Simulations numériques de la dynamique des liquides et des verres

W. Kob

Laboratoire des Verres, Université de Montpellier 2, France

Introduction

- Pourquoi faire des simulations sur l'ordinateur ?
- Quel genre de simulation est porteur à l'heure actuelle?
- La simulation en pratique?
- L'importance d'un bon potentiel.
- Dépendance des résultats en fonction de l'histoire de l'échantillon dans le cas des verres.
- Effets de taille finie
- L'importance de la mise en équilibre des systèmes

Simulation de SiO_2

- Potentiel et détails de la simulation
- Dynamique: déplacement carré moyen, constante de diffusion, fonction de diffusion intermédiaire
- Propriété de factorisation
- Dépendance en q du facteur de Debye-Waller et relation avec la théorie du couplage des modes

Simulation de $\text{Na}_2\text{O}-x\text{SiO}_2$

- Motivation
- Potentiel et détails de la simulation
- Constante de diffusion
- Distribution spatiale des atomes de sodium: existence de canaux
- Facteurs de structure partiels
- Facteur de structure neutronique S_n : comparaison de la théorie avec l'expérience
- Dynamique des atomes de sodium caractérisé par la partie propre (self) de la fonction de corrélation de van Hove
- Fonction de diffusion intermédiaire: cohérente et incohérente
- Temps de relaxation de la structure
- Dépendance en q de l'étirement
- résumé