

This article was downloaded by: [Michigan State University]

On: 16 January 2015, At: 16:08

Publisher: Taylor & Francis

Informa Ltd Registered in England and Wales Registered Number: 1072954 Registered office: Mortimer House, 37-41 Mortimer Street, London W1T 3JH, UK



Philosophical Magazine A

Publication details, including instructions for authors and subscription information:

<http://www.tandfonline.com/loi/tpha20>

Structure du coeur des dislocations vis $1/3\langle 1120 \rangle$ dans le titane

Par B. Legrand^a

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

Published online: 13 Sep 2006.

To cite this article: Par B. Legrand (1985) Structure du coeur des dislocations vis $1/3\langle 1120 \rangle$ dans le titane, Philosophical Magazine A, 52:1, 83-97, DOI: [10.1080/01418618508237608](https://doi.org/10.1080/01418618508237608)

To link to this article: <http://dx.doi.org/10.1080/01418618508237608>

PLEASE SCROLL DOWN FOR ARTICLE

Taylor & Francis makes every effort to ensure the accuracy of all the information (the "Content") contained in the publications on our platform. However, Taylor & Francis, our agents, and our licensors make no representations or warranties whatsoever as to the accuracy, completeness, or suitability for any purpose of the Content. Any opinions and views expressed in this publication are the opinions and views of the authors, and are not the views of or endorsed by Taylor & Francis. The accuracy of the Content should not be relied upon and should be independently verified with primary sources of information. Taylor and Francis shall not be liable for any losses, actions, claims, proceedings, demands, costs, expenses, damages, and other liabilities whatsoever or howsoever caused arising directly or indirectly in connection with, in relation to or arising out of the use of the Content.

This article may be used for research, teaching, and private study purposes. Any substantial or systematic reproduction, redistribution, reselling, loan, sub-licensing, systematic supply, or distribution in any form to anyone is expressly forbidden. Terms & Conditions of access and use can be found at <http://www.tandfonline.com/page/terms-and-conditions>

Structure du coeur des dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ dans le titane

Par B. LEGRAND

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

[Reçu le 19 novembre 1984 et accepté le 14 janvier 1985]

RÉSUMÉ

En utilisant un modèle de liaisons fortes nous avons simulé la structure de coeur des dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ dans le titane, métal de transition à glissement prismatique facile. Alors que les simulations faites avec des potentiels de paires n'avaient pas permis de comprendre l'apparition de ce glissement facile, le modèle employé conduit à un étalement principal de l'ordre de 9 Å sur le plan prismatique. Cette largeur est en bon accord avec les observations faites en microscopie électronique à haute résolution dans ce métal. De plus des étalements secondaires apparaissent sur les plans de base, conduisant à une structure non planaire du coeur. Ces étalements secondaires pourraient expliquer la forte force de friction observée expérimentalement sur les dislocations vis (Naka 1983).

ABSTRACT

CORE STRUCTURE OF THE SCREW DISLOCATIONS $\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ IN TITANIUM

In the tight-binding approximation we have simulated the core structure of the $\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ screw dislocations in titanium, where prism slip is the main glide system. Whereas simulations with pair potentials do not allow an understanding of the occurrence of the easy prism slip, the tight-binding model leads to a principal spreading of the core in the prism plane with a width equal to 9 Å. This width is in good agreement with observations by high-resolution electron microscopy. In addition, secondary spreadings occur on the basal planes; the configuration is therefore non-planar. This could explain the high resistance of the lattice to the motion of the screw dislocations observed experimentally in titanium by Naka (1983).

§ 1. INTRODUCTION

La variété du comportement plastique des métaux de structure hexagonale compacte (h.c.) a suscité de nombreuses études (revues de Partridge 1967, Poirier et Le Hazif 1976). Le système de glissement principal (SGP) est soit le système basal $(0001)\langle 11\bar{2}0 \rangle$ soit le système prismatique $\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$. Les métaux h.c. diffèrent tant dans leur géométrie (variation du rapport c/a) que dans la nature de la liaison atomique.

Le critère géométrique du rapport c/a ne permet pas de comprendre la facilité relative des glissements basal et prismatique dans ces métaux (exception du béryllium et différence inexpliquée de comportement entre magnésium et rhénium). Dans un article précédent (Legrand 1984 a), nous avons montré que la nature de la liaison atomique joue un rôle prépondérant dans le choix du plan de glissement. Plus précisément nous avons obtenu une bonne corrélation entre la valeur du rapport R des énergies de faute basale et prismatique et le mode de glissement principal.

Dans le cas des métaux divalents et plus généralement avec tous les potentiels de paires utilisés jusqu'à présent (Basinski, Duesbery et Taylor 1970, 1971, Bacon et Martin 1981 a, b, Bacon 1984), ce rapport R est inférieur à 1 (Legrand 1984 b). Les simulations du coeur des dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle$, qui peuvent glisser a priori sur le plan de base et sur le plan prismatique, ont toujours conduit à une dissociation sur le plan de base en deux partielles de Shockley suivant le schéma

$$\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle \rightarrow \frac{1}{3}\langle 10\bar{1}0 \rangle + \frac{1}{3}\langle 01\bar{1}0 \rangle. \quad (1)$$

Les simulations ainsi effectuées ne permettent de comprendre que le glissement basal facile et son analogie avec le glissement des métaux c.f.c. sur les plans compacts (111) de même nature que le plan de base.

L'objet de ce travail est d'étudier la structure du coeur des dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ dans le cas où $R > 1$, i.e. dans le cas du glissement prismatique facile. Cette situation ne se rencontre que pour certains remplissages électroniques dans les séries de transition (Legrand 1984 a). Elle est principalement due à l'anisotropie des orbitales d, explicitement prise en compte dans le modèle de liaisons fortes utilisé (Ducastelle 1972).

