



HAL
open science

Etude par simulation atomistique de l'effet des joints de grains sur la réponse élastique de polycristaux nanostructurés

P. Valat-Villain, J Durinck, P.-O Renault, F Badawi

► To cite this version:

P. Valat-Villain, J Durinck, P.-O Renault, F Badawi. Etude par simulation atomistique de l'effet des joints de grains sur la réponse élastique de polycristaux nanostructurés. Journées Surfaces Interfaces (JSI 2011), Jan 2011, Poitiers, France. hal-03704324

HAL Id: hal-03704324

<https://hal.science/hal-03704324>

Submitted on 24 Jun 2022

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.

Etude par simulation atomistique de l'effet des joints de grains sur la réponse élastique de polycristaux nanostructurés

P. Valat-Villain*, J. Durinck, P.-O. Renault, F. Badawi

*pascale.valat@univ-poitiers.fr

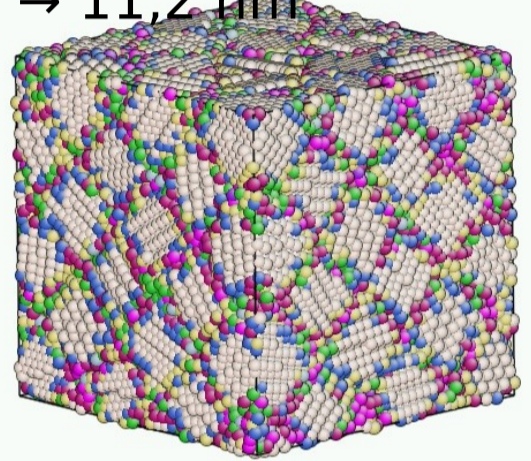
Tungstène: - structure CC, élastiquement isotrope
- déjà étudié sous forme de couches minces monocristallines

Méthodes

Construction

Construction géométrique: Voronoï

- vides entre les grains
- ✓ Plusieurs distributions de grains
- ✓ Taille moyenne des grains d_g : 2,7 → 11,2 nm



Exemple: boîte de 54 grains, 70314 atomes, $d_g = 3,0$ nm
- brute de construction
- gris pour les atomes du « massif » de coordonnée 14,
- autres couleurs pour les atomes des régions inter-cristallines de coordonnée $\neq 14$.

