



**HAL**  
open science

# SUR L'UTILISATION DU RÉSEAU ZÉRO POUR DÉTERMINER LA STRUCTURE DES JOINTS DE GRAINS

C. Goux

► **To cite this version:**

C. Goux. SUR L'UTILISATION DU RÉSEAU ZÉRO POUR DÉTERMINER LA STRUCTURE DES JOINTS DE GRAINS. *Journal de Physique Colloques*, 1975, 36 (C4), pp.C4-111-C4-115. 10.1051/jphyscol:1975412 . jpa-00216317

**HAL Id: jpa-00216317**

**<https://hal.science/jpa-00216317>**

Submitted on 4 Feb 2008

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

## SUR L'UTILISATION DU RÉSEAU ZÉRO POUR DÉTERMINER LA STRUCTURE DES JOINTS DE GRAINS

C. GOUX

E.N.S. Mines, 42023 Saint-Etienne Cedex, France

**Résumé.** — Dans un biréseau, les axes du réseau zéro correspondant à une rotation peuvent être déterminés par une construction géométrique simple. On en déduit que la notion d'un réseau zéro ne conduit à une interprétation correcte des structures intergranulaires que dans des cas particuliers.

**Abstract.** — In a bilattice, the axes of the 0-lattice corresponding to a rotation can be determined using a simple geometrical construction. In this way it is possible to show that the 0-lattice concept leads to a correct interpretation of intergranular structures only in particular cases.

Considérant deux cristaux I et II, on appelle biréseau l'ensemble des nœuds appartenant soit au réseau du cristal I, soit à celui du cristal II. Dans le courant de ces dernières années W. Bollmann a montré que l'on peut associer à un biréseau divers types de réseaux [1, 2] et ces derniers ont été très utilisés pour interpréter les images des joints intergranulaires obtenues par microscopie électronique [2, 3, 4]. Cependant, nous avons déjà signalé certaines difficultés qui se présentent lorsqu'on opère de cette manière [5, 6]. Les notions introduites par W. Bollmann étant relativement complexes, il me paraît utile d'examiner d'abord de manière précise à quoi peut conduire la première d'entre elles c'est-à-dire celle de *réseau zéro*.

La théorie du réseau zéro est utilisée pour déterminer les positions des zones dites *de bon raccordement* présentes dans les joints intergranulaires et on en déduit la disposition de certaines dislocations. Pour apprécier dans quelle mesure cet objectif peut être atteint nous montrerons d'abord comment il est possible de trouver, aisément, tous les éléments d'un réseau zéro ; ensuite, nous considérerons quelques cas particuliers.

**1. Détermination d'un réseau zéro.** — Nous admettons que les réseaux I et II ont au moins un nœud commun. Il existe alors une infinité de transformations linéaires qui font correspondre le réseau II au réseau I. Chacune de ces transformations permet de définir un réseau zéro particulier. En fait, les seules transformations qui aient été

réellement utilisées jusqu'à maintenant sont des rotations : il est vraisemblable que l'on se trouverait en présence de problèmes très complexes si l'on ne se limitait pas ainsi [6].

Supposons alors que le réseau II se déduise du réseau I par la rotation  $(R, \theta)$  dont l'axe  $R$  est perpendiculaire en  $R$  au plan réticulaire  $P$ . On peut déterminer aisément comme suit le réseau zéro (Fig. 1) :

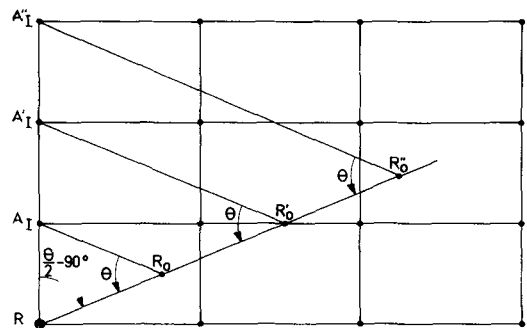


FIG. 1. — Construction du réseau zéro correspondant à une transformation par rotation.

1.1 Le point  $R$  est considéré comme un nœud du plan  $P$ . On en déduit tous les nœuds correspondant au cristal I situés dans ce plan (en particulier, dans la figure 1, les nœuds  $A_I, A'_I, A''_I$ ).

1.2 On transforme chacun des nœuds tel que  $A_I$  par la similitude qui est le produit des deux transformations suivantes :

— la rotation  $(R, \frac{\theta}{2} - 90^\circ)$ .