L'existence du glissement prismatique facile révèle, d'après certains auteurs, une possible dissociation, ou du moins un étalement, dans le plan prismatique. Plusieurs schémas de dissociation ont été proposés; celui de Tyson (1967), d'après un modèle de sphères dures, est

$$\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle \rightarrow \frac{1}{18}\langle 24\bar{6}3 \rangle + \frac{1}{18}\langle 42\bar{6}3 \rangle, \quad (2)$$

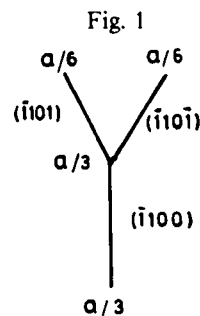
et celui de Régnier et Dupouy (1970), créant une faute voisine de la structure cubique centrée est

$$\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle \rightarrow \frac{1}{9}\langle 11\bar{2}0 \rangle + \frac{2}{9}\langle 11\bar{2}0 \rangle. \quad (3)$$

Pour expliquer les caractéristiques du glissement prismatique dans le titane (dislocations vis contrôlant la déformation et restant rectilignes durant leur mouvement, forte activation de la limite élastique à basse température), Naka et Lasalmonie (1984) ont proposé une configuration non plane, donc sessile,

$$a \rightarrow a/3 + a/6 + a/6 + a/3 \quad (4)$$

(fig. 1). Ce schéma est assez proche de celui de Sob, Kratochvil et Kroupa (1975). Cette étude a également pour but de déterminer la validité de ces modèles et en particulier de préciser si la structure du coeur des dislocations vis $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ dans le cas du glissement prismatique facile est plane ou non plane.



Modèle de dissociation en quatre partielles (Naka et Lasalmonie 1984). Cette configuration est sessile.

Tout d'abord nous rappellerons brièvement le modèle de liaisons fortes employé (§ 2). Nous présenterons ensuite la méthode de relaxation et les conditions de la simulation (§ 3). Les résultats sur la configuration de coeur obtenue sont décrits § 4 et discutés § 5.

§ 2. RAPPELS DU MODELE DE LIAISONS FORTES UTILISE DANS LA SIMULATION

Le modèle de liaisons fortes est bien approprié pour décrire les électrons d qui ont une influence prépondérante sur les propriétés de cohésion des métaux de transition (Friedel 1969). L'énergie de cohésion d'un atome i se met sous la forme

$$E_i^{\text{coh}} = E_i^{\text{d}} + E_i^{\text{rep}}. \quad (5)$$

E_i^{d} est le terme de bande d, qui s'écrit

$$E_i^{\text{d}} = \int^{E_F} E n_i(E) dE \quad (6)$$

où E_F est le niveau de Fermi, $n_i(E)$ la densité électronique locale (DEL) et où le niveau d'énergie atomique d a été pris comme origine des énergies.

La DEL est déduite par la méthode de récursion (Kelly 1980), à partir de l'Hamiltonien de liaisons fortes,

$$H = \sum_{\lambda, \mu}^{i \neq j} |i\lambda\rangle \beta_{ij}^{\lambda\mu} \langle j\mu|, \quad (7)$$

i et j étant les indices de site, $\lambda, \mu = 1, \dots, 5$, les indices d'orbitales et $\beta_{ij}^{\lambda\mu}$ étant les intégrales de saut, qui peuvent s'exprimer simplement à l'aide de trois paramètres $dd\sigma$, $dd\pi$, $dd\delta$ (Slater et Koster 1954). Nous adopterons une loi phénoménologique de décroissance de ces intégrales, très souvent employée,

$$\beta(R) = \beta(R_0) \exp[-q(R - R_0)] \quad (8)$$

où R_0 est la distance interatomique et qR_0 étant généralement compris dans un intervalle $3 \leq qR_0 \leq 5$ (Ducastelle 1970).

Le terme répulsif, E_i^{rep} , prend en compte l'augmentation de l'énergie cinétique des électrons lorsqu'on rapproche les atomes. Il est pris sous la forme d'un potentiel de Born-Mayer (Ducastelle 1970),

$$E_i^{\text{rep}} = \sum_j A \exp(-pR_{ij}). \quad (9)$$

A , p , q sont des paramètres à ajuster sur des valeurs expérimentales. Dans l'article précédent (Legrand 1984 a), nous avons étudié l'évolution des énergies de faute le long d'une série de transition, ainsi que l'influence du rayon de coupure et du paramètre de décroissance des intégrales de saut sur ces propriétés. Dans le cas présent nous avons déterminé des paramètres pour un métal particulier: le titane (tableau 1). Le choix de celui-ci, parmi tous les métaux h.c. à glissement prismatique facile, vient de la possibilité de rapprocher notre étude des observations en microscopie électronique à haute résolution sur les dislocations coin $\frac{1}{2} \langle 11\bar{2}0 \rangle$ (de Crecy, Bourret, Naka et Lasalmonie 1983).

Les intégrales de recouvrement sont limitées aux premiers voisins dans la structure parfaite. Du fait des déplacements dus à la dislocation, le rayon de coupure est pris à $1,27 R_0$. Ceci a été choisi pour obtenir, même près de la dislocation, des densités d'états dont le moment d'ordre deux reste proche de celui obtenu en volume, en ne considérant

Tableau 1. Valeur des paramètres (A, p, q) du titane pour $c/a = 1,587$ et $c/a = 1,64$.

c/a	A (Ryd)	$p(R_0^{-1})$	$q(R_0^{-1})$
1,587	356	10,83	3,01
1,64	351	10,67	2,97

que les intégrales entre premiers voisins. Ce critère concernant le rayon de coupure a déjà été employé par Turchi, Tréglia et Ducastelle (1983) pour comparer la stabilité relative de différentes phases n'ayant pas la même compacité.

Le nombre de coefficients de récursion pris en compte dans la simulation doit être suffisamment élevé pour reproduire correctement les énergies de faute basale et prismatique sans toutefois conduire à des temps de calcul prohibitifs. Trois couples de coefficients de récursion sont nécessaires et suffisants pour obtenir à 10% près les énergies de faute. Les DEL seront donc reconstruites durant la simulation avec trois couples de récursion.

Dans ces conditions de calcul, les valeurs des énergies de faute γ sont les suivantes (Legrand 1984 c):

$$\gamma_{\text{bas}} = 370 \text{ erg cm}^{-2}, \quad \gamma_{\text{prism}} = 140 \text{ erg cm}^{-2}, \quad R = \frac{\gamma_{\text{bas}}}{\gamma_{\text{prism}}} \times \frac{C_{66}}{C_{44}} = 2,5.$$

où C_{44} et C_{66} sont les constantes élastiques appropriées.

Rappelons que les valeurs données précédemment (Legrand 1984 a) étaient obtenues en tenant compte des intégrales de saut entre seconds voisins,

$$\gamma_{\text{bas}} = 290 \text{ erg cm}^{-2}, \quad \gamma_{\text{prism}} = 110 \text{ erg cm}^{-2}, \quad R = 2,5$$

§ 3. MÉTHODE DE RELAXATION ET CONDITIONS DE SIMULATION

Le cristallite est formé d'un motif de deux plans perpendiculaires à la ligne de dislocation, comprenant cent atomes et rendu infini dans la direction $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ par des règles de périodicité. Les surfaces bordant le cristallite perpendiculairement aux directions $\langle \bar{1}100 \rangle$ et $\langle 0001 \rangle$ sont laissées libres. En effet, étant donné la taille restreinte du cristallite, la relaxation peut se trouver bloquée si les conditions aux limites restent fixes durant la simulation. Nous avons vérifié que les forces images de la surface sur la dislocation ne modifient pas de manière substantielle la relaxation. Pour cela, nous avons introduit la dislocation plus près d'une des surfaces sans observer de modification sur la structure du cœur.

