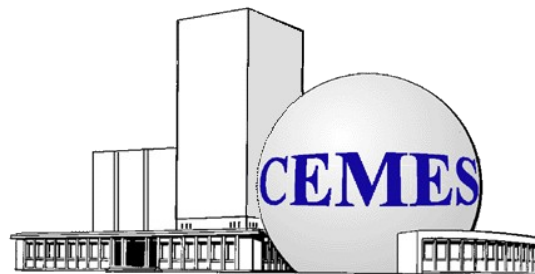


Mécanismes élémentaires de la mobilité des joints de grains sous contrainte de cisaillement

Armin Rajabzadeh^{1,2}, Frédéric Momprou¹,
Marc Legros¹, Nicolas Combe^{1,2}

¹ CEMES, CNRS UPR 8011,
29 rue J. Marvig BP 94347, 31055 Toulouse Cedex 4, France

² Université Paul Sabatier ; UPS 31055 Toulouse France



CEMES- UPR CNRS - Toulouse

3 groupes

Nano-matériaux (30 permanents)

Nanoscience (17 permanents)

Matériaux cristallins sous contrainte
(21 permanents)

Modélisation matériaux

Magnétisme DFT (L. Calmels)
Éléments finis

Plasmonique (C.Girard, A.Mlayah)

Tight-binding (C.Joachim-X.Bouju)
(électronique moléculaire)

Plasticité

mécanisme élémentaire,
matériaux pour l'aéronautique

Basse dimensionalité

Contrainte, nano-objets, auto-organisation,
interactions molécules-surface



Modélisation à l'échelle atomique dans MC2

M. Benoit, N. Combe, J. Morillo, H. Tang et N. Tarrat

Plasticité

- Cœur de dislocations vis Ti (DFT) MB,JM,NT
- **Mouvement de joint de grain (DM)** NC

Basse dimensionalité

- Nano-objet :
- magnétisme Fe-Rh (DFT) - HT,JM
 - particules cœur-coquille Fe-Au (DFT) - MB
 - phonons ZnO(DM) - NC
 - interaction nano-objet/ligand (DFT/DFTB) – HT,NT
 - interaction molécule-surface (DFT) – MB,HT

Auto-organisation/auto-assemblage

- auto-assemblage molécules sur surface (DFT) - HT
- diffusion atomique sur substrat vibrant (DM) - NC,JM

Autres thématiques

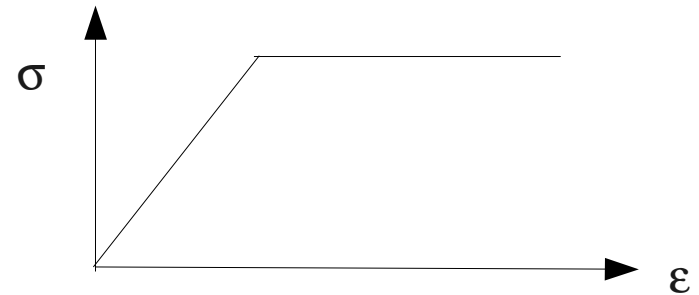
- Fractionnement isotopique – application géologie (DM ab-initio,intégrales de Chemin) – MB collab. GET (OMP)
- design d'ADN modifié (DFT/DFTB) – NT collab. LCPQ et LSPCMIB

Mécanisme élémentaire de la mobilité des joints de grain sous contrainte de cisaillement

Problématique

Dans un métal

- courbe contrainte-déformation
- régime plastique → mobilité des dislocations
influence poly-cristallinité et effet Hall-Petch.
- si grains nano-cristallins. Mobilités des joints de grain = vecteur alternatif de la plasticité

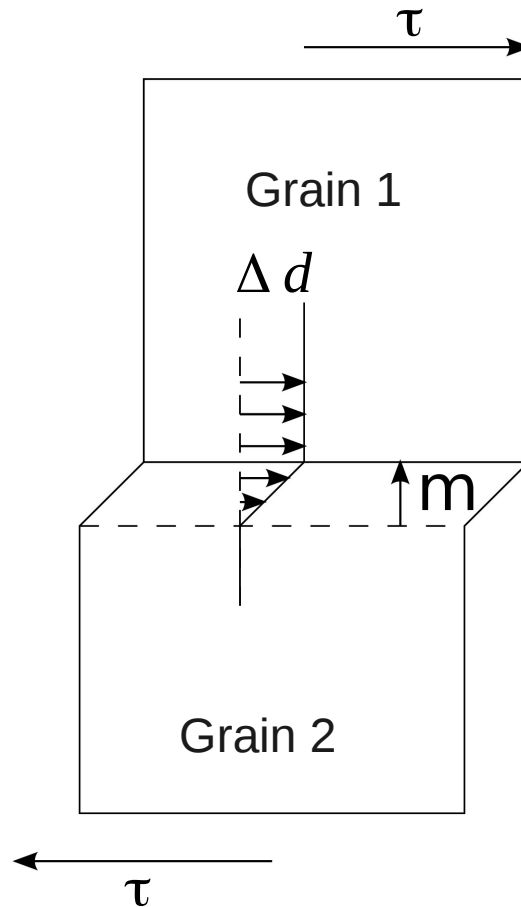


Quelles sont les mécanismes de la mobilité des joints de grain ?

