

Relations entre la structure électronique et la facilité de glissement dans les métaux hexagonaux compacts

Par B. Legrand

To cite this article: Par B. Legrand (1984) Relations entre la structure électronique et la facilité de glissement dans les métaux hexagonaux compacts, Philosophical Magazine B, 49:2, 171-184, DOI: [10.1080/13642818408227636](https://doi.org/10.1080/13642818408227636)

To link to this article: <https://doi.org/10.1080/13642818408227636>



Published online: 20 Aug 2006.



Submit your article to this journal [↗](#)



Article views: 129



View related articles [↗](#)



Citing articles: 139 View citing articles [↗](#)

Relations entre la structure électronique et la facilité de glissement dans les métaux hexagonaux compacts

Par B. LEGRAND

Centre d'Etudes Nucléaires de Saclay, Section de Recherches de Métallurgie Physique,
91191 Gif-sur-Yvette Cédex, France

[Reçu le 19 août 1983 et accepté le 12 septembre 1983]

RÉSUMÉ

Nous avons calculé les énergies de faute d'empilement dans les métaux 'normaux' et de transition, de structure hexagonale compacte. Il n'existe pas actuellement de critère, rendant compte, de manière satisfaisante, du glissement primaire observé dans ces métaux.

Il apparaît, au vu des résultats expérimentaux, que le glissement primaire est basal dans les métaux 'normaux', alors que les métaux de transition ont un comportement plus complexe. Nous avons essayé d'expliquer cette différence par la structure électronique de ces métaux. Les énergies de faute d'empilement ont été calculées en employant la théorie du pseudopotentiel pour les métaux 'normaux', et un modèle de liaison forte pour les métaux de transition.

Nous obtenons que l'énergie de la faute basale est toujours inférieure à celle de la faute prismatique dans les métaux 'normaux'; dans les métaux de transition, le rapport de ces énergies de faute est une fonction oscillante du nombre d'électrons d. La faute prismatique devient moins élevée que la faute basale pour certains remplissages (Y, Ti, Zr, Hf, Ru, Os).

Il existe un excellent accord entre le rapport ainsi calculé des énergies de faute et le mode de glissement observé. Ceci montre que la structure électronique joue un rôle prépondérant dans la détermination du mode de glissement primaire dans les métaux hexagonaux compacts.

ABSTRACT

RELATION BETWEEN THE ELECTRONIC STRUCTURE AND EASE OF GLIDING IN HEXAGONAL CLOSE-PACKED METALS

We have calculated the stacking fault energies in hexagonal close-packed transition and non-transition metals. At present there is no criterion which satisfactorily accounts for the main glide systems observed in these metals. It is known that, in the cases studied so far, the glide is basal in non-transition metals, whereas the transition metals present a more complex behaviour. We have attempted to explain this difference in terms of electronic structure.

The stacking fault energies have been calculated for non-transition metals using the pseudopotential theory, and for transition metals by the tight binding method. We find that for non-transition metals the stacking fault energies in the basal plane are always smaller than in the prismatic plane. For the transition metals, on the other hand, the ratio of the basal to prismatic stacking fault energies is an oscillating function of the filling of the d shell. For a certain number of d electrons, the prismatic stacking fault is smaller than the basal one (Y, Ti, Zr, Hf, Ru, Os).

Excellent agreement is found between the calculated fault energy ratios and the main glide systems observed. This shows that the electronic structure of the metals plays a predominant role in determining the main glide system.

§1. INTRODUCTION

Les métaux de structure hexagonale compacte (h.c.) se déforment toujours par glissement sur un système primaire (SGP) et sur des systèmes secondaires (SGS). Le SGP est, selon le cas, le système basal $(0001)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ que nous noterons (0001), ou le système prismatique $\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ noté $\{10\bar{1}0\}$ (Poirier et Le Hazif 1976). Jusqu'à ce jour aucun modèle n'a permis de comprendre ce qui détermine le choix du SGP.

Le critère du rapport géométrique c/a échoue pour expliquer le comportement de Be, et les différences observées entre Mg et Re. Le critère proposé par Régner et Dupouy (1970), fondé sur l'existence d'une transformation allotropique h.c. \rightleftharpoons c.c., se heurte au cas de Ru et des terres rares (Legrand et Le Hazif 1982).

Plus récemment, des simulations du coeur des dislocations vis $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ (Bacon et Martin 1981 a, b) utilisant des potentiels de Lennard-Jones (LJ5 et LJ6), n'ont révélé que le glissement basal facile. Cette approche, qui semble la plus fructueuse, dépend cependant fortement du potentiel employé.

Dans cette étude, après avoir montré une différence de comportement fondamentale entre les métaux 'normaux' et les métaux de transition (§2), nous calculons les énergies de faute basale et prismatique à 0 K dans les métaux 'normaux' (§3), puis dans les métaux de transition (§4), et nous proposons un critère rendant compte des tendances des modes de glissement observés.

§2. GLISSEMENT DANS LES MÉTAUX 'NORMAUX' ET LES MÉTAUX DE TRANSITION

Rappelons que la structure hexagonale compacte est stable pour certains métaux divalents (Be, Mg, Zn, Cd), trivalents (Tl), pour des métaux de transition de divers remplissages (Y, Ti, Zr, Hf, Tc, Re, Ru, Os, Co) et pour les terres rares lourdes. Il est remarquable que tous les métaux h.c. divalents, sans exception, glissent sur (0001), quel que soit le rapport c/a : Cd possède le rapport le plus élevé ($c/a = 1,886$) et Be le plus petit ($c/a = 1,567$).

Les métaux de transition ont un comportement qui varie avec le remplissage de la bande d: Z_d . Pour $1,5 < Z_d < 3$, cas de Y, Ti, Zr, Hf, le glissement prismatique est le glissement facile (Carnahan et Scott 1973, Pikalov, Papirov, Vorobiev et Kaptecherin 1981, Akhtar et Teghtsoonian 1975, Akhtar 1975, Das et Mitchell 1973). Pour $Z_d \cong 6$, cas de Tc et Re, le glissement se produit aussi facilement sur les deux plans (Churchman 1960, Kopetskiy, Myshlyayev, Novokhatskaya et Yukhanov 1975). Pour $Z_d \cong 7$, cas de Ru et Os, le SGP est prismatique (Snow et Breedis 1974). Pour $Z_d \cong 8,4$, cas de Co, le SGP est basal (Holt 1972). Ce caractère oscillant de la facilité relative de glissement est très analogue à celui de l'énergie de faute basale (Papon 1979) dans les métaux de transition.