Le procédé de relaxation adopté est l'intégration des équations du mouvement suivant l'algorithme de la différence centrale (Verlet 1967). La recherche de la structure d'énergie potentielle minimale (à 0 K) s'effectue en utilisant une procédure de 'trempe' (Hansen et McDonald 1976). Celle-ci consiste à annuler la vitesse \mathbf{V}_i d'un atome i , lorsque le produit $\mathbf{F}_i \cdot \mathbf{V}_i$ est négatif, \mathbf{F}_i étant la force s'exerçant sur l'atome i . La difficulté majeure de cet algorithme provient du calcul de la force sur chaque atome et à chaque pas d'itération sur le temps dans le cadre du modèle de liaisons fortes. Les approximations faites pour ce calcul sont traitées en annexe.

Pour séparer les relaxations de surface et celles dues à la dislocation, nous avons effectué dans un premier temps la relaxation du cristallite parfait sans dislocation.

Alors que le rapport des paramètres cristallins était fixé à sa valeur expérimentale $c/a = 1,587$ (les paramètres A, p, q étant eux-même fonction de c/a), on observe après relaxation une dilatation homogène suivant $\langle 0001 \rangle$ et une contraction homogène

suivant $\langle \bar{1}100 \rangle$. Cette évolution qui maintient le volume constant conduit à une augmentation du rapport c/a d'environ 3,3%. La valeur de ce rapport, à la fin de la relaxation, devient en effet égale à 1,64, valeur très voisine de celle assurant la compacité idéale $((8/3)^{1/2})$. Turchi et Duscatelle (1983) avaient déjà remarqué en reconstituant la densité d'états avec neuf couples de coefficients de récursion qu'une diminution du rapport c/a est énergétiquement favorable pour les remplissages électroniques voisins de 6 et 7 (Tc, Re, Ru et Os), mais ne l'est pas pour les remplissages proches de 2,5 (Ti, Zr, Hf). Ce désaccord avec les valeurs expérimentales n'est pas expliqué, bien qu'il soit possible d'évoquer un effet d'hybridation s-d qui peut ne pas être négligeable pour de faibles remplissages de la bande d.

Une nouvelle simulation du cristallite parfait, effectuée avec le rapport $c/a = 1,64$ et des paramètres (A , p , q) recalculés pour cette valeur (tableau 1), n'a fait apparaître aucune modification des paramètres cristallins. Le fait le plus notable est la relaxation des surfaces et des coins (fig. 2).

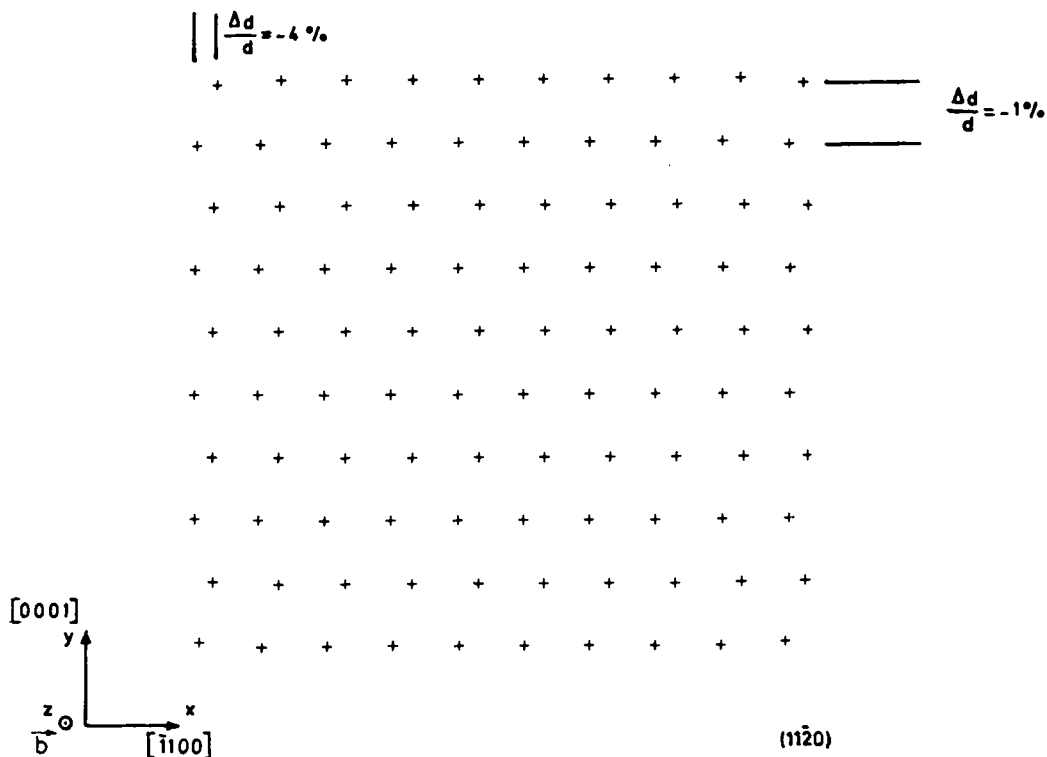
On observe une faible contraction de la première couche de la surface dense (0001),

$$\Delta d/d = -1\%$$

et une contraction plus importante du premier plan de la surface ($\bar{1}100$),

$$\Delta d/d = -4\%,$$

Fig. 2



Un cristallite parfait relaxé. La contraction de la première couche de surface est d'autant plus importante que celle-ci est moins dense.

avec une légère expansion de la deuxième couche pour la surface ($\bar{1}100$), de l'ordre de 0,5%. Les contractions des couches superficielles sont typiques du modèle de liaisons fortes (Allan et Lannoo 1973, 1976, Desjonquères 1979, Gupta 1981, Masuda 1982, Treglia 1983), et des relaxations multicouches sont observées sur de nombreuses surfaces (Sokolov, Jona et Marcus 1984, Gauthier, Baudoin, Joly, Gaubert et Rundgren 1984).