Mobilité des joints de grain couplée à un cisaillement

Plusieurs mécanismes :

- couplage
- sliding
- croissance....

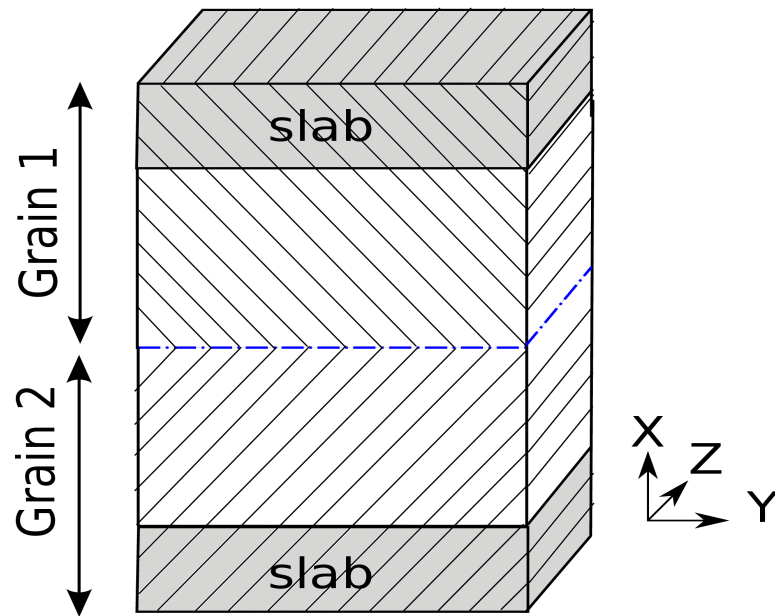


Facteur de couplage

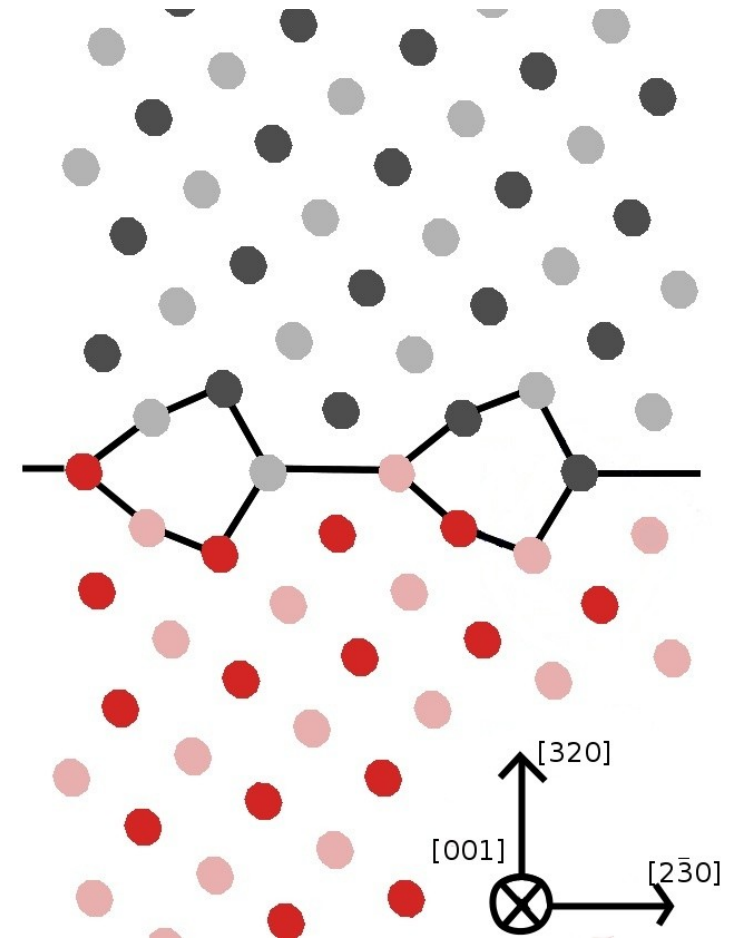
$$\beta = \frac{\Delta d}{m}$$

- Etude expérimentale(TEM in situ+ HRTEM)
- Etude théorique

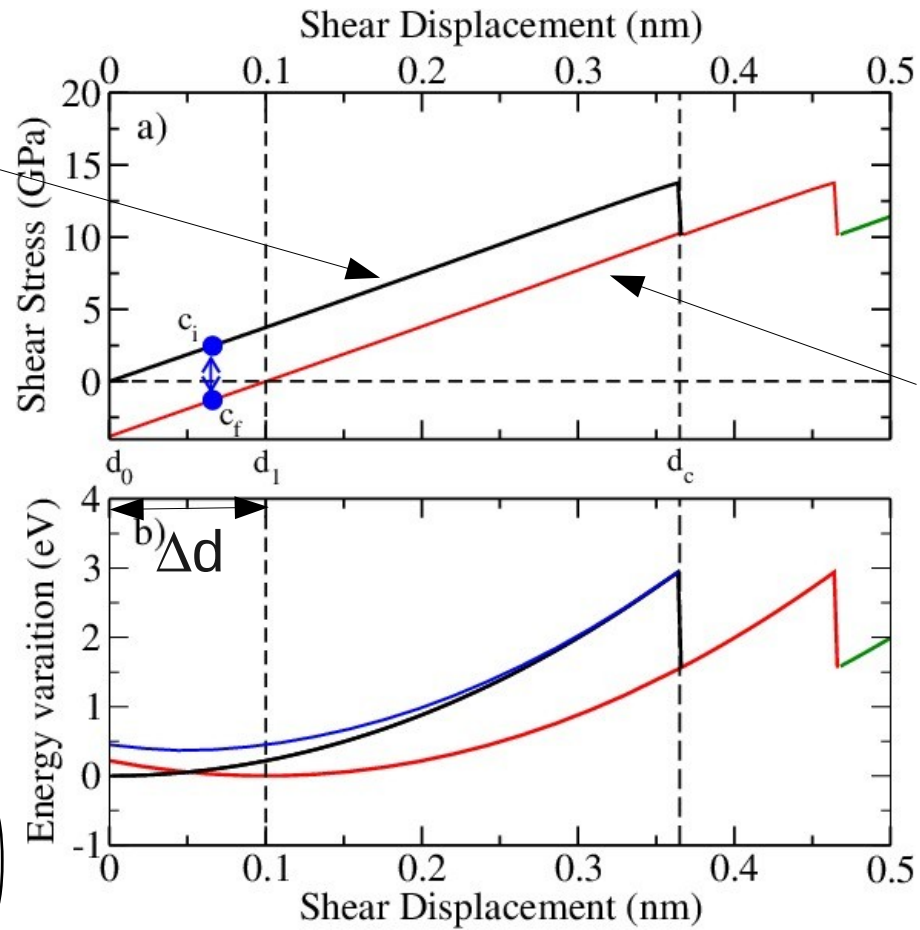
