

Comprendre la structure de systèmes désordonnés avec des simulations moléculaires

Matthieu Micoulaut^{a*},

a. Paris Sorbonne Université, LPTMC, Boite 121, 4 place Jussieu 75252 Paris cedex 05 France

* mmi@lptmc.jussieu.fr

La diffusion de rayons X ou neutrons indique que les liquides et les verres se caractérisent par un certain ordre à courte distance mais sont désordonnés à longue distance, toute la difficulté étant d'accéder à des informations sur la structure allant au-delà des premiers voisins.

Dans cet exposé, nous montrerons comment les développements de simulations de dynamique moléculaire classiques ou quantiques permettent de produire des modèles structuraux réalistes validant non seulement les données expérimentales mais permettant aussi de donner une multitude d'informations supplémentaires à l'échelle atomiques telles que la structure à moyenne distance (anneaux), la géométrie locale, la dynamique et les propriétés vibrationnelles.

Nous illustrerons notre propos en donnant quelques résultats récents portant sur le chalcogénures tels que les systèmes binaires vitreux Ge-Se [1,2], As-Se [2] ou les liquides Ge-Sb-Te [3] ou Ge-Te [4].

[1] *Revealing the crucial role of molecular rigidity on the fragility evolution of glass-forming liquids*, C. Yildirim, J.-Y. Raty, M. Micoulaut, *Nature Communications* 7, 11086 (2016).

[2] *Compositional thresholds and anomalies in connection with stiffness transitions in network glasses*, M. Bauchy et al., *Physical Review Letters* 110, 165501 (2013)

[3] *Effect of tellurium concentration on the structural and vibrational properties of phase change Ge-Sb-Te liquids*, H. Flores-Ruiz et al., *Physical Review B* 92, 134205 (2015)

[4] *Effect of the composition on structure in liquid Ge_xTe_{100-x} : a combined density functional and neutron scattering study*, M. Micoulaut et al., *Physical Review B* 89, 174205 (2014)

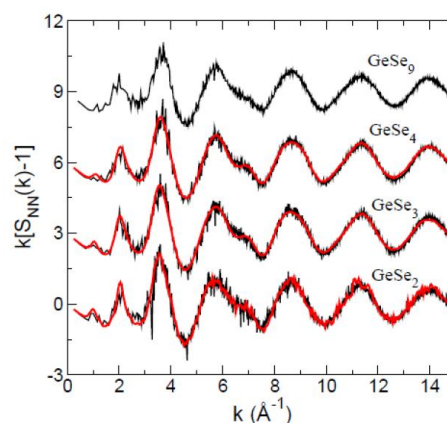


Figure 1 : Fonction interférence déduite de l'expérience (rouge), comparée aux simulations « Premiers principes » des amorphes Ge-Se en compositions variables. *Phys. Rev. B* **88**, 054203 (2013).