

# Représentation de structures de joints de grains métastables par les descripteurs d'environnement locaux SOAP

Kevin Arfi<sup>1\*</sup>, Jean Furstoss<sup>1</sup>, Laurent Pizzagalli<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institut Pprime, Université de Poitiers – CNRS – ISAE-ENSMA, France*

*\*[kevin.arfi@etu.univ-poitiers.fr](mailto:kevin.arfi@etu.univ-poitiers.fr)*

## Résumé pour : poster

La structure des joints de grains impacte significativement les propriétés mécaniques et chimiques des matériaux polycristallins. Cela explique leur étude voire leur ingénierie qui se développe depuis les années 90, voir [4] et les références qui y figurent. Récemment plusieurs travaux se sont intéressés aux structures de joints métastables, aussi appelées complexions, argumentant qu'on ne pouvait se restreindre à l'étude des états de plus basse énergie pour comprendre et améliorer les propriétés et performances des matériaux [1-4].

Notre étude est préliminaire au développement d'une méthode de classification des complexions de joints de grains à l'aide d'algorithmes d'apprentissage machine. On s'intéresse ici à la représentation de différentes complexions de joints  $\Sigma 5$  d'Aluminium fournie par les descripteurs d'environnements atomiques locaux SOAP [5]. Une  $\gamma$ -surface est calculée en suivant la méthodologie présentée dans [1] puis les représentations des états métastables sont comparées.

## Références :

- [1] Jian Han, Vaclav Vitek, David J. Srolovitz, *Grain-boundary metastability and its statistical properties*, Acta Materialia, **104** (2016) 259-273.
- [2] Jian Han, Vaclav Vitek, David J. Srolovitz, *The grain-boundary structural unit model redux*, Acta Materialia, **133** (2017) 186-199.
- [3] Shen J. Dillon, Ming Tang, W. Craig Carter, Martin P. Harmer, *Complexion: A new concept for kinetic engineering in materials science*, Acta Materialia, **55** (2007) 6208-6218.
- [4] Eric R. Homer, Gus L.W. Hart, C. Braxton Owens, Derek M. Hensley, Jay C. Spendlove, Lydia Harris Serafin, *Examination of computed aluminum grain boundary structures and energies that span the 5D space of crystallographic character*, Acta Materialia, **234** (2022).
- [5] Sandip De, Albert Bartok, Gábor Csányi, Michele Ceriotti, *Comparing molecules and solids across structural and alchemical space*, Phys. Chem. Chem. Phys., **18** (2015).