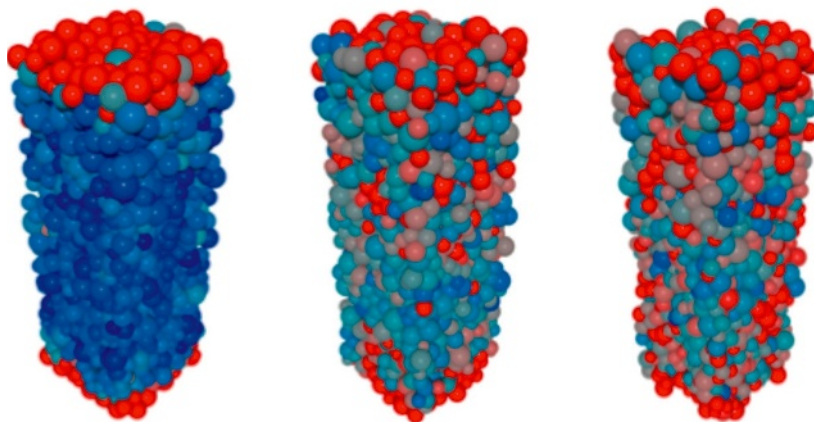


Cette difficulté laissait peu d'espoir pour l'approche numérique, mais la situation a radicalement changé en 2016. À l'université de Montpellier, nous avons mis au point un nouvel algorithme de type Monte-Carlo, c'est-à-dire qui repose sur un certain aléa lors de son exécution. Cet algorithme comble l'énorme écart entre simulations et expériences et permet d'étudier numériquement des verres modèles dont la structure est directement comparable aux verres expérimentaux. Mieux, en optimisant encore cet algorithme nous avons été capables, pour certains modèles de verres, de produire des verres considérablement plus stables et plus denses que des verres préparés expérimentalement, le gain en temps de calcul pouvant être supérieur à douze ordres de grandeur (voire quarante ordres de grandeur pour des films en deux dimensions!). Ces verres préparés *in silico* sont donc directement comparables aux films ultrastables obtenus par le groupe de Mark Ediger, et nous permettent d'approcher dans des études numériques bien contrôlées le verre idéal tant recherché. Cette avancée importante nous permet en particulier de tester de façon détaillée la théorie du champ moyen.

VERRES NUMÉRIQUES QUASI IDÉAUX

Depuis 2016, de nombreux travaux numériques ont permis d'explorer le comportement physique des liquides à des températures qui n'avaient jamais été étudiées auparavant. En particulier, plusieurs études semblent désormais confirmer assez directement la validité de la théorie du champ moyen pour décrire des verres modèles en trois dimensions. Pour ces systèmes, on démontre en refroidissant des liquides au plus proche de la transition vitreuse idéale que toutes les caractéristiques thermodynamiques prédites par la théorie sont bien observées. Nos simulations suggèrent en particulier que l'entropie configurationnelle s'annule à une température de transition finie vers la phase du verre idéal (voir la figure page 69). Cette transition présente les mêmes caractéristiques qu'une transition de phase du premier ordre (comme la transition liquide/solide pour l'eau à 0 °C).

Ces récents développements numériques et expérimentaux jettent une lumière nouvelle sur l'ensemble des propriétés physiques du verre. On peut désormais varier à loisir la qualité du verre préparé pour en étudier ensuite les propriétés macroscopiques. On peut alors se demander si les verres ultrastables, qui se rapprochent au plus près du verre idéal, ont des propriétés différentes des verres ordinaires. La réponse est oui. Nous comprenons désormais que les propriétés



thermiques, thermodynamiques et mécaniques du verre s'expliquent par l'existence d'une petite population d'excitations localisées dans le verre. L'existence de tels «défauts» est pourtant difficile à concevoir puisque la structure microscopique du verre est parfaitement homogène et désordonnée. Il reste difficile de définir les outils numériques ou mathématiques adéquats pour les identifier de manière simple et générique. Pourtant, la simulation numérique montre par exemple que lorsqu'on déforme lentement un verre, la déformation plastique est bel et bien localisée dans quelques endroits rares de l'échantillon, dont le nombre semble diminuer dramatiquement lorsqu'on s'approche du verre idéal. Il est donc tentant de postuler que le verre idéal, tel que prédit par la théorie du champ moyen, serait bien un matériau «parfaitement désordonné» ne comportant strictement aucun défaut : le désordre parfait!

En 2014, l'équipe de Frances Hellman, de l'université de Californie à Berkeley, a démontré que les excitations à l'origine des effets dissipatifs dans le verre à très basse température seraient beaucoup moins nombreuses dans les verres ultrastables. Des résultats similaires ont été obtenus par Miguel Ramos et ses collaborateurs. Notre étude numérique publiée en 2020 (voir l'encadré page 70) soutient ces résultats expérimentaux, suggérant que les effets dissipatifs seraient quasiment absents dans le verre idéal. L'équipe de Berkeley travaille aujourd'hui au développement de revêtements vitreux ultrastables pour les futurs miroirs de l'interféromètre *Ligo*. De tels verres à la dissipation fortement réduite pourraient aussi résoudre les problèmes de la cohérence des qubits dans les futurs ordinateurs quantiques. Même si la quête du verre idéal n'est pas encore arrivée à son terme, elle laisse déjà entrevoir de nombreuses applications pour d'autres secteurs telles que la recherche de pointe ou les télécommunications. ■

Grâce à une technique de fabrication par dépôt de molécules en phase gazeuse, les verres ultrastables présentent les caractéristiques, notamment la densité, de verres refroidis très lentement. Ludovic Berthier et ses collègues ont développé une simulation numérique fondée sur un algorithme de type Monte-Carlo qui échange la position de différentes molécules dans le matériau. Ce processus aléatoire permet d'explorer rapidement différentes configurations et les énergies associées. Les chercheurs ont ainsi montré que lors de la formation du verre ultrastable, les particules en surface diffusent plus facilement que celles en volume, ce qui permet d'atteindre un état d'équilibre stable (ci-dessus trois simulations réalisées à des températures différentes – la plus basse à gauche, la plus élevée à droite – et où plus une bille est rouge, plus elle est mobile).