

Sommaire

Avant-propos	iii
Remerciements	vii
Liste des sigles et définitions	ix

Partie 1

De l'ordre au désordre intergranulaire

Introduction : bref historique du concept d'ordre intergranulaire	1
---	---

Chapitre 1 : Ordre géométrique

1. Géométrie des joints de grains	5
1.1. <i>Les paramètres cristallographiques</i>	6
1.2. <i>Rotations équivalentes – Désorientation</i>	8
1.3. <i>Vecteur de Rodrigues et quaternions</i>	9
1.3.1. <i>Le vecteur de Rodrigues R</i>	10
1.3.2. <i>Les quaternions</i>	10
2. Bicristallographie	10
2.1. <i>Méthodologie générale : du complexe bicolore au joint de grains</i>	11
2.1.1. <i>Le complexe bicolore</i>	11
2.1.2. <i>Bicristal idéal</i>	13
2.1.3. <i>Bicristal réel – Joint de grains réel</i>	13
2.2. <i>Réseau bicolore – Réseau de coïncidence</i>	14
2.3. <i>Réseau DSC</i>	16

2.4.	<i>Extension de la notion de coïncidence</i>	17
2.4.1.	<i>Coïncidence planaire ou bidimensionnelle (2D)</i>	17
2.4.2.	<i>Coïncidence unidimensionnelle (1D) ou modèle du « Plane Matching »</i>	19
2.4.3.	<i>Coïncidence exacte et coïncidence approchée</i>	21
2.5.	<i>Généralisation de la coïncidence : réseau-0 et réseau-02</i>	23
2.5.1.	<i>Réseau-0</i>	23
2.5.2.	<i>Réseau-02</i>	25
2.6.	<i>Intérêt et limite de l'approche de Bollmann</i>	25
3.	Les différents types de joints de grains : terminologie	26
3.1.	<i>Terminologie basée sur les paramètres macroscopiques</i>	26
3.2.	<i>Terminologie basée sur les paramètres microscopiques</i>	28
3.3.	<i>Distinction pratique entre joints de grains</i>	28

Chapitre 2 : Ordre des contraintes mécaniques

1.	Approche continue – Équation de Frank et Bilby	31
2.	Approche discrète – Modèle de Read et Shockley	34
3.	Approche discrète de Bollmann – Dislocations intrinsèques	35
3.1.	<i>Dislocations intrinsèques primaires</i>	35
3.2.	<i>Dislocations intrinsèques secondaires</i>	39
3.3.	<i>Intérêt et limite du modèle « dislocations intrinsèques »</i>	45
4.	Dislocations intergranulaires partielles	48
5.	Champs de contraintes associés aux dislocations intrinsèques	48

Chapitre 3 : Ordre atomique

1.	Modèle des sphères dures – Construction géométrique	52
2.	Modèle des unités structurales	54
2.1.	<i>Principe</i>	54
2.2.	<i>Hierarchie des descriptions</i>	58
2.3.	<i>Multiplicité des descriptions</i>	62
2.4.	<i>Construction géométrique de la structure intergranulaire</i>	63
2.5.	<i>Algorithme de construction de la structure intergranulaire</i>	65
2.6.	<i>Détermination de la structure intergranulaire par la méthode de la bande</i>	68
3.	Intérêts et limites du modèle des unités structurales : « à tout modèle ses exceptions »	70
3.1.	<i>Joints de grains de flexion à trois dimensions (3D) dans les métaux</i>	72
3.2.	<i>Joints de grains de flexion asymétriques dans les métaux</i>	76

3.3. <i>Joint de grains de torsion dans les métaux</i>	79
3.4. <i>Joint de grains dans les matériaux covalents</i>	80
3.5. <i>Joint de grains dans les matériaux ioniques</i>	83
4. Modèle Unités Structurales/Dislocations intrinsèques (SU/GBD)	88
4.1. <i>Principe du modèle SU/GBD</i>	88
4.2. <i>Caractérisation des dislocations associées aux unités structurales</i>	89
4.3. <i>Application du modèle SU/GBD aux joints de flexion</i>	92
4.4. <i>Limite du modèle SU/GBD pour les joints de torsion</i>	93
5. Modèle Unités Structurales/Désinclinaisons	95

Chapitre 4 : Ordre ou désordre à haute température ?

