

# Modélisations continues de la ségrégation de solutés aux joints de grains à faibles et fortes désorientations

Joé Petrazoller<sup>1</sup>, Abdallah Wazne<sup>1</sup>, Julien Guénoles<sup>1</sup>, Thiebaud Richeton<sup>1</sup>, Stéphane Berbenni<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers, LEM3, F-57000 Metz, France

\*[stephane.berbenni@univ-lorraine.fr](mailto:stephane.berbenni@univ-lorraine.fr)

## Résumé pour (effacer la mention inutile) : oral

Cette étude examine la ségrégation des solutés aux joints de grains dans les métaux de symétrie cubique à faces centrées sous l'angle de méthodes micromécaniques continues traitant de l'interaction entre les défauts intrinsèques définissant le joint de grain et les atomes de solutés. Pour cela, deux modélisations sont proposées : l'une à base de dislocations pour des joints de grains à faibles désorientations, et l'autre à base d'unités structurelles de désinclinaisons pour des joints de fortes désorientations. Les solutés sont modélisés dans les deux cas de figure à l'aide d'un tenseur de dipôle élastique pour calculer les énergies d'interaction entre joints de grains / solutés. Les méthodes exposées permettent d'aller au-delà des méthodes analytiques en élasticité isotrope [1,2] en considérant un milieu hétérogène élastique anisotrope afin de se rapprocher des systèmes réels étudiés. Ainsi, la méthode de Stroh est utilisée pour les joints de faibles désorientations [3] et la méthode de transformation de Fourier rapide (FFT) pour la mécanique des champs de désinclinaisons [4] pour les joints à fortes désorientations ( $\Sigma 29$  (5 2 0) [001]  $46.40^\circ$  et  $\Sigma 149$  (10 7 0) [001]  $20.02^\circ$ ). Pour l'interaction élastique de ces interfaces avec les atomes de solutés en substitution, le tenseur de dipôle élastique contient à la fois le tenseur permanent de second ordre, qui est lié à un effet de taille, et le tenseur de polarisabilité de quatrième ordre, qui est lié à un effet de module en captant la dépendance à la contrainte externe. Des comparaisons numériques entre les calculs continus et les simulations atomistiques de statique moléculaire (MS) au niveau des énergies d'interaction sont effectuées pour différents métaux CFC (Cu, Ag, ...), avec Ag et Ni comme atomes de solutés en substitution. Les résultats soulignent le rôle crucial de l'élasticité anisotrope dans la modélisation précise de la ségrégation des solutés. Si les calculs continus et MS montrent une bonne concordance générale en termes d'énergies d'interaction et de ségrégation, respectivement, certaines divergences apparaissent notamment à proximité des cœurs de défauts, où des pistes d'amélioration seront discutées. Cette étude révèle également l'impact important de l'effet de module sur la concentration en soluté au niveau des interfaces cristallines type joints de grains pour certains systèmes.

## Références :

- [1] C.L. White, W.A. Coghlan, *Metall. Trans. A* 8 (9) (1977), 1403–1412.
- [2] R. Dingreville, S. Berbenni, *Acta Mater.* 104 (2016), 237–249.
- [3] J. Petrazoller, J. Guénoles, S. Berbenni, T. Richeton, *Comput. Mater. Sci.* 249 (2025) 113642.
- [4] A. Wazne, J. Petrazoller, J. Guénoles, T. Richeton, S. Berbenni, *Mech. Res. Com.* 149 (2025) 104529.