Elle peut être remplacée par la rotation  $(R, \frac{\theta}{2})$  si le plan P est perpendiculaire à un axe quaternaire du réseau.

— l'homothétie  $(R, \frac{1}{2 \sin \frac{\theta}{2}})$ .

On obtient des points tels que  $R_0, R'_0, R''_0...$  qui constituent un réseau semblable au réseau du plan P, le rapport de similitude étant  $\frac{1}{|2 \sin \frac{\theta}{2}|}$ .

1.3 Le réseau zéro est constitué par l'ensemble des axes perpendiculaires à P en chacun des points tels que  $R_0, R'_0, R''_0...$  qui sont en quelque sorte les nœuds du réseau zéro dans le plan P.

On déduit immédiatement de cette construction que le réseau zéro de la rotation  $(R, \theta)$  :

- est une fonction continue de  $\theta$
- est une fonction discontinue de l'axe R : en effet, si l'on a deux axes voisins  $R_1$  et  $R_2$  perpendiculaires à deux plans réticulaires  $P_1$  et  $P_2$ , les réseaux de ces derniers plans sont en général nettement distincts et le réseau de  $P_2$  ne tend pas, au sens mathématique du mot, vers celui de  $P_1$  lorsque  $R_2$  tend vers  $R_1$ .

On observe de plus que si R n'est pas perpendiculaire à un plan réticulaire, le réseau zéro se réduit au seul axe R.

2. Application au joint de macle (130) et aux joints voisins (dans le système c. f. c.). — Pour fixer les idées nous supposons que le matériau constitutif des cristaux est de structure cubique à faces centrées.

2.1 MACLE (130). — La figure 2 représente la coupe par un plan (001) du joint de macle (130). La désorientation  $\theta$  est de  $36^\circ 52'$ . Les points correspondent aux nœuds de chacun des deux réseaux. Les nœuds du réseau zéro dans le plan de figure

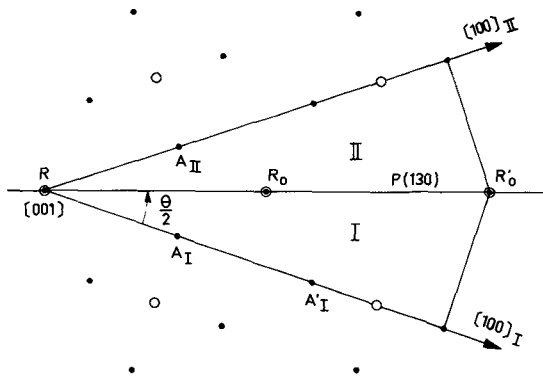


FIG. 2. — Coupe d'un plan de macle (130) par le plan (001). Les cercles indiquent les positions des nœuds du réseau zéro.

sont indiqués par de petits cercles ; on obtient ces derniers en appliquant successivement aux nœuds du réseau I :

- la rotation  $(R, \frac{\theta}{2})$ ,
- l'homothétie  $(R, \frac{1}{2 \sin \frac{\theta}{2}})$ .

$R_0$  est ainsi l'homologue de  $A_I$  et  $R'_0$  celui de  $A'_I$ .

On constate alors que tous les nœuds communs aux deux réseaux situés dans le plan de joint coïncident avec des nœuds du réseau zéro. Les axes correspondants du réseau zéro indiquent donc bien les zones de bon raccordement dans le plan de joint. Une étude plus approfondie montre que la structure du joint se compose de motifs ayant les dimensions indiquées dans la figure 3, la quantité  $a$  désignant le paramètre de la maille cubique.

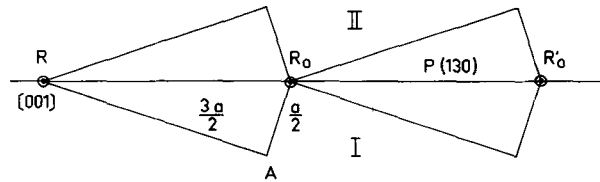


FIG. 3. — Allure schématique des motifs constituant le joint de macle (130).

2.2 JOINT DE MACLE [5, 14, 0]. — Si en partant du joint de macle (130) on augmente légèrement la désorientation tout en maintenant le plan de joint dans un plan de symétrie du biréseau, on a d'abord pensé que, dans la structure dense esquissée précédemment, s'introduisaient des dislocations d'une nature particulière. Ce point de vue qui est encore adopté par certains auteurs est sûrement erroné.

