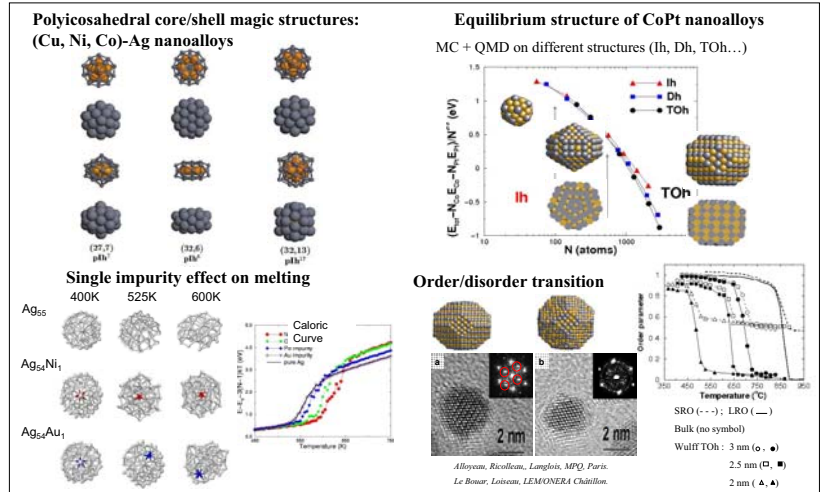
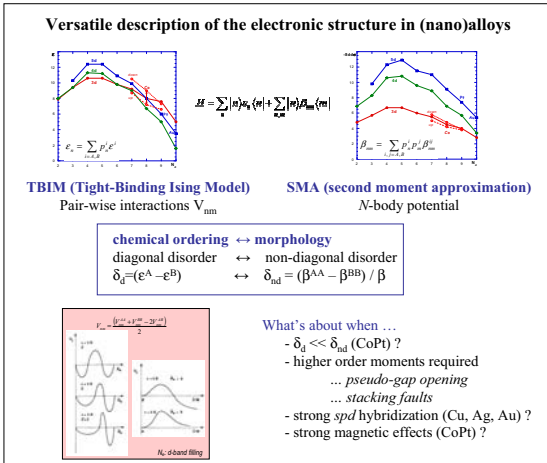


Simulation Numérique de Nano-Alliages ou alliages bimétalliques de dimension réduite : des surfaces aux agrégats.

Partenaire 1: Marseille – Centre Interdisciplinaire de Nanosciences de Marseille, CINaM – C. Mottet, G. Trégia

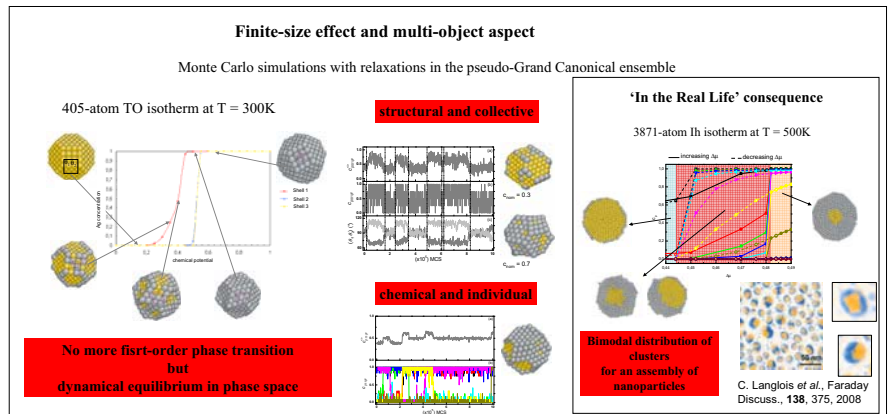
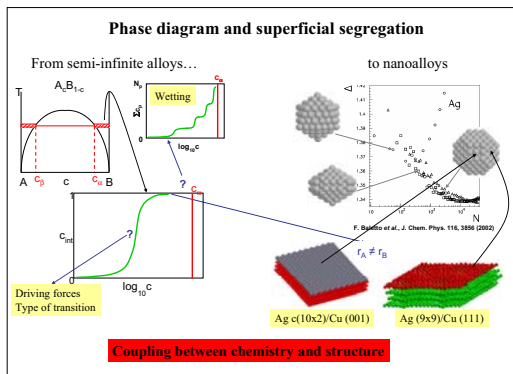
Tâche n°1. Dérivation de modèles effectifs d'interactions pour les nanoalliages à partir de leur structure électronique,

Tâche n°4 : Aspects Dynamiques



Partenaire 2: Paris-Sud – Laboratoire d'Étude des Matériaux Hors Équilibre / ICMO - Orsay – J. Creuze, F. Berthier – Section de Recherche en Métallurgie Physique, CEA, Saclay – B. Legrand

Tâche n°3. Équilibre thermodynamique



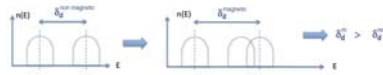
– Laboratoire d'Étude des Microstructures, ONERA-CNRS, Châtillon – H. Amara, F. Ducastelle

Tâche n°1. Dérivation de modèles effectifs d'interactions pour les nanoalliages à partir de leur structure électronique,

Thermodynamic Simulations of CoPt Nanoparticle
Size effect on the phase diagram: from bulk to nanoparticle
Tight-binding model beyond the SMA approximation for a good description of the electronic structure in (nano) alloys:
- reproduce the energetical properties of the FCC structures for Co and Pt and the L1₀ phase for CoPt

Role of the magnetism in the order-disorder transition
- for CoPt $\delta_d \approx 0 \Rightarrow$ another driving force : magnetic effect ?

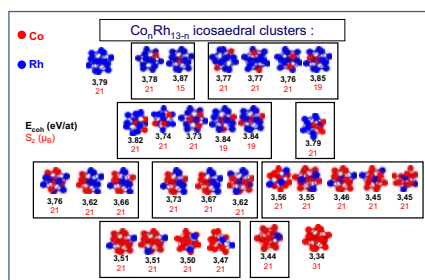
- from DFT calculations : $\delta_d^{Co} = 3.00 \text{ eV} > \delta_d^{Pt} = 2.35 \text{ eV}$



magnetism effects are important in CoPt systems

Partenaire 3: Toulouse – Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales, CEMES – J. Morillo, M. Benoit

Tâche n°2. Structure électronique et magnétisme des nanoalliages à partir d'une approche ab initio



Energy :
• Co prefers to be at center
• hetero atomic bonding

Magnetism :
• better Co at surface
• +1 Co is enough to increase the moment in the alloy

