

Une approche couplée thermodynamique et élastique des fluctuations de déplacements atomiques dans les solutions solides

Maylise Nastar^{1*}

¹*SRMP*

**maylise.nastar@cea.fr*

Résumé pour oral

La modélisation des fluctuations d'équilibre de la composition et des déplacements atomiques est cruciale pour une compréhension approfondie des propriétés élastiques, mécaniques et cinétiques des solutions solides. Nous présentons un modèle couplé thermodynamique-élastique qui prédit ces fluctuations à partir des propriétés structurales et thermodynamiques de l'alliage. Notre approche débute par un modèle thermodynamique des fluctuations de composition qui prend en compte les effets d'ordre à courte distance, à partir duquel nous dérivons les fluctuations du champ de déformation élastique minimisant l'enthalpie libre de Gibbs.

Cette approche permet d'obtenir des expressions analytiques simples pour les propriétés statistiques du champ de déplacement atomique, notamment les composantes de cisaillement et les corrélations spatiales. Les paramètres du modèle sont des variables thermodynamiques bien définies, telles que l'enthalpie libre, les paramètres de maille et les constantes élastiques, et intègrent naturellement les effets de la composition et de la température.

Nous introduisons une modélisation des effets de taille finie sur les fluctuations de composition afin de valider notre modèle par rapport à des simulations de dynamique moléculaire publiées précédemment. Notre travail souligne l'impact significatif des effets non linéaires — provenant des écarts à la loi de Vegard et des hétérogénéités des constantes élastiques — que les modèles élastiques conventionnels de distorsion de réseau, basés sur le formalisme de l'inclusion d'Eshelby, parviennent difficilement à capturer.