
Soutenance de thèse de Romain Soulairol

Vendredi 30 Septembre, 14h00, Salle B6, INSTN, CEA-Saclay

Étude théorique de la corrélation entre le magnétisme et les propriétés des défauts dans le fer, le chrome et leurs alliages

Résumé :

Cette thèse est consacrée à l'étude de la corrélation entre le magnétisme et les propriétés des défauts contenus dans les métaux $3d$, en particulier les systèmes à base de fer et de chrome, qui sont utilisés dans de nombreuses applications technologiques, et notamment la nouvelle génération de réacteurs nucléaires. Elle utilise deux approches complémentaires issues de la Théorie de la fonctionnelle de la Densité (DFT) ainsi qu'une approche de type Liaisons Fortes (LF).

Nous commençons cette étude par les propriétés des matériaux purs tels que le chrome, pour lequel la présence d'une onde de densité de spin (SDW) rend anisotrope la formation de défauts ponctuels ou encore la migration des lacunes, et le fer- α pour lequel l'énergie de mise en solution d'impuretés $3d$ est dictée par une contribution chimique, liée principalement à la différence du nombre d'électrons d entre le fer et l'impureté, et une contribution magnétique, dominante pour le Fe-Cr.

Puis nous abordons la corrélation entre magnétisme et défauts étendus. Nous montrons en particulier que l'existence de frustrations magnétiques à l'interface Fe/Cr peut conduire à l'émergence de structures magnétiques non colinéaires mais aussi influencer la stabilité énergétique de ces interfaces. Nous avons relevé, en accord avec les résultats expérimentaux, la présence de SDW près des interfaces Fe/Cr, à même de réduire ces frustrations magnétiques entre fer et chrome. Nous étudions en outre la structure magnétique d'agrégats de fer ou de chrome dans l'alliage Fe-Cr. Nous montrons, dans la dernière partie de cette thèse, comment l'approche LF peut décrire les propriétés énergétiques et magnétiques des défauts dans le fer ou le chrome purs, mais aussi celles d'un alliage Fe-Cr.

Jury :

Pr. Jaime Ferrer	Rapporteur
Dr. Lionel Calmels	Rapporteur
Pr. François Ducastelle	Examineur
Pr. Sergei Dudarev	Examineur
Pr. William Sacks	Examineur
Dr. Chu-Chun Fu	Encadrante CEA/SRMP
Dr. Cyrille Barreteau	Directeur de thèse