1. Changements de phases solide/solide au joint de grains	97
2. Fusion au joint de grains	98

Chapitre 5 : Ordre et énergie intergranulaires

1. Énergie interfaciale : aspect thermodynamique et facteurs de l'énergie	103
2. Degrés de liberté macroscopiques et énergie intergranulaire	105
2.1. <i>Variation de l'énergie intergranulaire avec l'angle de désorientation</i>	105
2.2. <i>Variation de l'énergie intergranulaire avec l'inclinaison du plan du joint</i>	111
3. Degrés de liberté microscopiques et énergie intergranulaire	119
3.1. <i>Variation de l'énergie intergranulaire avec la translation rigide dans le plan du joint</i>	119
3.2. <i>Variation de l'énergie intergranulaire avec l'expansion normale au plan du joint</i>	121
3.3. <i>Variation de l'énergie intergranulaire avec les relaxations individuelles locales des atomes</i>	123
4. Existe-t-il des critères géométriques d'énergie minimale ?	123
4.1. <i>Le critère « faible valeur de Σ »</i>	124
4.2. <i>Le critère « grande valeur de Γ »</i>	125
4.3. <i>Le critère « grande valeur de d »</i>	126
4.4. <i>Le critère « grande valeur de Γ pour d constant »</i>	126
5. Énergie et classification des joints de grains – Limites	128
5.1. <i>Classification fondée sur l'énergie</i>	128
5.2. <i>Classification des joints fondée sur la distance interplanaire</i>	130

Chapitre 6 : Ordre ou désordre intergranulaire : quelle conclusion ?

Références

Partie 2

Du joint de grains idéal au joint de grains réel

Introduction	147
--------------------	-----

Chapitre 1 : Les défauts de la structure intergranulaire

1. Les défauts ponctuels	149
2. Les défauts linéaires : dislocations extrinsèques	152
2.1. Définition d'une dislocation extrinsèque	152
2.2. Caractéristiques géométriques d'une dislocation extrinsèque	154
2.3. Origine d'une dislocation extrinsèque	155
2.4. Cœur d'une dislocation extrinsèque	157
2.4.1. Modèle de Peierls-Nabarro	158
2.4.2. Degré de localisation du cœur d'une dislocation intergranulaire	159

Chapitre 2 : Ségrégation intergranulaire

1. Forces motrices de la ségrégation d'équilibre	163
1.1. Interactions élastiques	163
1.1.1. Effets de taille	163
1.1.2. Effets liés aux modules d'élasticité	164
1.2. Effets électroniques	165

2. Approches thermodynamiques de la ségrégation d'équilibre	166
2.1. <i>Isotherme d'adsorption de Gibbs</i>	166
2.2. <i>Ségrégation en solution solide régulière sans interaction</i>	167
2.2.1. <i>Modèle de Langmuir-McLean</i>	167
2.2.2. <i>Modèle de Seah et Hondros</i>	168
2.3. <i>Modèles de ségrégation en solution solide avec interactions</i>	171
2.3.1. <i>Modèle de Fowler et Guggenheim</i>	171
2.3.2. <i>Modèles de McLean et Guttman</i>	171
3. Modèles de ségrégation fondés sur la mécanique statistique	174
3.1. <i>Modèle de solution régulière avec l'approximation de Bragg-Williams</i>	175
3.2. <i>Modèles de champ moyen (MFA pour Mean Field Approximation)</i>	175
4. Ségrégation « moyenne » aux joints de grains	176
4.1. <i>Influences de la température et de la concentration en matrice du soluté</i> ...	176
4.2. <i>Influence du terme d'interaction sur la ségrégation</i>	178
5. Relation entre ségrégation et structure du joint de grains	180
5.1. <i>Ségrégation et paramètres géométriques du joint de grains</i>	181
5.1.1. <i>Anisotropie de ségrégation observée et mesurée expérimentalement</i>	181
5.1.2. <i>Anisotropie de ségrégation quantifiée par les grandeurs thermodynamiques</i>	185
5.1.3. <i>Changement des paramètres géométriques sous l'effet d'une ségrégation</i>	192
5.2. <i>Ségrégation intergranulaire et dislocations intrinsèques du joint de grains</i>	196
5.3. <i>Ségrégation intergranulaire et structure atomique du joint de grains</i>	199
5.3.1. <i>Anisotropie de la ségrégation d'un site à l'autre dans la région intergranulaire</i>	199
5.3.2. <i>Changement de structure induit par la ségrégation</i>	207
5.3.3. <i>Mise en évidence expérimentale de la ségrégation à l'échelle atomique</i>	209
5.4. <i>Ségrégation intergranulaire et structure électronique du joint de grains</i>	210
5.4.1. <i>Changement des liaisons électroniques sous l'effet de la ségrégation dans les métaux</i>	211
5.4.2. <i>Changement des liaisons électroniques sous l'effet de la ségrégation dans les oxydes</i>	214
5.4.3. <i>Modification des structures de bande des semiconducteurs</i>	217
6. Rôle des dislocations extrinsèques dans la ségrégation d'équilibre	218
7. Ségrégation hors d'équilibre aux joints de grains	221

