

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**

**MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR**

**ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE CONSTANTINE 1**

**FACULTE DES SCIENCES EXACTES**

**DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**

**N° d'ordre :**

**Série :**

**MEMOIRE**

**PRESENTE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE MAGISTER**

**EN PHYSIQUE**

**Spécialité: SCIENCES DES MATERIAUX**

**Option: METALLURGIE**

**Par: GUERABLI YUCEF**

**Thème**

**INTERACTION ELASTIQUE DISLOCATIONS – JOINTS  
INTERPHASE DANS DES BICRISTAUX ELASTIQUEMENT  
ANISOTROPES DE STRUCTURE HEXAGONALE**

**SOUTENU LE : 11 / 12 / 2014**

Devant le jury:

Président: N. ROUAG                      Professeur                      Université Constantine 1

Rapporteur: O. KHALFALLAH                      Professeur                      Université Constantine 1

Examineur: R. BENSAHA                      Professeur                      Université Constantine 1

## *Remerciements*

Je remercie en premier lieu dieu le tout puissant pour m'avoir accordé l'énergie et la volonté de terminer ce travail.

Le travail qui fait l'objet de ce mémoire a été réalisé au laboratoire de microstructure et défauts du département de physique de l'université Constantine1, sous la direction de monsieur **Khalfallah Omar**, professeur à l'université de Constantine1.

Je tiens à le remercier pour le sujet de recherche qu'il m'a proposé, et lui exprimer ma profonde reconnaissance pour tout son aide scientifique, sa disponibilité, ses conseils, sa gentillesse et surtout l'intérêt qu'il a porté à mon travail et l'attention toute particulière accordée à la lecture et la correction de ce mémoire.

Je remercie également madame **N. Rouag**. Professeur à l'université de Constantine1, pour avoir accepté de présider le jury de ma soutenance.

Je tiens également à exprimer mes remerciements à monsieur **R. Bensaha**, professeur à l'université de Constantine1, d'avoir accepté d'être membres du jury et d'évaluer mon travail.

Je voudrais remercier tous les membres au laboratoire de microstructure et défauts du département de physique de l'université Constantine 1 pour aide et leur gentillesse.

Un grande merci à G. Hassan, Gh. Noureddine, Idris, Abdelhalim pour leur soutien.

Ces remerciements ne sauraient être sans y associer ma famille et tous mes amis, l'ensemble des étudiants poste-gradués. Merci à tous

A ma mère.

# SOMMAIRE

Introduction générale .....	1
<b>Chapitre 1 : Interaction élastique dislocation-interface</b>	
1.1 Interactions élastiques et champ de contrainte associés à l'interaction dislocation-interface.....	3
1.2 Revue sur les calculs d'interaction élastique dislocation-interface.....	5
1.2.1 En isotropie.....	5
1.2.2 En anisotropie.....	6
1.3 Influence de l'anisotropie élastique.....	7
1.4 Constantes élastiques.....	8
1.5 Propriétés élastiques et de cœur des dislocations.....	10
1.5.1 Énergie élastique d'une dislocation.....	11
1.5.2 Énergie de cœur.....	11
1.6 Forces appliquées à une dislocation.....	11
<b>Chapitre 2 : Bases de compréhension</b>	
2.1 Cristallographie.....	13
2.1.1 Maille Hexagonale Compacte HCP.....	13
2.1.2 Notation à 4 indices de Miller-Bravais.....	15
2.1.3 Symétrie hexagonale.....	16
2.2 Dislocations.....	17
2.2.1 Types de dislocation.....	17
2.2.2 Vecteur de Burgers des dislocations.....	19
2.2.3 Dislocation dans les matériaux de structure hexagonale.....	20
2.2.3 Dislocations intergranulaires intrinsèques et extrinsèques.....	23
2.2.5 Population de dislocation.....	23
2.2.6 Modes de mouvement des dislocations.....	24
2.3 Systèmes de glissement.....	24
2.3.1 Mécanismes de déformation des matériaux.....	24
2.3.2 Systèmes de glissement dans les métaux de structure hexagonal.....	25
2.3.3 Facilité des modes de glissement.....	28
i- Approches de Peierls Nabarro.....	28
ii- Approche de Legrand.....	28
iii- Approche par la dissociation.....	30
a- Dissociation dans le plan basal.....	30
b- Dissociation dans le plan prismatique.....	30
<b>Chapitre 3 : Configurations étudiées</b>	
3.1 Matériaux.....	31
3.2 Interfaces.....	33
3.3 Dislocations.....	34
3.4 Systèmes de glissement.....	35