Enfin, les terres rares lourdes étudiées, Tb, Dy et Er (Le Hazif et Legrand 1982, Legrand et Le Hazif 1982), glissent toutes sur le plan prismatique.

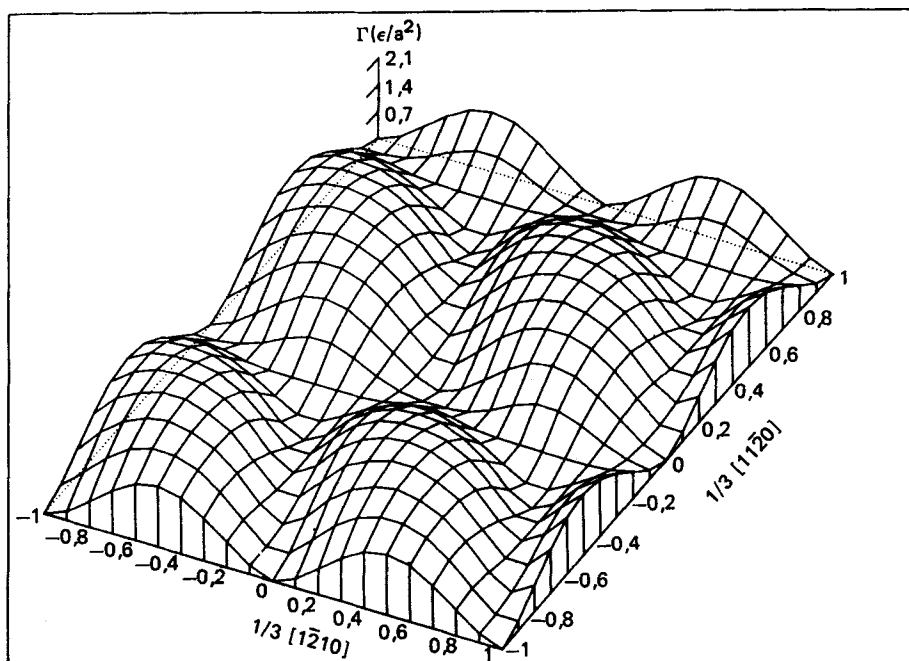
Ce comportement très distinct des métaux divalents et des métaux de transition nous a conduit à calculer les énergies de faute basale et prismatique à 0 K pour ces deux classes de métaux, en employant des pseudo-potentiels adaptés aux métaux normaux et un modèle de liaison forte (Ducastelle 1972), dont de nombreuses études (Papon 1979, Sato et Masuda 1981, Allan et Lannoo 1973, Desjonquères 1979) ont montré qu'il décrivait correctement les propriétés dues à la bande d des métaux de transition.

§3. ENERGIE DE FAUTE DANS LES MÉTAUX 'NORMAUX'

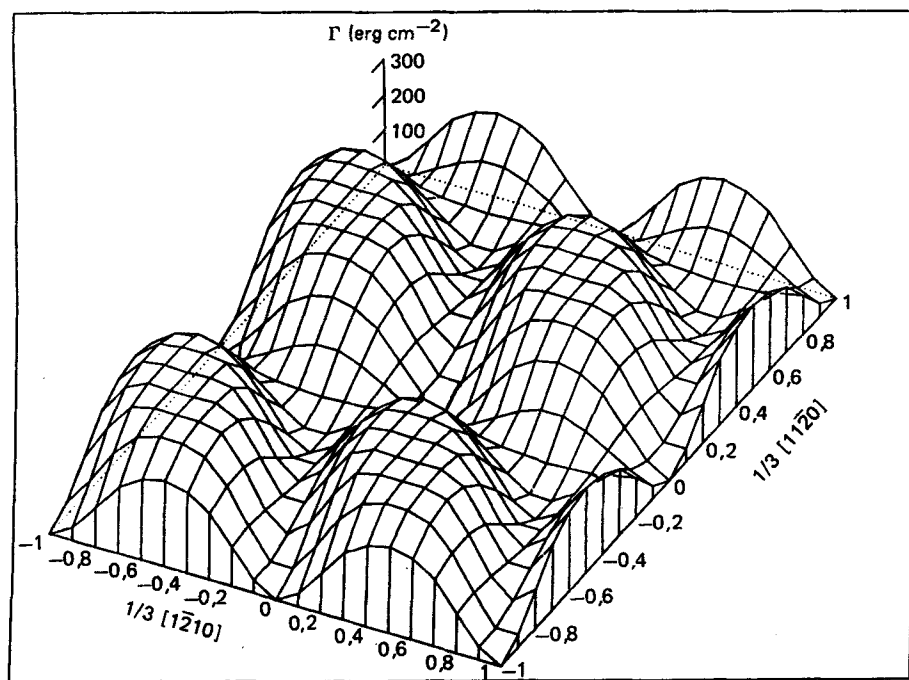
3.1. Faute basale

Les surfaces γ ont été utilisées pour déterminer la faute basale, et sa valeur. Cette notion, introduite par Vitek (1968), permet de visualiser l'énergie de faute, γ , en fonction du vecteur de faute, dont est cisailé le cristal. Ces calculs ont été effectués en employant des pseudo-potentiels adaptés à chacun des métaux divalents: Be (Duesbery et Taylor 1979), Mg (Dagens, Rasolt et Taylor 1975), Zn (Animalu et

Fig. 1.



(a)



(b)

Surface- γ relaxée sur (0001) (a) du cristal LJ6 et (b) de Mg.