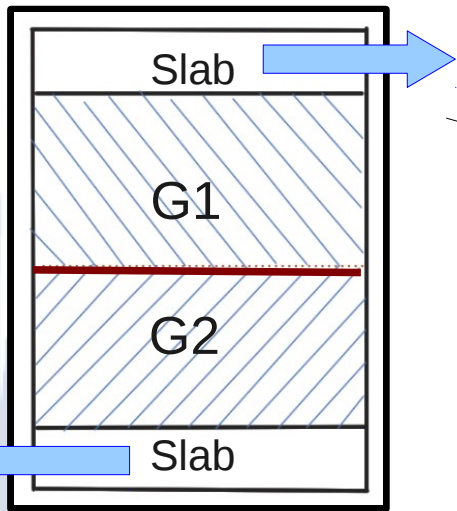
Simulation atomistique : Mobilité des joints de grain couplée à un cisaillement



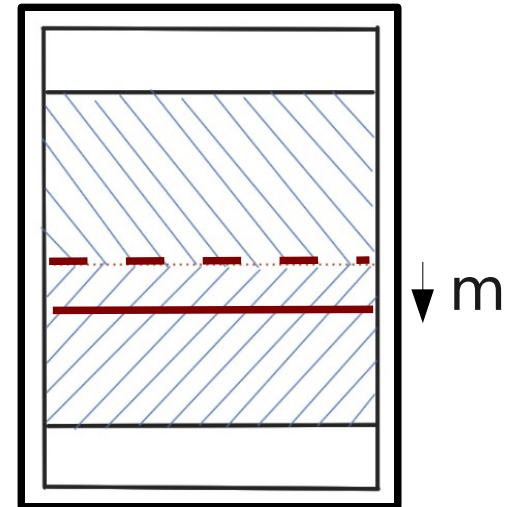
Bicristal de Cuivre
Joint de grain $\Sigma 13$ (320)
Angle de désor. : 67°
Axe de rotation : [001]
Potentiel EAM pour Cu



Stick-slip



T=0K
Minimisation par grad. conj.