Chapitre 4 : Energie d'interaction	
4.1 Technique d'étude.....	36
4.2 Méthode de calcul.....	37
Chapitre 5 : Résultats et discussion	
5.1 Effet du module de cisaillement.....	38
5.1.1 Interfaces Zn-X.....	38
5.1.2 Interfaces Be-X .....	45
5.1.3 Interfaces Tl-X.....	51
5.2 Effet de la désorientation .....	57
5.2.1 Système de glissement basal (0001) $[11\bar{2}0]$ .....	57
5.2.2 Système de glissement prismatique I : $(1\bar{1}00)$ $[11\bar{2}0]$ .....	61
5.2.3 Système de glissement prismatique II : $(01\bar{1}0)$ $[2\bar{1}\bar{1}0]$ .....	65
5.2.4 Système de glissement prismatique III : $(10\bar{1}0)$ $[\bar{1}2\bar{1}0]$ .....	69
5.2.5 Système de glissement pyramidal $\pi_1$ : $(\bar{1}011)$ $[1\bar{2}10]$ .....	73
5.2.6 Système de glissement pyramidal $\pi'_1$ : $(\bar{1}011)$ $[11\bar{2}3]$ .....	77
5.2.7 Système de glissement pyramidal $\pi_2$ : $(11\bar{2}2)$ $[\bar{1}\bar{1}23]$ .....	81
5.3 Effet du plan de glissement.....	85
5.4 Effet du caractère des dislocations .....	86
Conclusion.....	87
Références bibliographiques	

*Introduction*  
*Générale*

## Introduction générale

La technologie moderne utilise souvent des matériaux différents qui doivent être assemblés en une seule unité. Cela conduit à l'existence d'interfaces entre les phases constituant l'unité. L'interface devient, alors, un élément important qui influence considérablement les propriétés du matériau. Les interfaces sont souvent en interaction élastique avec les dislocations intragranulaires. La prédiction du comportement global du polycristal est liée à l'interaction élastique et est associée à une information topologique sur la microstructure interne différente selon les matériaux et les forces motrices qui imposent le déplacement d'une dislocation proche d'une l'interface.

Sur la base de la théorie de l'élasticité anisotrope, le déplacement d'une dislocation nécessite au préalable la connaissance de la force effective à laquelle elle est soumise. La relation de **Peach et Koehler** définit la forme générale de la force par unité de longueur exercée par une contrainte sur une dislocation. Parallèlement à la force de Peach et Kohler une dislocation située au voisinage d'une interface subira une force additionnelle, appelée **force image**. La force image est due à la discontinuité des propriétés élastiques au passage de l'interface, elle est modélisée par le champ de contrainte d'une dislocation virtuelle symétrique de la première par rapport à l'interface. Selon le sens et l'intensité de la force image la dislocation est attirée ou repoussée. La force image est liée :

- à la désorientation et au plan du joint.
- aux caractéristiques des dislocations, telles que la direction et le vecteur de Burgers.
- aux modules de cisaillement différents des matériaux constituant le bicristal.
- à la distance de la dislocation au joint interphase.

L'objectif de notre travail est l'étude de la mise en mouvement des dislocations, proches et parallèles à un joint interphase, sous l'effet de la force image et l'influence des paramètres élastiques et cristallographiques des matériaux de structure hexagonale sur cette force.

Le mémoire est structuré en cinq chapitres:

- Le premier chapitre est focalisé sur les effets élastiques (déplacements et contraintes) générés par les dislocations. Des rappels généraux sur les travaux réalisés théoriquement et expérimentalement en élasticité isotrope ou anisotrope dans les

matériaux hexagonaux et le problème fondamental d'une dislocation rectiligne en interaction avec une interface.

- Le deuxième chapitre comprend quelques rappels sur la cristallographie des cristaux de structure hexagonale et de leurs dislocations : vecteur de Burgers, tétraèdre de Thompson, systèmes de glissement.
- Le troisième chapitre est consacré aux configurations étudiées : matériaux, interfaces, vecteurs de Burgers et système de glissement.
- Les techniques d'étude et les méthodes de calculs, sont présentées dans le quatrième chapitre.

Les résultats et leur discussion sont présentés dans le cinquième chapitre qui est consacré au calcul de la force image et à l'influence des paramètres cristallographiques et élastiques sur l'interaction entre dislocation et interfaces interphases.

# *Chapitre 1*

## *Interaction élastique dislocation-interface*

## 1-Interaction élastique dislocation-interface

### 1.1 Interactions élastique et champ de contrainte associés à l'interaction dislocation-interface.

Une dislocation est soumise à des contraintes élastiques à longue distance qui sont celles liées à la contrainte appliquée et à une contrainte d'interaction liée à la présence des autres dislocations. Dans le cas d'un matériau anisotrope il convient de prendre en compte la contrainte liée à la force image développée par le joint considéré dans ce cas comme une interface entre deux milieux différents. Les contraintes à courte distance sont les contraintes de friction du réseau, et la contrainte due au cœur du joint là où se situe la perturbation de la structure, figure 1.1.

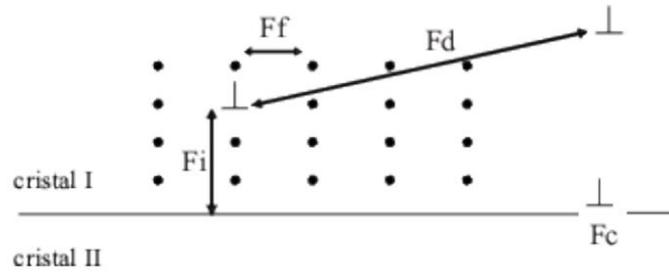
Toute dislocation située loin d'une interface est soumise au champ de contraintes  $\sigma_{ij}^d$  généré par les dislocations environnantes figure 1.2 et figure 1.3, à ces interactions s'ajoute la contrainte appliquée au cristal  $\sigma_{ij}^a$  si elle existe. Une dislocation située près d'un joint de grains subira en plus l'effet des contraintes de compatibilité  $\sigma_{ij}^c$ . L'application d'une contrainte ou d'une déformation macroscopique à un bicristal anisotrope va induire une réponse différente de chacun des deux cristaux, ce qui va se traduire par une incompatibilité de la déformation au niveau de l'interface. Cette incompatibilité de la déformation résultera de l'anisotropie élastique des deux grains dans le cas d'une déformation élastique du bicristal.