Tableau 1. Valeur en erg cm^{-2} des fautes basales (FB), des fautes prismatiques (FP) et du rapport $R = (C_{66} \times \text{FB}) / (C_{44} \times \text{FP})$ dans les métaux 'normaux' et les cristaux LJ5 et LJ6 (Bacon et Martin 1981 a).

	Be	Mg	Zn	Cd	LJ5	LJ6
FB	390	30	35	15	—	—
FP	620	125	210	150	—	—
$C_{44}b/\text{FB}$	100	195	350	445	125	495
$C_{66}b/\text{FP}$	60	45	85	85	50	50
R	0,5	0,25	0,25	0,2	0,4	0,1

Heine 1965) et Cd (Dagens 1977), ainsi que les potentiels LJ5 et LJ6 utilisés par Bacon et Martin (1981 a).

La forme de la surface γ varie très peu avec le potentiel employé: on observe toujours un minimum bien marqué pour la faute de Shockley (faute $2V$ d'après la notation de Frank et Nicolas 1953): figs. 1 (a) et 1 (b). Les différences entre notre carte obtenue avec le potentiel LJ6 et celle de Bacon et Liang (1980) viennent de la possibilité d'une relaxation perpendiculaire au plan de faute. Cependant, la faute $2V$ est obtenue avec une relaxation nulle, et les valeurs (tableau 1) sont en bon accord avec celles calculées par d'autres auteurs (Bacon et Liang 1980, Simon 1979, Devlin 1974, Beissner 1973, Cousins 1980). Notons cependant que Blandin, Friedel et Sadda (1966) trouvent des valeurs plus élevées. Ceci est principalement dû (J. Friedel 1983, communication privée) à l'emploi d'une charge ionique égale à la valence, alors que les autres calculs utilisent des pseudo-potentiels plus raffinés.

3.2. Faute prismatique

Les surfaces γ ont été obtenues par la même méthode et avec les mêmes potentiels que ci-dessus (fig. 2). Pour certains vecteurs de faute, les relaxations perpendiculaires au plan de faute sont très importantes (quelques dixièmes de distance interatomique), et les valeurs obtenues sont certainement des valeurs par défaut (la variation du terme de volume a été négligée). La forme des surfaces γ dépend peu du potentiel, et on remarque qu'il n'y a pas de minimum caractéristique d'une faute stable, telle que celle obtenue sur le plan basal.

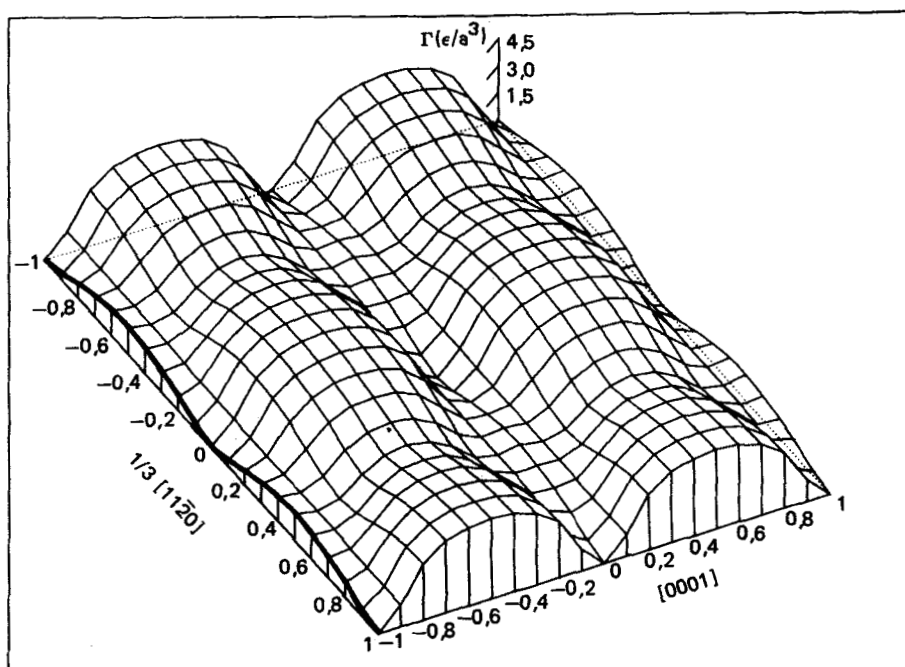
Néanmoins, les fautes de vecteurs colinéaires à la direction compacte $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ sont de basse énergie, et ne nécessitent qu'une faible relaxation (deux à huit centièmes de distance interatomique). Nous introduisons la notion de dissociation généralisée dans le plan prismatique, notion originalement présenté par Peierls et reprise par Fontaine (1968) dans les solides ioniques, puis par Vitek (1969) dans les cubiques centrés. Le vecteur de Burgers $\mathbf{b} = \frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ se dissocie en une distribution continue de vecteurs de Burgers $x\mathbf{b}$ avec $0 < x < 1$ et de densité $\rho(x)$ telle que

$$\int_0^1 \rho(x)(x\mathbf{b}) dx = \mathbf{b}.$$

Pour caractériser cette distribution, nous prendrons la valeur de l'énergie de faute à mi-hauteur: $\frac{1}{2}[\gamma(0,2b) + \gamma(0,3b)]$ comme étant la valeur de la 'faute prismatique'.

Quel que soit le potentiel utilisé, le point fondamental réside dans le fait que la faute basale (FB) est toujours nettement inférieure à la faute prismatique (FP). Le rapport $R = (C_{66} \times \text{FB}) / (C_{44} \times \text{FP})$ est reporté tableau 1.

Fig. 2

Surface- γ relaxée sur $(10\bar{1}0)$ du cristal Lj6.

Remarquons que les simulations de Bacon et Martin (1981 a, b) sont faites avec des potentiels tels que $R < 1$. Il n'est donc pas surprenant qu'elles conduisent au glissement basal facile, si on fait l'hypothèse que le rapport des énergies de faute contrôle la facilité de glissement (Régner et Dupouy 1970).

