tensile tests).

Keywords

precipitation - modlisation - alliage 6061

Nanoscale heat transport across superlattices: effects of the interfacial roughness and partial amorphisation of the solids

Samy Merabia ^{a*}, Tristan Albaret, David Lacroix and Konstantinos Termentzidis^b

^aUniversité de Lyon, CNRS, UCBL, ILM, UMR5306, F-69621, Villeurbanne, France

^bLEMMA CNRS-UMR7563, Université de Lorraine, F-54506 Vandoeuvre les Nancy, France

*corresponding author: samy.merabia@univ-lyon1.fr

Keywords: nanoscale heat transport, interfacial thermal resistance, molecular dynamics

In this contribution, we will discuss two issues related to interfacial heat transport in the vicinity of solids. We first discuss the effect of interfacial roughness on the thermal boundary conductance between two solids, on the basis of molecular dynamics simulations [1]. We report a transition between two behaviors, depending on the interfacial roughness. When the roughness is smaller than the phonon wavelength, the thermal conductance is found to be constant, and takes values close to the conductance of a planar interface. On the other hand, when the interfacial roughness is large, the interfacial conductance becomes proportional to the true interfacial area and increases with the roughness. The transition between these two limiting behaviors may be described using a simple model, which involves the fraction of phonon modes having a wavelength greater than the roughness. We also show that the thermal conductance between dissimilar materials may be enhanced by a factor larger than three by playing with the interfacial slope. Finally, we discuss the effect of the shape of the interface, and conclude that at fixed roughness wave-like interfaces may display the highest conductance, because of their large true interfacial area.

The other issue concerns heat transport across amorphous-crystalline superlattices, a class of materials which has received recently attention for thermoelectric applications. After discussing some considerations regarding the fine preparation of these heterogeneous systems, we quantify the effect of the partial amorphisation of silicon on the thermal conductivity of amorphous-crystalline silicon superlattices. We show that even a small amorphous proportion may lead to a sharp reduction of the thermal conductivity of the superlattice, as compared with bulk silicon [2]. This reduction is attributed to the thermal interfacial resistance between crystalline and amorphous silicon, which tends to deteriorate the energy transport in the direction perpendicular to the interfaces. We also discuss the thermal anisotropy displayed by the superlattices, and report anisotropy levels greater than 4 between the direction perpendicular and parallel to the interfaces, even for small amorphous proportions. All these considerations may help in the design of thermoelectric materials or materials aimed at conveying heat in a preferential direction.

References

- [1] S. Merabia and K. Termentzidis, *Phys. Rev. B* **89**, 054309 (2014)
- [2] A. France-Lannord, S. Merabia, T. Albaret, D. Lacroix and K. Termentzidis, *J. Phys. Cond. Mat.*, **26**, 355801 (2014)

Computational design of metal-organic frameworks for CO₂ capture

Roberta Poloni

SIMaP, CNRS, Grenoble

and

University of California, Berkeley

Capturing and sequestering CO₂ is a route to partial mitigation of climate change associated with anthropogenic carbon dioxide emissions. Among the most promising candidate methods for CO₂ separation, physisorption and chemisorption by metal-organic frameworks (MOFs) are attracting much attention. MOFs are three-dimensional nanoporous extended solids composed of metal centers connected by organic molecules (called bridging ligands or linkers).

In my talk I will show how first-principles calculations are used to identify and understand CO₂ binding in several MOFs featuring open metal sites [1]. In all cases, the physisorption of CO₂ can be attributed to a combination of electrostatic and dispersion interactions [2,3]. I will show how the CO₂ energetics in these materials can be tailored in a manner optimal for industrial CO₂ capture by independently changing the organic ligand and the metal site [4,5]. Then, I will discuss how the chemisorption of CO₂ in amine-functionalized MOFs can lead to an extraordinary CO₂ uptake. The adsorption mechanism elucidated in these studies reveals how crucial the combination of amine length with the MOF morphology is for new types of reactivity leading to an higher performance compared to the current carbon capture technologies [6].

The results presented in this talk are discussed in the context of recent experiments performed at Berkeley. This shows how the computational design of new materials from first-principles and therefore guided by chemical/physical comprehension, can be used as the first step towards the development of a successful revolutionary technology in conjunction with the experimental activity.

References

1. Dzubak, Lin, Kim, Swisher, Poloni, Maximoff, Smit and Gaglardi, *Nature Chem.* 4, 810 (2012);
2. Poloni, Smit and Neaton, *J. Am. Chem. Soc.* 134, 6714 (2012);
3. Poloni, Smit and Neaton, *J. Phys. Chem. A* 116, 4957 (2012);
4. Poloni, Lee, Berger, Smit and Neaton, *J. Phys. Chem. Lett.* 5, 861 (2014);
5. Drisdell, Poloni, McDonald, Long, Smit, Neaton, Prendergast and Kortright, *J. Am. Chem. Soc.* 135, 18183 (2013);
6. Planas, Dzubak, Poloni, et al. *J. Am. Chem. Soc.* 135, 7402 (2013).

Energétique dans les polymorphes de la silice (SiO_2) et du trioxyde de bore (B_2O_3): de la DFT au QMC

Guillaume Ferlat, Henri Hay, Michele Casula, Ari P. Seitsonen, Francesco Mauri

*Institut de Minéralogie, Physique des Matériaux et Cosmochimie, UMR UPMC-CNRS-IPG,
Université P. & M. Curie Paris VI, 4 Place Jussieu, 75005 Paris*

ferlat@imPMC.upmc.fr, Tel: + 33 (1) 44 27 98 22, Fax: +33 (1) 44 27 37 85

En utilisant des arguments topologiques et des calculs *premiers-principes* (réalisés dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité, DFT), nous avons récemment prédit l'existence de 26 nouvelles phases cristallines dans le composé B_2O_3 [1]. Ces polymorphes, permettent de comprendre des caractéristiques de la phase vitreuse $v\text{-B}_2\text{O}_3$ jusqu'ici inexplicables (notamment sa faible densité, la présence de certains types d'anneaux, et sa propension à vitrifier). Par ailleurs, certaines des phases prédites, nano-poreuses, pourraient avoir des applications pour, par exemple le tri moléculaire ou le stockage de gaz. Nous avons récemment affiné les prédictions (énergies et densités d'équilibre) en utilisant différents cadres d'approximations de la DFT, incluant notamment les effets des forces de dispersion (fonctionnelles dites DFT-D2, vdw-TS ou DFT-DF2). Ces résultats montrent l'importance, souvent sous-estimée, des forces de dispersion dans ces systèmes. Ils seront complétés par des calculs Monte Carlo Quantique permettant l'obtention d'une précision thermochimique de l'ordre du kcal/mol. Une étude similaire dans les polymorphes connus de la silice (SiO_2) a été réalisée afin de valider notre approche.

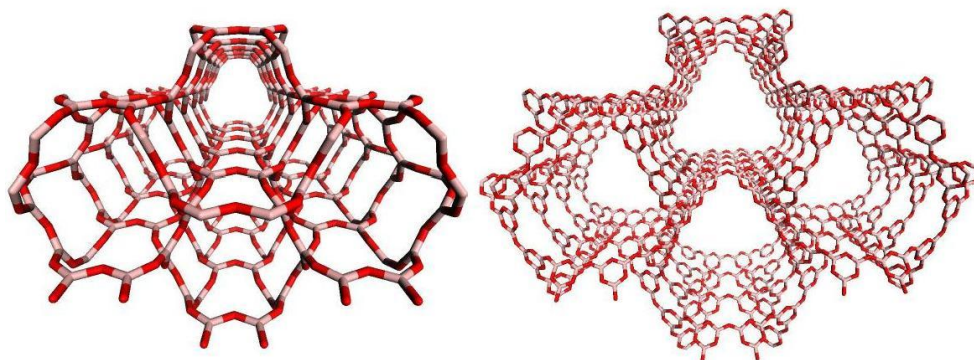


Figure: Two (among 26) predictions of B_2O_3 polymorphs. Large channels are clearly seen.

Ref.: [1] G. Ferlat, A. P. Seitsonen, M. Lazzeri, F. Mauri, *Nature Materials* **11**, 925 (2012).