La dislocation est ainsi soumise à une force  $\vec{F}$ , qui résulte de ces différents champs de contraintes. L'équation de Peach et Koehler [Hirth 82] nous donne l'expression de cette force par unité de longueur L :

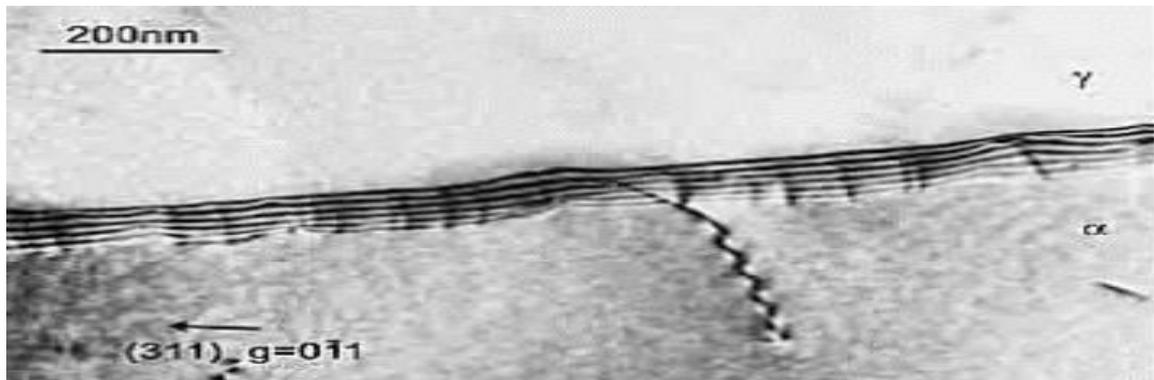
$$\frac{\vec{F}}{L} = [ \vec{b} \cdot (\sigma^d + \sigma^a + \sigma^c) ] \wedge \vec{\zeta} \quad (1.1)$$

Avec  $\vec{b}$  le vecteur de Burgers de la dislocation et  $\vec{\zeta}$  son vecteur ligne unitaire.

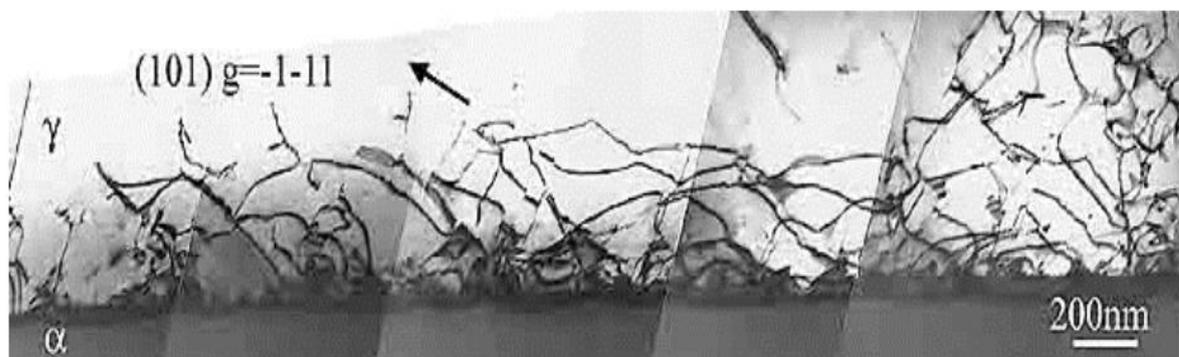
Parallèlement à la force de Peach et Koehler, toute dislocation au voisinage d'une interface subira une force additionnelle  $\vec{F}_i$ , appelée force image.



**Figure1.1:** Représentation schématique des différentes interactions entre dislocations et joint de grains [Priester 06].  $F_d$  est la force résultant de l'interaction à longue distance entre dislocations ;  $F_i$  est un effet d'auto-contrainte représentant la force image développée par le joint ;  $F_f$  représente la force de friction de réseau (interaction à courte distance) ;  $F_c$  est la force due au cœur du joint.



**Figure1.2:** Micrographie en champ clair permettant de visualiser les dislocations interfaciales dans un bicristal de fer  $\alpha/\gamma$  [Tainsne 01]



**Figure1.3 :** Micrographie en champ clair des dislocations de matrice dans l'austénite pour le bicristal de fer  $\alpha/\gamma$  [Tainsne 01]

## 1.2 Revue sur les calculs d'interaction élastique dislocation-interface

### 1.2.1 En isotropie

Les expressions analytiques des déplacements et des contraintes autour d'une dislocation rectiligne dans un milieu isotrope homogène ont été déterminées pour une dislocation vis par Volterra [Volterra 07] et pour une dislocation coin par Burgers [Burgers 39].