Des considérations géométriques simples [5, 7, 8] aussi bien que des déterminations précises de structures [5] montrent qu'un tel joint se compose de motifs analogues à celui de la figure 2 mais alors que dans la macle (130), il y a un seul type de motif, on en trouve deux dans un joint pour lequel la désorientation diffère de  $36^\circ 52'$ .

D'une manière plus précise, considérons le joint de macle (5, 14, 0) pour lequel la désorientation autour de [001] est de :

$$\theta = 2 \operatorname{Arctg} \frac{5}{14} = 39^\circ 18'$$

La figure 4 montre schématiquement la structure d'un tel joint qui comprend :

- 4 motifs du joint de macle (130) correspondant à  $\theta = 36^\circ 52'$ .
- 1 motif du joint de macle (120) correspondant à  $\theta = 53^\circ 08'$ .

Ce dernier motif a été hachuré dans la figure 4.

Il est clair que ces différents motifs sont légèrement déformés par rapport à ceux que l'on trouverait dans les joints de macle (130) et (120) rigoureux.

Si l'on modifie la désorientation, la proportion des motifs de type (130) et (120) varie en conséquence et l'alternance des motifs peut suivre des règles plus compliquées que pour la macle (5, 14, 0).

Or, la disposition des nœuds du réseau zéro ne justifie aucun des deux types de structures précédents. En effet, la figure 4 montre que les nœuds  $R, R_0, R'_0, \dots$  sont régulièrement espacés dans le plan de joint ce qui conduit à un type de structure équivalent à celui de la macle (130) : ceci ne laisse prévoir ni l'introduction de dislocations particulières comme on le pensait antérieurement ni l'alternance de motifs schématisée dans la figure 4.

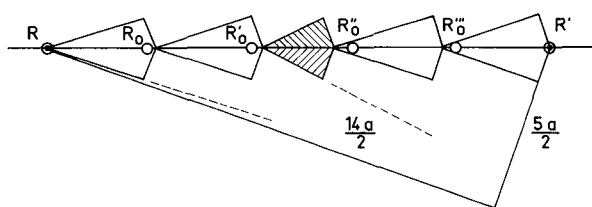


FIG. 4. — Allure schématique des motifs constituant le joint de macle (5, 14, 0).

**2.3 JOINT DÉSORIENTÉ DE 45°.** — La figure 5 montre la disposition des nœuds voisins du plan de joint lorsque la désorientation autour de [001] atteint 45°. La structure d'un tel joint comprend les mêmes motifs que dans le joint de macle (5, 14, 0).

Or, pour construire le réseau zéro, les deux rotations de + 45° et - 45° ne sont pas équivalentes. Dans la figure 5, on a repéré par des cercles et des croix les nœuds des réseaux zéro correspondant

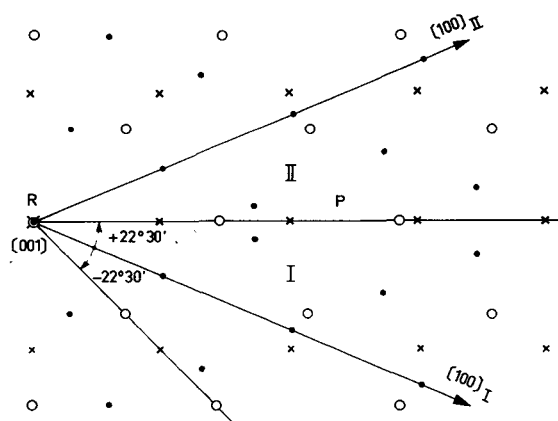


FIG. 5. — Coupe par le plan (001) du joint obtenu pour une désorientation de 45°. Les cercles et les croix indiquent les positions des nœuds de chacun des réseaux zéro correspondant respectivement à une rotation de + 45° ou - 45°.

respectivement à + 45° et - 45°. On trouve dans le plan de joint deux dispositions tout à fait différentes des deux types de nœuds : en particulier, les espacements de deux nœuds consécutifs des réseaux zéro obtenus respectivement pour + 45° et - 45° sont dans le rapport de  $\sqrt{2}$  à 1. On observe d'ailleurs que, de ces deux catégories de nœuds, ni l'une ni l'autre ne correspond clairement aux zones de bon raccordement dans le plan de joint.