§ 4. ENERGIE DE FAUTE DANS LES MÉTAUX DE TRANSITION

Dans les métaux de transition, le modèle de liaison forte est très approprié pour décrire les électrons d, qui ont une influence prédominante sur les propriétés de cohésion de ces métaux (Friedel 1969). Récemment les travaux de Papon, Simon, Guyot et Desjonquères (1979 a, b) ont confirmé la validité du modèle de Ducastelle (1972) pour les calculs d'énergie de faute et de macule dans ces métaux. Les aspects théoriques de ces calculs sont brièvement rappelés (§ 4.1), suivis des résultats concernant la faute basale (§ 4.2) et la faute prismatique (§ 4.3).

4.1. Rappel des aspects théoriques de la méthode

L'énergie de faute est égale à la variation totale de l'énergie de cohésion E_c . Nous adoptons la décomposition de l'énergie de cohésion proposée par Gelatt, Ehrenreich et Watson (1977):

$$E^{\text{coh}} = E^{\text{prep}} + E^{\text{ren}} + E^{\text{sp}} + E^{\text{d}} + E^{\text{sd}},$$

où E^{ren} et E^{sp} sont des termes répulsifs de renormalisation et de bande sp, regroupés dans un terme empirique E_{R} (Ducastelle 1970):

$$E_{\text{R}} = \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} A \exp(-p R_{ij}),$$

A et p étant des paramètres à déterminer sur des valeurs expérimentales. Ducastelle (1970) a montré la courte portée de cette interaction, qui sera arrêtée aux seconds voisins. E^{rep} , qui est l'énergie requise pour passer de l'état atomique d^ns^2 à l'état cristallin $d^{n+1}s^1$, est supposée invariante lors de la création du défaut, et E^{sd} , énergie d'hybridation des bandes s et d, est négligée (Papon 1979). En prenant comme origine des énergies le niveau de l'atome isolé, le terme de bande d sur un site i s'écrit:

$$E_i^d = \int^{E_F} E n_i(E) dE,$$

où E_F est le niveau de Fermi et $n_i(E)$ la densité électronique locale.

La bande d est décrite par un Hamiltonien à un électron dans l'approximation des liaisons fortes:

$$H = \sum_{\substack{i \neq j \\ \lambda \neq \mu}} |i\lambda\rangle \beta_{ij}^{\lambda\mu} \langle j\mu|,$$

i et j étant les indices de site et $\lambda, \mu = 1, \dots, 5$, étant les indices d'orbitales. Les intégrales de dérive, ainsi que les transferts de charge ont été négligés (Papon 1979).

Les intégrales de saut $\beta_{ij}^{\lambda\mu}$ peuvent s'exprimer en fonction de trois paramètres $dd\sigma$, $dd\pi$, $dd\delta$ (Slater et Koster 1954), pour lesquels nous avons utilisé les valeurs usuelles $dd\sigma/dd\pi = -2$, $dd\delta = 0$, l'unité d'énergie pour un élément donné étant fixé pour reproduire la largeur de bande de cet élément. Dans les structures compactes, on ne retient souvent que les intégrales de saut entre premiers voisins. L'influence des intégrales de saut entre seconds et troisièmes voisins a été considérée dans le présent calcul. Nous avons adopté comme loi de variation en distance de ces intégrales, une loi exponentielle (Ducastelle 1970):

$$\beta(R) = \beta(R_0) \exp[-q(R - R_0)],$$

où R_0 est la distance interatomique.

La densité d'état locale est donnée par:

$$n_i(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \text{Im} \left[\sum_{\lambda} G_{ii}^{\lambda\lambda}(E + i\varepsilon) \right],$$

où $G(z) = 1/(z - H)$, la résolvante du système, est reconstruite par un développement en fraction continue:

$$G_{ii}(z) = \frac{1}{z - a_1 - \frac{b_1^2}{z - a_2 - \frac{b_2^2}{z - a_3 - \frac{b_3^2}{\dots}}}}$$

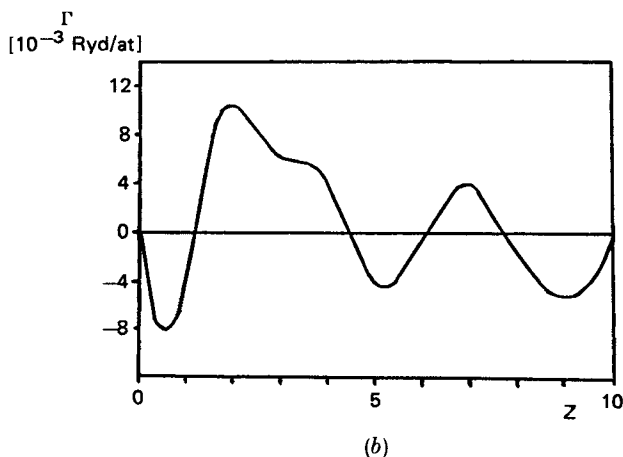
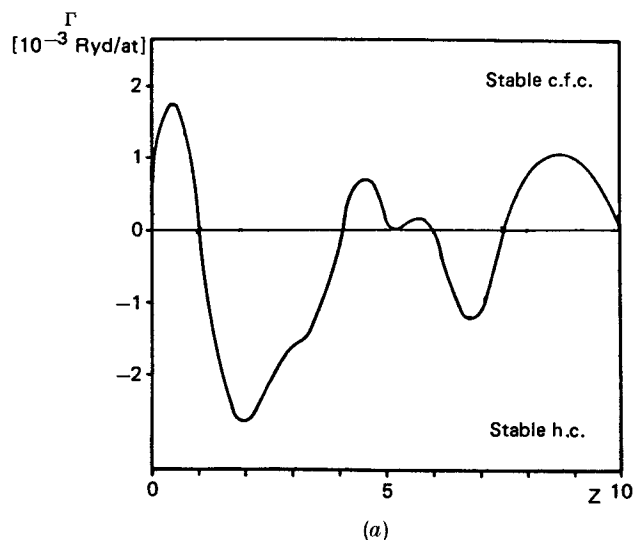
Les coefficients (a_n, b_n^2) sont calculés par la méthode de récursion (Haydock, Heine et Kelly 1972, 1975, Kelly 1980). La fraction continue est tronquée en utilisant les valeurs asymptotiques des a_n et b_n^2 , a_∞ étant le milieu de bande et $b_\infty^2 = W^2/16$ avec W : largeur de la bande d. Rappelons que, si nous calculons n_0 couples exacts, alors les $2n_0 + 1$ premiers moments de la densité d'états sont exacts. L'emploi de neuf couples de coefficients exacts nous a permis d'avoir une précision supérieure à 10% sur les énergies calculées. La détermination des paramètres A , p et q à partir de données expérimentales, est traitée dans l'annexe.