Utilisant la théorie classique de l'élasticité isotrope, Read et Shockley d'une part, [Read 50], et Vander, [Vander 49], d'autre part déterminent le champ de contraintes et l'énergie d'un réseau de dislocations à l'interface séparant deux milieux différents. Plus récemment Hokanson et Winchell calculèrent l'énergie des sous-joints de torsion de plan (0001) dans les monocristaux de zinc pour différentes configurations [Hokanson 68].

En 1981, R. Bonnet en appliquant une nouvelle méthode basée sur une analyse en séries de Fourier, a déterminé les champs de déplacement et de contrainte proche d'un joint plan séparant deux phases. Une application numérique a été alors proposée pour un réseau plan de dislocations afin d'examiner l'influence de la période et du module de Young sur l'énergie élastique stockée à l'interface, il est arrivé au résultat suivant : l'énergie élastique emmagasinée dans le cas des dislocations vis est inférieure à celle emmagasinée par les dislocations coin [Bonnet 81].

En admettant que les dislocations interfaciales sont extrinsèques, le champ élastique de telles dislocations à l'interface couche / substrat a été étudié en 1990 par Willis et col, ces auteurs parviennent à donner une solution explicite lorsque les deux milieux ont les mêmes propriétés élastique, et que les dislocations sont purement vis. Pour les dislocations coin, ils donnent une solution en séries de Fourier [Willis 90].

Bonnet et Zenati ont estimé le champ élastique des déplacements d'une dislocation interfaciale rectiligne, placée sur l'une des deux interfaces d'une plaquette mince séparant deux milieux semi-infinis d'un précipité  $Al_2Cu$ , [Bonnet 94], la même année Bonnet, [Bonnet 94], a proposé une solution analytique, pour le calcul du champ des déplacements d'une dislocation interfaciale rectiligne placée à l'interface d'une lame mince biphasée élastiquement isotrope. La même année aussi, R Bonnet a proposé une solution analytique, pour le calcul du champ des déplacements d'une dislocation interfaciale rectiligne placée à l'interface d'une lame mince biphasée, la lame étant formée de deux plaquettes soudées élastiquement isotropes, des applications sur le bicristal  $Al/Al_2Cu$  ont conduit à la

représentation du champ de déplacement suivant deux directions du vecteur de Burgers [Bonnet 94].

En 2000, Bonnet a proposé une solution analytique pour la détermination du champ élastique (déplacement, contrainte et énergie) d'un composite A/B/C déformé par un réseau rectiligne de dislocations de misfit, localisé à l'interface B/C [Bonnet 00].

### 1.2.2 En anisotropie

L'élasticité anisotrope a été introduite dans la théorie des dislocations par Eshelby, Read et Shockley pour calculer les champs des déplacements et des contraintes au voisinage d'une dislocation rectiligne dans un milieu homogène [Eshelby 53].

Le problème d'une dislocation rectiligne située à l'interface entre deux milieux élastiques anisotropes a reçu une attention particulière dans la littérature ([Gemperlova 68], [Tucker 69], [Willis 71], [Braekhus 71]); mais comme souligné par Pande et Chou, [Pande 72], toutes les tentatives aboutissent à des formules compliquées et encombrées ce qui traduit le manque d'applications numériques à ce sujet. Ainsi Nakahara et Willis, [Nakahara 73], montrent que les calculs effectués par Braekhus et Lothe, [Braekhus 71], sont basés sur des conditions aux limites inappropriées et posent des questions sur la validité des résultats obtenus.

En 1973, Barnett et Lothe, [Barnett 73], corrigent l'erreur de Braekhus et Lothe, [Braekhus 71], et montrent que, lorsqu'on utilise un facteur correct de l'énergie de la dislocation, le théorème de force image est vraiment valable.

Plus tard, Dupeux et Bonnet reconsidèrent le problème et le résolvent numériquement. Les auteurs calculent les champs des contraintes et des déplacements autour d'une dislocation placée à l'interface de deux milieux différents. Deux exemples concernant des dislocations aux interfaces Al/Al<sub>2</sub>Cu et laiton  $\alpha$ /laiton  $\beta$  sont traités numériquement [Dupeux 80].

Concernant les réseaux périodiques de dislocations interfaciales et à partir des résultats de Eshelby et Col, [Eshelby 53], Stroh obtiendra le champ des contraintes d'un réseau plan de dislocations rectilignes équidistantes situées dans un milieu anisotrope homogène [Stroh 62]. Plus tard et en 1962, Chou propose des expressions plus détaillées du champ des contraintes pour un réseau de dislocations où la structure du cristal est hexagonale prenant en compte l'avantage de la symétrie du cristal [Chou 62].

