



## DIPLÔME NATIONAL DE DOCTORAT

(Arrêté du 25 mai 2016)

Date de la soutenance : **18 juillet 2017**

Nom de famille et prénom de l'auteur : **Olivier MACKAIN**

Titre de la thèse : « Modélisation du maclage à l'échelle atomique dans le zirconium, le titane et le magnésium. »



### RÉSUMÉ DE THÈSE :

L'objectif de la thèse est d'écrire une loi de croissance des macles en fonction de la contrainte appliquée et de la température. Pour cela, les paramètres importants régissant le maclage dans trois métaux hexagonaux (Zr, Ti, Mg) sont identifiés et quantifiés.

Dans un premier temps, nous modélisons à l'échelle atomique par le biais de deux méthodes les différents joints de macles parfaits observés expérimentalement. La première méthode est l'utilisation d'un potentiel empirique qui permet de réaliser des calculs qualitatifs avec un très grand nombre d'atomes. La seconde, plus coûteuse en temps de calcul mais plus précise est la méthode ab initio. L'étude des joints de macles parfaits permettant de valider le potentiel empirique. Un potentiel empirique ne pouvant décrire qu'un métal, nous travaillons principalement sur le zirconium et seuls les résultats obtenus en ab initio seront étendus aux deux autres métaux. Un mécanisme permettant d'expliquer l'épaississement des macles est le glissement de dislocations d'interfaces, i.e. les disconnections, le long des joints de macles parfaits. Nous nous intéressons alors à la germination des disconnections avant de nous concentrer sur leur migration.

En se concentrant en premier lieu sur la germination de dipôles de disconnections, une première étude en potentiel empiriques permet de valider un couplage original avec la théorie élastique afin d'extraire des simulations atomiques l'énergie de cœur des disconnections. Cette méthode permet de partitionner l'énergie entre une contribution de cœur, intrinsèque à la disconnection et une partie élastique qui dépend de l'environnement de la disconnection. Cette partition faite, nous modélisons alors l'énergie de formation de chaque dipôle de disconnection pertinent pour chacun des différents joints de macles. Cette modélisation nous permet alors

de sélectionner les dipôles de disconnections les plus pertinents que nous étudions par la méthode ab initio. L'étude ab initio est quant à elle étendue aux deux autres métaux étudiés.

Nous modélisons ensuite la migration des disconnections le long des joints de macles parfaits. Pour cela, nous montrons via l'utilisation de la méthode Nudge Elastic Band, que l'énergie de migration est d'un ordre de grandeur inférieur à l'énergie de formation. Ainsi, l'énergie de formation des dipôles de disconnections apparaît comme prédominant dans la croissance des macles. Cette prédiction basée uniquement sur des facteurs énergétiques simples est confirmée par une étude bibliographique d'observations expérimentales.

La dernière partie de ce travail a été d'écrire des lois de croissance des macles en fonction de la contrainte extérieure et de la température. Pour cela, un modèle de germination classique est utilisé et alimenté des paramètres déterminés dans les premières parties de ce travail. Les résultats de ce modèle sont ensuite comparés à la littérature expérimentale.