4.2. Faute basale

4.2.1. Résultats antérieurs

Les résultats antérieurs (Papon *et al.* 1979 a) ont montré que l'énergie de faute 2V est fortement corrélée à la différence d'énergie ΔE entre les phases h.c. et c.f.c. Les

Fig. 3



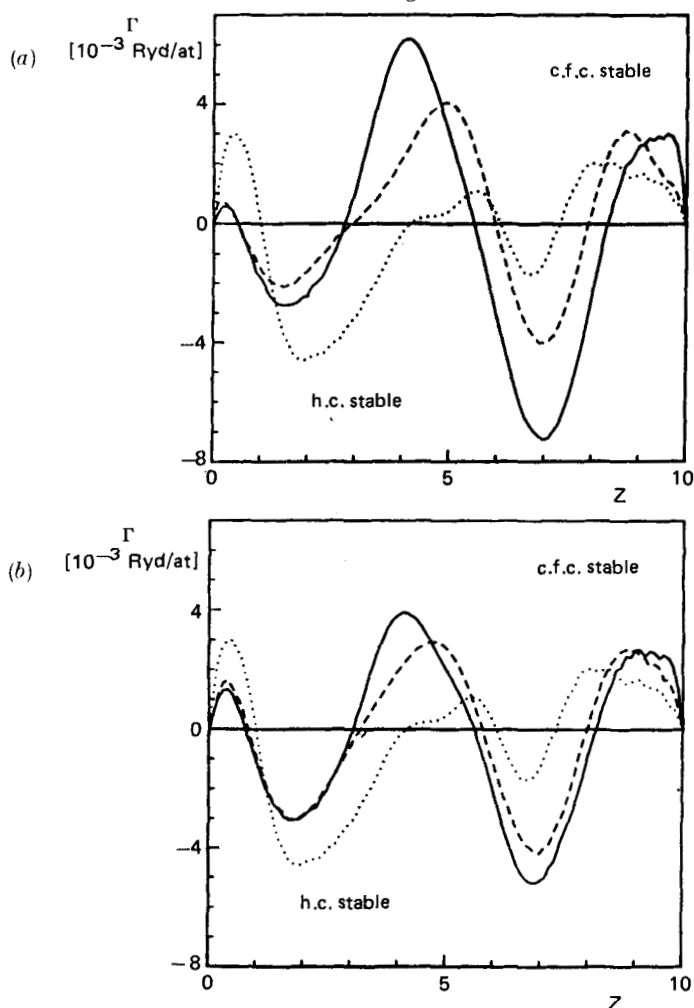
(a) Difference d'énergie de liaison d entre les phases c.f.c. et h.c. d'après Desjonquères (Papon 1979). (b) Energie de faute 2V dans la phase h.c. (Papon 1979).

valeurs de ΔE , portées figure 3 (a), sont tirées du calcul effectué avec 20 moments exacts par Desjonquères et publié dans Papon (1979). Notons que Pettifor (1977) avait obtenu des résultats très semblables.

4.2.2. Résultats

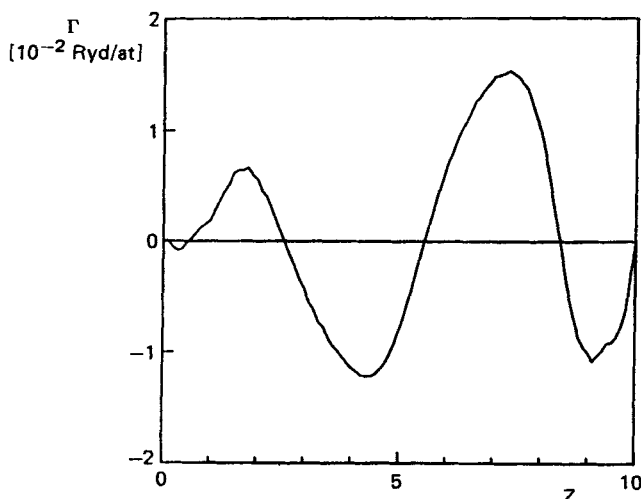
Nous avons calculé la différence d'énergie entre les phases h.c. et c.f.c. pour différentes valeurs du paramètre q et pour différentes portées des intégrales de transfert (figs. 4 (a) et 4 (b)). Le point marquant est l'augmentation de la stabilité par rapport à la fig. 3 (a) de la structure h.c. pour des remplissages compris entre 6 et 8, due à l'influence des intégrales de saut entre seconds voisins, négligées dans les calculs de Papon *et al.* (1979 a, b). Ces courbes évoluent peu lorsqu'on considère également les intégrales de saut jusqu'aux quatrièmes voisins et ceci est d'autant plus marqué que le paramètre de décroissance de ces intégrales, q , est élevé.

Fig. 4



Différence d'énergie de liaison ΔE entre les phases c.f.c. et h.c. pour (a) $qb = 2.9$ et (b) $qb = 4$; intégrales de saut jusqu'aux premiers voisins (\cdots), deuxièmes voisins (—) et quatrièmes voisins (---).

Fig. 5



Energie de faute $2V$ dans la phase h.c. pour $qb=2,9$; intégrales de saut jusqu'aux deuxièmes voisins.