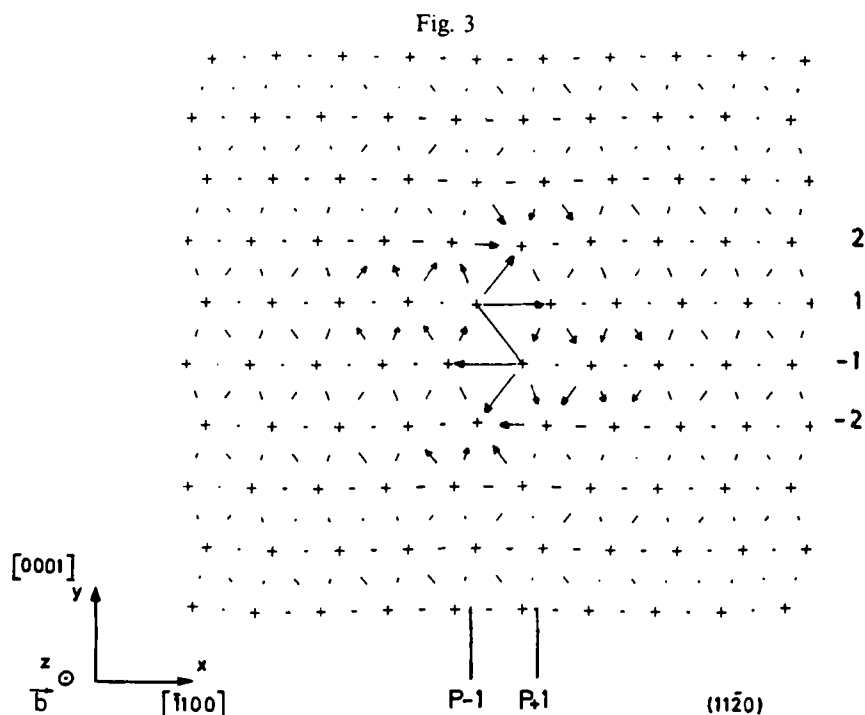
Des relaxations similaires sont obtenues en utilisant l'approximation gaussienne pour la densité d'états et en introduisant un potentiel de surface calculé de manière autocohérente pour obtenir la neutralité électrique sur chaque atome (Allan et Lannoo, 1976). Ce résultat nous permet de nous affranchir de manière raisonnable du traitement autocohérent dans les calculs concernant le coeur de la dislocation.

Différentes configurations initiales de la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ ont été introduites par le champ de déplacement élastique de la solution isotrope dans le cristallite ainsi relaxé. Les résultats obtenus sont décrits dans le paragraphe suivant.

§ 4. CONFIGURATION DE COEUR DES DISLOCATIONS VIS $\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ DANS LE TITANE

La surface γ sur le plan prismatique (Legrand 1984 a) suggère la possibilité d'un étalement continu du coeur des dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ sur le plan prismatique. Pour étudier l'existence et la stabilité d'un tel étalement nous avons introduit initialement des configurations formées de 200 dislocations vis partielles de vecteur de Burgers $\mathbf{b}/200$, placées régulièrement dans le plan prismatique sur une largeur pouvant varier de c à $4c$.

La configuration relaxée de moindre énergie est représentée fig. 3. à l'aide de la notation des déplacements relatifs (Vitek, Perrin et Bowen 1970). Les atomes sont



Configuration relaxée d'une dislocation vis étalée dans le plan prismatique. Les positions atomiques sont projetées sur le plan $(11\bar{2}0)$.

figurés par des croix; la composante parallèle à $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ (direction du vecteur de Burgers, orthogonale au plan de représentation) des déplacements relatifs des premiers voisins d'un atome est représentée par une flèche entre les atomes correspondants. La longueur de la flèche est proportionnelle au déplacement relatif ramené entre $-\mathbf{b}/2$ et $\mathbf{b}/2$, et normalisée de manière à ce qu'une flèche joignant deux atomes représente un déplacement relatif de $|\mathbf{b}/2|$. Le sens de la flèche indique la direction du déplacement.

La configuration la plus stable est obtenue à partir d'un étalement initial de largeur $2c$. Des étalements prismatiques initiaux plus grands (respectivement plus petits) ont tendance à diminuer (respectivement à augmenter) sans toutefois atteindre systématiquement l'état stable montré fig. 3. Ils sont piégés dans des états métastables d'énergie toujours plus élevée que celle de l'état stable.

Pour tester la validité des modèles de Régnier et Dupouy (1970) et Naka et Lasalmonie (1984), nous avons également introduit des configurations initiales dissociées suivant les schémas proposés par ces auteurs (fig. 4 (a) et (b)). Dans les deux cas, nous avons obtenu comme état final, la configuration stable montrée fig. 3.

Nous avons ensuite introduit une dislocation vis non dissociée. La configuration relaxée obtenue (fig. 5) présente un léger étalement tant sur le plan de base que sur le plan prismatique. Le point essentiel est que l'énergie de cette configuration est plus élevée que celle de la configuration étalée sur le plan prismatique (tableau 2). Nous avons également introduit la dislocation sous une forme dissociée dans le plan basal d'après le schéma (1). La largeur de dissociation ($\sqrt{3}a$) est fixée en minimisant l'énergie de la solution élastique. Là encore, le point essentiel est que la configuration relaxée a une énergie nettement supérieure à celle de la configuration non dissociée et a fortiori à celle de l'étalement prismatique (tableau 2).

La configuration stable de la fig. 3 est caractérisée par un étalement principal sur le plan prismatique et des étalements secondaires asymétriques sur les plans de base. Pour mieux définir ces étalements nous utiliserons le concept de densité de vecteur de Burgers, plus adapté dans le cas des configurations planaires, mais néanmoins utile pour décrire tant l'étalement principal que les étalements secondaires. La densité de vecteur de Burgers entre deux plans est donnée par la dérivée du déplacement relatif u entre ces deux plans par rapport à une coordonnée perpendiculaire à la ligne de dislocation (x entre les plans de base et y entre les plans prismatiques). Nous ne considérerons que les déplacements parallèles à b , les déplacements perpendiculaires étant beaucoup plus petits. Nous définissons $\rho_{B,-1}(x)$, $\rho_{B,0}(x)$, $\rho_{B,+1}(x)$ et $\rho_P(y)$ entre les plans $-2, -1; -1, +1; 1, 2$ et P_{-1}, P_{+1} (fig. 3).