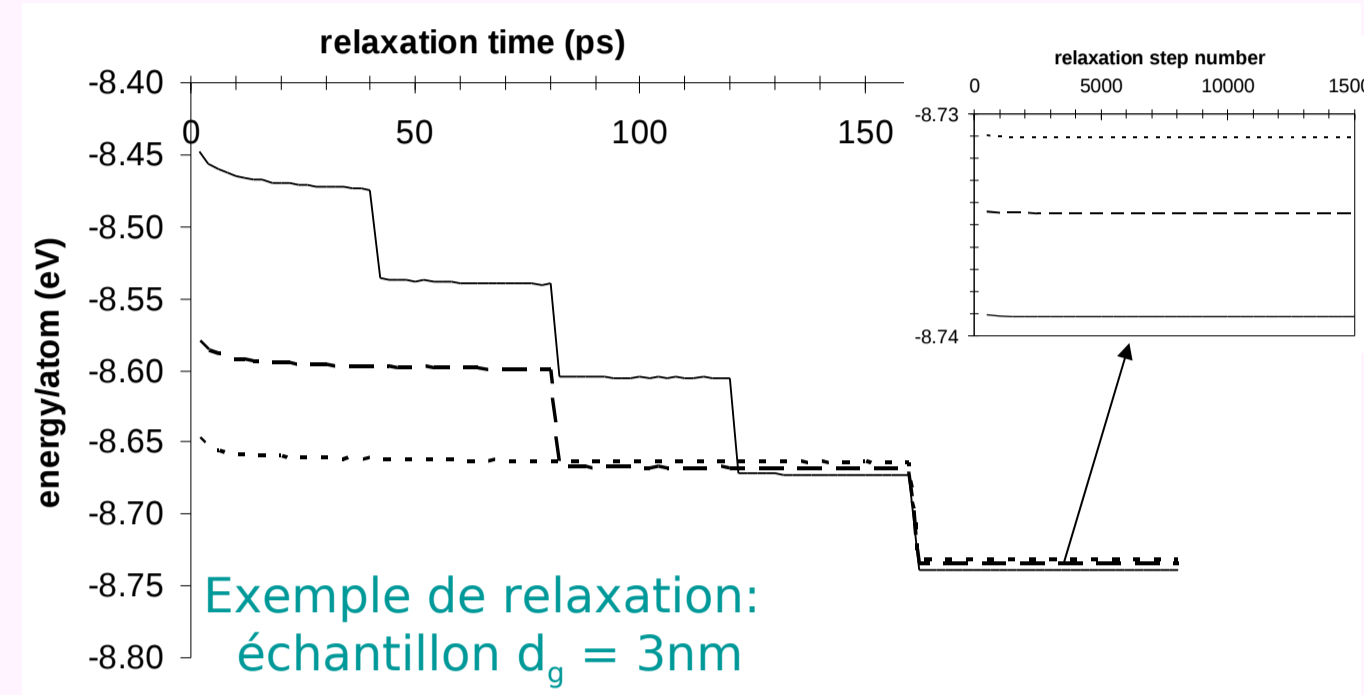
Relaxation

- ✓ **Relaxation:** les échantillons sont
- Recuits selon trois procédés pendant 160ps à T de 500 à 2000K
- Tremrés et relaxés → $F < 10^{-3}$ eV/Å
- Ajustés en volume → $\rho \geq 0,99$
- réorganisation des joints de grains

Codes: XMD et LAMMPS

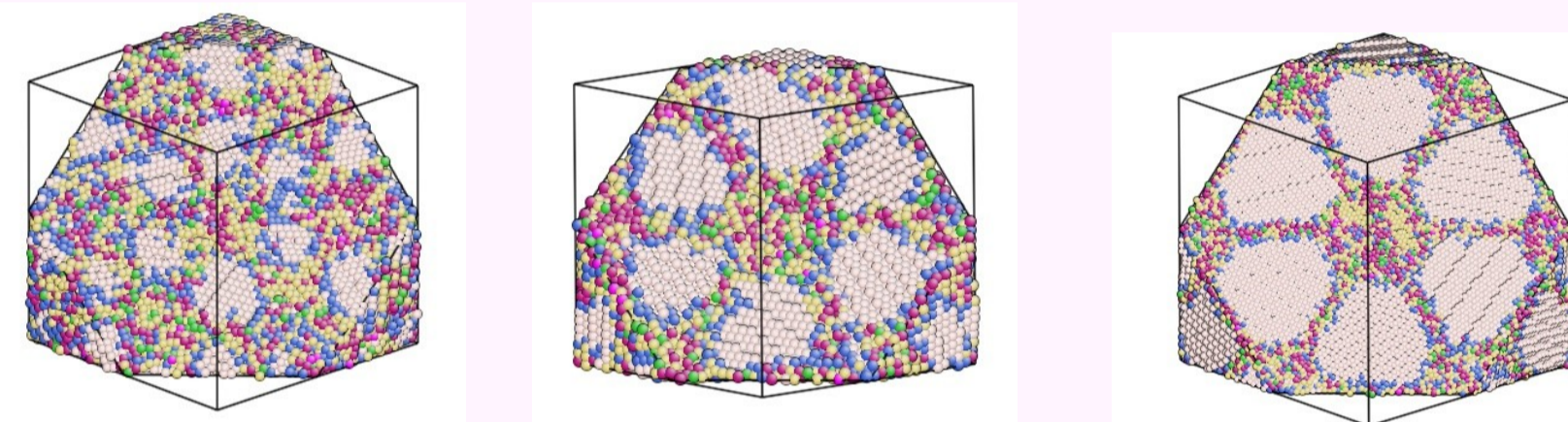
Deux potentiels: Ackland et al. (type Finnis-Sinclair)

Zhou et al. (EAM)