Nous avons calculé l'énergie de faute, Γ ($2V$) avec les mêmes paramètres que ci-dessus. Leur influence est la même que pour la différence d'énergie h.c. – c.f.c. et nous reportons fig. 5 et tableau 3 les résultats obtenus avec $qR_0=2,9$ et des intégrales de saut étendues aux seconds voisins. La valeur nettement plus élevée que la valeur trouvée par Papon *et al.* (1979 a) pour le remplissage $Z=7$ s'accorde bien avec le fait que la faute n'a jamais été observée en microscopie électronique dans Ru (Snow et Breedis 1974). En effet, notre calcul donne, pour ce métal, un rapport $C_{44}b/\Gamma(2V)=60$, alors que celui de Papon *et al.* (1979 a) donne $C_{44}b/\Gamma(2V)=375$, valeur qui devrait conduire à une faute d'empilement observable dans (0001) ce qui n'est pas le cas.

4.3. Faute prismatique

Dans le cas de la faute prismatique, les variations de distance doivent être prises en compte dans le terme répulsif. Nous avons utilisé l'approximation Gaussienne de la densité d'état (Ducastelle 1970) pour tracer les surfaces γ et calculer les énergies de faute, puis nous avons étudié l'influence de l'anisotropie des orbitales d en reconstruisant la densité d'état locale par la méthode de récursion avec neuf couples de coefficients exacts.

4.3.1. Modèle Gaussien

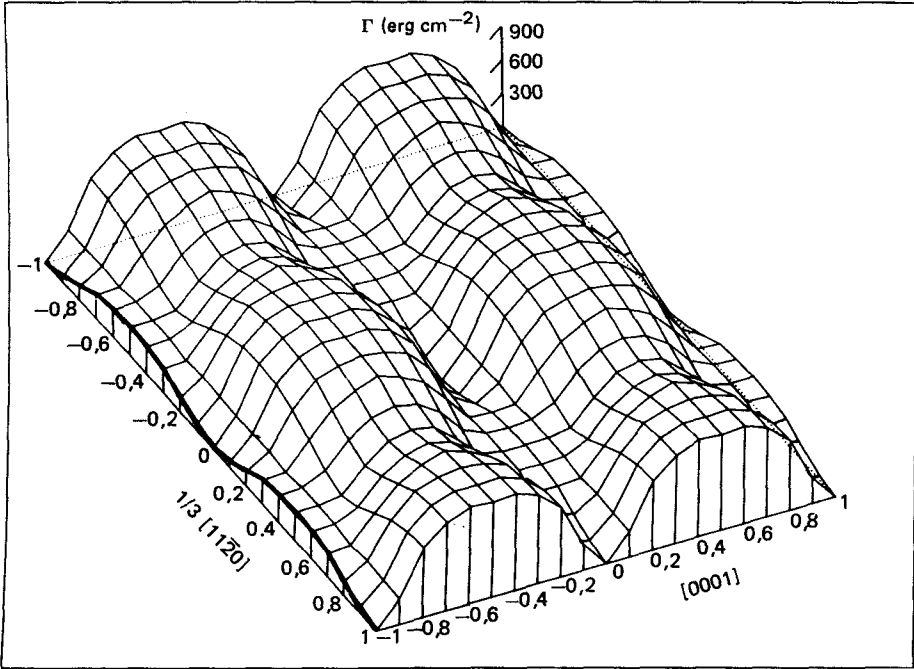
Les paramètres A , p et q sont donnés dans le tableau 2. Les valeurs du paramètre q sont plus faibles que celle prévue par Heine (1967), mais sont très comparables à celles obtenues par Ducastelle (1970) et Papon *et al.* (1979 b).

Les surfaces γ (fig. 6) ont une forme très voisine de celles obtenues avec des potentiels de paire; on note la même absence de faute stable, et la même 'vallée' le long de la direction compacte $\langle 11\bar{2}0 \rangle$. Les énergies de faute, rassemblées tableau 3, n'ont pu jusqu'à présent être mesurées expérimentalement en raison de leur valeur élevée.

Tableau 2. (a) Valeur des paramètres A , p et q dans l'approximation Gaussienne de la densité d'état. Z et W sont d'après Jepsen (1975) et Jepsen, Andersen et Mackintosh (1975).
(b) Valeur des paramètres A et p pour $qb=2,9$. L'écart à la valeur expérimentale du module de compressibilité K est donné.

	Y	Ti	Zr	Hf	Tc	Re	Ru	Os	Co
(a)									
Z	1,5	2,5	2,8	2,5	6,0	6,0	7,0	7,0	8,4
W (Ryd)	0,49	0,45	0,62	0,71	0,70	0,82	0,63	0,76	0,35
Edg (Ryd)	-0,29	-0,34	-0,50	-0,53	-0,63	-0,76	-0,51	-0,54	-0,20
A (Ryd)	9733	356	146	372	1973	4889	122302	16085	12855
p (b^{-1})	15,52	10,83	9,47	10,70	11,93	12,72	17,05	14,18	14,82
q (b^{-1})	1,46	3,01	2,81	2,31	3,18	3,08	2,34	3,52	4,19
(b)									
Edg (Ryd)	-0,29	-0,37	-0,55	-0,58	-0,72	-0,83	-0,55	-0,67	-0,21
A (Ryd)	900	252	128	341	971	2853	26452	13078	7066
p (b^{-1})	11,94	10,39	9,19	10,22	11,14	12,18	15,05	14,08	14,67
$\delta K/K(\%)$	32	0	7	20	-2	-1	10	-10	-20

Fig. 6



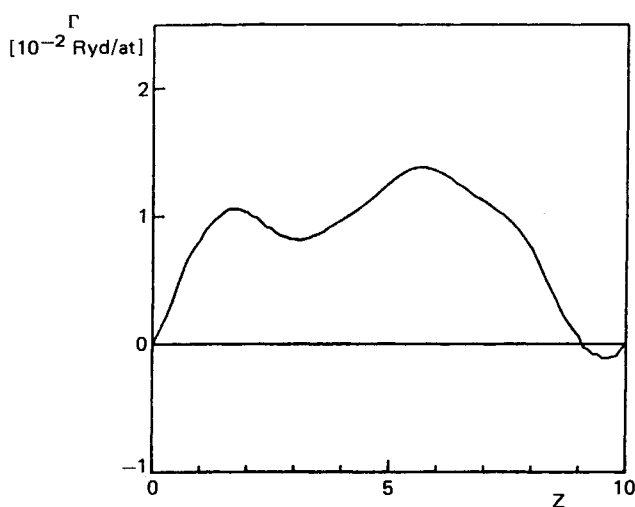
Surface- γ relaxée sur $(10\bar{1}0)$ de Ti dans l'approximation Gaussienne de la densité d'états.

