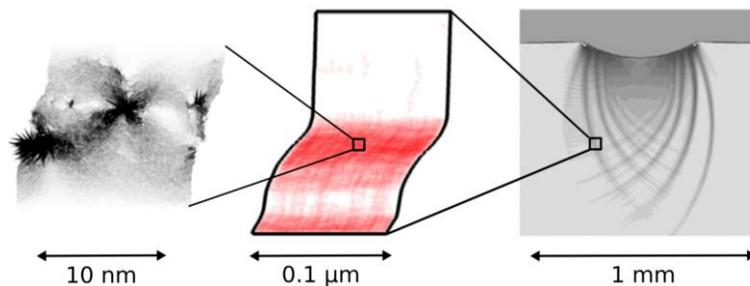


Modéliser la matière condensée à différentes échelles de temps et d'espace

D. Rodney

Institut Lumière Matière, Université de Lyon, 69622 Villeurbanne, France

La matière condensée couvre plus de 10 ordres de grandeur à la fois en échelles de temps et d'espace, allant des interactions et vibrations atomiques, au vieillissement des structures pouvant s'étendre sur plusieurs siècles. La modélisation numérique de ces processus a fait des progrès rapides ces 20 dernières années grâce à l'accroissement de la puissance des ordinateurs et au développement de nouveaux modèles physiques. Ces modèles restent cependant souvent dédiés à une échelle particulière et les coupler en eux, ou faire passer une information d'une échelle inférieure vers une échelle supérieure, demeure un challenge encore difficile à relever.



Exemple de structure multi-échelle [1]. Cas de la plasticité des verres: des réarrangements à l'échelle atomique s'organisent pour former des bandes de cisaillement à l'échelle micronique qui elles-mêmes se multiplient pour produire une déformation macroscopique.

Dans cet exposé, j'illustrerai la modélisation à différentes échelles d'espace et de temps à partir d'exemples personnels. Je commencerai par la plasticité cristalline, qui est certainement le domaine le plus avancé où les besoins de prédictions quantitatives nécessitent l'utilisation de modèles de grande précision, tel que les calculs de structure électronique [2]. A l'inverse, dans le domaine des verres, il est encore possible d'utiliser des modèles simplifiés car il demeure un besoin de compréhension phénoménologique de la physique sous-jacente par exemple à la plasticité ou au vieillissement des verres [1]. Finalement, j'aborderai les matériaux architecturés, mêlant de façon intime des constituants présentant des grands contrastes de propriétés et nécessitant le développement de nouveaux outils tant expérimentaux que numériques. [3]

-
1. Rodney D., Tanguy A., Vandembroucq D. 'Multiscale modeling of the mechanics of amorphous solids' *Modeling and Simulation in Material Science and Engineering* **19** (2011) 083001.1-49.
 2. Clouet E., Caillard D., Chaari N., Onimus F., Rodney D. 'Dislocation locking versus easy glide in titanium and zirconium' *Nature Materials* **14** (2015) 931-936.
 3. Rodney D., Gadot B., Riu Martinez O., Rolland du Roscoat S., Orgéas L. 'Reversible dilatancy in entangled single-wire materials' *Nature Materials* **15** (2016) 72-77.