**2.4 JOINT D'AXE VOISIN DE [001].** — Reprenons maintenant un joint dont la désorientation est celle de la macle (130) c'est-à-dire 36° 52' mais supposons que l'axe de rotation s'écarte très légèrement de la direction [001] : admettons, par exemple, qu'il s'agisse d'un axe  $[1/100, 0, 1]$  c'est-à-dire  $[1, 0, 100]$ . Bien que la structure d'un tel joint n'ait pas encore été déterminée d'une manière précise, il est clair qu'elle sera très voisine de celle du joint de macle (120) : sans doute trouvera-t-on en plus quelques *dislocations* d'un type spécial.

Pour voir à quoi nous conduit l'utilisation du réseau zéro, nous pouvons reprendre le schéma de la figure 2 dans lequel :

- l'axe [001] est remplacé par  $[1, 0, 100]$ ,
- la rangée [100] est remplacée par  $[100, 0, 1]$ .

Le paramètre du réseau étant  $a$ , celui de la rangée  $[100, 0, 1]$  est très voisin de 100  $a$ . Ceci veut dire que, dans le plan de joint, les nœuds du réseau zéro sont 100 fois plus espacés que dans le joint de macle (130). Le seul fait d'avoir légèrement modifié l'axe de désorientation laisse prévoir un changement de structure essentiel, le nombre des zones de bon raccordement et par conséquent celui des *dislocations* étant divisé par un facteur 100 : il n'est guère douteux que ceci ne reflète pas la réalité.

**3. Conclusion.** — Si dans le cas du joint de macle (130) rigoureux le réseau zéro indique bien la position des zones de bon raccordement dans le plan de joint des cristaux, il n'en est plus ainsi dès que l'on fait subir la moindre modification aux paramètres définissant le joint. On pourrait citer de nombreux autres exemples où la considération du réseau zéro conduit soit à des ambiguïtés soit à des structures manifestement erronées. On peut donc en conclure que pour la détermination des structures intergranulaires l'utilisation du réseau zéro n'est justifiée que dans des cas très particuliers.

Comme il a été précisé antérieurement, nous n'avons utilisé que des réseaux zéro correspondant à des transformations par rotation. Cependant, la considération de transformations linéaires plus générales augmenterait encore les ambiguïtés analogues à celles que nous avons rencontrées.

## Bibliographie

- [1] BOLLMANN, W., *Phil. Mag.* **16** (1967) 363.  
 [2] BOLLMANN, W., *Crystal defects and crystalline interfaces* (Springer Verlag, New-York) 1970.  
 [3] BOLLMANN, W., MICHAUT, B. and SAINFORT, G., *Phys. Stat. Sol. (a)* **13** (1972) 637.  
 [4] SCHÖBER, T. and BALLUFFI, R. W., *Phil. Mag.* **21** (1970) 109.  
 [5] HASSON, G., BISCONDI, M., LAGARDE, P., LEVY, J. et GOUX, C., p. 3 in *The nature and behaviour of grain boundaries*. H. Hu, éd. (Plenum Press, New-York), 1972.  
 [6] GOUX, C., *Can. Met. Quat.* **13** (1974) 9.  
 [7] BISHOP, G. H. and CHALMERS, B., *Scri. Metall.* **2** (1968) 133.  
 [8] BISHOP, G. H. and CHALMERS, B., *Phil. Mag.* **24** (1971) 515.

## DISCUSSION

R. BONNET : En ce qui concerne la discontinuité du réseau 0 avancée par le Professeur Goux lorsque la rotation  $R(\theta)$  est proche de l'axe  $\langle 001 \rangle$  (sans y être confondu), il faut noter que c'est l'équation fondamentale du Professeur Bollmann qui permet de lever cette ambiguïté :

$$(I - R^{-1}) \mathbf{X}^0 = \mathbf{b}.$$

Ici le sous-espace  $b$  n'est pas un plan réticulaire en toute rigueur. En conséquence, le réseau 0 disparaît effectivement en toute rigueur. Cependant il est possible de donner des solutions très approchées à l'équation ci-dessus en adoptant un sous-espace  $b$  constitué de petites marches séparées par une grande surface de plan (001).

En conséquence, le réseau 0 est alors pratiquement un réseau de deux ou trois types de lignes de natures différentes parallèles à l'axe  $\langle 001 \rangle$ .