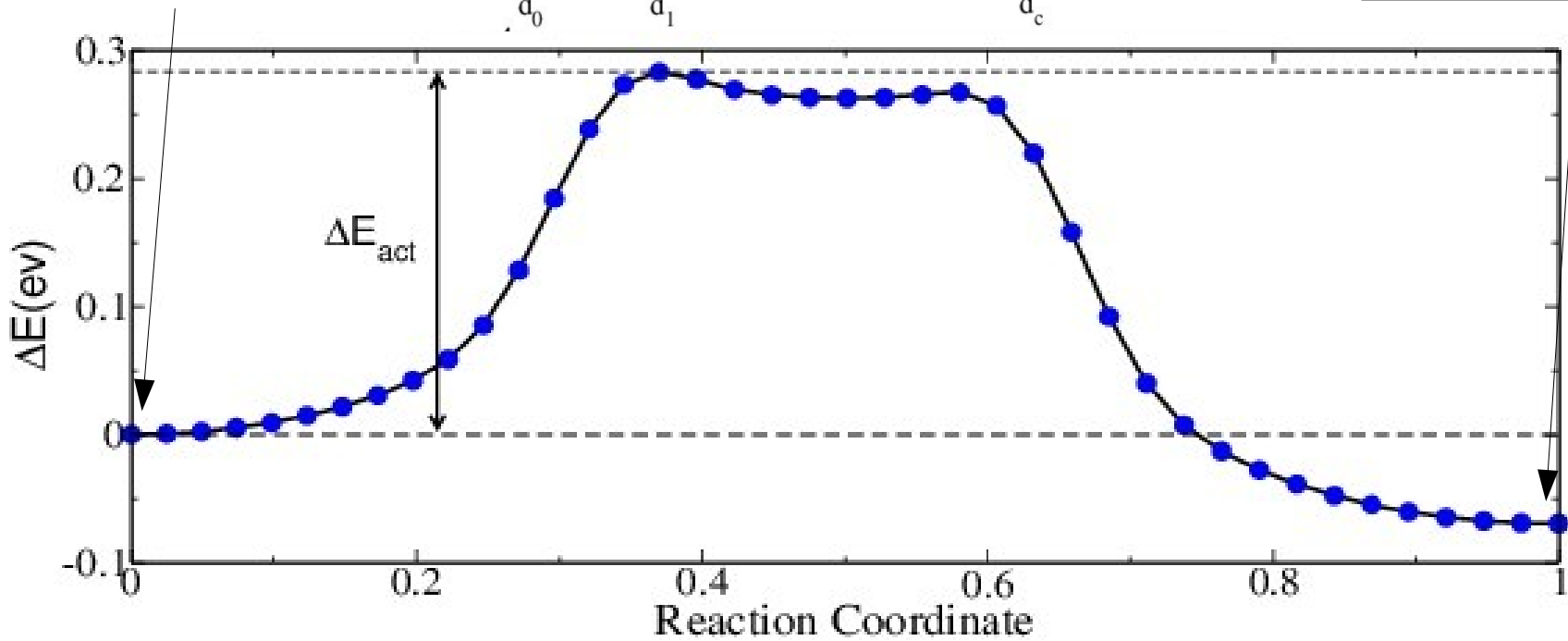
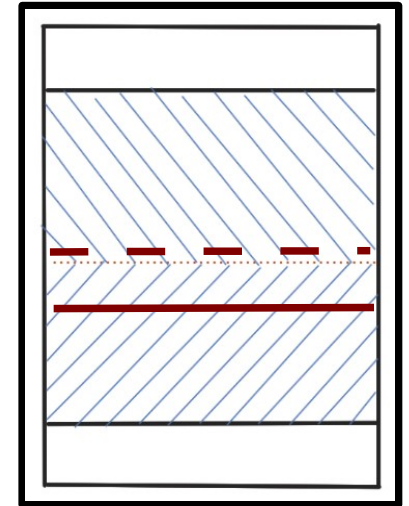
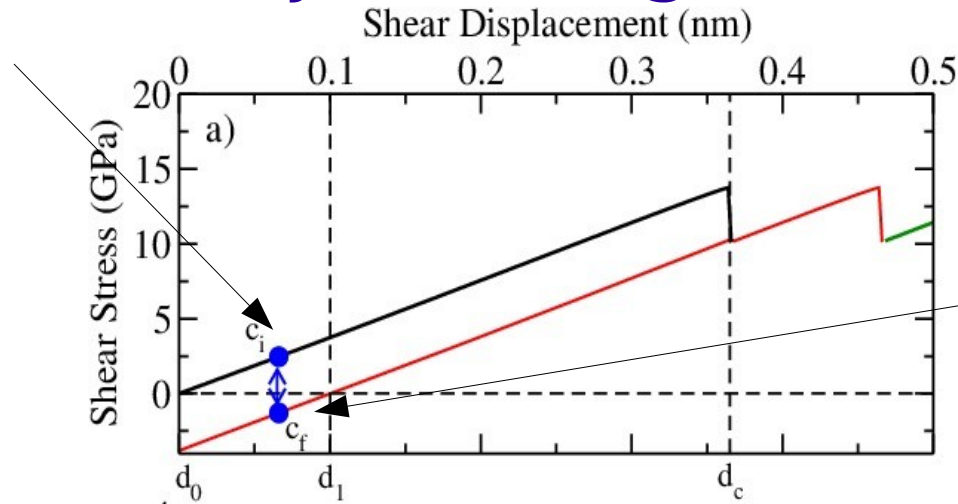
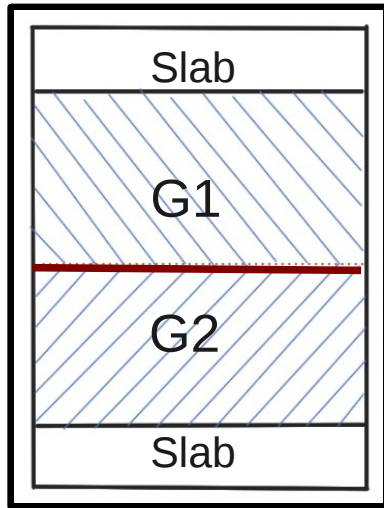
$$\beta = \frac{\Delta d}{m} = -0.4$$