Atomistic modelling of multibandgaps and multivalleys hybrid perovskites for photovoltaic applications

L. Pedesseau, M. Kepenekian, D. Saponi, A. Rolland, C. Katan, J. Even

Following pioneering works [1], the 3D hybrid perovskites $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ have recently been shown to drastically improve the efficiency of Dye Sensitized Solar Cells (DSSC) [2]. It is predicted to open “a new era and a new avenue of research and development for low-cost solar cells ... likely to push the absolute power conversion efficiency toward that of CIGS (20%) and then toward and beyond that of crystalline silicon (25%)” [3]. We have theoretically investigated by DFT and k.p method the crystalline phases relevant for photovoltaic applications [4]. Our findings reveal the dramatic effect of spin orbit coupling (SOC) on their multiple band gaps, sizably smaller for tin than for lead based materials. Critical electronic states and optical absorption are thoroughly investigated. Multibandgaps and multivalleys phenomena are important to understand the optical and transport properties. Effective masses are also inferred. Excitonic effects are simulated. Besides inversion of band edge states, their physical properties show a close match to conventional semiconductors, leading to a new class of semiconductors different from the materials usually employed in DSSC.

[1] A. Kojima et al, J. Am. Chem. Soc. 131, 6050 (2009), M. M. Lee et al, Science 338, 643 (2012), H-S. Kim et al, Sci. Rep. 2, 591 (2012).

[2] J. Burschka et al, Nature, 499, 316 (2013), J. H. Heo et al, Nature Photonics 7, 487 (2013), M. Liu et al, Nature 501, 395 (2013), S. D. Stranks et al, Science 342, 341 (2013). G. Xing et al, Science 342, 344 (2013).

[3] N. G. Park, J. Phys Chem. Lett. 4, 2423 (2013). H. Snaith, J. Phys Chem. Lett. 4, 3623 (2013).

[4] J. Even et al, Phys. Chem. C., 2014 118, 11566, J. Phys. Chem. Lett. 4, 2999 (2013), Phys. Status Solidi RRL 8, 31 (2014)

First-principles investigation of charged point defects and fission gases in CeO₂

Lei Shi^{1*} and Emerson Vathonne¹, Michel Freyss¹, Roland Hayn², Vincent Oison²

¹CEA, DEN, DEC, Centre de Cadarache,

13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

²Aix Marseille University, IM2NP,

13397 Marseille Cedex 20, France

Cerium dioxide (CeO₂) is considered as a model material for nuclear fuel uranium dioxide (UO₂). It could largely simulate UO₂, having the same crystal structure, similar lattice properties and common features in the electronic structures, but CeO₂ has the advantage of being non-radioactive. That simplifies considerably any experimental study on radiation damage. In order to investigate the similarities between CeO₂ and UO₂ in terms of the behavior of point defects, first-principles study is used, which can also simulate at the atomic scale the incorporation and diffusion of fission gases (xenon and krypton) created in nuclear fuels under irradiation. A comparative study of the calculated defects and fission gases properties in CeO₂ and UO₂ will be of particular interest in order to anticipate further experimental studies of radiation damage.

In this first-principles study, the DFT+U framework is used for all the calculations of both CeO₂ and UO₂. All intrinsic charge states are considered for point defects. The electron potential (Fermi energy) is an important parameter in the calculation of formation energies of defects and incorporation energies of fission gases. We find that CeO₂ and UO₂ show similar behavior in the formation of point defects under same charge states. The charge states of traps (vacancies) have an important effect on the incorporation of fission gas atoms as well. The Schottky defects are found energetically preferable to trap krypton atoms both in CeO₂ and UO₂.

* lei.shi@cea.fr

Etude *ab-initio* des transitions de phases du titane

V. Stutzmann, J. Bouchet, and F. Bottin
 CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France
 (Dated: October 30, 2014)

Le titane est un métal de transition aux propriétés thermo-chimiques et thermo-mécaniques très intéressantes, principalement pour des applications du domaine aéronautique et aérospatial [1]. De nombreux travaux ont été réalisés pour comprendre son comportement dans des conditions de pression et de température extrêmes. En particulier des études sur les pressions de transitions à basse température et sur la courbe de fusion [2–9].

Le titane est présent sous la forme de cinq structures différentes : la phase α (structure hcp) stable dans les conditions ambiantes, ω (hexagonale) stable à basse température, β (bcc) stable en température sous la courbe de fusion, γ et δ (orthorombique de groupe d'espace Cmcm) stables à basse température et haute pression. En ce qui concerne les domaines de stabilité de ces différentes structures à basse température sous pression, les expériences et calculs sont en désaccord [2–6, 8]. Par ailleurs, à plus haute température, si une étude expérimentale de la courbe de fusion du titane a été réalisée [9], aucune étude *ab-initio* n'existe à notre connaissance. Par conséquent, ce travail a pour objectif de comprendre les désaccords entre théorie et expérience au niveau du diagramme de phase à basse température, et de réaliser la première courbe de fusion *ab-initio* du titane.

Les résultats obtenus à basse température, sur les domaines de stabilité de ces différentes structures, reproduisent ceux tous électrons [8]. De plus, ils sont également en meilleur accord avec les résultats expérimentaux que ne le sont les calculs précédents [2, 3]. Une nouvelle phase est prédite à 0 K, appelée δ' . Il s'agit d'une structure orthorombique de groupe d'espace Cmcm. Au cours de cette étude, nous avons aussi noté que le rayon de sphère PAW avait un effet très important sur les résultats et que cela expliquait la différence qualitative qui existait entre théorie et expérience.

La courbe de fusion du titane est calculée par dynamique moléculaire *ab-initio*. Quatre méthodes de calculs ont été utilisées :

- la méthode "Heat until it melts" (HUM) consiste à modéliser un cristal parfait et à augmenter la température jusqu'à ce qu'il fonde [10].
- La Z-method, fonctionne de la même manière que HUM mais en augmentant l'énergie totale à la place de la température. La simulation possédant l'énergie la plus faible qui permet la fonte du cristal donne la température de fusion [11].
- La méthode à deux phases (Two phase approach : TPA) consiste à modéliser un cristal interfacé avec son liquide. Une température est imposée pour chaque simulation : sous la température de fusion, la partie liquide se solidifie, au dessus la partie solide se liquéfie, permettant ainsi d'obtenir la température de fusion [12].
- Enfin, la Coexistence de phases repose sur le même principe que la TPA en imposant une énergie totale comme pour la Z-method [13].

Comme attendu, la méthode HUM surestime les autres de 20 % environ. Les trois dernières méthodes, quant à elles, permettent d'avoir des résultats assez proches les uns des autres. La courbe de fusion ainsi obtenue est sensiblement au dessus des résultats expérimentaux de Errandonea *et al* [9]. Nous présenterons des résultats expérimentaux récents, et montrerons qu'un meilleur accord peut être obtenu.

-
- [1] P. E. Brett S. Paddock, "titanium industries," <http://titanium.com/markets/aerospace/other/> (2013)
- [2] Y. Akahama, H. Kawamura, and T. Le Bihan, Phys. Rev. Lett **87**, 275503 (2001)
- [3] Y. K. Vohra and P. T. Spencer, Phys. Rev. Lett **86**, 3068 (2001)
- [4] Z. Mei, S. Shang, Y. Wang, and Z. Liu, Phys. Rev. B **79**, 134102 (2009)
- [5] A. K. Verma, P. Modak, R. S. Rao, B. K. Godwal, and R. Jeanloz, Phys. Rev. B **75** (2007)
- [6] Y.-J. Hao, J. Zhu, L. Zhang, J.-Y. Qu, and H.-S. Ren, Solid State Science **12**, 1473 (2010)
- [7] R. G. Hennig, T. J. Lenosky, D. R. Trinkle, S. P. Rudin, and J. W. Wilkins, Phys. Rev. B **78** (2008)
- [8] A. L. Kutepov and S. G. Kutepova, Phys. Rev. B **67**, 132102 (2003)
- [9] D. Errandonea, B. Schwager, R. Ditz, C. Gessmann, R. Boehler, and M. Ross, Phys. Rev. B **63**, 132104 (2001)
- [10] J. Bouchet, F. Bottin, J. Jomard, and G. Zerah, Phys. Rev. B **80**, 094102 (2009)
- [11] A. B. Belonoshko, N. V. Skorodumova, A. Rosengren, and B. Johansson, Phys. Rev. B **73**, 012201 (2006)
- [12] A. B. Belonoshko, Geochim. cosmochim. Acta **58**, 4039 (1994)
- [13] D. Alfe, Phys. Rev. B **79** (2009)