Exemple de relaxation: échantillon $d_g = 3$ nm

Echantillons recuits et relaxés



$d_g = 3,0$ nm

$d_g = 3,9$ nm

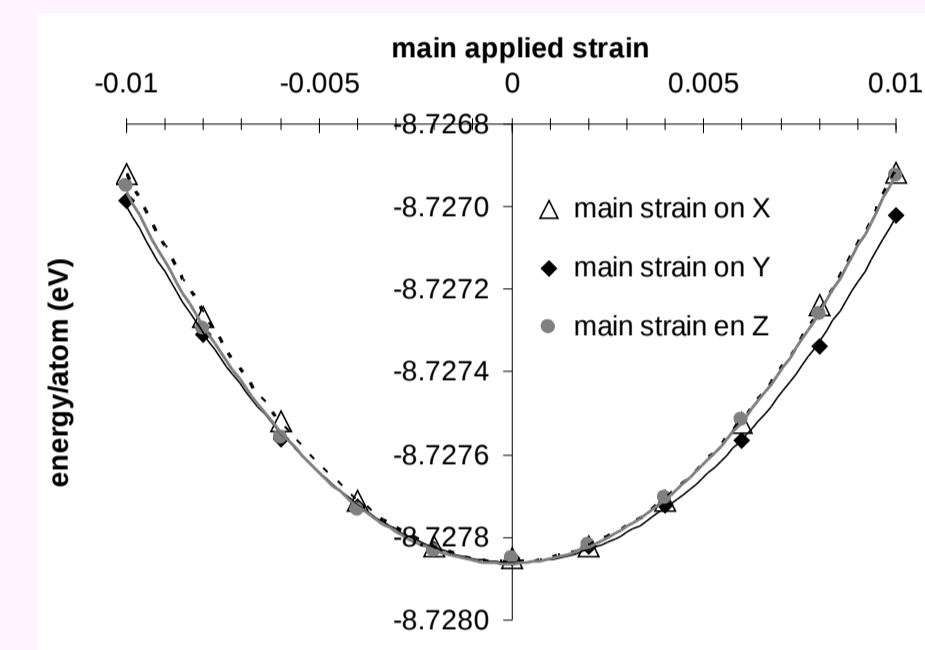
$d_g = 6,7$ nm

39081 atomes, 32 grains 48208 atomes, 16 grains 233605 atomes, 16 grains

Déformations

- ✓ **Séries de déformations** de \neq types pour calculer B , μ , E et ν à partir des courbes (énergie, déformation)

Exemple: déformation uniaxiale d'un échantillon $d_g = 3$ nm

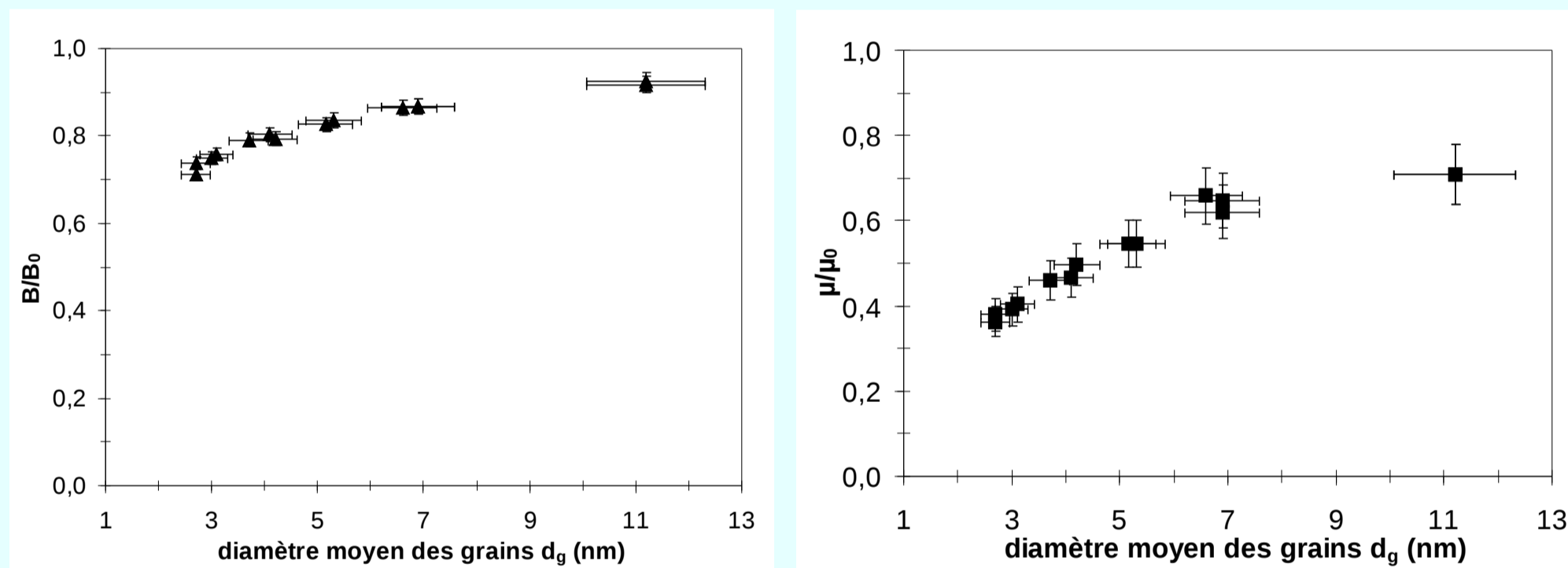


$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & -\nu\varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & -\nu\varepsilon \end{pmatrix}$$