$$\beta_{theo} = 2 \tan\left(\frac{\theta}{2} - \frac{\pi}{4}\right)$$

A 0K, mouvement du joint de grain pour d_c

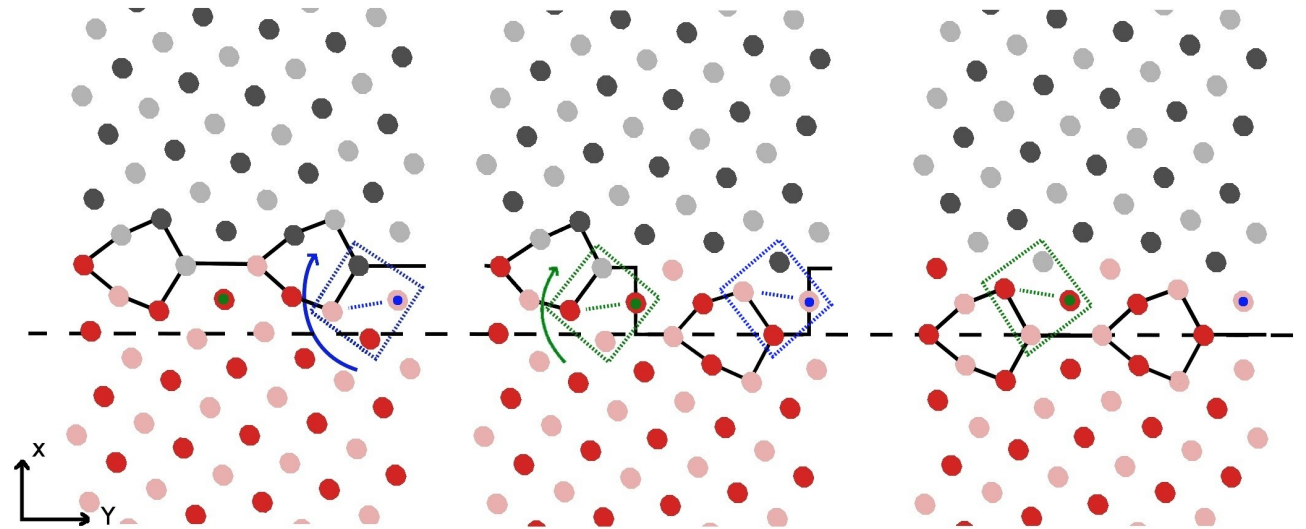
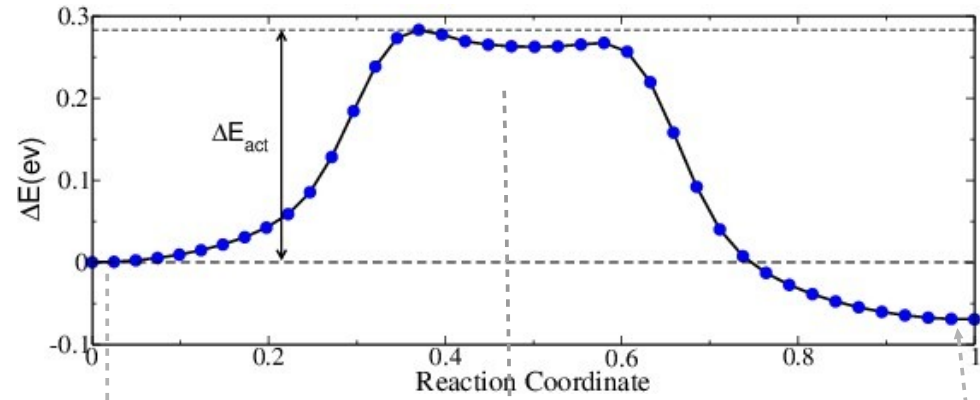
A température finie, mouvement du joint de grain pour $d < d_c$

