

Structure et cinétique de défauts tridimensionnels sur le joint de macle cohérent {10-12} dans le magnésium : Simulations atomistiques et champ de phase

D.E. Spearot¹, V. Taupin², K. Dang¹, L. Capolungo³

¹ Department of Mechanical and Aerospace Engineering, University of Florida, Gainesville, FL 32611, USA, dspearot@ufl.edu, kqdang@ufl.edu

² Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers ParisTech, LEM3, F-57000 Metz, France, vincent.taupin@univ-lorraine.fr

³ Materials Science and Technology Division (MST-8), Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545, USA, laurent@lanl.gov

Résumé — On s'intéresse à la structure et au mouvement de facettes formant un cratère créé par dynamique moléculaire dans un joint de macle cohérent {10-12} dans le magnésium. Des interfaces de type Prismatique-Basal (PB) et Pyramidal-Pyramidal (PP1) sont observées. Elles ont une mobilité plus importante que celle du joint de macle cohérent lors de l'annihilation du cratère. Un modèle champ de phase est développé pour déconvoluer le rôle de l'anisotropie des énergies d'interfaces, et des contraintes internes sur la cinétique du cratère.

Mots clefs — Magnésium, maillage, dislocations, disconnections, champ de phase, atomistique.

1. Introduction

Le maillage est un mode de déformation plastique important dans le magnésium. Les macles sont des phases tridimensionnelles délimitées par différentes facettes [1,2], chaque facette étant unique, en termes de structure, de défauts d'interface, d'énergie et de mobilité. Les propriétés résultantes des interfaces influent de façon complexe sur la cinématique et sur la cinétique de la croissance des macles. On peut citer comme exemple l'épaississement des macles dans la direction perpendiculaire au plan {10-12} par la nucléation et la propagation de disconnections [3], de type <10-11> dans le plan {10-12}. Dans ce travail, on s'intéresse à la structure et au mouvement de facettes composant un cratère, créé par l'introduction d'une boucle de dislocation dans un joint de macle cohérent de type {10-12}. Le cratère formé par dynamique moléculaire est notamment composé de facettes de type Prismatique-Basal (PB) dans la direction de maillage et de type Pyramidal-Pyramidal (PP1) dans la direction transverse. Lors de l'autorelaxation du cratère sous l'action des contraintes internes et des effets de tension de surface, les simulations atomistiques révèlent que les interfaces qui composent le cratère ont une mobilité plus importante que le joint de macle cohérent. La profondeur du cratère reste donc quasi-constante jusqu'à l'annihilation complète du cratère. Pour interpréter ces résultats en termes d'énergies de facettes, et de distributions de contraintes internes, on propose un modèle champ de phase anisotrope. La reproduction des résultats obtenus par dynamique moléculaire avec le modèle champ de phase suggère l'importance de l'anisotropie des énergies de facettes.

2. Dynamique moléculaire

Les simulations atomistiques sont réalisées avec le logiciel LAMMPS [4], avec le potentiel MEAM (Modified Embedded-Atom Method) pour Mg développé par Wu et al. [5]. Ce potentiel donne des valeurs réalistes des paramètres de réseau pour Mg, d'énergie de cohésion et de défauts cristallins. La figure 1 illustre le setup utilisé pour l'étude. Une configuration de type bicristal est créée, avec un joint de macle cohérent horizontal au milieu de la cellule de simulation, et un joint de macle opposé visible en haut et en bas de la cellule en raison des conditions périodiques. La boucle rouge sur la

figure montre la boucle de dislocation de cisaillement introduite et superposée au joint de macle situé au milieu de la cellule. Après relaxation et décomposition de la boucle de dislocation dans le joint de macle, un défaut tridimensionnel ressemblant à un cratère se forme dans le joint de macle. Sa structure est montrée sur la figure 2. Le cratère a une forme circulaire. On peut noter sur cette figure la présence de 2 boucles de disconnexions autour du cratère. Les facettes qui composent le cratère sont de type Prismatique-Basal (PB) dans la direction de maclage et de type Pyramidal-Pyramidal (PP1) dans la direction transverse. Les interfaces qui forment le cratère ont une orientation proche de 45 degrés par rapport au joint de macle. Lorsque cette configuration est chauffée, les simulations de dynamique moléculaire prédisent l'auto-annihilation du cratère. Les 2 boucles de disconnexions grandissent, le cratère se réduit quant à lui avec un mouvement très uniforme des facettes qui le composent, jusqu'à son annihilation complète. Enfin, les 2 boucles de disconnexions rétrécissent puis s'annihilent, pour laisser un joint de macle parfait, comme avant l'introduction de la boucle de dislocation. Durant la réduction du cratère, la forme initiale circulaire devient légèrement elliptique, le cratère étant légèrement plus allongé dans la direction de maclage. Cela indique que les facettes de type PP1 se déplacent plus vite que celles de type PB.