Par définition, on a les relations suivantes:

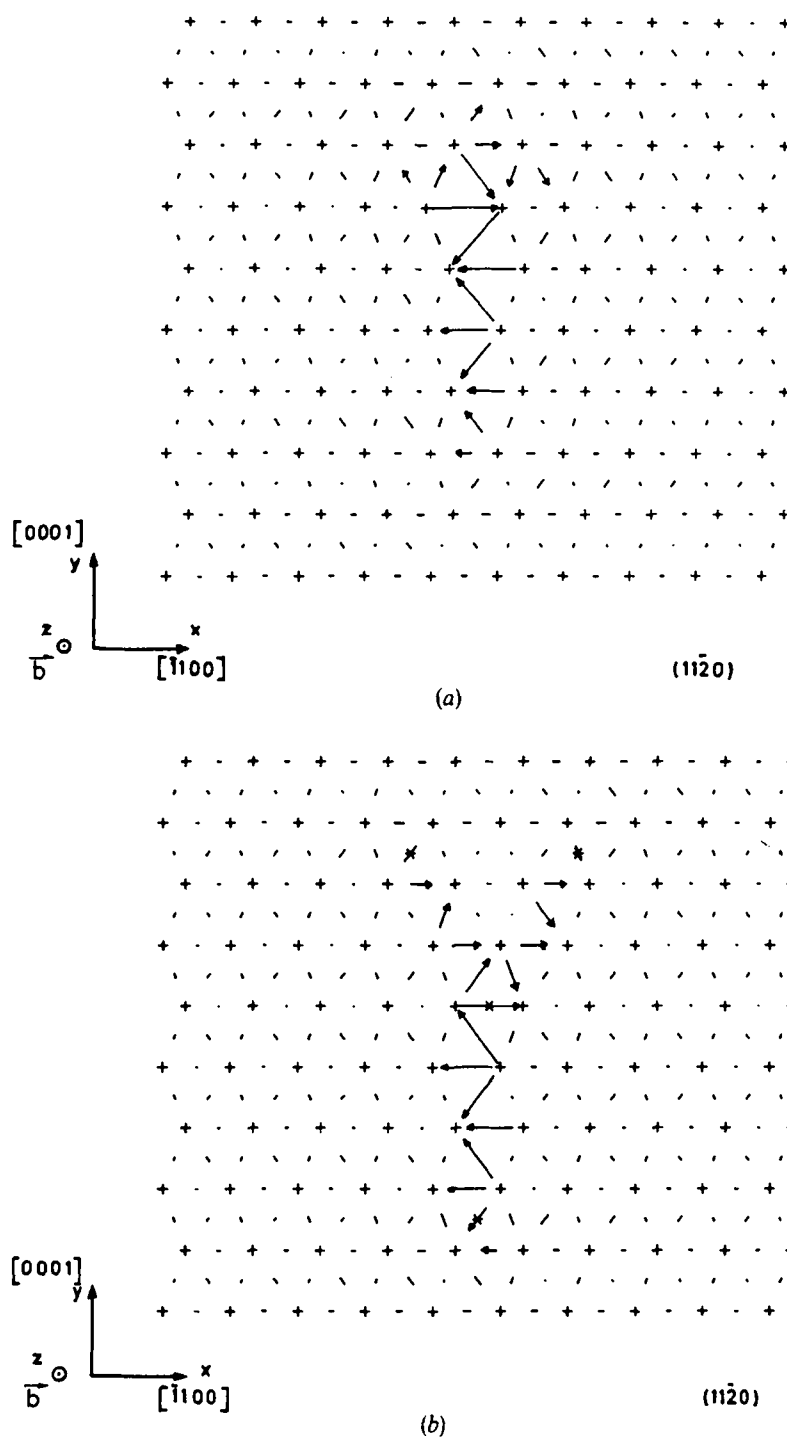
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{B,-1}(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{B,0}(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_{B,+1}(x) dx = 0$$

et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho_P(y) dy = b$$

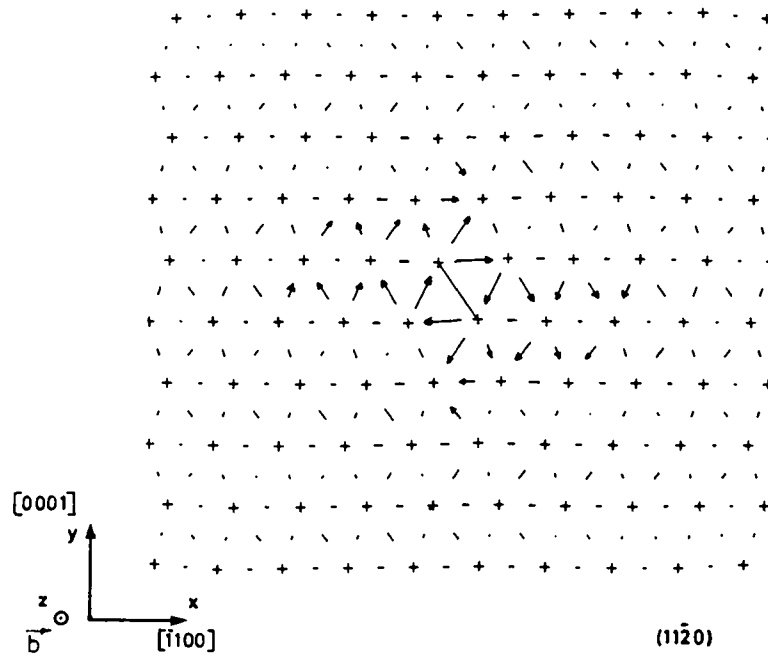
Nous avons tracé fig. 6 la densité de vecteur de Burgers concernant l'étalement principale sur le plan prismatique, $\rho_P(y)$. Celui-ci est nettement plus large que celui de la solution élastique non dissociée. La largeur obtenue, environ 9 \AA , est en bon accord avec celle observée en microscopie électronique à haute résolution pour la dislocation coin $\frac{1}{3}\langle 11\bar{2}0 \rangle (1\bar{1}00)$; $l_{\text{coin}} = 12 \text{ \AA}$ (De Crecy *et al.* 1983).

Fig. 4



(a) configurations élastiques obtenues d'après les modèles de (a) Régnier et Dupouy (1970), et (b) Naka et Lasalmonie (1984).

Fig. 5



Configuration d'une dislocation vis non dissociée.