Glaces d'ammoniac monohydraté sous haute pression par méthodes *ab initio*A. Mafety¹ et A.M. Saitta¹

¹Institut de Minéralogie, de Physique des Matériaux et de Cosmochimie,
 Université Pierre et Marie Curie – Paris VI,
 UMR 7590, Paris, France,
Adrien.Mafety@impmc.upmc.fr

Dans ce projet, nous nous proposons d'explorer les régions hautes pressions/hautes températures du diagramme de phase du mélange cristallin en proportion équimolaire de l'eau et de l'ammoniac. L'eau et l'ammoniac sont des constituants majeurs du manteau des planètes de notre Système Solaire (ex : Neptune, Saturne) et de leurs satellites (ex : Titan). Au sein de ces manteaux planétaires, règnent des conditions thermodynamiques extrêmes (voir Figure 1). La pression peut atteindre plusieurs centaines de gigapascals et la température peut égaler plusieurs milliers de degré Kelvin. Dans de telles conditions, de nouvelles propriétés cristallines sont à étudier et une nouvelle forme de chimie apparaît.

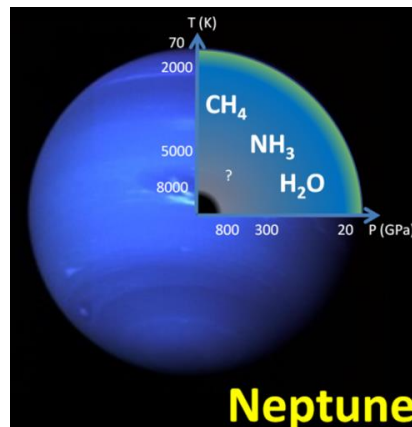


FIG. 1 : Composition chimique du manteau de Neptune.

Le diagramme de phase P-T des glaces pures comme l'eau et l'ammoniac est bien connu. La glace d'eau possède les propriétés de superionicité et de symétrisation. L'ammoniac est un solide ionique à une pression de 150 GPa à température ambiante [1] et possède également la propriété de superionicité [2]. Nous montrerons comment il a été possible de retrouver ces trois propriétés « exotiques » au sein de l'ammoniac monohydraté, dont la propriété de symétrisation (Figure 2).

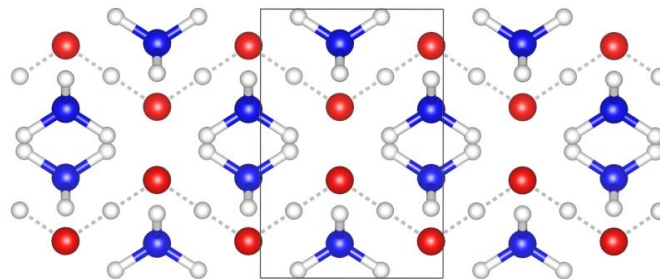


FIG. 2 : Symétrisation des protons initialement positionnés autour des atomes d'oxygène au sein de la glace d'ammoniac monohydraté.

Pour ce faire, nous utilisons des méthodes *ab initio* de prédiction de structures afin de prédire les phases cristallines stables énergétiquement en fonction de la pression. Enfin, l'effet de la température est étudié à partir de simulations de dynamiques moléculaires *ab initio*. Nos calculs sont systématiquement comparés à des expériences de spectroscopie et de diffusion des rayons X (et neutrons) sous enclume de diamant. Ces expériences étant réalisées au sein même de notre laboratoire.

[1] S. Ninet, F. Datchi, P. Dumas, M. Mezouar, G. Garbarino, **A. Mafety**, C. J. Pickard, R. J. Needs, and A. M. Saitta, *Experimental and theoretical evidence for an ionic crystal of ammonia at high pressure*, Phys. Rev. B **89**, 174103 (2014)

[2] S. Ninet, F. Datchi, and A. M. Saitta, *Proton Disorder and Superionicity in Hot Dense Ammonia Ice*, Phys. Rev. Lett. **108**, 165702 (2012)

DIAGRAMMES DE PHASES DE NANOPARTICULES NI-C PAR SIMULATION NUMÉRIQUE

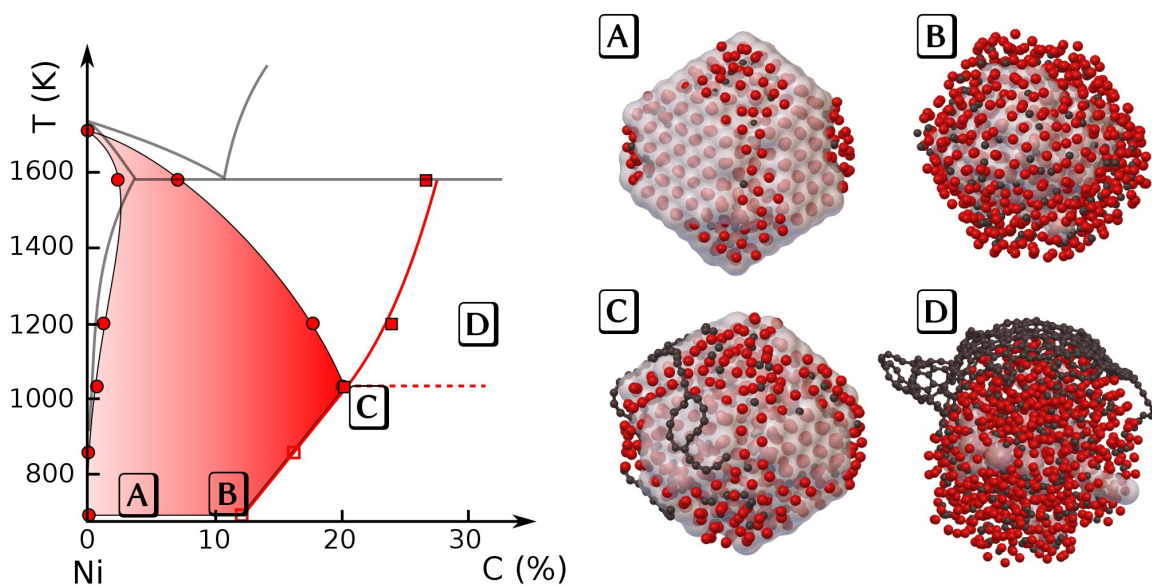
Y. Magnin¹, C. Bichara¹ and H. Amara²

¹Aix Marseille University, 13288, FRANCE

²LEM, ONERA and CNRS, Chatillon, 92322, FRANCE

La synthèse de nanotubes de carbone simple parois dépend de l'état physico-chimique du catalyseur sur lequel s'opère la croissance. Dans la gamme de températures de croissance (900-1300 K), le catalyseur (nanoparticule de Ni), interagit avec un précurseur carboné et présente une forte réactivité vis à vis du carbone. En fonction de la température, du potentiel chimique ainsi que de la taille de la nanoparticule, les atomes de carbone sont adsorbés en surface, diffusent en sub-surface ou vers le coeur de la nanoparticule provoquant la fusion partielle ou totale de la nanoparticule.

Sur la base de simulations Monte Carlo en liaisons fortes dans l'ensemble grand canonique [1], nous étendons nos précédents calculs [2,3]. Nous analysons la structure à l'aide du paramètre d'ordre de Steinhardt [4] et présentons le calcul de diagrammes de phases Ni-C en fonction de la taille et de la structure (FCC, icosédrique) des nanoparticules.