Mécanisme de migration du joint de grain



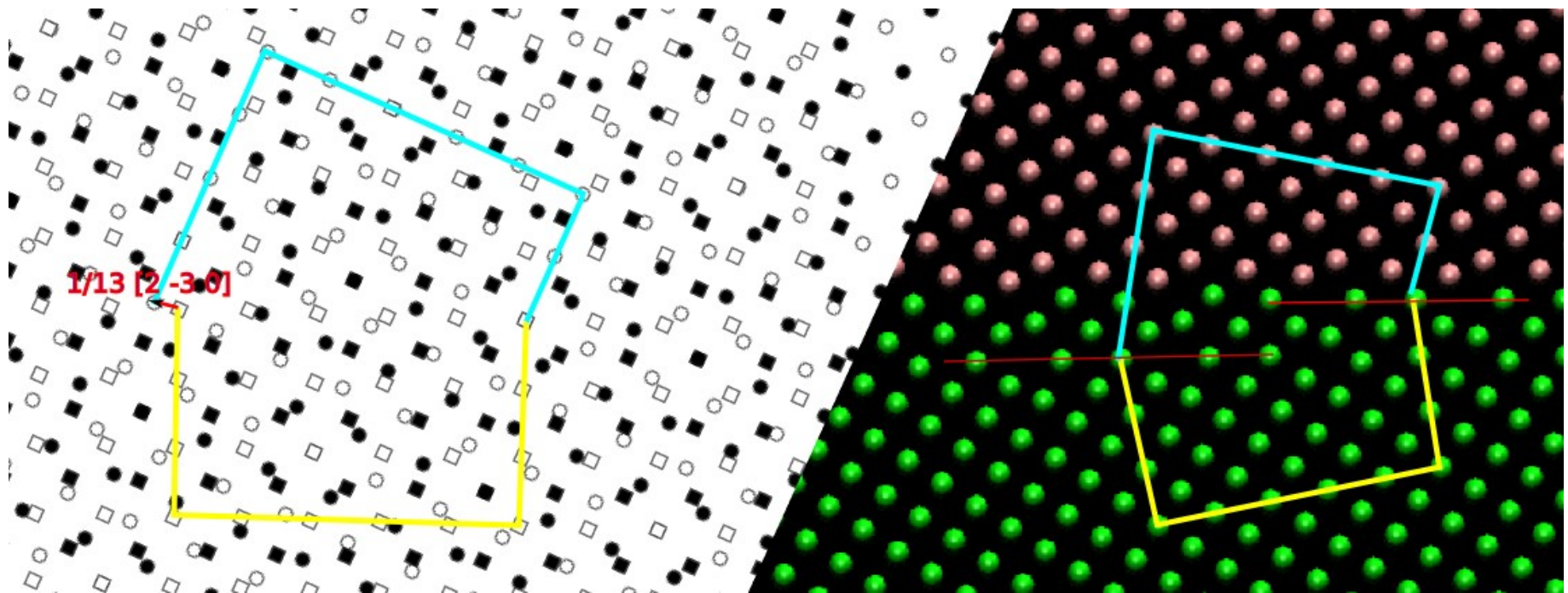
Nudge Elastic Band method

Structure du joint lors de la migration



Mouvement de joint de grain et disconnection

Circuit de Burgers sur le réseau de coïncidence