La seule valeur obtenue en microscopie électronique à haute résolution dans Ti (De Crecy, Bourret, Naka et Lasalmone 1983), est en excellent accord avec la valeur calculée: $\gamma_{\text{exp}}=150 \text{ erg cm}^{-2}$ et $\gamma_{\text{calc}}=110 \text{ erg cm}^{-2}$

Tableau 3. Valeur en erg cm^{-2} des fautes basales (FB) des fautes prismatiques (FP) et du rapport $R = (C_{66} \times \text{FB}) / (C_{44} \times \text{FP})$ dans les métaux de transition.

	Y	Ti	Zr	Hf	Tc	Re	Ru	Os	Co
FB	210	290	340	390	470	540	875	1050	45
FP	60	110	150	185	440	600	520	600	230
$C_{44}b/\text{FB}$	50	50	40	50	—	90	60	—	445
$C_{66}b/\text{FP}$	165	125	90	100	—	80	100	—	90
R	3,5	2,5	2,3	2,1	1,0	0,9	1,7	1,8	0,2

Fig. 7



Contribution ΔE^d à l'énergie de faute prismatique en fonction du remplissage Z pour $qb = 2,9$ et des intégrales de saut jusqu'aux deuxièmes voisins.

4.3.2. Modèle anisotrope

Nous avons calculé l'énergie de faute le long des séries de transition pour un paramètre moyen $qb = 2,9$, qui est particulièrement adapté à Ti, Tc et Re. Les paramètres A et p sont rassemblés tableau 2. La variation du terme d'énergie de bande d est montrée fig. 7. L'approximation Gaussienne apparaît dans ce cas très satisfaisante, les écarts observés pour Ti, Tc et Re entre le calcul anisotrope et l'approximation Gaussienne étant inférieurs à 10%.

§ 5. DISCUSSION ET CONCLUSION

Nous avons réuni tableau 4 les résultats concernant tous les métaux divalents et de transition. Il s'en dégage très clairement que le rapport $R = (C_{66} \times \text{FB}) / (C_{44} \times \text{FP})$ est inférieur à 1 pour tous les métaux divalents, et une fonction oscillante du remplissage de la couche d dans les métaux de transition.

Nous pouvons ainsi classer les métaux hexagonaux en trois groupes:

$R < 1$: le glissement basal est facile.

$R > 1$: le glissement prismatique est facile.

$R \cong 1$: le glissement est aussi facile sur le plan basal que sur le plan prismatique.

Tableau 4. Classification des métaux h.c. suivant le rapport R , et système de glissement primaire (SGP) observé.

	Cd	Co	Mg	Zn	Be	Re	Tc	Ru	Os	Hf	Zr	Ti	Y
R	0,2	0,2	0,25	0,25	0,6	0,9	1	1,7	1,8	2,1	2,3	2,5	3,5
SGP	B	B	B	B	B	B/P	—	P	—	P	P	P	P

Cette classification, qui ne comporte aucune exception, montre le rôle essentiel que joue la structure électronique dans l'anisotropie de glissement dans les h.c.

Remarquons que, lorsque le SGP est basal, l'énergie de faute sur (0001) est basse et le comportement de cette classe de métaux (métaux divalents et Co) est très proche de celui des CFC.

La simulation du coeur des dislocations $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ par Bacon et Martin (1981 b) avec des rapports $R < 1$ donne des résultats analogues à ceux obtenus dans les c.f.c. (Norgett, Perrin et Savino 1972).

Lorsque le S.G.P. est prismatique, les énergies de faute sont élevées et la faute unicouche n'est pas stable. Cette situation est voisine de celle observée dans les métaux c.c. (Vitek et Yamaguchi 1980), où la simulation a montré que les dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$, sont étalées sur les plans $\{110\}$ en zone avec la direction $\langle 111 \rangle$. Cette analogie montre l'intérêt de la simulation du coeur des dislocations vis $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ dans les métaux h.c. de transition avec $R > 1$; cette étude du coeur, actuellement en cours, devrait fournir d'utiles renseignements sur l'étalement de la dislocation dans les différents plans en zone avec la direction $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ et expliquer les écarts à la loi de Schmid observé dans Ti (Naka et Lasalmonie 1983).

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier très vivement les Docteurs F. Ducastelle et P. Turchi pour l'aide qu'ils m'ont apportée dans l'utilisation de la méthode de récursion et sans qui ce travail n'aurait pu être mené à son terme. Je n'oublierai pas de remercier les Docteurs J. P. Poirier et R. Le Hazif, qui ont suivi constamment ce travail.

ANNEXE

Détermination des paramètres A , p et Q

Ces paramètres sont déduits des valeurs expérimentales (Gschneider 1964) du paramètre de réseau b (par l'intermédiaire de l'équation d'équilibre), du module de compressibilité K et du module élastique C_{44} . On obtient le système (s) suivant (Ducastelle 1970):

$$(s) \quad \left\{ \begin{array}{l} -\frac{\delta E_c}{\delta R} \Big|_0 = qE^d + pE^R = 0, \\ 9K = (bq)^2 E^d + (bp)^2 E^R, \\ C_{44} = \frac{1}{12} \left(1 - 2\frac{q}{p} \right) (pb)^2 E^R. \end{array} \right.$$

La valeur expérimentale de l'énergie de cohésion est reproduite avec un écart d'environ 20% pour les métaux de début et de fin de série. Cela est dû au terme d'hybridation E^{sd} négligé dans ce calcul. Notons, de plus, que le terme de corrélation électronique a été également négligé.

Les paramètres obtenus pour E^d déterminé dans l'approximation Gaussienne de la densité d'état sont rassemblés tableau 2.a.