Depuis ces travaux, plusieurs auteurs ont abordé le sujet dans le but d'obtenir le champ des contraintes et/ou des déplacements au voisinage des réseaux de dislocations interfaciales Hirth, Barnett et Lothe [Hirth79], Bacon et al [Bacon 78]. Bonnet [Bonnet 79] mettant en évidence deux types particuliers de dislocations interfaciales : les dislocations intrinsèques et les dislocations extrinsèques. Par développement en séries Fourier doubles, les champs élastiques du joint interphase à structure périodique, sont établis formellement par Bonnet. Dans le cas d'un réseau de dislocation intrinsèques identiques et parallèle (cas unidimensionnel), l'auteur détermine analytiquement les champs élastiques (déplacements et contraintes) et l'énergie élastique stockée. Une application est déduite pour le système laiton  $\alpha$  / laiton  $\beta$  avec l'observation d'un effet considérable de l'orientation du joint sur les valeurs des énergies élastiques [Bonnet 81].

L'énergie d'interaction élastique d'une dislocation proche et parallèle à une interface (joint de grain, interface interphase), et la mise en mouvement de la dislocation sous l'effet de force image a été étudiée dans le fer des structure CFC par Khalfallah et al, [Khalfallah 92], le cas des matériaux de structure hexagonale a été abordé par Khalfallah et al, [Khalfallah 99], et Ayadi et Khalfallah [Ayadi 10].

### **1-3 Influence de l'anisotropie élastique**

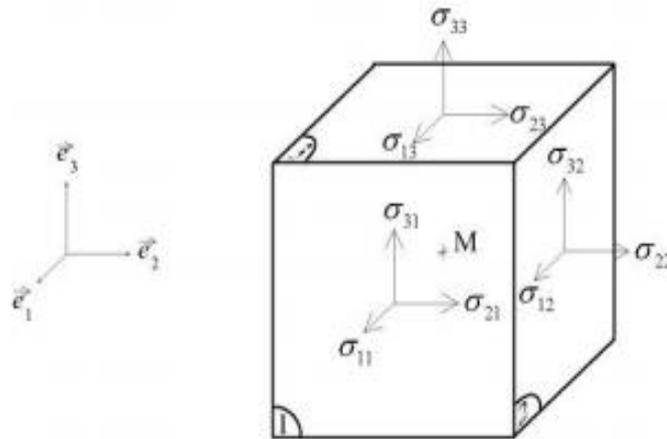
Le fait qu'un cristal soit élastiquement anisotrope ne modifie évidemment pas seulement les conditions d'observation des dislocations, Bonnet et Morton, [Bonnet67], les auteurs sont arrivés à calculer le contraste en M.E.T d'une dislocation rectiligne placée dans un cristal élastiquement anisotrope.

L'anisotropie élastique peut influencer sur la structure de cœur des dislocations de deux façons différentes :

- Elle peut modifier à la fois les énergies propres des dislocations et leurs énergies d'interaction avec les autres dislocations.
- Elle peut être responsable de l'apparition de dislocations énergétiquement instables.

## 1-4 Constantes élastiques

Les propriétés élastiques d'un solide dépendent de ses constantes élastiques. Ces constantes établissent un lien entre le comportement mécanique et dynamique d'un cristal et donnent des informations importantes sur la nature des forces qui opèrent dans le solide. En particulier, elles fournissent des informations sur la rigidité et l'anisotropie des matériaux, la connaissance des constantes élastiques nous permet de calculer les modules d'Young et de cisaillement  $E$  et  $G$ , ainsi que le coefficient de poisson  $\nu$  qui sont des paramètres importants dans les applications technologiques et fournissent une description fondamentale du comportement mécanique d'un matériau.



**Figure 1.4 :** indices des composantes du tenseur de contrainte

Considérons un cube de matière autour d'un point  $M$ , Sur une face  $j$  s'exerce un vecteur de force  $\vec{F}_j$  qui possède 3 composantes  $(\vec{F}_{1j}, \vec{F}_{2j}, \vec{F}_{3j})$ . La composante  $F_{ij}$  est la composante de la force selon  $\vec{e}_i$  sur la face  $j$ . La surface de chaque facette étant  $a^2$ , on peut définir neuf composantes  $\sigma_{ij}$  homogènes à des contraintes (figure 1.2).

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

Du fait de cette symétrie, on peut écrire le tenseur comme un vecteur, selon la notation de Voigt ou  $\sigma_1 = \sigma_{11}$ ,  $\sigma_2 = \sigma_{22}$ ,  $\sigma_3 = \sigma_{33}$ ,  $\sigma_4 = \sigma_{23}$ ,  $\sigma_5 = \sigma_{31}$ ,  $\sigma_6 = \sigma_{12}$

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{pmatrix} \quad (1.3)$$

Où

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix}$$

On peut écrire de la même manière le tenseur des déformations  $\varepsilon$  :

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

Selon la loi de Hooke, le tenseur des déformations  $\sigma$  est relié au tenseur des contraintes  $\varepsilon$  par le tenseur des rigidités ou des constantes de rigidité  $C_{ijkl}$  :

$$\sigma_{ij} = \sum C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (1.5)$$

Ce tenseur  $C_{ijkl}$  est constitué 81 termes initialement : les constantes de rigidité C. Il se réduit selon la géométrie du système (certaines constantes de rigidité peuvent être nulles) à 36 dans notre cas.