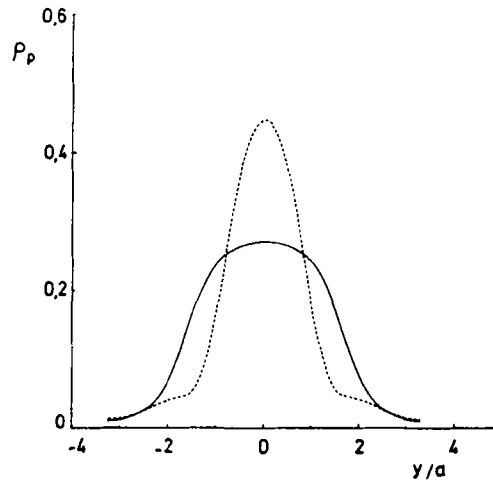
Tableau 2. Energie des configurations prismatique, basale et non dissociée, relaxées et non relaxées (solution élastique isotrope), en eV/b.

Configuration de coeur	Prismatique	Non dissociée	Basale
Non-relaxée	0,96	1,03	1,03
Relaxée	0,60	0,66	0,84

Cette valeur expérimentale conduit à une largeur des dislocations vis égale à $l_{vis} = l_{coin}(1 - \nu) = 8 \text{ \AA}$, où ν est le coefficient de Poisson, si on admet que le changement de la structure du coeur entre dislocations vis et coin ne modifie pas la largeur de l'étalement principal.

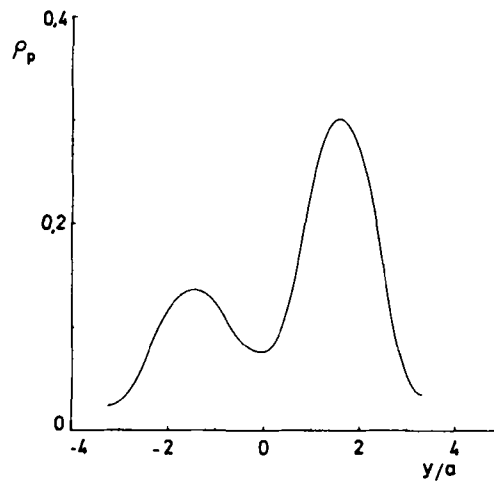
Comme la forme de la surface γ sur le plan prismatique le laissait prévoir (Legrand 1984 a), il n'y a ni faute stable (densité de vecteur de Burgers nulle) ni dislocations partielles bien définies (maximum dans la densité). Cette propriété semble peu dépendre du potentiel (Legrand 1984 b), ce qui explique que Bacon (1984) obtient un étalement prismatique très comparable pour les dislocations $coin \frac{1}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle (1\bar{1}00)$ en utilisant un potentiel empirique de Lennard-Jones. Rappelons que, pour la dislocation vis $\frac{1}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle$, cet auteur trouve une dissociation sur le plan de base. Nous montrons (fig. 7) la densité obtenue d'après le modèle de Régnier et Dupouy (1970), qui conduit après relaxation à la densité montrée fig. 6. (ceci confirme l'instabilité de la dissociation (3)).

Fig. 6



Densité de vecteur de Burgers $\rho_p(y)$ le long du plan prismatique pour la dislocation relaxée (—) et pour la solution élastique non relaxée et non dissociées (---).

Fig. 7



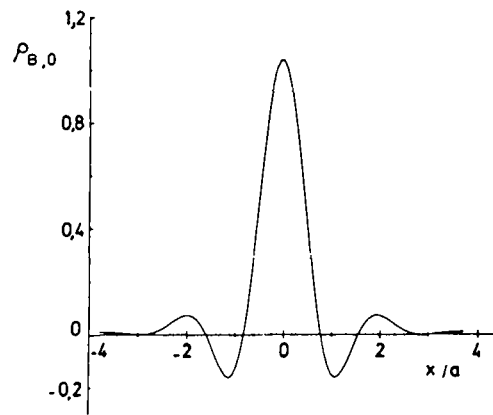
Densité de vecteur de Burgers $\rho_p(y)$ le long du plan prismatique pour la configuration élastique non relaxée du modèle de Régnier et Dupouy (1970).

Nous reportons fig. 8 (a), (b) et (c) les densités $\rho_{B,0}(x)$, $\rho_{B,-1}(x)$ et $\rho_{B,+1}(x)$. Alors que $\rho_{B,0}(x)$ est symétrique par rapport au plan Oy , $\rho_{B,+1}$ et $\rho_{B,-1}$ ne le sont pas. On note cependant que $\rho_{B,+1}$ et $\rho_{B,-1}$ sont symétriques l'une de l'autre. Ces densités permettent de montrer que les étalements situés en dehors du plan prismatique sont loin d'être négligeables. Un ordre de grandeur peut être obtenu en intégrant les densités en dehors de l'intersection avec le plan prismatique. Ainsi

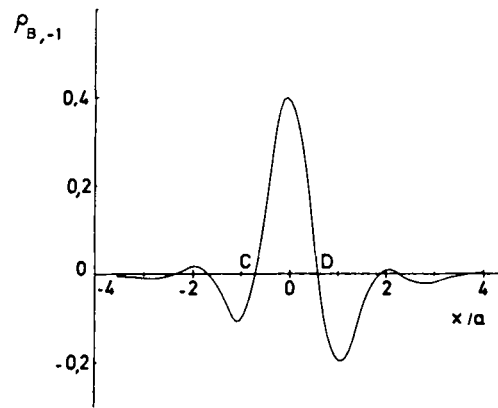
$$\int_{-\infty}^A \rho_{B,+1}(x) dx = \int_D^{+\infty} \rho_{B,-1}(x) dx \simeq b/5,$$

$$\int_B^{+\infty} \rho_{B,+1}(x) dx = \int_{-\infty}^C \rho_{B,-1}(x) dx \simeq b/20.$$

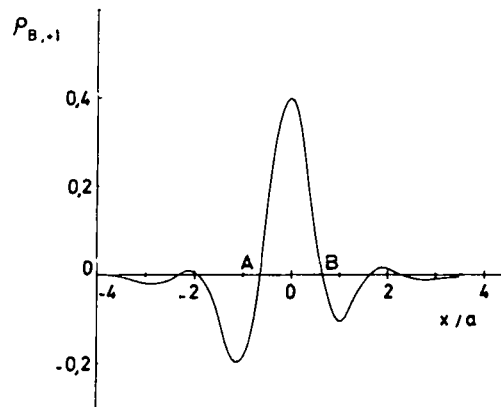
Fig. 8



(a)



(b)



(c)

Densité de vecteur de Burgers (a) $\rho_{B,0}(x)$, (b) $\rho_{B,-1}(x)$ et (c) $\rho_{B,+1}(x)$ le long des plans de base pour la dislocation relaxée de la fig. 3.

