

DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **05 décembre 2024**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Monsieur Bassem SBOUI**

Titre de la thèse : Modélisation atomistique et élastique des distorsions de la maille et du durcissement par solution solute dans les alliages aléatoires concentrés

Résumé



L'utilisation des matériaux métalliques dans de nombreux secteurs industriels, tels que le transport, l'énergie et la construction, exige le développement d'alliages aux propriétés mécaniques améliorées. Parmi ces propriétés, la contrainte d'écoulement est fondamentale car elle contrôle la limite élastique du matériau. La solution solide est un mécanisme bien connu qui est souvent exploité pour augmenter la contrainte d'écoulement des alliages modernes (e.g les aciers austénitiques) : des atomes de soluté distribués de manière aléatoire forment des obstacles au mouvement des dislocations qui déclenche la déformation plastique. Ce durcissement par solution solide a joué un rôle clé dans le développement récent des alliages à haute entropie (HEAs). Les HEAs, qui sont composés de plusieurs éléments en proportions presque égales, présentent des performances mécaniques exceptionnelles. Dans ces alliages, la distribution aléatoire des différents éléments sur le réseau atomique entraîne également des déplacements significatifs des atomes par rapport à leurs sites du réseau, appelés distorsions de la maille. Bien qu'une corrélation entre l'amplitude des distorsions de la maille et l'ampleur du durcissement par solution solide ait été établie, le lien entre ces quantités et leur dépendance à la composition de l'alliage reste flou. Cette thèse étudie les distorsions de la maille et le durcissement par solution solide dans des alliages concentrés aléatoires, en particulier ceux ayant une structure cubique centrée (BCC), en utilisant une combinaison de simulations atomistiques, de modélisation élastique et d'analyse statistique. Le manuscrit commence par une revue des développements récents dans l'étude des HEAs, en se concentrant sur les effets de base et les mécanismes de dislocation. Les études clés sur la modélisation élastique des distorsions de la maille et la plasticité médiée par dislocation sont

particulièrement examinées. La première partie de la recherche explore les distorsions de la maille dans les HEAs, qui sont quantifiées par le déplacement atomique carré moyen (MSAD). Ce travail de thèse propose un nouveau modèle analytique pour prédire le MSAD dans des alliages complexes, allant au-delà du simple effet de taille traité précédemment et prenant en compte la variation statistique de l'environnement chimique entourant chaque atome. Les prédictions du modèle sont en bon accord avec les résultats obtenus à partir de simulations atomistiques si la différence des constantes élastiques entre les différentes espèces reste raisonnable. En utilisant un potentiel interatomique pour un système modèle, nous démontrons comment le contraste des constantes élastiques influence l'amplitude du MSAD en synergie avec l'effet de taille. La deuxième partie de la thèse examine l'influence de l'effet de taille et de le contraste des constantes élastiques sur le glissement des dislocations coins et vis à travers des simulations atomistiques, mettant en lumière la façon dont ces dislocations interagissent avec les environnements atomiques complexes des HEAs. Les dislocations coins présentent un durcissement significatif dans les HEAs, influencé à la fois par les écarts de taille et les différences de constantes élastiques. Un modèle élastique est proposé pour estimer la contrainte critique de cisaillement résolu (CRSS), clarifiant les modèles classiques de durcissement par solution solide de la littérature. En revanche, l'impact des effets de taille et des constantes élastiques sur le glissement des dislocations vis est moins clair, car ils influencent de manière complexe les mécanismes de nucléation de paires de crans et de migration de crans. La combinaison de modèles atomistiques et théoriques utilisée dans ce travail permet de relier les distorsions du réseau microscopiques et le durcissement par solution solide, clarifiant ainsi le lien entre ces quantités et la manière dont elles dépendent des constituants et de la composition de l'alliage.

Mots-clés : Alliage à haute entropie, Simulation atomistique, Modélisation, Alliages aléatoires concentrés, Distorsions de la maille