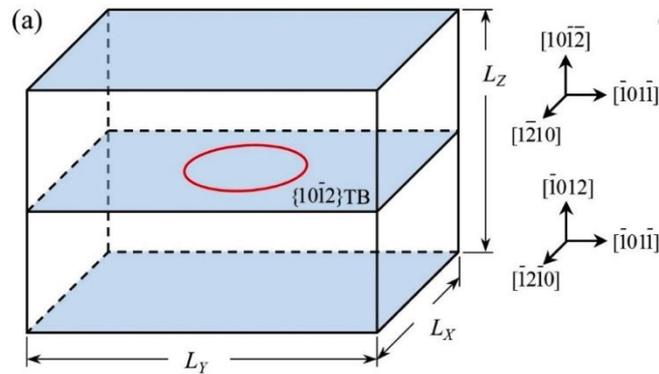


Figure 1 – Illustration du setup utilisé en dynamique moléculaire pour modéliser un joint de macle cohérent. Les joints de macle sont en gris. La boucle rouge montre la boucle de dislocation insérée dans le joint de macle.

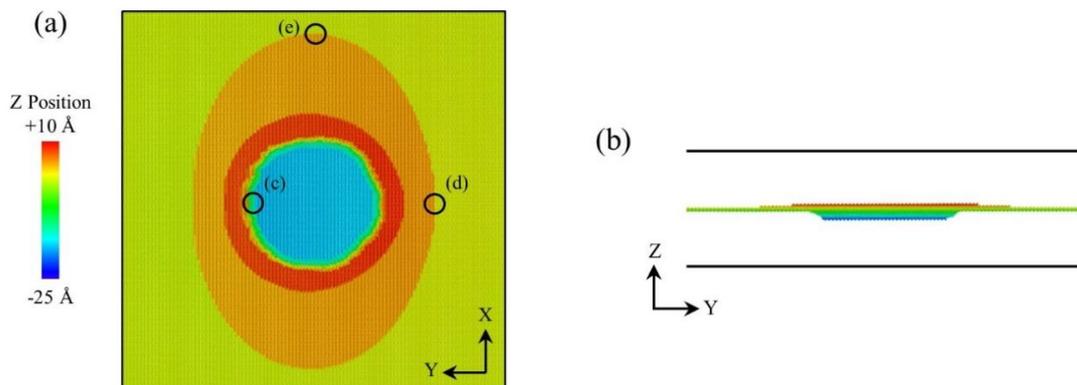


Figure 2 – Simulation par dynamique moléculaire de la formation du cratère après relaxation de la boucle de dislocation dans le joint de macle. (a) Vue de dessus. (b) Vue latérale. En vue de comparer ces résultats à ceux du modèle champ de phase, Y correspond à la direction de maclage, X à la direction transverse et Z à la direction normale.

3. Modèle champ de phase

Un modèle champ de phase anisotrope est proposé pour essayer de comprendre le rôle des contraintes internes et des énergies de facettes dans la cinématique et dans la cinétique d'annihilation du cratère observée par dynamique moléculaire. La variable de phase ϕ représente le passage de la phase parente ($\phi = 0$) à la phase maclée ($\phi = 1$), et les régions continues où $0 < \phi < 1$ représentent les facettes qui délimitent la macle. Les axes du repère cartésien X_1 , X_2 et X_3 correspondent respectivement aux directions de maclage, transverse et normale. Dans le modèle, l'énergie libre d'Helmholtz contient 3 contributions [6,7] :

$$F = \iiint_V (E + f + \Gamma) dV$$

Le terme E représente l'énergie élastique, f l'énergie de barrière et Γ l'énergie de gradient. Pour l'énergie de barrière, un potentiel en double-puits est utilisé :

$$f(\phi) = W \phi^2 (1 - \phi^2)$$

La constante W représente la hauteur de l'énergie de barrière et vaut $W=10^9 \text{J/m}^3$ dans les simulations. L'énergie de gradient prend la forme :

$$\Gamma = \frac{1}{2} \kappa (\nabla \phi) : (\nabla \phi \otimes \nabla \phi)$$