$$E = \frac{\partial^2 U}{\partial \varepsilon^2}$$

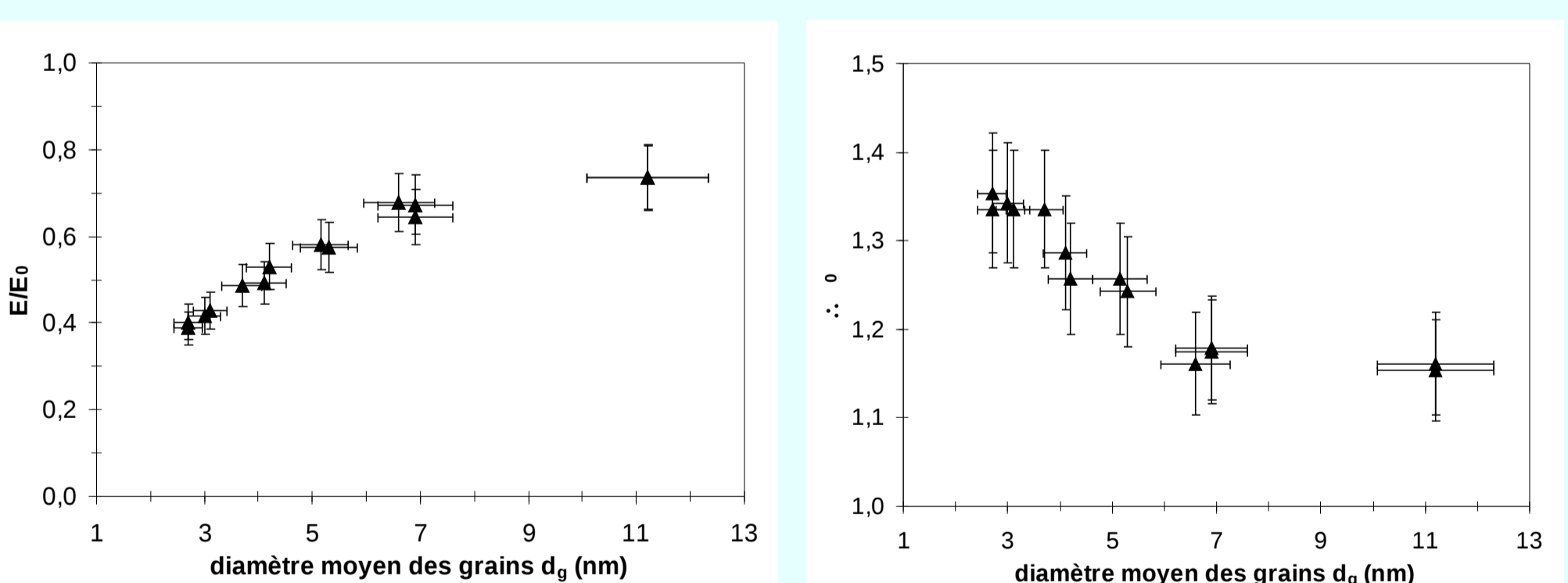
Résultats

Constantes d'élasticité avec potentiel 1 : Finnis-Sinclair



➢ Diminution de B (compressibilité isotrope) quand $d_g \searrow$

➢ Forte diminution de μ (cisaillement) quand $d_g \searrow$



➢ Forte diminution de E (module d'Young) quand $d_g \searrow$

➢ Coefficient de Poisson: $\nu \nearrow$ quand $d_g \searrow$ et $t_{js} > \nu_0$

✓ forte diminution de μ et E, diminution plus modérée de B :

cohérent avec biblio; liens avec microstructure?

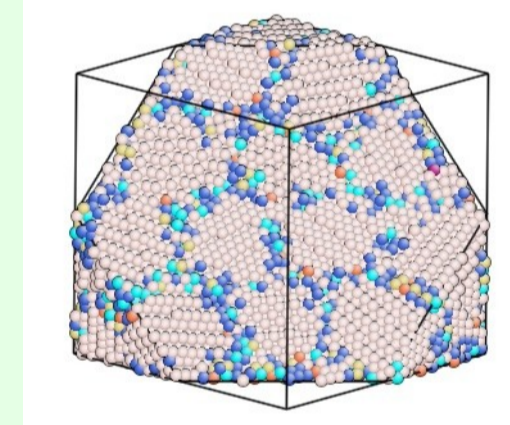
Analyse

• Modèle simple: loi de mélange $\frac{E}{E_{mono}} = a\eta + b = 1 - \left(1 - \frac{E_{IC}}{E_{mono}}\right)\eta$

