

**Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques de l'Ingénieur**

N° d'ordre 40/2020

**THESE DE DOCTORAT**

Présentée par

**Mlle : HANAE CHABBA**

Discipline : Physique

Spécialité : Physique des matériaux et nanostructures

**Sujet de la thèse :** Simulation de l'évolution microstructurale des alliages d'Aluminium Al-Mg-Si par la méthode de la dynamique moléculaire.

**Formation Doctorale :** Sciences de l'ingénieur Sciences Physiques, Mathématiques et Informatique.

Thèse présentée et soutenue le 03/10/2020 à 10h au centre de conférences devant le jury composé de :

Nom Prénom	Titre	Etablissement	
AMEGOUZ Driss	PES	Ecole Supérieure de Technologie- Fès	Président
BOULGHALLAT Mustapha	PES	Faculté des Sciences et Techniques- Beni Mellal	Rapporteur
JOUAITI Ahmed	PES	Faculté des Sciences et Techniques- Beni Mellal	Rapporteur
SKALI Mohammed	PES	Faculté des Sciences et Techniques- Fès	Rapporteur
BOUTAHARI Saïd	PES	Ecole Supérieure de Technologie- Fès	Examineur
DAFIR Driss	PES	Ecole Supérieure de Technologie- Fès	Directeur de thèse

Laboratoire d'accueil : Laboratoire de Production Energétique et Développement Durable (LPEDD).

Etablissement : Ecole Supérieure de Technologies de Fès.

**Centre d'Etudes Doctorales : Sciences et Techniques de l'Ingénieur**

**Titre de la thèse** : Simulation de l'évolution microstructurale des alliages d'Aluminium par la méthode de la dynamique moléculaire.

**Nom du candidat** : HANAE CHABBA

**Spécialité** : Physique des matériaux et nanostructures.

**Résumé de la thèse**

Les travaux de cette thèse s'inscrivent dans le cadre de la simulation par dynamique moléculaire des alliages d'Aluminium et plus précisément, le travail porte sur la modélisation du comportement mécanique des alliages d'Al sous différentes déformation mécanique, l'effet du Magnésium (Mg) et Silicium (Si) sur la microstructure, les transformations de phases et les propriétés mécaniques des alliages binaires Al-Mg et ternaires Al-Mg-Si qui font partie à la série 5xxx et 6xxx, qui ont le Mg et le Si comme principaux éléments d'addition, sous des déformations plastique. Afin de pouvoir relier la composition et l'évolution structurale aux propriétés mécaniques des alliages d'Al.

La thèse se compose de six chapitres, les trois premiers chapitres portent sur étude bibliographique. Le premier chapitre est consacré à une généralité sur les alliages d'Al. Le deuxième chapitre est une introduction aux concepts de la simulation atomistique et de la dynamique moléculaire ; les techniques que nous avons utilisées pour caractériser les propriétés structurales, dynamiques et physiques des alliages étudiés sont présentées au troisième chapitre.

Les trois derniers chapitres regroupent les chapitres 4, 5 et 6, qui ont comme but de présenter les résultats des simulations effectuées. Plus précisément, dans le chapitre 4, nous présentons les résultats d'une simulation par dynamique moléculaire de l'Al pur, pour déterminer les propriétés mécaniques et microstructural de l'Al pur, on comparant les résultats de deux types de potentiels, pour voir le plus convenable pour prédire les propriétés des alliages d'Al pour nos prochaines simulations. Le chapitre 5 présente les modifications existantes lors de l'addition du Mg à l'Al pur, dans le but de voir l'influence du Mg sur la cinétique de transformation de phase, sur les propriétés mécaniques et la microstructure des alliages étudiés lors d'une compression. Ensuite, pour mieux connaître le rôle du Mg et du Si sur les propriétés mécaniques de l'Al, la simulation de la compression des phases ternaires Al/Mg/Si, était l'objet du chapitre 6.

**Mots clés** : Alliages d'Aluminium (Al), Dynamique Moléculaire (DM), Propriétés mécanique, Evolution structural, potentiels interatomique (EAM & MEAM), logiciel LAMMPS.

**Laboratoire où la thèse a été préparée :**

Laboratoire de Production Energétique et Développement Durable (LPEDD).

Ecole Supérieure de Technologies de Fès.

Université Sidi Mohamed Ben Abdellah Fès, Maroc.