Le symbole ∇ dénote l'opérateur Nabla et \otimes le produit dyadique entre 2 vecteurs. La matrice κ est diagonale. On prend ses 3 termes diagonaux égaux à κ , une valeur qui dépend de $\nabla \phi$, de façon à introduire une énergie d'interface anisotrope qui dépend de l'orientation de l'interface comme expliqué ci-après. Le vecteur $\nabla \phi$ donne en effet accès à la normale unitaire aux interfaces. En utilisant une approximation monodimensionnelle simplifiée [8], on peut relier l'énergie d'excès d'une interface à l'équilibre γ , aux paramètres κ et W:

$$\gamma = \sqrt{\frac{\kappa W}{3}}$$

Ainsi, pour toute interface choisie et de normale donnée par $\nabla \phi$, son énergie d'excès $\gamma(\nabla \phi)$, pour une valeur de W constante, peut être introduite dans le modèle champ de phase au travers du terme κ :

$$\kappa(\nabla \phi) = \frac{9\gamma(\nabla \phi)^2}{W}$$

L'idée consiste donc à construire une carte continue des énergies d'interfaces et donc de κ , en fonction des types d'interfaces définies par leur normale. Comme le montre la figure 3 ci-dessous, on projette les normales aux interfaces (le vecteur $\nabla \phi$) dans un système de coordonnées sphériques, dans lequel on peut ensuite introduire les énergies d'interfaces désirées.

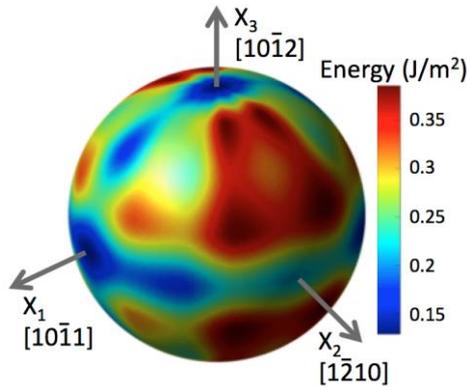


Figure 3 – Energie d’excès des interfaces en fonction de la normale aux interfaces, mappée dans un système de coordonnées sphériques.

Les énergies des interfaces de type PB, PP1, PP2 et joint de macles cohérent, sont notamment introduites, les valeurs respectives étant $\gamma = 0.17 \text{ J/m}^2$, $\gamma = 0.318 \text{ J/m}^2$, $\gamma = 0.212 \text{ J/m}^2$ et $\gamma = 0.13 \text{ J/m}^2$. Finalement, l’évolution spatiale et temporelle de la variable de phase est donnée par la solution de l’équation :

$$\frac{d\phi}{dt} = -L \frac{\partial F}{\partial \phi}$$

Le paramètre L représente la mobilité des interfaces. Cette mobilité dépend dans la réalité du type d’interface et donc de $\nabla\phi$, mais aussi de la contrainte appliquée, d’énergies d’activation, de la température... Nous introduirons une telle complexité lors d’une prochaine étude. Dans le présent travail, nous utiliserons une mobilité constante $L=10^{-2} \text{ (Pa.s)}^{-1}$. Le modèle développé est résolu numériquement par une méthode spectrale basée sur l’utilisation d’algorithmes fast Fourier transform (FFT). Il est utilisé pour essayer de reproduire le cratère et son annihilation en accord avec les résultats de dynamique moléculaire. Les résultats sont présentés dans la figure 4. Seulement les valeurs de la variable de phase inférieures à 0.2 sont tracées pour faire apparaître le cratère. Les 2 boucles de disconnections ont été ignorées dans cette étude.

