

Défis et avancées dans la modélisation des processus de croissance des films minces ou comment les percées récentes en algorithmiques nous permettent de relier plus facilement simulations et expériences

Normand Mousseau

Département de physique et Regroupement québécois sur les matériaux de pointe, Université de Montréal

* email : normand.mousseau@umontreal.ca

L'étude des processus de croissance de films minces demande à la fois une description précise des interactions atomiques dans des environnements variés (molécules gazeuses, ions, liaisons pendantes, diversité d'éléments) et sur des échelles de temps qui dépassent, parfois de beaucoup, la picoseconde. Face à ces défis, les modélisateurs ont longtemps été contraints de choisir entre précision, avec de lourds calculs quantiques, et durée, avec des potentiels empiriques beaucoup plus légers, mais incapables de décrire réellement la complexité des environnements chimiques. Même avec ces potentiels plus qu'approximatifs, les méthodes de simulation traditionnelles, telles que la dynamique moléculaire, ne permettent pas, toutefois, de dépasser la microseconde, limitant considérablement la pertinence des modèles pour comprendre les phénomènes expérimentaux. L'apprentissage automatique des champs de force couplé à des approches de dynamique accélérées, telles que ART cinétique (ou *kinetic ART*), un algorithme de Monte Carlo cinétique hors-réseau laisse espérer qu'il sera bientôt possible de lever plusieurs de ces barrières. Dans ce séminaire, je présenterai un survol des récents développements que nous poursuivons autour de ces méthodes.

Les travaux présentés ici ont été réalisés en collaboration, entre autres, avec Charlotte Becquart, Laurent Karim Béland, Othmane Bouhali, Romain Candela, Christophe Domain, Fedwa El-Mellouhi, Simon Gelin, Miha Gunde, Anne Hémerlyck, Antoine Jay, Carl Lévesque, Ruggero Lot, Sami Mahmoud, Layla Martin-Samos, Nicholas Salles, Alexandre Sauvé Lacoursière, Mijanur Rahman, Oscar Restrepo, Nicholas Richard, Eugène Sanscartier et Mickaël Trochet.