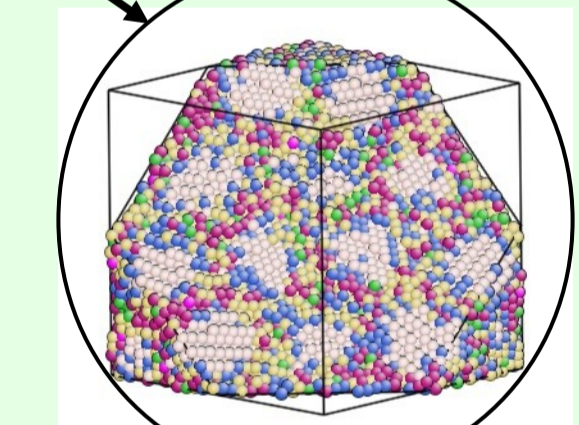
- 2 paramètres: E_{IC}/E_0 et η à déterminer
- On cherche $E_{IC}/E_0 < 1$ (JdG plus « mou » que le cœur des grains)
- Une méthode choisie pour η : coordonnée des atomes mais grosse incertitude!

Valeurs retenues ↔ épaisseur JdG = 1,3 nm

$d_g = 3,0$ nm
 $R_c = 0,382$ nm



$d_g = 3,0$ nm
 $R_c = 0,322$ nm



Avec cette méthode: ajustement de B_{IC}/B_{mono} , μ_{IC}/μ_{mono} , E_{IC}/E_{mono}

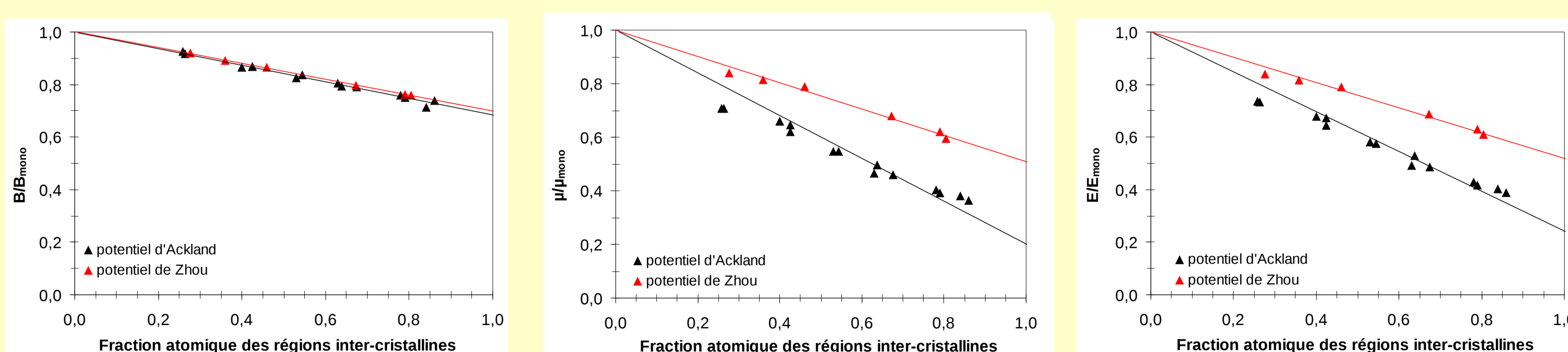
➢ $B_{IC}/B_{mono} \approx 0,68$ $\mu_{IC}/\mu_{mono} \approx 0,30$ $E_{IC}/E_{mono} \approx 0,35$

➢ très fort adoucissement des régions inter-cristallines!

Diminution de B et E beaucoup + forte que dans d'autres métaux CC (Ta, Fe...)

⇒ Étude de W avec un 2ème potentiel

Constantes d'élasticité comparaison avec potentiel 2 : EAM



Changement de potentiel: pas d'effet significatif sur B mais grandes différences pour μ , E, ν

➢ $B_{IC}/B_{mono} = 0,69$

$\mu_{IC}/\mu_{mono} \approx 0,54$

$E_{IC}/E_{mono} \approx 0,56$

➢ adoucissement des régions inter-cristallines encore fort! Mais plus cohérent avec résultats de la littérature. Pourquoi?

Perspectives

- analyses microstructurales plus fines (rdf, distributions d'énergie...)
- ⇒ paramètres pertinents dans la variation des constantes d'élasticité?
- étude d'échantillons à joints de grains contrôlés
- utilisation d'un 3ème type de potentiel interatomique (MEAM)
- ⇒ potentiel le mieux adapté? Pourquoi?
- films minces ...