§ 5. DISCUSSION

Rappelons que les simulations faites antérieurement sur la structure du coeur des dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle$, avec des potentiels de paires (Basinski *et al.* 1970, 1971, Bacon et Martin 1981 a et b, Bacon et Liang 1981), avaient toujours conduit à une dissociation sur le plan basal. Notre travail, mené dans le cadre du modèle de liaisons fortes adapté aux métaux de transition, nous permet d'obtenir un coeur étendu principalement sur le plan prismatique pour le titane. Ce résultat doit pouvoir s'étendre à tous les métaux où R est supérieur à 1, cas que l'on ne rencontre que dans certains métaux de transition et où le rôle de l'anisotropie des orbitales d est prépondérant. Cette raison explique pourquoi les potentiels de paires ne permettent pas de simuler ce cas.

L'étalement principal sur le plan prismatique rend bien compte de l'apparition du glissement prismatique comme glissement principal. Contrairement aux modèles de dissociation sur le plan prismatique proposés jusqu'à présent, il n'apparaît pas de faute stable sur ce plan, comme le laissait prévoir du reste la forme des surfaces γ .

Les étalements secondaires sur les plans de base ont des conséquences importantes sur les propriétés des dislocations vis dans le titane. Bien que le modèle de dissociation non planaire de Naka et Lasalmonie (1984) soit instable, les conséquences citées par ces auteurs demeurent valables et ont été obtenues expérimentalement (Naka 1983):

- (a) faible mobilité des dislocations vis
- (b) non respect de la loi de Schmid
- (c) forte dépendance, dans le domaine des basses températures, de la limite élastique envers la température.

Bien qu'une simulation sous contrainte de cisaillement (actuellement en cours) soit nécessaire, on peut très vraisemblablement prévoir une forte force de friction pour les dislocations vis et l'analogie avec les métaux de structure cubique centrée est frappante. Ainsi, les métaux h.c. peuvent se classer en deux grandes catégories:

- (1) Lorsque $R < 1$, le coeur des dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 11\bar{2}0 \rangle$ est étendu (dissocié) de manière planaire sur le plan basal. Le glissement basal est le glissement primaire et a de fortes ressemblances avec le glissement (111) des c.f.c. Ce cas est celui de tous les métaux divalents et du cobalt.
- (2) Lorsque $R > 1$, le coeur des dislocations vis est constitué d'un étalement principal sur le plan prismatique, et d'étalements secondaires sur les plans de base. Le caractère non planaire de cette configuration est analogue à celui rencontré pour les dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ dans les métaux c.c. Ainsi le comportement de cette catégorie de métaux h.c. (Ti, Zr, Hf, Ru, Os, et probablement les métaux h.c. des terres rares (Le Hazif et Legrand 1982) est proche de celui des métaux c.c.

Citons enfin le cas intermédiaire où les énergies de faute sur les plans basal et prismatique sont voisines: Tc et Re (Legrand 1984 a), et où le glissement a lieu aussi facilement sur les deux plans.

REMERCIEMENTS

Que F. Ducastelle, P. Turchi, et G. Treglia trouvent ici l'expression de mon amicale reconnaissance pour leur aide et leurs conseils.

ANNEXE

Calcul de la force dans le cadre du modèle de liaisons fortes

La nécessité de reconstruire les DEL à l'aide des trois premiers couples de coefficients de récursion ne permet pas le calcul d'une expression analytique de la force sur chaque atome. Nous avons donc estimé cette force de manière numérique, en calculant les variations d'énergie totale induites par des petits déplacements $\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$, ($\simeq 10^{-6} R_0$) de chaque atome. Deux approximations ont été essentiellement utilisées pour réduire un temps de calcul, qui se révélait a priori prohibitif (Boswarva et Esterling 1982).

(1) Pour éviter la reconstruction des DEL, puis l'intégration pour obtenir l'énergie, nous avons utilisé la méthode de linéarisation de la fonction de Green (MLG) développée par Turchi et Ducastelle (1984).

Considérons la variation de la DEL sur un site i engendré par un petit déplacement. Avant déplacement,

$$n(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} (G_{11}(\varepsilon + i\eta)) \quad (\text{A } 1)$$

où l'indice 1 est associé au premier site de la chaîne de récursion (on fait abstraction de l'indice d'orbitales pour simplifier les notations).

Après déplacement,

$$n^*(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} (G_{11}^*(\varepsilon + i\eta)) \quad (\text{A } 2)$$

où $G^*(z)$ est définie sur la même base de récursion $|n\rangle$ par des coefficients (a_i^*, b_i^*) , on obtient alors:

$$\begin{aligned} \delta n(\varepsilon) &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} [G_{11}^*(\varepsilon + i\eta) - G_{11}(\varepsilon + i\eta)] \\ &= -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} (\delta G_{11}(\varepsilon + i\eta)). \end{aligned} \quad (\text{A } 3)$$

Associons aux variations $\delta a_i = a_i^* - a_i$ et $\delta b_i = b_i^* - b_i$ un potentiel δV défini dans la base de récursion par

$$\left. \begin{aligned} \{n|\delta V|n\rangle &= \delta a_n, \\ \{n|\delta V|n+1\rangle &= \delta b_n. \end{aligned} \right\} \quad (\text{A } 4)$$

L'équation de Dyson permet de relier G^* à G de la manière suivante:

$$G^* = G + G\delta VG + G\delta VG\delta VG + \dots$$

Si δV peut être traité en perturbation, un développement de G^* au premier ordre donne $\delta G = G\delta VG$, ou encore

$$\delta G_{11} = \{1|G\delta VG|1\rangle \quad (\text{A } 5)$$

Du fait de (A 4), on peut écrire

$$\delta G_{11} = \sum_n G_{1n}^2 \delta a_n + 2 \sum_n G_{1n} G_{1n+1} \delta b_n \quad (\text{A } 6)$$

On obtient alors, pour les différences d'énergie, l'expression suivante:

$$\delta E(\varepsilon) = \sum_n \phi_n(\varepsilon) \delta a_n + 2 \sum_n \psi_n(\varepsilon) \delta b_n \quad (\text{A } 7)$$

avec

$$\phi_n(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} \left[\int^\varepsilon dt (t - \varepsilon) G_{1n}^2(t + i\eta) \right] \quad (\text{A } 8)$$

$$\psi_n(\varepsilon) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \rightarrow 0} \text{Im} \left[\int^\varepsilon dt (t - \varepsilon) G_{1n}(t + i\eta) G_{1n+1}(t + i\eta) \right] \quad (\text{A } 9)$$

Les $G_{1n}(z)$ se calculent par la relation

$$G_{1n}(z) = b_1 b_2 \dots b_{n-1} G_{11}^>(z) G_{22}^>(z) \dots G_{nn}^>(z) \quad (\text{A } 10)$$

avec

$$G_{nn}^>(z) = \frac{1}{z - a_n - b_n^2 \over z - a_{n+1} \dots} \quad (\text{A } 11)$$

Pratiquement, les fonctions (ϕ_n, ψ_n) sont calculées une fois pour toute au début du calcul pour le cristal parfait. Ceci conduit donc à remplacer la reconstruction de la DEL et l'intégration de l'énergie pour chaque petit déplacement par une simple multiplication (cette méthode fait partie du travail de thèse de Turchi (1984).