References

- [1] H. Amara et al., Phys. Rev. B 79, 014109 (2009).
- [2] M. Diarra et al., Phys. Stat. Sol. B 249, 12, 2629 (2012).
- [3] M. Diarra et al., Phys. Rev. Lett. 109, 185501 (2012).
- [4] P. Steinhardt et al., Phys. Rev. B, 28, 2, 784 (1983).

corresponding author : magnin@cinam.univ-mrs.fr

Miller experiments in atomistic computer simulations

Antonino Marco Saitta^{1,2,*}, Franz Saija³

¹Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, UMR 7590, IMPMC, F-75005 Paris, France

²CNRS, UMR 7590, IMPMC, F-75005 Paris, France

³CNR-IPCF, Viale Ferdinando Stagno d'Alcontres 37, 98158 Messina, Italy

The celebrated Miller experiments reported on the spontaneous formation of amino-acids from a mixture of simple molecules reacting under an electric discharge, giving birth to the research field of prebiotic chemistry. However, the chemical reactions involved in those experiments have never been studied at the atomic level. Here we report on the first *ab initio* computer simulations of Miller-like experiments in the condensed phase. Our study [1], based on the recent method of treatment of aqueous systems under electric fields and on metadynamics analysis of chemical reactions, shows that glycine spontaneously form from mixtures of simple molecules once an electric field is switched on and identifies formic acid and formamide as key intermediate products of the early steps of the Miller reactions, and the crucible of formation of complex biological molecules.

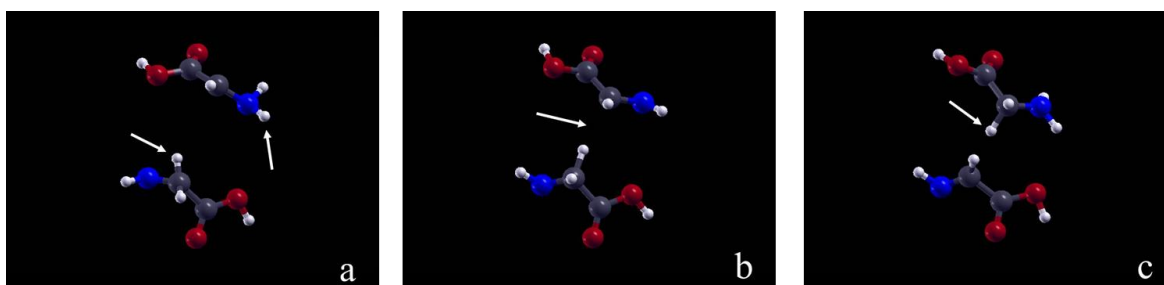


Fig. 1. Formation of glycine. Trajectory snapshots showing, at first, two hydrogen atoms bonding with the α -carbon of one dehydroglycine molecule and with the nitrogen of a nearby one (left panel, shown by arrows). After about 90 fs the two α -carbon of both molecules approach (middle panel, indicated by the arrow), and the extra proton jumps from one of the two molecules onto the other one, yielding glycine (right panel, indicated by the arrow).

This work, which has received considerable attention both from the specialized scientific media and the mainstream large public press [2] might have a relevance in geochemistry, as electric fields are naturally present at mineral surfaces, suggesting a potentially crucial role in abiotic chemistry of both the primordial and the modern Earth.

[1] A.M. Saitta & F. Saija, **Proceedings of the National Academy of Sciences USA (PNAS)** 111, 13768 (2014).

[2] http://www.altmetric.com/details.php?domain=www.pnas.org&citation_id=2665951

http://www.imPMC.upmc.fr/~saitta/press_Miller.html

Phonons dans les matériaux à base d'actinides et application au calcul *ab initio* des coefficients de diffusion

Boris Dorado¹, Philippe Garcia², François Bottin¹,
Johann Bouchet¹ et Marc Torrent¹

¹ CEA, DAM, DIF, F-92197 Arpajon, France

² CEA, DEN, DEC, F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance, France

Résumé

Les matériaux à base d'actinides, en particulier UO₂, UN, UC, ainsi que les oxydes mixtes, ont fait l'objet de nombreuses études théoriques et expérimentales compte tenu de leur importance en tant que combustibles nucléaires. Malheureusement, les difficultés associées aux coûts et à la manipulation de ces matériaux rendent les études expérimentales de plus en plus difficiles à réaliser et la modélisation atomistique s'est alors imposée comme l'outil de choix pour l'étude des propriétés physiques de ces systèmes complexes. Cependant, en dépit du nombre considérable de travaux théoriques effectués à ce jour, les propriétés vibrationnelles de ces matériaux restent encore aujourd'hui peu étudiées.

Dans cette étude, nous avons calculé les fréquences de phonons dans plusieurs matériaux à base d'actinides par différentes approches complémentaires. Dans un premier temps, nous avons utilisé la théorie de la perturbation de la fonctionnelle de la densité (DFPT) afin de calculer les fréquences de phonons à $T = 0$ K, ce qui nous a permis d'extraire plusieurs propriétés thermodynamiques (en particulier les entropies) dans l'approximation harmonique. Dans un second temps, nous avons effectué des calculs de dynamique moléculaire *ab initio* afin d'inclure explicitement les effets de température (anharmonicité). Nous présentons l'application de ces résultats au calcul *ab initio* des coefficients de diffusion.

Electronic structure scenarios at stoichiometric polar/polar interfaces.

C. Noguera, J. Goniakowski

Institut des NanoSciences de Paris, Paris, France

Oxide-oxide interfaces have recently focused the attention of the research community, due to the entirely new properties they display, compared to their parent materials, and their much wider variety of behaviors compared to traditional semiconductor-semiconductor interfaces. The possibility of producing a confined two-dimensional electron gas (2DEG), subject of enhanced correlation effects, magnetic or even superconducting instabilities, represents a particularly exciting issue. In the past and more recently, 2DEG have been invoked at non-stoichiometric or hydrogenated oxide surfaces, and also evidenced and thoroughly studied at polar/non-polar interfaces between two insulating oxides.

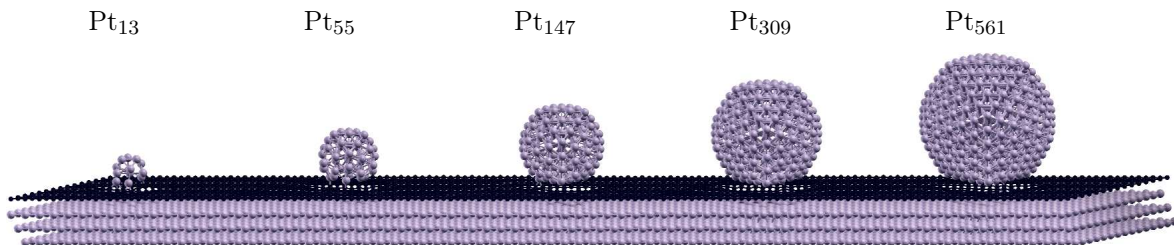
Much less work has been devoted to interfaces between two oxides which are both oriented along a polar direction. While a number of polar-polar interfaces between conventional semiconductors have been studied in the past, and compensation mechanisms, such as nonstoichiometric reconstructions or intermixing, have been proposed, there exists no general classification of the scenarios which can be encountered.

In this communication, relying on first principles simulations of perfect ZnO(0001)/MgO(111), AlN(0001)/GaN(0001) and MgO(111)/CaO(111) interfaces, we will provide such classification. We will show that the electronic structure at a polar-polar interface is determined by three parameters of different nature: one linked to structure discontinuity, a second one associated to valence discontinuity and a third one, of a covalent nature. Depending upon their relative values, several prototypical scenarios which may take place at polar-polar interfaces will be highlighted and the conditions of occurrence of a 2DEG and of a metal-insulator transition will be discussed.