Chapitre 3 : Précipitation intergranulaire

1. Aspect énergétique	230
2. Différents types d'interfaces et de précipités	233

2.1. Interface cohérente	233
2.2. Interface semi-cohérente	234
2.3. Interface incohérente.....	236
2.4. Les différents types de précipités	236
3. Condition d'équilibre d'un germe à un joint de grains	237
4. Construction de Wulff généralisée et diverses formes de germes aux joints de grains.....	239
4.1. Principe de la construction de Wulff généralisée	239
4.2. Formes d'équilibre des germes à deux dimensions.....	240
4.2.1. Germe sans facette	240
4.2.2. Germe avec une facette dans un seul cristal	241
4.2.3. Germe avec deux facettes dans un seul cristal	242
4.2.4. Germe avec facettes dans les deux cristaux	243
4.3. Influence du plan du joint sur la forme des germes intergranulaires	244
4.4. Forme d'équilibre des germes intergranulaires à trois dimensions	246
4.5. Phénomène de « plissage » du joint de grains	246
5. Croissance des précipités intergranulaires	247
5.1. Migration d'une interface courbe incohérente.....	248
5.2. Migration d'une interface plane (cohérente ou semi-cohérente)	249
6. Localisation des précipités intergranulaires sur les dislocations extrinsèques	250

Chapitre 4 : Interactions entre dislocations et joints de grains

1. Interaction élastique à longue distance : force image	256
2. Configurations de dislocations au voisinage d'un joint de grains	260
3. Interaction à courte distance entre les défauts, linéaires et plans	261
3.1. Simulation de l'interaction entre une dislocation de matrice et un joint de grains	265
3.2. Processus de combinaison	268
3.3. Processus de décomposition	269
3.4. Processus de transmission	273
3.5. Entrée d'une dislocation dissociée dans un joint de grains.....	277
3.5.1. Modèle d'interaction d'une dislocation dissociée avec un joint de grains	278
3.5.2. Observation de l'interaction d'une dislocation dissociée avec un joint de grains	279

Chapitre 5 : Relaxation des contraintes intergranulaires

1. Modèles d'accommodation des dislocations extrinsèques	284
1.1. Délocalisation du cœur de la dislocation extrinsèque	284
1.2. Décomposition de la dislocation extrinsèque et arrangement des produits ..	286
1.3. Incorporation de la dislocation extrinsèque dans la structure intrinsèque ..	288
2. Évolution des champs de contrainte des dislocations avec la distance au joint de grains	292
2.1. Modèle d'un mur désordonné « au hasard » de dislocations	292
2.2. Modèle du joint de grains « quasi équidistant »	295
2.2.1. Mur infini de dislocations	295
2.2.2. Mur fini de dislocations	296
3. Dépendance des champs de contraintes avec le temps	297
4. Études expérimentales de l'accommodation des dislocations extrinsèques	300
4.1. Accommodation dans les joints symétriques de flexion des semi-conducteurs	300
4.2. Accommodation dans des joints singuliers, vicinaux et généraux des métaux	302
4.2.1. Accommodation dans des joints proches de $\Sigma 3 \{111\}$	303
4.2.2. Accommodation dans des joints de proche coïncidence avec réseaux intrinsèques	307
4.2.3. Accommodation dans des joints généraux asymétriques, sans réseau intrinsèque	310
4.2.4. Interprétation des phénomènes observés d'accommodation sur la base des modèles	311
4.3. Étude de la cinétique d'accommodation	315
5. Conclusion sur les phénomènes d'accommodation des dislocations extrinsèques	318

