

SOUTENANCE DE THÈSE
pour obtenir le grade de
DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS-SUD
présentée par
Thomas GARNIER

Transfert d'échelle dans la modélisation thermodynamique et cinétique des alliages



Vendredi 7 décembre 2012 à 10h à Neurospin - CEA Saclay
amphithéâtre Talairach

Composition du jury :

Pascal BELLON	Examineur
Alphonse FINEL	Directeur de thèse
Alexandre LEGRIS	Examineur
Maylise NASTAR	Examinatrice
Pär OLSSON	Rapporteur
Mathis PLAPP	Rapporteur
Robert TÉTOT	Examineur

La prédiction des microstructures représente un enjeu majeur pour l'étude des processus de vieillissement des alliages métalliques, en particulier sous irradiation. Les résultats des calculs *ab initio* de structure électronique peuvent être utilisés pour paramétrer les méthodes cinétiques de Monte Carlo Atomique et permettent ainsi de simuler quantitativement la diffusion des atomes et l'évolution de la microstructure qui en résulte. Cette méthode est cependant limitée par le temps de calcul qu'elle exige. Les simulations mésoscopiques évitent cet écueil, mais souffrent généralement de ne pouvoir être paramétrées sur les résultats obtenus aux échelles inférieures, limitant ainsi leur pouvoir de prédiction.

Dans ce travail, une méthode de simulation appelée Monte Carlo cellulaire cinétique a été développée pour relier les échelles atomiques et mésoscopiques tout en conservant la nature discrète des atomes. Une procédure de paramétrisation basée sur les simulations Monte Carlo à l'échelle atomique a été établie. Elle permet de reproduire quantitativement les propriétés macroscopiques d'équilibre des alliages indépendamment de la taille des cellules utilisées. Une application à l'alliage fer-cuivre est présentée.

Afin de décrire les propriétés cinétiques à ces échelles, un outil générique de calcul de la matrice d'Onsager dans les alliages a été mis en place. Il est fondé sur la théorie du Champ Moyen Auto-Cohérent. Les résultats obtenus sur des cinétiques de diffusion et de précipitation dans un alliage modèle sont présentés et validés par une comparaison systématique avec des simulations Monte Carlo à l'échelle atomique.