Nanoparticules de platine sur substrats graphitiques et rôle des forces de dispersion

G. D. Förster, F. Calvo, F. Rabilloud
Institut Lumière Matière
Équipe de Physico-Chimie Théorique
Université Claude Bernard Lyon 1

Le dépôt de nanoparticules métalliques sur différents substrats tels que graphène, graphite ou graphène épitaxié sur métal a récemment fait l'objet d'études expérimentales et théoriques (notamment DFT)[1,2]. Les forces de dispersion s'avèrent potentiellement essentielles pour décrire la liaison entre particule et de tels substrats étendus. Afin de modéliser la structure et dynamique de nanoparticules raisonnablement grandes (dizaines à centaines d'atomes) nous avons cherché à étendre un champ de force conventionnel décrivant les liaisons covalentes-métalliques de type Brenner [3] afin de prendre en compte les contributions dues aux forces de dispersion à longue portée. Nous comparons notamment plusieurs approches inspirées de Grimme prenant ou non en compte la coordination [4], ainsi que des approximations semi-analytiques de type champ moyen, en négligeant la corrugation du substrat, mais en intégrant rigoureusement la contribution des monocouches individuelles si nécessaire présentes en infinité, et ce sans introduire de paramètre supplémentaire. À titre d'application, ce modèle implicite a permis de traiter le dépôt d'agrégats de platine réalistes (2D et 3D) sur graphène et graphite ainsi que sur graphène en épitaxie sur Pt(111) grâce à des simulations de dynamique moléculaire. Ce modèle a également été appliqué dans le cas du système Ru_n sur graphène/Ru(0001).



Agrégats Pt_n déposés sur du graphène épitaxié sur Pt(111)

Références

- [1] E. Sutter, P. Albrecht, B. Wang, M.-L. Bocquet, L. Wu, Y. Zhu, and P. W. Sutter, *Surf. Sci.* **605**, 1676 (2011).
- [2] G. Ramos-Sanchez and P. B. Balbuena, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **15**, 11950 (2013).
- [3] K. Albe, K. Nordlund, and R. Averback, *Phys. Rev. B* **65**, 195124 (2002).
- [4] S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, and H. Krieg, *J. Chem. Phys.* **132**, 154104 (2010).

SHOULD MOLECULAR LATTICES ALWAYS BE THE MOST DENSELY PACKED ?

Fabrizio Cleri, University of Lille I, IEMN CNRS, Lille (FRANCE)

High-density packing in organic crystal is usually associated with an increase of the coordination between molecules, since the early formulations of molecular symmetry arguments by Kitaigorodski in the late 50s. We contend the validity of this concept for two-dimensional molecular networks self-assembled on solid semiconductor surfaces, by using a combination of scanning tunneling microscopy experiments and multi-scale computer simulations. We study the phase transitions between different polymorphs and we demonstrate that, contrary to simple intuition, the structure with the lowest packing density may correspond indeed to the highest coordination. The subtle competition between intermolecular and surface dispersion forces (often ignored in the discussion of molecular symmetry) is at the origin of such a counter-intuitive result. Having the lowest free energy, such low-density structures spread out macroscopically as the most stable polymorphs over a wide range of molecular concentrations.

Adsorption de selenium sur Mo(110) : stabilité et influence du sodium sur la cinétique

Guido Roma (CEA, DEN, Service de Recherches de Métallurgie Physique, F-91191 Gif sur Yvette, France)

Dans la production de cellules solaires en couches minces basées sur le semi-conducteur quaternaire $\text{CuIn}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Se}_2$ (CIGS) la déposition sur le contact en face arrière, en molybdène, mène à la formation de MoSe_2 . Les mécanismes à l'échelle atomiques qui contrôlent ce processus, et notamment l'orientation des feuillettes de chalcogénure, sont mal connus, ainsi que la thermodynamique de l'adsorption de Se sur la surface (110) du molybdène.

Dans le cas des cellules solaires CIGS, le rôle du sodium, impureté dont la présence est recherchée pour améliorer l'efficacité du dispositif, a été évoqué comme catalyseur de la formation de MoSe_2 ; cela permettrait, dans certaines conditions, d'obtenir un contact Ohmique. Dans ce contexte, sur la base de calculs ab initio d'énergies d'adsorption[1, 2], nous pouvons prédire les motifs adsorbés susceptibles d'être observés selon les conditions externes (température, pression partielle et composition du gaz de Se)[3]. Nos résultats montrent que des taux de couverture compris entre 1/4 et 3/4 d'une mono-couche sont atteignables à l'équilibre thermodynamique. La simulation des images de microscopie à effet tunnel (STM), que nous présentons, devrait en faciliter l'observation expérimentale.

Hors équilibre, toutefois, ce sont les mécanismes cinétiques qui contrôlent la formation des motifs les plus favorables à la croissance de MoSe_2 ; c'est pour cela que nous avons commencé l'étude de la mobilité du selenium, mais aussi du sodium et de l'oxygène, sur la même surface de molybdène. Les calculs de barrières de migration dans plusieurs configurations, dont nous présentons les résultats, servira comme base de données pour un Monte Carlo cinétique, afin de comprendre l'influence du sodium et de l'oxygène sur la mobilité du selenium.

[1] G. Roma et L. Chiodo, Phys. Rev. B **87**, 245420 (2013).

[2] G. Roma et al., Proceedings of the 39th IEEE Photovoltaics Specialists Conference 2013.

[3] G. Roma et al., Appl. Phys. Lett. **104**, 061605 (2014).

Surfaces d'approximants de quasicristaux décagonaux: $\text{Al}_{13}\text{Co}_4$ et Al_5Co_2

É. Gaudry, M. Meier, J. Ledieu, M.-C. De Weerd, V. Fournée

Institut Jean Lamour, UMR 7198 CNRS-Université de Lorraine, Nancy, France

Les surfaces d'alliages métalliques complexes, ou intermétalliques à grande maille (contenant d'une dizaine à plusieurs milliers d'atomes) présentent des propriétés originales en regard de celles d'alliages métalliques conventionnels (réactivité chimique, faibles frottements...). C'est le cas des approximants de quasicristaux décagonaux $\text{Al}_{13}\text{Co}_4$ et Al_5Co_2 , qui sont de bons candidats en remplacement des catalyseurs à base de Pd employés pour la semi-hydrogénation de l'acétylène, dans le cadre de la synthèse industrielle du polyéthylène.

La compréhension des mécanismes à l'origine de la réactivité spécifique de ces intermétalliques nécessite une description précise des structures électroniques et atomiques de surface. Ici, une approche combinant à la fois des techniques expérimentales sous ultra-vide (diffraction d'électrons lents, photoémission, microscopie à effet tunnel) et une approche basée sur des calculs *ab initio* permet de déterminer les structures des surfaces.

Dans cet exposé, les résultats seront présentés en mettant l'accent sur l'interaction entre la structure tridimensionnelle des systèmes massifs, décrite par un empilement de briques élémentaires, et la surface bi-dimensionnelle [1,2,3]. L'influence de la densité atomique de surface, la composition atomique de surface, le réseau de liaisons chimiques du volume sur l'énergie de surface sera discutée, ainsi que l'influence des conditions expérimentales de préparation de surface sur la structure de surface.

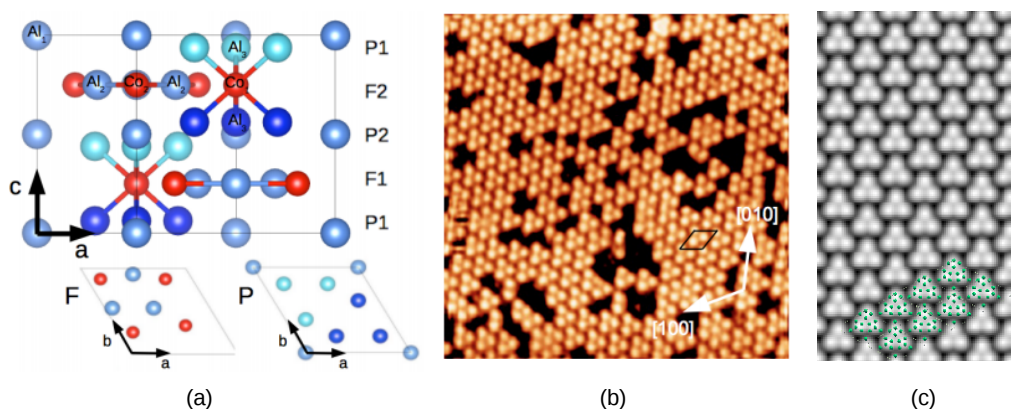


Fig. 1: (a) Structure de Al_5Co_2 , mettant en évidence la sous-structure en empilement de clusters. (b) Image expérimentale de microscopie à effet tunnel (STM) de la surface $\text{Al}_5\text{Co}_2(001)$ (-2V, 0.1 nA, 20x20 nm²). La maille de la reconstruction est indiquée en noir. (c) Image STM calculée de la surface $\text{Al}_5\text{Co}_2(001)$. Deux mailles de la reconstruction sont superposés (atomes d'aluminium en vert).