(2) La deuxième approximation a été utilisée pour résoudre le problème suivant. L'interaction atomique ne se mettant pas sous forme d'interaction de paires, il faudrait en toute rigueur calculer pour chaque petit déplacement de chaque atome i et à chaque pas les variations d'énergie sur le site i déplacé, mais aussi sur tous les atomes de l'amas nécessaire à l'obtention des trois couples de coefficients de récursion. Ceci conduirait à des temps de calcul d'environ 25 heures sur un ordinateur tel que le NAS 9080.

Cette difficulté vient du fait qu'il n'existe pas un facteur constant entre la variation d'énergie sur le site i et la variation de l'énergie totale, comme c'est le cas pour un potentiel de paires, où on a la relation

$$\delta E^i = \frac{1}{2} \delta E^{\text{totale}} \quad (\text{A } 12)$$

Nous pensons cependant que les écarts à cette relation sont principalement donnés par des arguments de second moment sur le site i et sur les sites premiers voisins, k . Ainsi nous avons appliqué l'approximation suivante:

$$\delta E^{\text{tot}} = (\phi_1 \delta a_1^i + 2\psi_1 \delta b_1^i) + \sum_k (\phi_1 \delta a_1^k + 2\psi_1 \delta b_1^k) + 2 \sum_{p=2}^3 (\phi_p \delta a_p^i + 2\psi_p \delta b_p^i) \quad (\text{A } 13)$$

Le cas le plus critique pour cette approximation est certainement celui des surfaces. Toutefois, la relaxation satisfaisante observée sur celles-ci est une vérification a posteriori de cette approximation. En effet, si le calcul de la force était trop imprécis, le système n'arriverait pas à diminuer son énergie potentielle.

REFERENCES

- ALLAN, G. et LANNON, M., 1973, *Surf. Sci.*, **40**, 375; 1976, *Phys. Stat. Sol.*, (b), **74**, 409.
- BACON, D. J., 1984, *Symposium on the Structure and Properties of Crystal Defects*, *Liblice*, rédaction par V. Paidar et L. Lejček (Amsterdam: Elsevier) part B, p. 102.
- BACON, D. J., et LIANG, M. H., 1981, *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.
- BAZINSKI, Z. S., DUESBERY, M. S., et TAYLOR, R., 1970, *Phil. Mag.*, **21**, 1201; 1971, *Can. J. Phys.*, **49**, 216.
- BENNETT, C. H., 1975, *Diffusion in Solids, Recent Developments*, rédaction par A. S. Nowick et J. J. Burton (New York: Academic), p. 73.
- BOSWARVA, I. M., et ESTERLING, D. M., 1982, *J. Phys. C*, **15**, L 729.
- DE CRECY, A., BOURET, A., NAKA, S., et LASALMONIE, A., 1983, *Phil. Mag.*, **A**, **47**, 245.
- DESJONQUERES, M. C., 1979, *J. Phys.*, *Paris*, **40**, L249.
- DUCASTELLE, F., 1970, *J. Phys. Paris*, **31**, 1055; 1972, thèse, Orsay.
- FRIEDEL, J., 1969, *The Physics of Metals*, rédaction par J. M. Ziman (Cambridge University Press), p. 340.
- GAUTHIER, Y., BAUDOING, R., JOLY, Y., GAUBERT, C., et RUNDGREN, J., 1984, *J. Phys. C.*, **17**, 4547.
- GUPTA, R. P., 1981, *Phys. Rev. B*, **23**, 6265.
- KELLY, M. J., 1980, *Solid St. Phys.*, **35**, 295.
- LEGRAND, B., 1984 a, *Phil. Mag. B*, **49**, 171; 1984 b, thèse, Paris VI; 1984 c, *Dislocations: Structure de Coeur et Propriétés Physiques*, rédaction par P. Veyssi re, L. P. Kubin et J. Castaing (Paris: Edition du CNRS), p. 73.
- LEGRAND, B., et LE HAZIF, R., 1982, *Acta metall.*, **30**, 917.
- LE HAZIF, R., et LEGRAND, B., 1982, *Scripta metall*, **16**, 1065.
- MASUDA, K., 1982, *Phys. Rev. B*, **26**, 5968.
- NAKA, S., 1983, th se, Orsay.
- NAKA, S., et LASALMONIE, A., 1984, *Symposium on the Structure and Properties of Crystal Defects*, *Liblice*, rédaction par V. Paidar et L. Lej ek (Amsterdam: Elsevier), part A, p. 31.
- PARTRIDGE, P., 1967, *Metall. Rev.*, No. 118, 169.
- POIRIER, J. P., et LE HAZIF R., 1976, *J. Microsc. Spectrosc. Electron.*, **1**, 595.
- REGNIER, P., DUPOUY, J. M., 1970, *Phys. Stat. Sol.*, **39**, 79.
- SLATER, J. C., et KOSTER, G., 1954, *Phys. Rev.*, **94**, 1498.
- SOB, M., KRATOCHVIL, J., et KROUPA, F., 1975, *Czech J. Phys. B.*, **25**, 872.
- SOKOLOV, J., JONA, F., et MARCUS, P. M., 1984, *Sol. St. Commun.*, **49**, 307.
- TREGLIA, G., 1983, th se Orsay.
- TURCHI, P., 1984, th se, Paris VI.
- TURCHI, P., et DUCASTELLE, F., 1984, *The Recursion Method and its Application*, redaction par D. G. Pettifor et D. Weaire, *Solid State Science*, Vol. 58 (Heidelberg: Springer-Verlag), p. 104.
- TURCHI, P., TREGLIA, G., et DUCASTELLE, F., 1983, *J. Phys. F*, **13**, 2543.
- TYSON, W., 1967, *Acta metall.*, **15**, 574.
- VERLET, L., 1967, *Phys. Rev.*, **159**, 98.
- VITEK, V., PERRIN, R. C., et BOWEN, D. K., 1970, *Phil. Mag.*, **21**, 1049.