

# Propriétés surfaciques entre phases par dynamique moléculaire

Fabienne RIBEIRO et Andrei JELEA,

Autorité de Sûreté Nucléaire et de Radioprotection (ASNR), PSN-RES/SEMIA/LSMA, BP 3, 13115, Saint-Paul-lez-Durance Cedex, France

L'objectif de cette présentation est d'illustrer comment la dynamique moléculaire peut être utilisée pour caractériser les interfaces. Dans un premier temps, les concepts de base de la dynamique moléculaire seront brièvement présentés, ainsi que les principales briques élémentaires sur lesquelles reposent son utilisation (choix du système, de l'ensemble, du potentiels...). Dans un second temps, un exemple d'application dédié à la caractérisation des propriétés mécaniques de l'interface des bulles d'He dans les aciers permettra de mettre en évidence l'intérêt de ces approches pour alimenter les outils de mécanique à l'échelle de la mesostructure.

## Bibilio:

- Allen, M. P., & Tildesley, D. J. (2017). Computer simulation of liquids. Oxford university press.
- Frenkel, D., & Smit, B. (2023). *Understanding molecular simulation: from algorithms to applications*. Elsevier.
- Jelea, A. (2018). On the Laplace-Young equation applied to spherical fluid inclusions in solid matrices. *Journal of Nuclear Materials*, 505, 127-133.
- Rusanov, A. I. (2005). Surface thermodynamics revisited. *Surface Science Reports*, 58(5-8), 111-239.