Références

Partie 3

Du joint de grains libre au joint de grains contraint

Introduction	329
--------------------	-----

Chapitre 1 : La jonction triple

1. Géométrie d'une jonction triple	332
1.1. Paramètres géométriques et classification des jonctions triples	332
1.2. Tricristallographie	333
2. Équilibre d'une jonction triple	337
2.1. Approche thermodynamique – Limites	337
2.1.1. Règle d'équilibre d'Herring	337
2.1.2. Observation d'une jonction triple à différentes échelles : quel équilibre ?	339
2.2. Équilibre en termes de dislocations intrinsèques	344
2.3. Équilibre en termes d'unités structurales	346
3. Énergie d'une jonction triple	349
3.1. Calcul de l'énergie d'une jonction triple	350
3.2. Détermination expérimentale de l'énergie d'une jonction triple	352
4. Défauts d'une jonction triple	354
4.1. « Défauts intrinsèques » d'une jonction triple – Approche géométrique	354
4.2. « Défauts extrinsèques » d'une jonction triple – Approche mécanique	358
5. Du tricristal au polycristal	362

Chapitre 2 : Le réseau de joints de grains (texture des joints de grains)

1. Les critères de distribution des joints de grains	367
1.1. Le critère « désorientation »	368
1.2. Le critère « plan du joint de grains »	370
1.3. Critères non géométriques	371
2. Calculs de la distribution des désorientations entre cristaux	373
2.1. Les fonctions de distributions des orientations et des désorientations	373
2.2. Distributions théoriques des désorientations	375
2.2.1. Approche analytique des probabilités d'existence de joints CSL et CAD dans un polycristal aléatoire	376
2.2.2. Approches par simulation des distributions des joints CSL et CAD dans un polycristal aléatoire	378
3. Distributions expérimentales des désorientations des joints de grains ..	383
3.1. Différents types de distributions expérimentales des désorientations	384
3.2. Effets de la structure et de l'énergie de faute d'empilement du matériau	385
3.2.1. Matériaux du groupe I	385
3.2.2. Matériaux du groupe II	389
3.2.3. Matériaux du groupe III	391

3.3.	<i>Effets de la pureté du matériau</i>	392
3.4.	<i>Effets des traitements thermomécaniques – Relation avec la texture cristalline</i>	396
3.4.1.	<i>Matériaux du groupe I</i>	397
3.4.2.	<i>Matériaux du groupe II</i>	403
3.4.3.	<i>Matériaux du groupe III</i>	408
4.	Distributions des plans de joints de grains	413
5.	Distribution des cinq paramètres macroscopiques des joints de grains ..	420
5.1.	<i>Approche théorique</i>	420
5.2.	<i>Approche expérimentale</i>	422
6.	Distributions des joints de grains selon leurs propriétés	425
6.1.	<i>Distribution des joints de grains selon leur diffusivité</i>	425
6.2.	<i>Distribution des joints de grains selon leur énergie</i>	427
6.2.1.	<i>Distribution déterminée après gravage thermique</i>	427
6.2.2.	<i>Distribution déterminée après mouillage</i>	427
7.	Distributions des jonctions triples	428
7.1.	<i>Limites d'application de la règle de combinaison des indices de coïncidence</i> ..	429
7.2.	<i>Approche théorique de la distribution des jonctions triples</i>	434
7.3.	<i>Distributions expérimentales des jonctions triples</i>	440
7.4.	<i>Distribution des énergies des joints de grains à partir de la distribution des angles dièdres aux jonctions triples</i>	442
8.	Texture locale des joints de grains	444
8.1.	<i>Divers types d'amas</i>	445
8.2.	<i>Configurations d'amas observées</i>	447
8.3.	<i>Configurations d'amas simulées</i>	452
9.	Concept de percolation appliqué aux réseaux de joints de grains	458
9.1.	<i>Réseau infini de joints de grains</i>	459
9.1.1.	<i>Seuils de percolation</i>	460
9.1.2.	<i>Structures fractales des amas</i>	463
9.2.	<i>Réseau fini de joints de grains</i>	463
9.3.	<i>Percolation corrélée</i>	464

Références

Épilogue	475
Bibliographie des ouvrages spécialisés du domaine	477
Index	479
Crédits	483