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1131} & C_{1112} \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2231} & C_{2212} \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & C_{3323} & C_{3331} & C_{3312} \\ C_{2311} & C_{2322} & C_{2333} & C_{2323} & C_{2331} & C_{2312} \\ C_{3111} & C_{3122} & C_{3133} & C_{3123} & C_{3131} & C_{3112} \\ C_{1211} & C_{1222} & C_{1233} & C_{1223} & C_{1231} & C_{1212} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ 2\varepsilon_4 \\ 2\varepsilon_5 \\ 2\varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

On peut également appliquer la notation de Voigt à la matrice des constantes de rigidité  $C$

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ 2\varepsilon_4 \\ 2\varepsilon_5 \\ 2\varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

Pour le cas des cristaux hexagonaux, la symétrie de la maille entraîne que les constantes  $C_{11} = C_{22}$ ,  $C_{13} = C_{23}$ ,  $C_{44} = C_{55}$ , la constante  $C_{66}$  dépendant quand à elle des constantes  $C_{11}$  et  $C_{12}$ , il reste donc que 5 constantes indépendantes et non nulles. Le tenseur des constantes élastiques de rigidité se réécrit suivant la notation de Voigt, comme suit :

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

Nous avons donc uniquement besoin de déterminer 5 constantes élastiques :  $(C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44})$  et  $C_{66} = 1/2(C_{11} - C_{12})$  [Hirth 82]

-La structure hexagonale est caractérisée [Edington 75] par :

- Le rapport d'anisotropie de compression :  $\mathbf{A}_C = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$  (1.9)

- Le rapport d'anisotropie de cisaillement :  $\mathbf{A}_S = \frac{C_{11} + C_{12} - 2C_{13}}{C_{33} - C_{13}}$  (1.10)

- Le facteur d'anisotropie :  $\mathbf{H} = 2C_{44} + C_{12} - C_{11}$  (1.11)

## 1.5 Propriétés élastiques et de cœur des dislocations

Pour simuler l'interaction élastique d'un élément représentatif de matière contenant une forte densité de dislocations, on considère tout d'abord les lignes de dislocations comme des lignes de discontinuité dans un milieu élastique isotrope. Le formalisme utilisé est conforme à la théorie élastique des dislocations. Les aspects énergétiques, les champs de contraintes et par conséquent les forces s'exerçant sur les dislocations sont alors bien résolus à condition de négliger la contribution du cœur à l'énergie d'une dislocation [Hirth 82]. En effet, cette

simplification est justifiée à partir d'une comparaison entre énergie de cœur et énergie élastique, car ce dernier est d'un ordre de grandeur supérieure à l'énergie de cœur.

### 1.5.1 Énergie élastique d'une dislocation

Pour définir l'énergie élastique d'une ou plusieurs dislocations, on considère que le champ élastique créé par une ligne de dislocation se réduit à la solution de Volterra. Il s'agit du terme principal dans les développements en série des champs de déplacement et de contrainte, terme minimal obéissant aux lois d'équilibre mécanique et conduisant à une discontinuité de déplacement. Grâce au théorème Gauss, l'énergie élastique peut être décomposée en deux contributions :

- celle correspondant à l'intégrale le long de la discontinuité de déplacement du travail des forces nécessaires pour créer la dislocation. Cette contribution varie avec le logarithme d'une distance caractéristique de la microstructure de dislocations.
- La contribution des tractions de cœur, correspondant au travail des forces de traction sur le cylindre qui isole le cœur de la dislocation.

La contribution de la discontinuité de déplacement domine généralement l'énergie élastique.

### 1.5.2 Énergie de cœur

L'énergie de cœur est la partie de l'énergie d'excès de la dislocation provenant des interactions atomiques proches du cœur de la dislocation, l'énergie de cœur doit être une propriété intrinsèque de la dislocation, c'est-à-dire que sa valeur doit dépendre seulement de la dislocation considérée et non de son environnement, en particulier les autres dislocations présentes. Il faut noter cependant que l'énergie de cœur doit être définie pour un rayon de cœur  $r_c$  donné. Ce rayon partitionne l'énergie entre contribution de cœur et contribution élastique.

## 1-6 Forces appliquées à une dislocation

L'étude des propriétés dynamiques d'une dislocation suppose un calcul de la force totale agissant sur chacune des lignes des dislocations qui la constituent. Cette force se décompose en cinq contributions différentes :

- La force due au champ de contrainte homogène appliqué,  $\sigma_{app}$

- La force due au champ de contrainte interne associé aux autres segments de dislocations,  $\sigma_{int}$ .

- La force de friction (force de Peierls).

- La tension de ligne.

- La force image liée à l'existence d'interface.

- Les deux premières composantes de la force se calculent classiquement en tous points par la relation de Peach- Koehler, le calcul de  $\sigma_{int}$  au centre des segments constitue la solution qui minimise les anomalies du champ de self-contrainte aux extrémités des segments.

- La troisième composante de la force totale concerne la contrainte de friction de réseau due à l'interaction du cœur de la dislocation avec le réseau cristallin, qui se traduira par une force exercée sur la dislocation.