Pour suivre l'évolution des énergies de faute le long d'une série de transition, nous avons pris également un paramètre moyen, $qb = 2,9$, et calculé A et p par le système (s). E^d est alors déterminé avec une densité d'état locale reconstruite par la méthode de récursion et nous avons vérifié que sa valeur est indépendante de celle de q pour qb compris entre 2,9 et 4. Les valeurs obtenues et l'écart avec la valeur expérimentale de K sont donnés tableau 2 (b).

RÉFÉRENCES

- AKHTAR, A., 1975, *Scripta metall.*, **9**, 859.
 AKHTAR, A., et TEGHTSOONIAN, E., 1975, *Metall. Trans. A*, **6**, 2201.
 ALLAN, G., et LANNON, M., 1973, *Surf. Sci.*, **40**, 375.
 ANIMALU, A. O. E., et HEINE, V., 1965, *Phil. Mag.*, **12**, 1249.
 BACON, D. J., et LIANG, M. H., 1980, *Interatomic Potentials and Crystalline Defects*, rédaction par J. K. Lee (New York: Metallurgical Society of AIME), p. 181.
 BACON, D. J., et Martin, J. W., 1981 a, *Phil. Mag. A*, **43**, 883; 1981 b, *Ibid.*, **43**, 901.
 BEISSNER, R. E., 1973, *Phys. Rev. B*, **8**, 5432.
 BLANDIN, A., FRIEDEL, J., et SAADA, G., 1966, *J. Phys., Paris*, **24**, C3, 128.
 CARNAHAN, T. G., et SCOTT, T. E., 1975, *Metall. Trans.*, **4**, 27.
 CHURCHMAN, A. T., 1960, *Trans. Metall. Soc. A.I.M.E.*, **218**, 262.
 COUSINS, C. S. G., 1980, *J. Phys. F*, **10**, 755.
 DAGENS, L., 1977, *J. Phys. F*, **7**, 1167.
 DAGENS, L., RASOLT, M., et TAYLOR, R., 1975, *Phys. Rev. B*, **11**, 2726.
 DAS G., et MITCHELL, T. E., 1973, *Metall. Trans.*, **4**, 1405.
 DE CRECY, A., BOURRET, A., NAKA, S., et LASALMONIE, A., 1983, *Phil. Mag. A*, **47**, 245.
 DESJONQUÈRES, M. C., 1979, *J. Phys. Lett., Paris*, **40**, L249.
 DEVLIN, J. F., 1974, *J. Phys. F*, **4**, 1865.
 DUCASTELLE, F., 1970, *J. Phys., Paris*, **31**, 1055; 1972, Thèse, Orsay.
 DUESBERY, M. S., et TAYLOR, R., 1979, *J. Phys. F*, **9**, L19.
 FONTAINE, G., 1968, Thèse, Orsay.
 FRANK, F. C., et NICHOLAS, J. F., 1953, *Phil. Mag.*, **44**, 1213.
 FRIEDEL, J., 1969, *The Physics of Metals*, rédaction par J. M. Ziman (Cambridge University Press), p. 340.
 GELATT, C. D., EHRENREICH, H., et WATSON, R. E., 1977, *Phys. Rev. B*, **15**, 1613.
 GSCHNEIDNER, K. A., 1964, *Solid St. Phys.*, **16**, 275.
 HAYDOCK, R., HEINE, V., et KELLY, M. J., 1972, *J. Phys. C*, **5**, 2845; 1975, *Ibid.*, **8**, 2591.
 HEINE, V., 1967, *Phys. Rev.*, **153**, 673.
 HOLT, R. T., 1972, *Cobalt*, **56**, 145.
 JEPSEN, O., 1975, *Phys. Rev. B*, **12**, 2988.
 JEPSEN, O., ANDERSEN, O. K., MACKINTOSH, A. R., 1975, *Phys. Rev. B*, **12**, 3084.
 KELLY, M. J., 1980, *Solid St. Phys.*, **35**, 295.
 KOPETSKIY, CH. V., MYSHLYAYEV, M. M., NOVOKHATSKAYA, N. I., et YUKHANOV, V. A., 1975, *Phys. Metals Metallogr.*, **39**, 145.
 LE HAZIF, R., et LEGRAND, B., 1982, *Scripta metall.*, **16**, 1065.
 LEGRAND, B., et LE HAZIF, R., 1982, *Acta metall.*, **30**, 917.
 NAKA, S., LASALMONIE, A., 1983, *J. Mater. Sci.*, **18**, 2613.
 NORGETT, M. J., PERRIN, R. C., et SAVINO, E. J., 1972, *J. Phys. F*, **2**, L73.
 PAPON, A. M., 1979, Thèse, Grenoble.
 PAPON, A. M., SIMON, J. P., GUYOT, P., et DESJONQUÈRES, M. C., 1979 a, *Phil. Mag. B*, **39**, 301; 1979 b, *Ibid.*, **40**, 159.

- PETTIFOR, D. G., 1977, *Calphad*, **1**, 305.
- PIKALOV, A. I., PAPIROV, I. I., VOROBIEV, V. V., et KAPTCHERIN, A. S., 1981, *Izvest. Akad. Nauk. SSSR, Metall.*, **5**, 153.
- POIRIER, J. P., et LE HAZIF, R., 1976, *J. Microsc. Spectrosc. electron.*, **1**, 595.
- RÉGNIER, P., et DUPOUY, J. M., 1970, *Phys. Stat. Sol.*, **39**, 79.
- SATO, A., MASUDA, K., 1981, *Phil. Mag. B*, **43**, 1.
- SIMON, J. P., 1979, *J. Phys. F*, **9**, 425.
- SLATER, J. C., et KOSTER, G. F., 1954, *Phys. Rev.*, **94**, 1498.
- SNOW, D. B., et BREEDIS, J. F., 1974, *Acta metall.*, **22**, 419.
- VITEK, V., 1968, *Phil. Mag.*, **18**, 773; 1969, *Ibid.*, **19**, 265.
- VITEK, V., et YAMAGUCHI, M., 1980, *Interatomic Potentials and Crystalline Defects*, rédaction par J. K. Lee (New York: Metallurgical Society of AIME), p. 223.