

Lundi 2 mars 2015 à 14h

Salle de réunion du SRMP – Bâtiment 520 - Pièce 109

Durcissement par solution solide dans les alliages à haute entropie de structure CFC

C. Varvenne, A. Luque Gomez, S. I. Rao, W. A. Curtin

Laboratory for Multiscale Mechanics Modeling, IGM – STI

Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, CH-1015 Lausanne, Suisse

Le concept des alliages à haute entropie a permis d'accéder à une nouvelle classe de matériaux aux propriétés uniques, qui n'auraient pu être atteintes par les techniques classiques de micro-alliage. En particulier, les alliages à haute entropie possèdent d'excellentes propriétés mécaniques, typiquement comparables à celles des verres métalliques, mais leur structure cristalline leur confère une meilleure ductilité [1]. Augmenter le nombre de constituants dans ces matériaux tend à améliorer leurs propriétés mécaniques ainsi que leur évolution avec la température. Cependant, ces effets sont encore peu modélisés [2] pour cette classe d'alliages complexes, et une théorie complète permettant de discuter des paramètres matériaux déterminants n'a toujours pas été proposée.

Nous présentons ici une généralisation aux solutions solides multi-composants fortement concentrées du modèle de durcissement précédemment proposé par Leyson et al. [3]. Elle se fonde sur une approche de milieu effectif moyen, permettant de traiter le durcissement dans le même esprit que pour des alliages dilués [3-5]. Nous pouvons ainsi prédire les barrières énergétiques pour le glissement d'une dislocation, la contrainte critique d'écoulement à température nulle ainsi que son évolution avec la température pour une solution concentrée. L'analyse des paramètres clés du modèle permet de conclure que le nombre d'élément d'alliage n'est pas déterminant en lui-même, et que la composition équi-atomique n'est pas nécessairement optimale du point de vue des propriétés mécaniques.

Un travail sur un système modèle ternaire FeNiCr modélisé en potentiel empirique sera présenté. Nous pourrions ainsi confronter résultats du modèle et simulations atomistiques directes effectuées en statique moléculaire à 0K. Finalement, nous discuterons d'un modèle simplifié reposant sur un faible nombre de paramètres directement mesurables en DFT, qui permettrait de calculer les contraintes critiques d'écoulement pour des alliages réels afin de les comparer à des mesures expérimentales.

[1] Y. Zhang, T.T. Zuo, Z. Tang, M.C. Gao, K.A. Dahmen, P.K. Liaw, and Z.P. Lu, Prog. Mat. Sci. **61**, 1 (2014).

[2] I. Toda-Caballo and P. E. J. Rivera Diaz del Castillo, Acta Materialia **85**, 14-23, (2015)

[3] G. P. M. Leyson, L. G. Hector Jr. and W. A. Curtin, Acta Materialia **60**, 3873-3884, (2012)

[4] L. Proville and S. Patinet, Phys. Rev. B **82**, 054115, (2010)

[5] J. A. Yasi, L. G. Hector Jr. and D. Trinkle, Acta Materialia **58**, 5704-5713, (2010)

Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance, et ceux de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire, le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre : Tel : 01 69 08 66 64 - Fax : 01 69 08 68 67.

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
DEN/DANS/DMN Service de Recherches de Métallurgie Physique
Centre de Saclay – Bât. 520 - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex – France

