

Un ordre chimique subtil dans les nanoalliages

Alexis Front^{a*}, Christine Mottet^a, Guy Tréglia^a et Bernard Legrand^b

a. CINaM, CNRS / Aix-Marseille Université, Campus de Luminy, Marseille, France.

b. DEN-SRMP, CEA, Université Paris-Saclay, F91191 Gif-sur-Yvette, France.

* mottet@cinam.univ-mrs.fr << corresponding author >>

Les nanoalliages constituent un terrain de jeu attractif pour les théoriciens, comme pour les expérimentateurs, puisqu'ils présentent un grand nombre de degrés de liberté au niveau de leur structure, morphologie, et ordre chimique [1], auxquels s'ajoutent des questions thermodynamiques [2] et cinétiques liées à leur taille finie.

Nous présentons ici une étude comparée de deux systèmes à tendance à l'ordre (Co-Pt et Ag-Pt) dans lesquels la phase ordonnée à l'équiconcentration présente une alternance de plans purs dans deux directions différentes (voir figure): la direction (100) pour la phase $L1_0$ et la direction (111) pour la phase $L1_1$. Alors que les nanoalliages de Co-Pt ont donné lieu à de nombreuses études théoriques et expérimentales [3], ceux de Pt-Ag n'ont été élaborés et caractérisés que très récemment dans le cadre d'une thèse à Orléans [4] et la phase $L1_1$ a pu être observée dans les nanoparticules de quelques nm.

Les phases d'équilibre sur l'ensemble des compositions de nanoalliages de différentes tailles, structures et morphologies sont déterminées par des simulations Monte Carlo et un modèle énergétique semi-empirique. Une différence majeure entre les deux systèmes, outre les différents types de phases ordonnées $L1_1$ versus $L1_0$, est que Pt-Ag présente une forte tendance à la ségrégation de surface, absente dans Co-Pt.

[1] R. Ferrando, Volume 10 of the series Frontiers of Nanoscience, Elsevier (2016)

[2] F. Calvo, Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 27922 (2015)

[3] P. Andréazza et al., Surf. Sci. Rep. **70**, 188 (2015)

[4] J. Pirart, thèse en préparation.

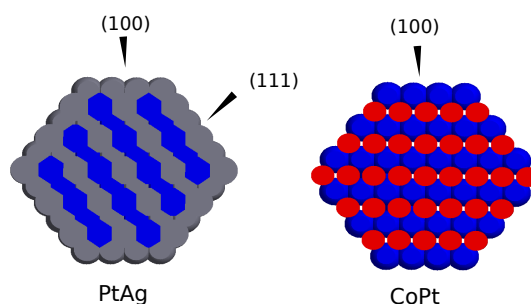


Figure 1: Représentation schématique des phases ordonnées $L1_1$ (Pt-Ag) et $L1_0$ (Co-Pt) avec une alternance de plans purs dans les directions (111) et (100) respectivement.