

Étude de la nucléation et l'extension de macles de déformation dans des films minces métalliques : simulations numériques

R. Béjaud¹, S. Brochard¹ & J. Durinck¹

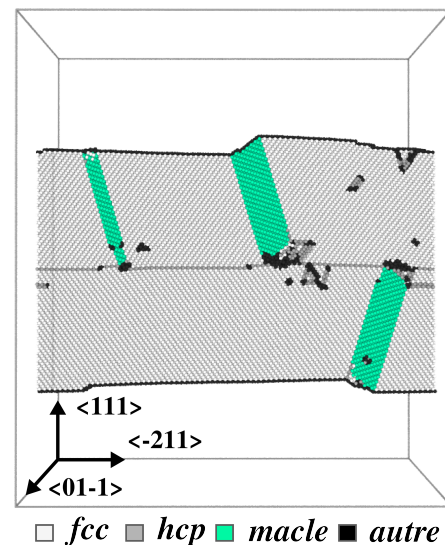
¹ Institut P', UPR 3346, Université de Poitiers - CNRS - ISAE ENSMA, Poitiers, France

Plusieurs études ont montré que les matériaux nanostructurés présentent souvent des propriétés physiques différentes de leurs homologues sous forme massive. Dans ses toutes dernières années, Jacques Friedel portait un grand intérêt à la plasticité des métaux nanostructurés, qui suscite actuellement une grande attention pour son effet sur certaines propriétés mécaniques. Les métaux nano-maclés ou nano-lamellaires, par exemple, sont connus pour avoir une très bonne résistance aux contraintes mécaniques, en raison des interactions entre les dislocations et une interface ou un joint de macle¹².

Pour comprendre les mécanismes de plasticité pouvant influencer sur les propriétés mécaniques, comme le maclage, nous avons utilisé des simulations atomistiques, particulièrement bien adaptées car permettant la visualisation de ces mécanismes à l'échelle atomique. Nous avons ainsi étudié, dans un film mince métallique cubique à faces centrées, la compétition entre des surfaces libres et une interface pour la nucléation d'une macle de déformation, ainsi que l'influence d'une interface sur l'extension des macles alors nucléées. Les orientations cristallographiques sont donc choisies pour faciliter la nucléation de macles de déformation et permettre également d'introduire des défauts de surface, capables d'agir sous contrainte mécanique comme des sources de dislocation.

Notre étude met ainsi en évidence le rôle des défauts de surface sur la formation des macles de déformation, ainsi que l'influence d'un joint de macle et d'une interface bimétallique semi-cohérente sur l'extension des macles nucléées. Nous montrons notamment qu'un joint de macle préexistant a pour effet de limiter l'extension d'une macle nouvellement formée et peut entraîner la nucléation d'une dislocation de Lomer. Dans le cas d'une interface bimétallique, la présence de dislocations d'épitaxie est susceptible également d'influencer la croissance de la macle³.

Cette étude s'inscrit bien entendu dans la thématique "plasticité des métaux" pour laquelle l'apport de Jacques Friedel est considérable.



Nucléation de macles (en vert) à partir de défauts de surface, dans un film mince d'aluminium contenant un joint de macle initial (en gris).

¹Wang, J., Beyerlein, I.J., et al., *Interface-facilitated deformation twinning in copper within submicron Ag-Cu multilayered composites*, Scripta Materialia 64, 1083-1086, 2011

²Wang, J.W., Sansoz, F., et al., *Near-ideal theoretical strength in gold nanowires containing angstrom scale twins*, Nature Communications 4, 1-8, 2013

³Zheng, S.J., et al., *Plastic instability mechanisms in bimetallic nanolayered composites*, Acta Materialia 79, 282-291, 2014