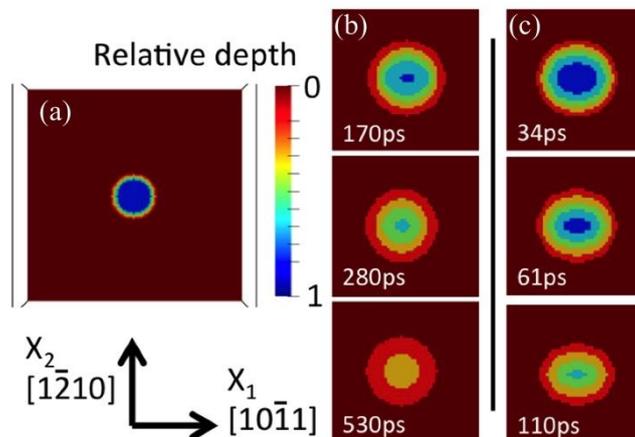


Figure 4 – Simulations de l’annihilation du cratère avec un modèle champ de phase. Les cartes sont coloriées en fonction de la profondeur pour comparer aux simulations de dynamique moléculaire. (a) configuration initiale.

Colonne (b) : Modèle isotrope. Colonne (c) : Modèle avec anisotropie des énergies de facettes.

Les simulations prédisent l'annihilation du cratère. Le premier modèle, complètement isotrope et dans lequel le rôle des contraintes internes sera important, prédit un étalement des facettes qui composent le cratère, en désaccord avec les simulations atomistiques qui ont montré que les facettes restent à un angle quasi-constant (~ 45 degrés) par rapport au joint de macles et se déplacent de façon plutôt uniforme. Le deuxième modèle, qui introduit l'anisotropie des énergies de facettes, est beaucoup plus en accord avec les résultats de dynamique moléculaire car les facettes se déplacent de façon beaucoup plus homogène. On note de plus pour le modèle 2 la forme elliptique du cratère lors de son annihilation, en bon accord avec la dynamique moléculaire.

4. Conclusions

Les résultats présentés montrent que les facettes de type PB et PP1 ont une mobilité plus importante que le joint de macles cohérent. Les simulations par dynamique moléculaire révèlent en effet que celles-ci se déplacent rapidement et de façon uniforme, de sorte que le cratère s'annihile avec une profondeur constante jusqu'à sa disparition complète. Un modèle champ de phase anisotrope permet de déconvoluer le rôle des contraintes internes et des énergies de facettes durant cette annihilation. Les résultats suggèrent que l'anisotropie des énergies de facettes joue un rôle majeur dans la mobilité importante et uniforme des interfaces de type PB et PP1.

Références

- [1] C.D. Barrett, H. El Kadiri. Impact of deformation faceting on $\{10-12\}$, $\{10-11\}$ and $\{10-13\}$ embryonic twin nucleation in hexagonal close-packed metals, *Acta Mater.* 70, 137-161, 2014.
- [2] C.D. Barrett, H. El Kadiri. The roles of grain boundary dislocations and disclinations in the nucleation of $\{10-12\}$ twinning, *Acta Mater.* 63, 1-15, 2014.
- [3] J.P. Hirth, R.C. Pond. Steps, dislocations and disconnections as interface defects relating to structure and phase transformations, *Acta Mater.* 44, 4749-4763, 1996.
- [4] S. Plimpton. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *J. Comput. Phys.* 117, 1-19, 1995.
- [5] Z. Wu, M.F. Francis, W.A. Curtin. Magnesium interatomic potential for simulating plasticity and fracture phenomena, *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* 23, 015004, 2015.
- [6] T.W. Heo, Y. Wang, S. Bhattacharya, X. Sun, S. Hu, L.-Q. Chen. A phase-field model for deformation twinning, *Phil. Mag. Letters* 91, 110-121, 2011.
- [7] R. Kondo, Y. Tadano, K. Shizawa. A phase-field model of twinning and detwinning coupled with dislocation-based crystal plasticity for HCP metals, *Comput. Mater. Sci.* 95, 672-683, 2014.
- [8] S.M. Allen, J.W. Cahn. A microscopic theory for antiphase boundary motion and its application to antiphase domain coarsening, *Acta Metall.* 27, 1085-1095, 1979.