- La quatrième composante de la force totale : La tension de ligne, conduit à une contribution supplémentaire à la force de Peach Koehler. Dans le cas le plus général de l'élasticité anisotrope, la self-énergie d'une dislocation dépend de son caractère, qui est repéré par l'angle  $\alpha$  de la ligne avec une direction de référence. Dans une approximation de tension de ligne locale, celle-ci,  $T^{TL}$ , est définie comme la dérivée totale de l'énergie par rapport à la déformation d'un petit élément de ligne qui modifie sa courbure et, donc, à la fois sa longueur et son caractère. La tension de ligne peut alors être calculée aisément au premier ordre [Hirth 82].

$$\mathbf{T}^{TL} = \frac{dW}{dl} = \mathbf{W} + \frac{\partial^2 W}{\partial \alpha^2} \quad (1.12)$$

le second terme à droite tient compte de la dépendance angulaire de la self-énergie.

- La cinquième et dernière composante de la force agissant sur les dislocations, la force image est liée à la présence de l'interface. Cette force image est due au champ de contraintes d'une dislocation virtuelle symétrique de la première par rapport au plan du joint.

## *Chapitre 2*

### *Bases de compréhension*

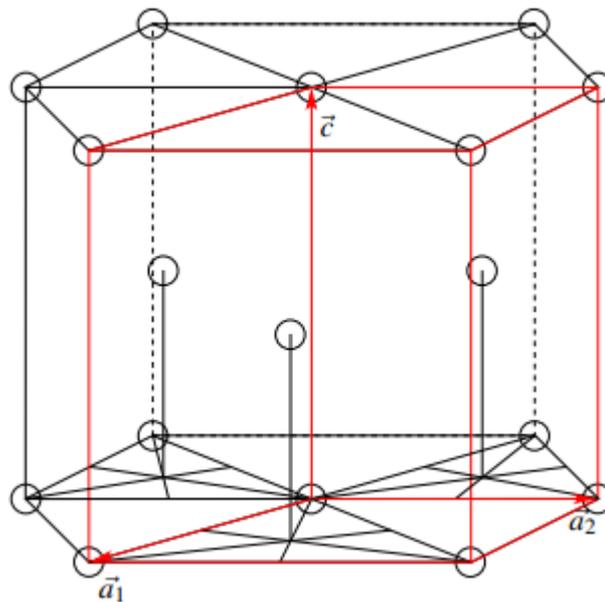
## 2- Bases de compréhension

### 2.1 Cristallographie

#### 2.1.1 Maille Hexagonale Compacte HCP

Dans les matériaux de structure hexagonale, la maille primitive hexagonale compacte (HCP) contient deux atomes de coordonnées  $(000)$  et  $(\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{2})$  elle est associée à un réseau de Bravais de type hexagonal comme schématisé à la figure 2.1. La maille est définie par les 3 vecteurs  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  et  $\vec{c}$ . On peut alors définir cette structure par ces paramètres de maille :

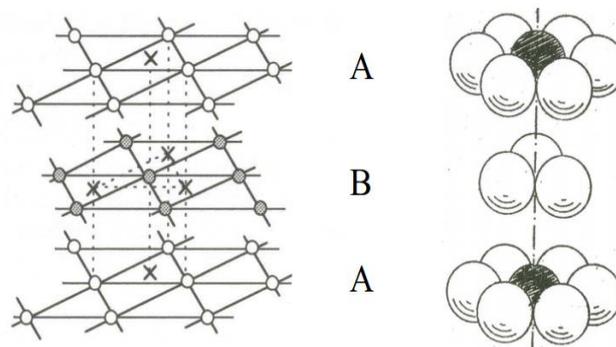
Le coté  $a$  du plan de base de l'hexagone et la hauteur  $c$  du prisme à base hexagonale.



**Figure 2.1** : Schéma de la maille cristalline d'une structure hexagonale compacte.

- La maille primitive est définie par les vecteurs  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  et  $\vec{c}$  et contient 2 atomes de coordonnées (000) et  $(\frac{2}{3} \frac{1}{3} \frac{1}{2})$ .

La maille hexagonale est considérée comme compacte. Les structures compactes sont des structures où les atomes sont empilés de manière à minimiser le volume non occupé. La structure hexagonale compacte (HCP) possède un empilement de type ABABAB..., (Figure 2.2).



**Figure 2.2 :** Empilement hexagonal compact

Dans le cas idéal d'un empilement de sphères dures, le rapport  $\frac{c}{a}$  vaut  $\sqrt{\frac{8}{3}} = 1.633$  mais aucun matériau hexagonal ne possède ce rapport idéal. Nous avons reporté dans le tableau 2.1 les valeurs des rapports  $\frac{c}{a}$  pour certains matériaux hexagonaux. On peut remarquer que seule le Zinc et le Cadmium ont des rapports  $\frac{c}{a}$  supérieurs au rapport idéal.

