

Soutenance de thèse

Jeudi 29 juin 2006, 14h
Amphithéâtre de l'INSTN

Défauts atomiques et diffusion dans les alliages : effets des corrélations

Vincent BARBE

Thèse préparée au Service de Recherches en Métallurgie Physique (CEA Saclay)

La théorie de la diffusion dans les alliages a pour but de prédire les propriétés de diffusion d'un alliage à partir de la description de sauts atomiques individuels. Ces propriétés sont fondamentales dans des matériaux maintenus hors d'équilibre, comme par exemple les aciers soumis à irradiation dans les centrales nucléaires.

Nous proposons plusieurs développements d'un modèle existant, dit de champ moyen auto-cohérent (CMAC). La principale difficulté théorique est le traitement des effets de couplage (ou de corrélations) entre les différents flux de matière. Pour les prendre en compte, le CMAC détermine la fonction de distribution d'un alliage hors d'équilibre, en suivant le déplacement simultané de plusieurs atomes ou défauts. Cette fonction de distribution est traduite formellement par un ensemble d'interactions de nature dynamique, appelé Hamiltonien effectif.

L'étude contient une extension du domaine de validité du CMAC à des systèmes fortement corrélés pour le mécanisme lacunaire, ainsi qu'au transport par mécanisme interstitiel. Nous nous appuyons pour cela sur des modèles atomiques dits de liaisons coupées capables de rendre compte des propriétés thermodynamiques d'un alliage telles que l'ordre à courte distance.

Ces approches sont appliquées pour estimer les propriétés de diffusion dans deux alliages modèles d'intérêt nucléaire, la solution solide concentrée Fe-Ni-Cr et l'alliage dilué Fe(P) : nous proposons un modèle atomique adapté et comparons nos résultats à des données expérimentales.

La présentation orale insistera sur le traitement, théorique et appliqué, du mécanisme interstitiel.