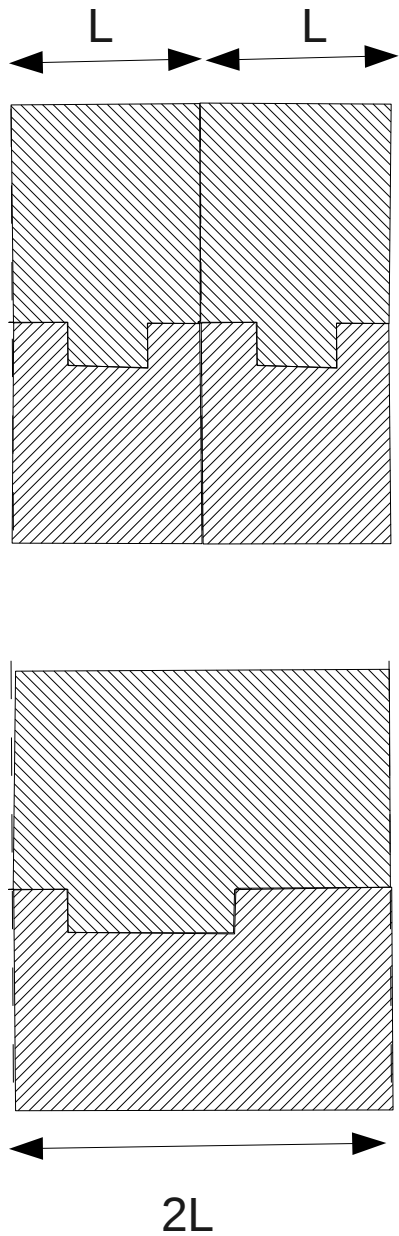


Vecteur de Burgers associé à la marche → disconnection

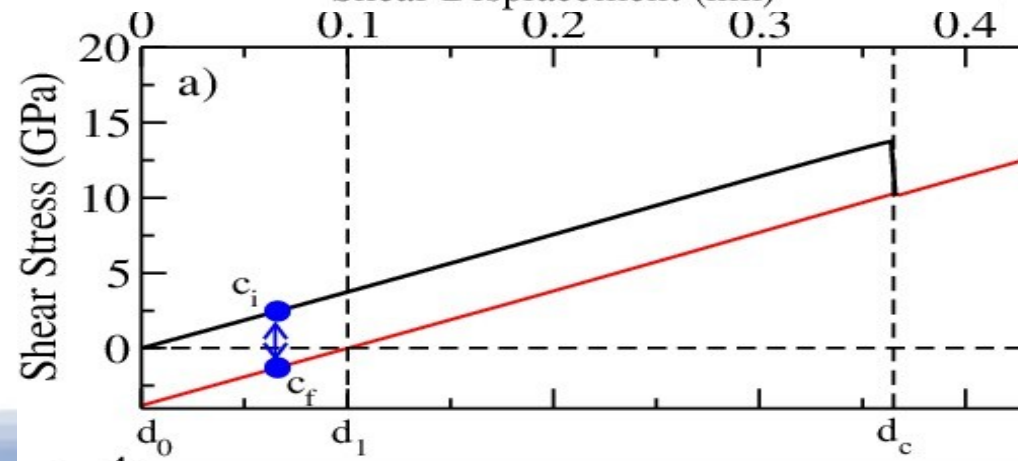
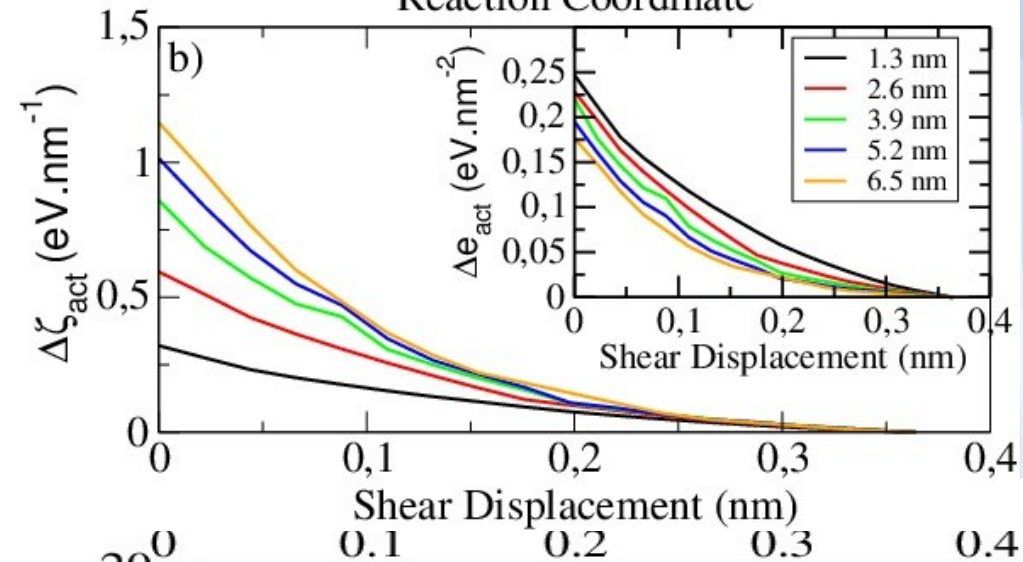
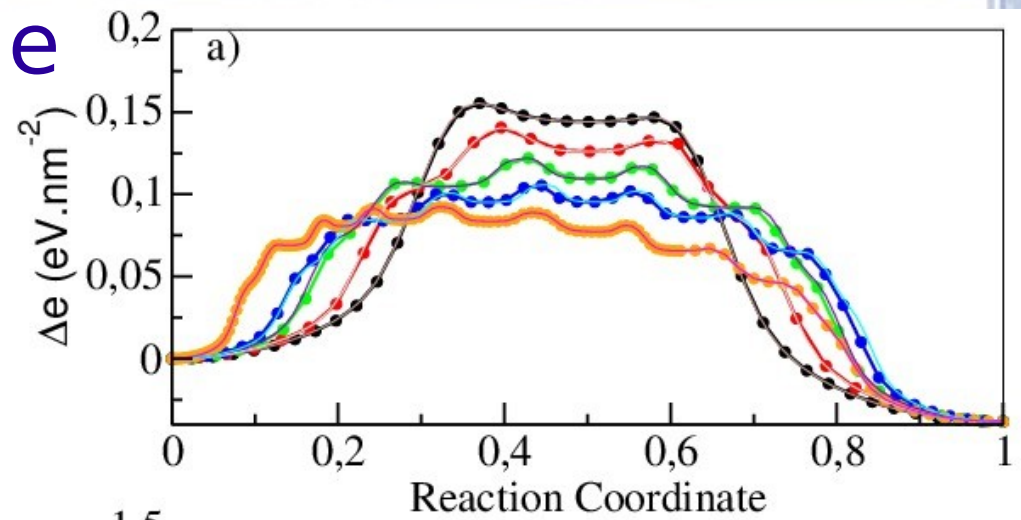
$$\beta = \frac{\Delta d}{m} = -0.4$$

