

Responsable :  
Fabien BRUNEVAL  
■ 01 69 08 43 49



énergie atomique • énergies alternatives

# SEMINAIRE



## Service de Recherches de Métallurgie Physique

DEN/DANS/DMN

Salle de réunion du SRMP - Bâtiment 520 - Pièce 109

### ***Microstructures d'alliages métalliques avec élasticité à l'échelle atomique : étude par simulation Monte Carlo***

***Céline Varvenne***

***- Post-Doctorante au SRMP -***

Les alliages à vocation structurale doivent remplir un cahier des charges précis concernant leurs propriétés mécaniques (résistance à la rupture, tenue en fluage, dureté), en fonction de leur utilisation future. L'ensemble de ces propriétés est étroitement lié à l'organisation spatiale des phases constituant l'alliage, c'est-à-dire sa microstructure. Les différences de taille entre éléments d'alliage jouent un rôle prépondérant à la fois sur la thermodynamique de l'alliage, sur les cinétiques de formation et sur les morphologies de microstructures. Une étude de cet effet à l'échelle atomique est pertinente dans la mesure où elle permet de reproduire des interfaces réalistes, d'observer les tous premiers instants d'une séquence de précipitation et fait un lien direct avec les potentiels inter atomiques.

Dans ce travail, un formalisme approché est utilisé pour traiter les déplacements atomiques. Il s'agit du formalisme des fonctions de Green sur réseau (Lattice Statics), qui permet d'obtenir de façon analytique les déplacements d'origine élastique au second ordre. La description énergétique de l'alliage se ramène simplement à un Hamiltonien d'Ising sur réseau, mettant en jeu des interactions effectives de paire à longue portée. Cette approche présente l'avantage de ramener l'échelle des temps caractéristiques à celle de la diffusion des atomes, ce qui autorise la simulation de microstructures avec prise en compte de l'élasticité.

Après une présentation du formalisme des fonctions de Green sur réseau, une étude des interactions effectives de paire en fonction de l'effet de taille atomique est effectuée. Une comparaison avec un modèle d'élasticité continue homogène est ensuite réalisée, soulignant le caractère partiellement inhomogène du Lattice Statics. Pour terminer, des simulations de microstructures de séparation de phases par méthode Monte Carlo permettent de quantifier les conséquences de l'effet de taille atomique : organisation spatiale, cinétique de croissance et distribution en taille des précipités. Quelques détails d'algorithmique, propres aux calculs avec interactions à longue portée, sont également abordés.

**Judi 13 octobre 2011 à 10h30**

***N.B :*** ***Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avvertir impérativement 3 semaines à l'avance – les visiteurs 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  
Centre de Saclay - Bât 520 - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex - France  
Service de Recherches de Métallurgie Physique  
Séminaires - Martine Logé : Tél. : 01 69 08 51 67 – Fax. : 01 69 08 68 67



Etablissement public à caractère industriel et commercial  
R.C.S. PARIS B 775 685 019