C. GOUX : Le produit des deux transformations par homothétie et rotation dont j'ai parlé, peut se déduire géométriquement de la définition du réseau zéro par Bollmann mais l'équation

$$(I - A^{-1}) \mathbf{X}^0 = \mathbf{b}$$

y conduit de la même manière.

En effet, avec des axes de coordonnées convenablement choisis, si  $A$  désigne la rotation d'angle  $\theta$  autour de l'axe  $Oz$ , on peut remplacer  $A$  par l'opérateur  $(\cos \theta + i \sin \theta)$  dans le plan  $Oxy$ . On trouve alors aisément :

$$\mathbf{b} = \frac{1}{2 \sin \frac{\theta}{2}} \left[ \cos \left( \frac{\theta}{2} - 90^\circ \right) + i \sin \left( \frac{\theta}{2} - 90^\circ \right) \right] \mathbf{X}^0.$$

Dans cette formule on identifie immédiatement

— l'homothétie de rapport  $\frac{1}{2 \sin \frac{\theta}{2}}$

— la rotation d'angle  $\frac{\theta}{2} - 90^\circ$  autour de  $Oz$ .

Il est exact que si l'axe de rotation,  $R$  ou  $Oz$  suivant les notations, n'est pas perpendiculaire à un plan réticulaire, le réseau zéro se réduit uniquement à cet axe.

B. MICHAUT : Lorsque vous comparez un joint (130) et un joint [5, 14, 0] vous passez d'un joint de coïncidence de  $\Sigma = 5$  à  $\Sigma = 97$ . Or pour une si grande valeur de  $\Sigma$  l'approche géométrique du réseau 0 ne suffit pas. Bollmann a introduit le réseau 02 qui vous conduit à garder l'orientation de coïncidence (130) ( $\Sigma = 5$ ) en ajoutant un réseau de dislocations secondaires dont les vecteurs de burgers sont pris dans le réseau DSC du joint (130). On retrouve bien ainsi le résultat que vous avez présenté à la figure 4. De même, passer de l'axe [100] à l'axe [100, 0, 1] est un problème qui ne se résout pas par le réseau zéro, mais par le réseau 02, ou, comme Sainfort et moi-même l'avons proposé par l'introduction d'un *pseudo-sous-joint*, addition d'une structure simple d'axe [100] et d'un réseau de dislocations.

C. GOUX : Dans mon exposé, j'ai seulement cherché à montrer les difficultés qui se présentent lorsqu'on veut appliquer aux joints de grains les toutes premières notions introduites par Bollmann. La considération du réseau 02 permet d'éliminer certaines de ces difficultés mais elle en amène d'autres : en particulier, il n'est pas aisé de préciser quels types de joints peuvent être considérés comme *joints de coïncidence*. Cette question justifierait de plus amples développements.

D. H. WARRINGTON : I am sorry to report that I am not in agreement with Prof. Goux at this moment. I believe his approach gives misleading results for the following reasons.

a) 0-lattice points are origins where relaxation may start, the nature of the relaxation may be hinted at but the final structure may not be predicted.

b) Rotations of  $\pm \theta$  give the same 0-lattice but it is rotated in observer space.

c) The problem of deviating an axis of rotation from a direct crystal plane normal must be tackled with a 3 D 0-lattice and DSC network. The discontinuity referred to then resolves itself in the introduction of a new set of DSC Burgers vectors.

It may be advantageous, following the procedure of Warrington and Bollmann in *Philosophical Magazine*, to define all physical dislocations with strain fields as secondary dislocations and those neces-

sary to achieve a standard (CSL) orientation as primary dislocations.

In this way even low angle boundaries ( $\varepsilon = 1$ ) may be considered as secondary dislocation networks since the 0-lattice formation shows that for all rotations leading to  $\varepsilon = 1$  the DSC dislocation Burgers vectors are the crystal lattice vectors themselves.

C. GOUX: *a)* Dr. Warrington's comment is implicitly included in my paper: there is no disagreement on this point.

*b)* Figure 5 of the paper shows that for  $\theta = 45^\circ$  the 0-lattices corresponding to  $+45^\circ$  and  $-45^\circ$  respectively are actually different.

*c)* Let us simply consider the case of a symmetrical tilt boundary misoriented of  $5^\circ$  either about  $[0, 0, 1]$  or about  $[1, 0, 100]$ . The two corresponding 0-lattices lead to two completely different structures, which does certainly not reflect the reality. I do not see how it could be possible to clearly resolve such a difficulty in a satisfactory way.