[1] H. Shin et al., *Physical Review B*, **84**, 085411 (2011); V. Fournée et al., *MRS proceedings* **1517** (2012)

[2] J. Ledieu et al., *Sci. Technol. Adv. Mater.*, **15** 034802 (2014).

[3] M. Meier et al., submitted

First-principles modelling of complex silicate glasses

S. ISPAS^{1*}, L. PEDESSEAU^{1,2}, A. HOMENIUK^{1,3}, M. PICCIANI³ AND W. KOB¹

¹Laboratoire Charles Coulomb, CNRS UMR 5221, Univ. Montpellier 2,
34095 Montpellier

²Univ. Européenne de Bretagne, INSA, FOTON, UMR 6082,
35708 Rennes

³Saint-Gobain Recherche
39 quai Lucien Lefranc - 93303 Aubervilliers Cedex

The vibrational properties of silica glass have been intensively studied experimentally and theoretically during the last four decades. However there are few theoretical studies of the evolution of the vibrational properties for more complex silicate glasses (binary, ternary etc...).

In the first part of this talk, we will present the structural and vibrational properties of a sodium silicate glass of composition $4\text{Na}_2\text{O}-6\text{SiO}_2$ (NS1.5). The study has been carried out using first principles calculations within the density functional theory framework as implemented in the VASP code. We have studied the structural and vibrational properties of this glass, and we have identified the contributions of the various species to the vibrational density of states (VDOS) as well as to the IR spectra. In particular we will discuss how the presence of the sodium atoms affects the relevant vibrational parameters: positions, shapes and intensities of the main peaks of the VDOS and IR spectra.

In the second part, we will discuss the properties of several complex borosilicate glasses. Computing physical properties of complex glass compositions via numerical simulations often suffers of inaccurate predictions when using classical potentials, or it is excessively time consuming when glass structures are obtained using *ab-initio* methods. The study has been carried out by combining classical and *ab initio* molecular dynamics (MD) methods and by varying the concentrations of SiO_2 , B_2O_3 , Na_2O , CaO , Al_2O_3 and MgO . The classical MD included liquid equilibration, quenching and preliminary relaxation, while *ab initio* method was used to further relax the samples. Two sets of effective potentials have been used for the classical simulations. This strategy allows of course a significant CPU time saving.

We have compared the structural properties of the simulated samples and have found that classical MD simulations cannot provide reliable glass models for complex borosilicates (at least with the potentials we have chosen), especially for the peculiar aspect of Boron coordination. The *ab initio* simulations have corrected the unreliable classical simulated structures and provided results in good agreement with previous studies of borosilicate glasses. We have also noticed that the presence of Al and Mg has influenced the fraction of 3-fold coordinated Boron, as expected from experimental data. The vibrational properties have been equally studied within the *ab initio* approach, and the contributions of the various species have been identified. We have found that 3- and 4-fold coordinated borons give rise to distinguished spectral features.

Contact: simona.ispas@univ-montp2.fr

Microplasticity of MD-modeled sodium silicate glasses

Gergely Molnár^a, Patrick Ganster^b, János Török^c, Anne Tanguy^a

^aLaboratoire de Physique de la Matière Condensée et des Nanostructures, Université Claude Bernard (Lyon I) and CNRS, 43 Bvd. du 11 Nov. 1918, 69622 Villeurbanne Cedex, France

^bLaboratoire Claude Goux, Centre SMS, CNRS UMR5146, Ecole Nationale Supérieure des Mines, 158 Cours Fauriel 42023 Saint-Etienne, France

^cDepartment of Theoretical Physics, Budapest University of Technology and Economics, Budapest H-1111, Hungary

Silicate glasses are widely used in architecture, passive fire protection or automobile industry.

When somebody thinks about glass, the first think which crosses his mind that the material is fragile. The reason of this misbelief is that most silicate glasses does not show any ductile behavior macroscopically. However it was shown in [1] that different compositions have different failure modes, some of them have outstanding plastic resistance at the microscopic scale.

The main idea of our study is to use multi-scale approach to investigate the failure of sodium silicate ($x\text{Na}_2\text{O}-(100-x)\text{SiO}_2$, where $x = 5, 10, 20, 30, 40$). We used classic molecular dynamics (MD) to calculate macroscopic mechanical properties.

Our first aim was to develop the best structural properties we can. Therefore we had a four stage process: every system started from a randomly generated configuration, then it was introduced into molecular dynamics, cooled down, and equilibrated. Since we could simulate only a very short amount of real time, after the simulation we modified each system using Reverse Monte Carlo (RMC) method to get as close to the experimentally measured structure factors as we can. During the RMC we calculated potential energies in every step taking care not to increase it with the random movements. The last step was to conduct static deformation on each simulated system.

As a result we were able to calculate elastic and plastic material properties both globally and locally. Using shear test we were able to observe the change in the mechanical behavior from the brittle silica to the ductile sodium silicate.

We also showed that the crack formation starts from high sodium density regions.

Our major aim is to develop constructive relations based on atomic simulations, which then could be used in continuum methods to simulate actual crack propagation in macroscopic scale.

Reference

- [1] T. Gross, M. Tomozawa, Fictive temperature-independent density and minimum indentation size effect in calcium aluminosilicate glass, *Journal of Applied Physics* 104 (6) (2008) 1-11.

Etude théorique des propriétés des défauts et des dopants dans SiO₂ amorphe.

N. Richard¹, L. Martin-Samos^{2,3}, L. Giacomazzi², S. Girard⁴,
A. Boukenter⁴, Y. Ouerdane⁴, B. Winkler³.

¹CEA, DAM, DIF, Arpajon, France

²CNR-IOM DEMOCRITOS, Trieste, Italy

³Materials Research Laboratory, University of Nova Gorica, Nova Gorica, Slovenia

⁴Laboratoire Hubert Curien, UMR-CNRS 5516, Saint-Etienne, France

Les défauts ponctuels dans la silice amorphe sont étudiés expérimentalement depuis une cinquantaine d'années [1] mais l'attribution de propriétés spectroscopiques et optiques à une structure de défaut reste malgré tout un challenge [2-3]. En effet, la caractérisation expérimentale d'un défaut nécessite la combinaison de nombreux moyens comme la Résonance Paramagnétique Electronique (RPE) ou la spectroscopie par absorption et chacun d'eux possède ses limitations intrinsèques. Par exemple, la RPE ne peut détecter que les défauts paramagnétiques. C'est pourquoi nous avons mis en place une stratégie basée sur des calculs *ab initio* afin de compléter les mesures expérimentales et de mieux comprendre la physico-chimie des défauts et des dopants dans la silice amorphe.

Les calculs réalisés se placent dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) au travers du package Quantum ESPRESSO (QE) [4]. Ils nous permettent d'avoir non seulement accès aux configurations atomiques et à l'énergie totale des défauts et des dopants mais aussi aux paramètres RPE des défauts paramagnétiques grâce au module (GIPAW) [5].

De plus, à partir des configurations atomiques et des fonctions d'ondes obtenues en DFT, nous calculons la densité d'états du matériau et la position des niveaux d'énergie dus aux défauts et aux dopants avec le code SaX [6] en appliquant l'approximation GW. Enfin, les propriétés optiques (principalement le spectre d'absorption) sont obtenues en résolvant l'équation de Bethe-Salpeter (BSE).

Dans ce papier, la stratégie couplant expérience et simulation sera détaillée et des exemples de résultats seront donnés, certains ayant déjà fait l'objet de publications [7,8,9].

