



SOUTENANCE DE THÈSE



Lundi 17 décembre 2018, à 14h00

Salle Contensou, 29 Avenue de la Division Leclerc 92320 Châtillon

Application d'une dynamique de Langevin sur-amortie pour l'étude des évolutions microstructurales dans les matériaux cristallins

présentée par:

Carolina BARUFFI

Directeur de thèse: Alphonse Finel

Co-directrice de thèse: Brigitte Bacroix, Encadrant: Oguz Umut Salman

Devant le jury composé de:

Emmanuel Clouet	SRMP (CEA)	Rapporteur
Frédéric Momprou	CEMES (CNRS, Université Paul Sabatier)	Rapporteur
Maurine Montagnat	IGE (CNRS, UGA)	Examineur
Philippe Vermaut	IRCP (CNRS, ChimieParisTech)	Examineur
Marc Fivel	SIMaP (CNRS, INP Grenoble)	Examineur
Alphonse Finel	LEM (CNRS, Onera)	Examineur
Brigitte Bacroix	LSPM (CNRS, Université Paris 13)	Examineur
Oguz Umut Salman	LSPM (CNRS, Université Paris 13)	Examineur

Résumé:

Les propriétés macroscopiques des métaux et des alliages métalliques dépendent fortement de leur microstructure. La modélisation numérique est un instrument très puissant pour la compréhension de son évolution dans des conditions thermomécaniques données. Le besoin de comprendre les processus à l'échelle microscopique qui sont à la base des phénomènes tels que la plasticité cristalline, la recristallisation et les transformations de phase a conduit à un intérêt croissant pour les techniques de modélisation atomistique telle que la Dynamique Moléculaire. Cette approche permet de prendre en compte la nature discrète de la matière et donc d'incorporer automatiquement tous les processus à l'échelle atomique. Cependant, elle présente des fortes limitations en termes des échelles de temps et d'espace accessibles. En particulier, la présence de vibrations à haute fréquence (phonons) nécessite l'utilisation de pas d'intégration de l'ordre de la femtoseconde, ce qui limite l'échelle de temps observée à quelques nanosecondes.

La présente thèse aborde la problématique liée à la limite d'échelle temporelle. Pour circonvenir la problématique des phonons, nous proposons l'utilisation d'une dynamique de Langevin sur-amortie. Avec cette dynamique, les vibrations ne sont pas explicitement représentées en raison de la nature du premier ordre en temps des équations. Leur effet sur l'évolution du système est intégré dans le bruit stochastique. En particulier l'objectif principal de cette thèse a été d'étudier les potentialités de cette méthode en l'appliquant à deux phénomènes qui régissent l'évolution de la microstructure dans les métaux: la migration des joints de grains et les transformations de phase.

Mots clés: simulations atomistiques, dynamique de Langevin, joints de grain, transformations de phase