

# **Modélisation des changements de phase martensitiques par une méthode multiéchelle**

Christophe DENOUAL

CEA, DAM, DIF  
Département de Physique Théorique et Appliquée

Les changements de phase martensitiques jouent un rôle crucial dans le comportement de certains matériaux métalliques, essentiellement en raison des déformations importantes mises en jeu et de leur couplage avec les sollicitations macroscopiques. Les microstructures obtenues lors de ces changements de phase sont généralement très complexes, avec notamment des empilements très structurés de lamelles de martensite. Cette structuration émerge de la compétition entre une énergie cristalline (dont les minima correspondent aux différentes phases stables) et une énergie élastique. La définition rigoureuse de ces deux énergies est la principale difficulté rencontrée pour une modélisation prédictive des changements de phase.

La modélisation présentée lors de cet exposé lève les principales limitations des méthodes actuellement disponibles, notamment en permettant d'utiliser des grandes déformations, mais également en autorisant la propagation d'ondes acoustiques et l'anisotropie élastique. La mesure par dynamique moléculaire des principales données d'entrée du modèle lui confère par ailleurs un caractère multiéchelle et permet des comparaisons directes DM/Champ de phase aux plus petites échelles.