- [1] R.A. Weeks, J. Appl. Phys., **27**, 1376 (1956).
- [2] S. Girard *et al.*, IEEE Trans. Nuc. Sci., **60**(3), 2015 (2013).
- [3] L. Skuja, Journal of Non-Crystalline Solids **239**, 16 (1998).
- [4] P. Giannozzi *et al.*, J. Phys. Condens.Matter, **21**, 395502 (2009).
- [5] C.J. Pickard et F. Mauri, Phys. Rev. Lett. **88**, 086403 (2002).
- [6] L. Martin-Samos et G. Bussi, Comp. Phys. Com., **180**, 1416 (2009).
- [7] N. Richard *et al.*, Journal of Non-Crystalline Solids, **357**, 1994 (2011).
- [8] N. Richard *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter, **25**, 335502 (2013).
- [9] L. Giacomazzi *et al.*, Phys. Rev. B, **90**, 014108 (2014).

Molecular dynamics simulations of epitaxial growth of thin silicon films from the deposition of hydrogenated silicon clusters

Ha-Linh Thi LE^{1,2,3} and Holger VACH³

¹*CNRS, UMR 7588, Institut des Nanosciences de Paris, F-75005 Paris, France*

²*Sorbonne Universités, UPMC Univ Paris 06, UMR 7588, INSP, F-75005 Paris, France*

³*CNRS-LPICM, Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau, France*

E-mails: linh-ha-thi.le@insp.jussieu.fr, holger.vach@polytechnique.edu

Thin crystalline silicon solar cells based on epitaxial silicon thin films have been widely investigated in the field of photovoltaics [1]. Recently, it has been shown experimentally that high-quality epitaxial growth of thin silicon films in a Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD) reactor can be achieved at low temperatures and high deposition rates when plasma-born hydrogenated silicon clusters are used as deposition precursors [2-5]. However, the under-lying growth mechanisms for such an epitaxial growth have not been understood yet. In the present work, we have performed molecular dynamics (MD) simulations for the deposition of hydrogenated silicon clusters on crystalline silicon substrates by controlling various impact parameters to get a better understanding of high-speed epitaxial growth of thin silicon films catalyzed by plasma-born hydrogenated silicon nanoparticles at low substrate temperatures.

Keywords: hydrogenated silicon clusters, epitaxial growth, thin silicon films, molecular dynamics simulations

REFERENCES

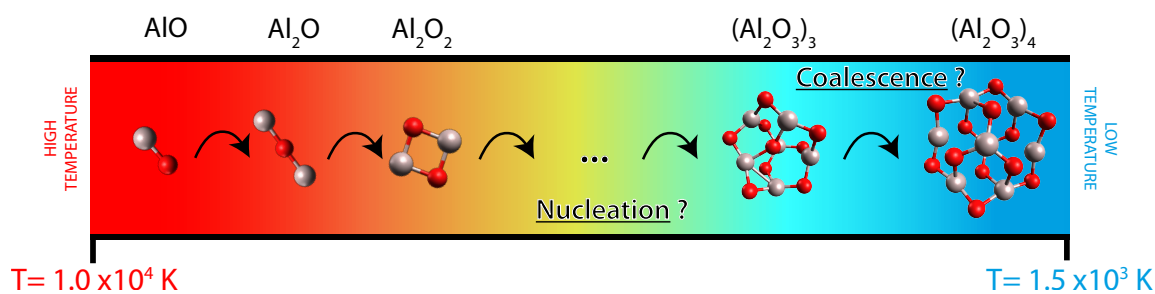
- [1] J. Poortmans and V. Arkhipov, *Thin Film Solar Cells Fabrication, Characterization and Applications*, John Wiley & Son Ltd, West Sussex (2006) 1
- [2] P. Roca i Cabarrocas, R. Cariou, and M. Labrune, *Journal of Non-Crystalline Solids* **358** (2012) 2000
- [3] M. Labrune, X. Bril, G. Patriarche, L. Largeau, O. Mauguin, and P. R. i Cabarrocas, *EPJ Photovoltaics*, **3** (2012) 30303
- [4] R. Cariou, R. Ruggeri, P. Chatterjee, J.-L. Gentner, and P. Roca i Cabarrocas, *SPIE optics and photonics*, San Diego: United States, **8470** (2012) 84700B
- [5] M. Moreno, G. Patriarche, and P. Roca i Cabarrocas, *Journal of materials research*, **28** (2013) 1626

Nucleation of nanoparticles: a microscopic approach based on quantum thermochemistry

J. Lam, D. Amans, C. Dujardin, G. Ledoux and A-R. Allouche
Institut Lumière Matière
Equipe Luminescence, Équipe de Physico-Chimie Théorique
Université Claude Bernard Lyon 1

Nucleation processes in the context of nanoparticles synthesis still raises numerous questions. It is agreed that a nucleation core is required to achieve nanoparticles growth. But, very few works have been done to formalize its nature and origin in the case of the nanoparticles synthesis^[1]. Experimental investigations are not suitable considering the fast time scale of the transient properties of the nucleation core. For computational research, most of the work were based on molecular dynamics simulations^[2].

To tackle this problem, we propose to combine quantum chemistry calculations with laser induced plasma spectroscopy. We demonstrate the potentiality of this method on a model system made of aluminium and oxygen atoms. We first computed the molecules lowest energy structures. This work was achieved using a systematic algorithm to search and optimize the geometries at a Møller-Plesset perturbation theory (MP2). Then, this computational method enables to deduced electronic energies, vibrational and rotational constants of all the considered molecules. Thereafter, we calculated the gas-phase equilibrium composition as a function of temperature, pressure and aluminum to oxygen ratio. At high temperature, the composition was compared to experimental measurements obtained from the laser ablation of an alumina target (Al_2O_3). The good agreement between experimental data and numerical simulations allows us to extend the calculation to lower temperature. We point out an emergence of alumina molecules, Al_4O_6 , Al_6O_9 and Al_8O_{12} in order of appearance. This result can be seen as a first step to build a numerical approach of homogeneous nucleation.



Schematic evolution of the main composition of an alumina gas as a function of the temperature.

References

- [1] R. Catlow, S. Bromley, S. Hamad, M. Mora-Fonz, A. Sokol, and S. Woodley, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 786-811 (2010).
- [2] D. Chakraborty and N. Patey, *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 573-578 (2013).
- [3] J. Lam, D. Amans, F. Chaput, M. Diouf, G. Ledoux, N. Mary, K. Masenelli-Varlot, V. Motto-Ros, C. Dujardin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 963-973 (2014).
- [4] J. Lam, V. Motto-Ros, D. Misiak, C. Dujardin, G. Ledoux, D. Amans, *Spec. Act. B.* **101**, 86-92 (2014).

Solid-state wetting and dewetting

O. Pierre-Louis

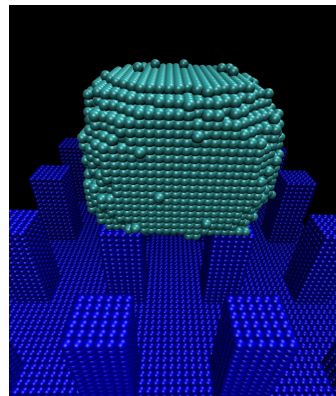
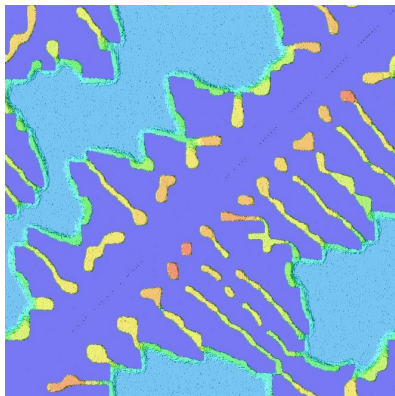
Institut Lumière Matière, UMR5306 Université Lyon 1-CNRS, Université de Lyon 69622 Villeurbanne, France

ABSTRACT

At the nanoscale, the morphological evolution of solid films and islands under annealing is strongly influenced by wetting properties. Inspired by analogies with recent advances in the wetting behavior of liquids, we explore two situations where solid-state wetting plays a crucial role.

In a first part, we discuss the dewetting dynamics of a thin solid film based on 2D Kinetic Monte Carlo (KMC) simulations and analytical models. We focus on the role of the faceting of the dewetting rim, which changes the asymptotic behavior of the dewetting velocity. In addition, we analyze the instability of the dewetting front, which leads to the formation of fingers.

In a second part, we will present some results on the wetting statics and dynamics of islands (or nanoparticles) on surface topographical structures with a large aspect ratio, such as pillars or trenches using 3D KMC simulations including elastic effects. We show that elasticity induces novel states such as asymmetric and partially impaled configurations.



