

Jeudi 15 Juin 2017 à 14h

Salle de réunion du SRMP – Bâtiment 520 - Pièce 109

Effets d'alliage sur la formation et la stabilité des amas d'interstitiels de type C15 dans le fer

Luca Messina

Post Doc au SRMP

L'évolution de la microstructure des alliages irradiés et leurs propriétés macroscopiques sont déterminées par la formation d'amas de défauts et les variations spatiales de la composition chimique induites par la diffusion des défauts et leur couplage avec les atomes de soluté. Par conséquent, la caractérisation des propriétés d'équilibre et cinétique des défauts ponctuels (lacunes et interstitiels) et leurs amas est fondamentale pour comprendre et prédire le comportement des alliages sous irradiation. Dans les alliages bas fer, la structure des amas d'interstitiels varie en fonction de leur taille. Des études récentes ont montré qu'aux tailles intermédiaires, les amas les plus stables présentent une structure de type phases de Laves (C15). Ces amas sont immobiles et peuvent grossir en absorbant des interstitiels isolés. En présence d'un couplage cinétique positif entre les défauts ponctuels et les solutés, les C15 peuvent aussi agir comme des sites de germination pour la ségrégation et la précipitation induites, et voir ainsi leurs propriétés se modifier sous irradiation. L'existence de ces amas a été confirmée par de récentes observations expérimentales réalisées sur des alliages base fer irradiés aux électrons. Ces expériences ont montré que les amas C15 sont fortement stabilisés par l'ajout de phosphore et d'autres éléments, ceci même pour de très faibles concentrations.

Dans cet exposé, nous présentons notre étude sur les effets d'alliage sur la formation et la stabilité des amas C15 dans le fer en présence d'atomes de soluté. Plusieurs angles d'attaque ont été choisis. Tout d'abord, des simulations de dynamique moléculaire associées à la méthode ART-nouveau ont été réalisées pour explorer les mécanismes de formation des amas C15 à partir d'auto-interstitiels isolés. D'autre part, la stabilité des amas C15 en présence d'une large variété d'éléments d'alliage a été analysée à l'aide de modèles thermodynamiques, ces derniers étant fondés sur une base de données ab initio des interactions d'équilibre entre les amas C15 et les solutés. Enfin, une étroite collaboration avec T. Schuler (École de Mines Saint-Étienne) a permis de développer un nouveau code de calcul des propriétés de diffusion des amas soluté-défauts (KineCluE) basé sur la méthode du champ-moyen auto-cohérent (SCMF). À partir de ce code, nous avons étudié l'effet du champ élastique des C15 sur la diffusion des défauts et sur la ségrégation induite des atomes de solutés au voisinage des amas C15.

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 Secrétaire du Service de leur entrée sur le Centre :
Tel : 01 69 08 66 64 - Fax : 01 69 08 68 67.