Facteur de couplage
donné par la marche

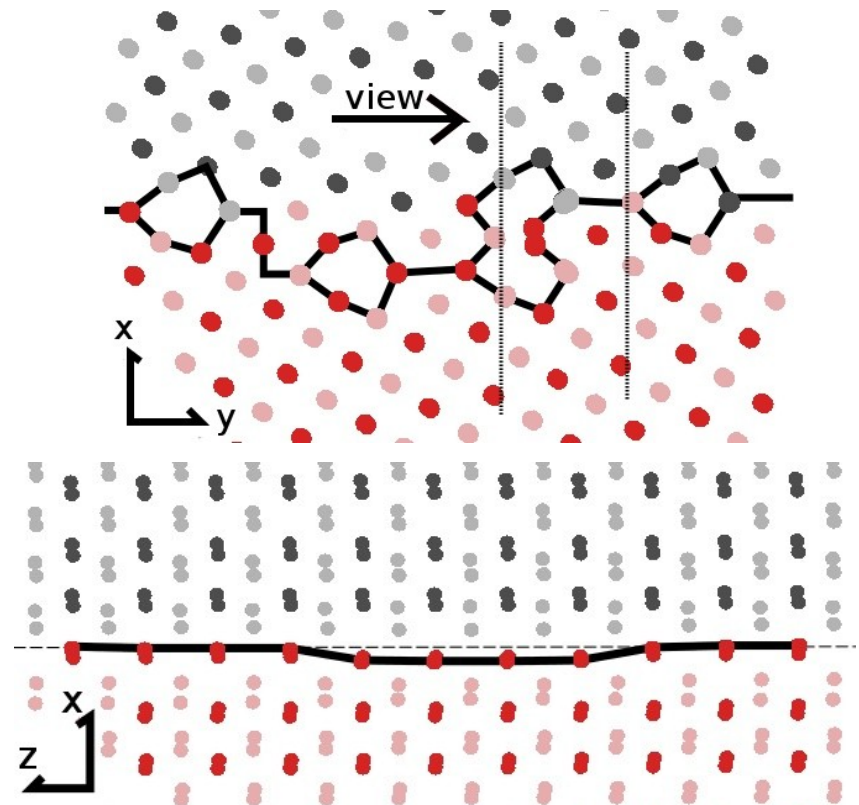
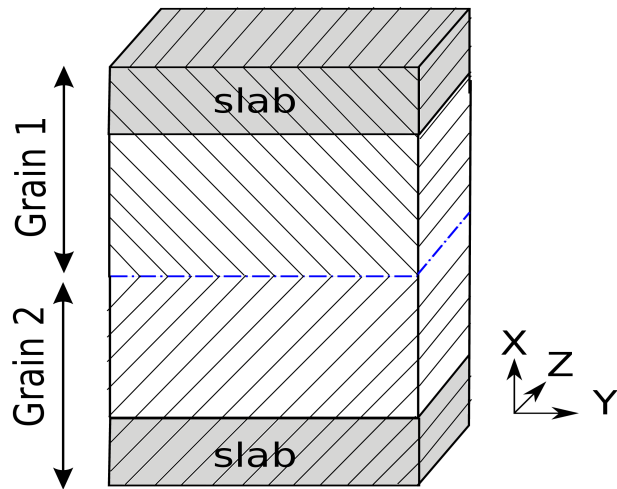
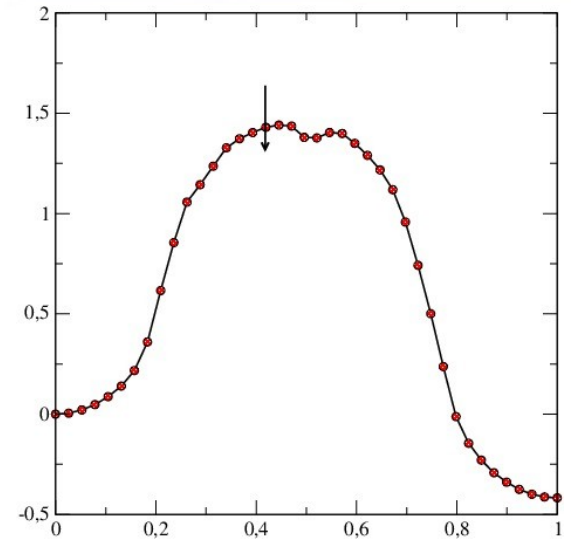
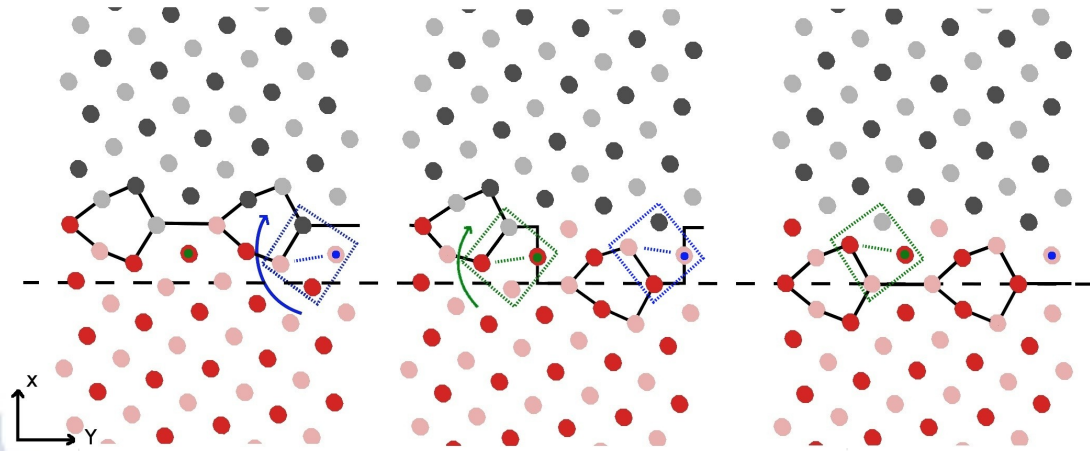
Effet de taille



Comparaison
Energie/ GBsurface



Double effet... de taille



Mais boîte trop petite pour que les marches selon z aient une signature dans le MEP

Conclusion

- migration du joint de grain par nucléation + migration de « marche »
- marche = disconnection
- la marche/disconnection contient le facteur de couplage
- un seul type de marche observé
- nucléation et la migration des marches se font elles même par création puis migration de « disconnection kink »
- bon accord qualitatif avec expérience

Perspective

- étendre à d'autres types de joint de grain
- processus activé à plus haute température : pour un même joint de grain, plusieurs types de disconnection ?