KMC Simulations-- Left: Dewetting of a thin solid film; Right: Cassie-Baxter state for a nanoparticle

REFERENCES

1. M. Ignacio, Y. Saito, P. Smereka, O. Pierre-Louis, Phys Rev Lett 12 146102 (2014)
2. A. Chame O. Pierre-Louis, Phys Rev B (2014)
3. M. Ignacio, O. Pierre-Louis, Phys Rev B 86 235410 (2012)
4. A. Chame, O. Pierre-Louis, Phys Rev E 85 011602 (2012)
5. M. Dufay, O. Pierre-Louis, Phys Rev Lett 106105506 (20011)
6. P. Gaillard, Y. Saito, O. Pierre-Louis, Phys Rev Lett 106 195501 (2011)
7. K. Takano, Y. Saito, O. Pierre-Louis, Phys Rev B 82 075410 (2011)
8. E. Bussmann, F. Cheynis, F. Leroy, P. Müller, O. Pierre-Louis, New Journ. Phys. (2011)

Dynamique effective pour des coordonnées de réaction lente

Frédéric Legoll
Laboratoire Navier, Ecole des Ponts Paris Tech

Marne-La-Vallée

`legoll@lami.enpc.fr`

Abstract

Etant donné un système moléculaire et une coordonnée de réaction lente, on s'intéresse dans ce travail à la construction d'une dynamique effective pour cette coordonnée de réaction. Partant de l'équation de Langevin (en grande dimension) pour décrire la dynamique de l'ensemble du système, on montrera comment obtenir une équation de Langevin en petite dimension pour décrire la dynamique des variables collectives. L'objectif du modèle réduit est typiquement de reproduire les temps de résidence dans les bassins métastables.

Ce travail est issu de collaborations avec T. Lelievre et G. Samaey.

Whispering gallery modes in nanostructures : a way to force the electron to hug the walls (of potential)

Hervé Bulou

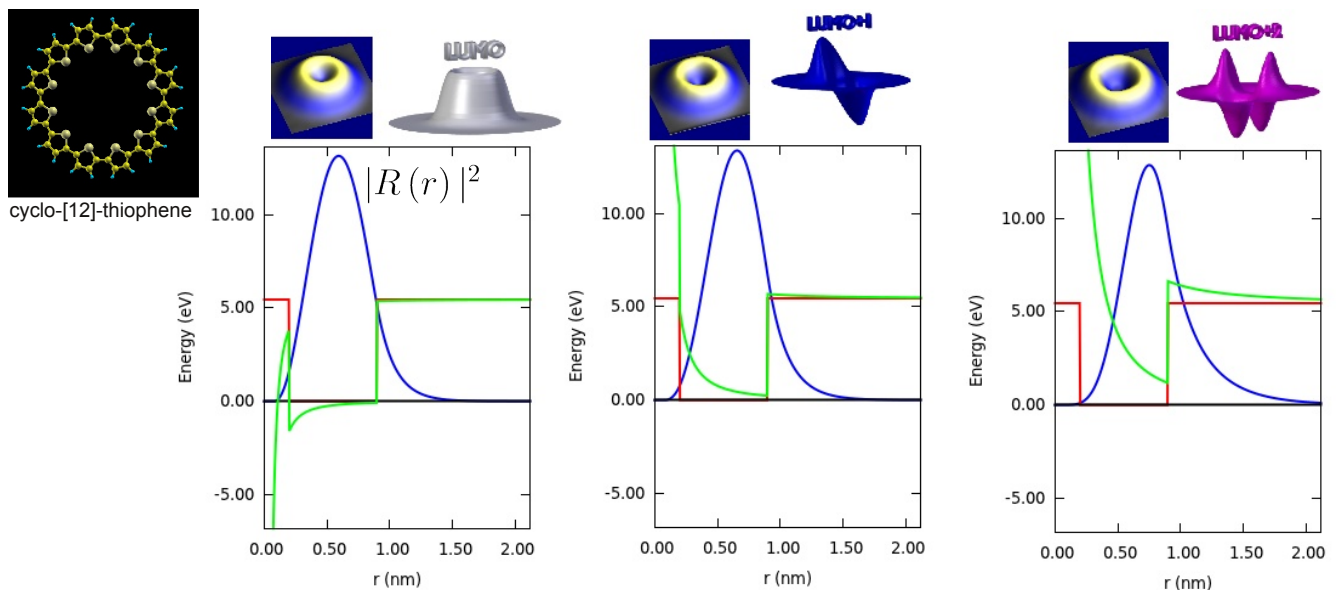
IPCMS-CNRS UMR7504

23, rue du Loess, B. P. 43, 67034 Strasbourg, France

The long-range propagation of the sound along curved walls is a long-standing, well-known phenomenon. A famous illustration of this effect can be observed in St Paul cathedral, London, where a faint sound can be heard at extraordinary distances from the source provided it is emitted close to the wall and that the auditor is also located close to the wall. This is indeed remarkable given that if you speak directly across the dome, far from the wall, the sound dispersion leads to an audible signal only at a short range. It is Lord Rayleigh who, at the end of the XIXth century, explained this whispering effect [1].

Since then, this effect was observed for electromagnetic waves propagating at the surface of spherical dielectrics [2,3], for neutrons [4], and it has been predicted for anti-hydrogen atoms [5].

In this talk I will present the necessary conditions for observing this effect for electrons [6]. I will show that molecular nanostructures are suitable devices for characterizing this effect in the nanoscale range and I will give an analytical description of this phenomenon in the quantum framework based on scanning tunneling microscopy results and density functional theory.



[1] Lord Rayleigh, Theory of Sound, vol. II, 1st edition, (London, MacMillan), 1878.

[2] "Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen", G. Mie, Ann. Physik 25, 377, (1908).

[3] "Der Lichtdruck auf Kugeln von beliebigem Material", P. Debye, Ann. Physik 30, 57, (1909).

[4] "Neutron whispering gallery", V. V. Nesvizhevsky, A. Y. Voronin, R. Cubitt and K. V. Protasov, Nature Phys. 6, 114, (2009).

[5] "Whispering-gallery states of antihydrogen near a curved surface", A. Y. Voronin, V. V. Nesvizhevsky, and S. Reynaud, Phys. Rev. A 85, 014902, (2012).

[6] "Oligothiophene Nanorings as Electron Resonators for Whispering Gallery Modes", G. Reecht, H. Bulou, F. Scheurer, V. Speisser, B. Carrière, F. Mathevet, and G. Schull, Phys. Rev. Lett. 110, 056802 (2013).

POSTERS

Une dizaine de posters seront exposés à proximité du lieu des pauses café :

Quantum and dielectric confinement of charge Carriers in hybrid perovskite heterostructures

D. Saponi*, L. Pedesseau, M. Kepenekian, A. Rolland, C. Katan, J. Even

*** INSA de Rennes**

Etude multi-échelle de l'interaction entre les solutés interstitiels et les lacunes dans le fer α

Caroline Barouh*, Chu-Chun Fu and Thomas Jourdan

*** CEA, SRMP, Saclay**

Hydration mechanisms in the GdBaCo₂O_{5.5} electrolyte from first-principles

E. Coulaud*, G. Geneste, G. Dezanneau

***CEA, DAM, DIF, Arpajon, France.**

First-principles modeling of NaCl-bearing H₂O ices at extreme conditions

Jean-Alexis Hernandez*, Razvan Caracas

***ENS Lyon**

Equation of state and structure of silicate melts at high pressure and temperature from first-principles calculations

Alexandra Catalina Seclaman, ENS Lyon

The WURM project - a database of computed physical properties of minerals, with a special focus on Raman

Razvan Caracas*, Ema Bobocioiu

***ENS Lyon**

Ab initio modeling of dislocation-carbon interaction in ferritic steels

B. Lüthi*, L. Ventelon, F. Willaime, D. Rodney

CEA, SRMP Saclay

Ab initio modeling of dislocation cores in HCP Zirconium and interaction with Oxygen atoms

N. Chaari*, E. Clouet, D. Rodney

***CEA, SRMP Saclay**