

Nucléation de cavités aux joints de grains

Dôme Tanguy^{1*}

¹Institut Lumière Matière, Université Lyon 1-CNRS, Villeurbanne

*dome.tanguy@univ-lyon1.fr

Résumé pour poster

L'agrégation de lacunes constitue un mécanisme de formation de cavités alternatif à la rupture de particules [1]. Néanmoins, les conditions de leur formation restent confuses. En particulier, la taille critique et les contraintes locales, n'ont pas été évaluées avec tous les détails atomistiques. Le poster montrera des résultats de simulations Monte Carlo, à l'échelle atomique, de la nucléation de cavités au niveau de joints de grains dans Al. La méthode et de premiers résultats sur de petits clusters de lacunes ont été publiés récemment [2]. Pour étudier la formation de cavités, un biais a été introduit dans les simulations, dans l'esprit de la méthode « Umbrella Sampling ». Il a permis de forcer le système à franchir la barrière d'énergie vers la cavité, tout en échantillonnant la structure et l'énergie des clusters de lacunes les plus importants statistiquement le long de la coordonnée de réaction (Fig. 1). Les forces motrices et le niveau de déformation nécessaire sont discutées.

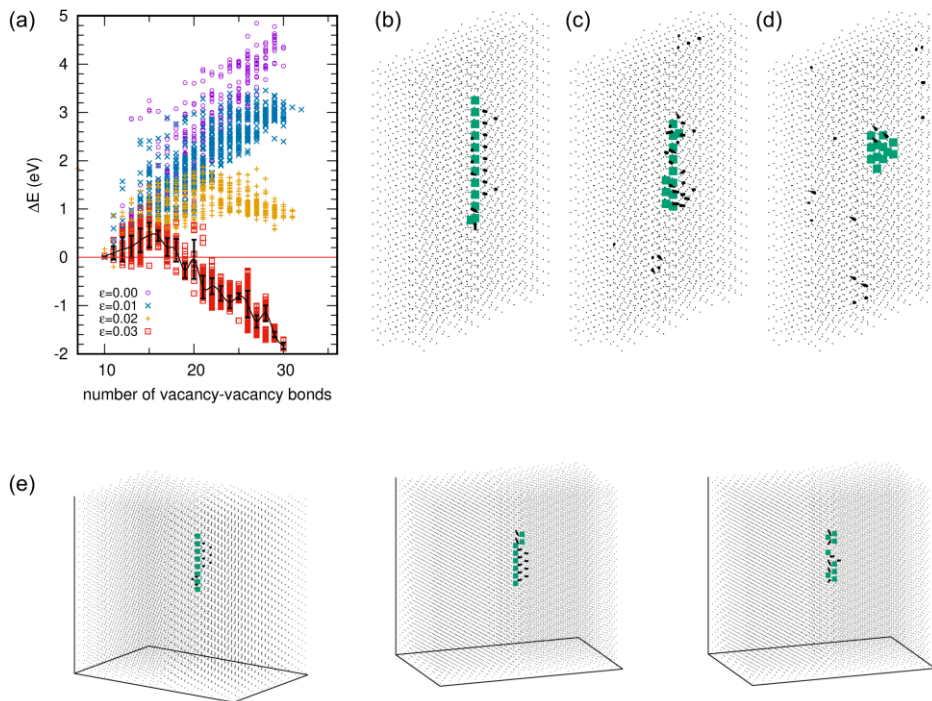


Fig. 1: (a) Variation de l'énergie potentielle en fonction du nombre de liaisons lacune-lacune en position de premier voisin nll (configurations générées par simulations Monte Carlo avec 12 lacunes suivies d'une minimisation de l'énergie potentielle) pour différentes déformations hydrostatiques entre 0 et 3% élastique, (b, c, d) trois configurations représentatives $n_{ll}=12$, 15 et 30, i.e. configurations initiale, col et finale le long du chemin de réaction (a). (e) Trois configuration $n_{ll}=7$ illustrant la complexité du champ de déplacement (flèches noires) autour des clusters de lacunes (carrés verts), simulations avec 8 lacunes.

[1] "Void nucleation during ductile rupture of metals: A review" P. J. Noell et al. Prog. Mat. Sci. **135** 101085 (2023)

[2] "Sampling vacancy configurations with large relaxations using Smart Darting" **D. Tanguy** Phys. Rev. Mat. **8** 033604 (2024)