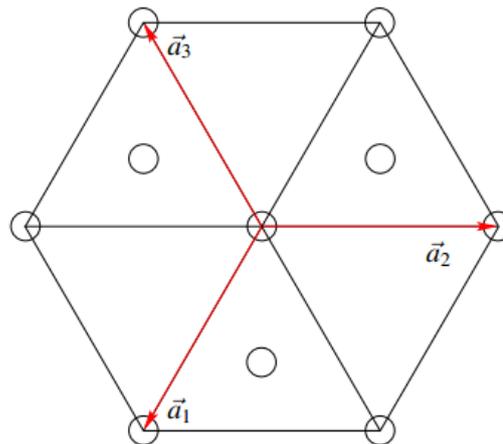
Matériaux HCP	$\frac{c}{a}$	Matériaux HCP	$\frac{c}{a}$
Cd	1.886	Zr	1.593
Zn	1.856	Ti	1.587
Co	1.628	Hf	1.581
Mg	1.624	Y	1.571
Tl	1.598	Be	1.568

**Tableau 2.1 :** Valeurs des rapports  $\frac{c}{a}$  pour quelques métaux hexagonaux à température ambiante

### 2.1.2 Notation à 4 indices de Miller-Bravais

Dans les matériaux hexagonaux, l'utilisation de la notation classique à 3 indices de Miller n'est pas évidente. En fait, si l'on considère le plan base (001) d'une structure hexagonale, ce plan a une symétrie d'ordre 3, c'est-à-dire qu'il est invariant par une rotation  $\frac{1}{3}$  de tour ( $\frac{\pi}{3}$ ). Il contient donc trois directions identiques [100], [010] et [110]. Ces 3 directions sont équivalentes mais n'apparaissent pas de manière évidente avec la notation à 3 indices. C'est pour pallier à cette difficulté que fut introduite la notation à 4 indices de Miller-Bravais [Partridge 67].

En effet, il est plus pratique d'utiliser, dans les matériaux hexagonaux, une notation à 4 indices au lieu de la notation classique à 3 indices de Miller. On définit trois vecteurs  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  et  $\vec{a}_3$  dans le plan de base (figure 2.3).



**Figure 2.3 :** Représentation des 3 vecteurs  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  et  $\vec{a}_3$  dans le plan base. Ces 3 vecteurs obéissent à la relation  $\vec{a}_1 + \vec{a}_2 = -\vec{a}_3$

Dans la notation à 4 indices (hkil) les trois premiers indices (hki) étant liés respectivement aux vecteurs  $\vec{a}_1$ ,  $\vec{a}_2$  et  $\vec{a}_3$ , ils doivent respecter la même relation, à savoir  $h+k+i = 0$ . On déduit alors des familles de plans ou de direction par des permutations et inversions des trois premiers indices ce qui ne serait pas le cas avec une notation à 3 indices.

Par exemple, les directions [100] et [110] deviennent respectivement, avec la notation à 4 indices,  $[2\bar{1}\bar{1}0]$  et  $[11\bar{2}0]$ , On peut alors plus facilement constater que ces directions sont équivalentes.

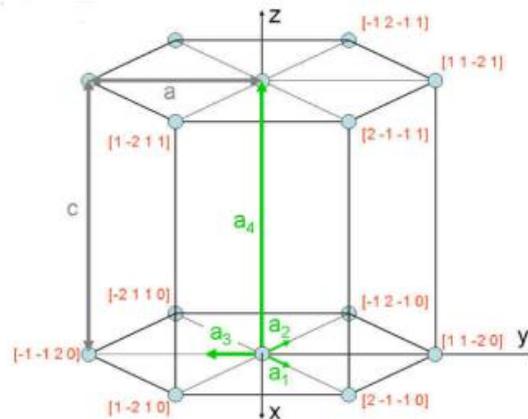
Le passage de 3 à 4 indices s'écrit de la manière suivante :

- La direction  $[uvw]$  devient  $[UVTW]$  :

$$U = \frac{1}{3}(2u-v) ; V = \frac{1}{3}(2v-u) ; T = -(U+V) ; W = w. \quad (2.1)$$

- le plan  $(hkl)$  devient  $(HKIL)$  :

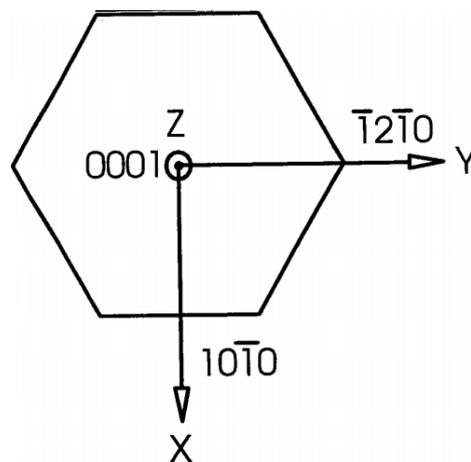
$$\text{avec } H=h, K=k, I= -(H+K) \text{ et } L=l. \quad (2.2)$$



**Figure 2.4** : Indices de Miller-Bravais  $[UVTW]$  dans la maille hexagonale

### 2.1.3 Symétrie hexagonale

Dans le cas de la symétrie hexagonale il existe deux axes de symétrie : un axe d'ordre 6 et un axe d'ordre 2. On choisit le repère cristallin  $K_B = (X, Y, Z)$  de telle façon que  $Z$  coïncide avec l'axe d'ordre 6 et  $X$  avec l'axe d'ordre 2 (figure 2.5)



**Figure 2.5** : Choix des axes de la maille hexagonale

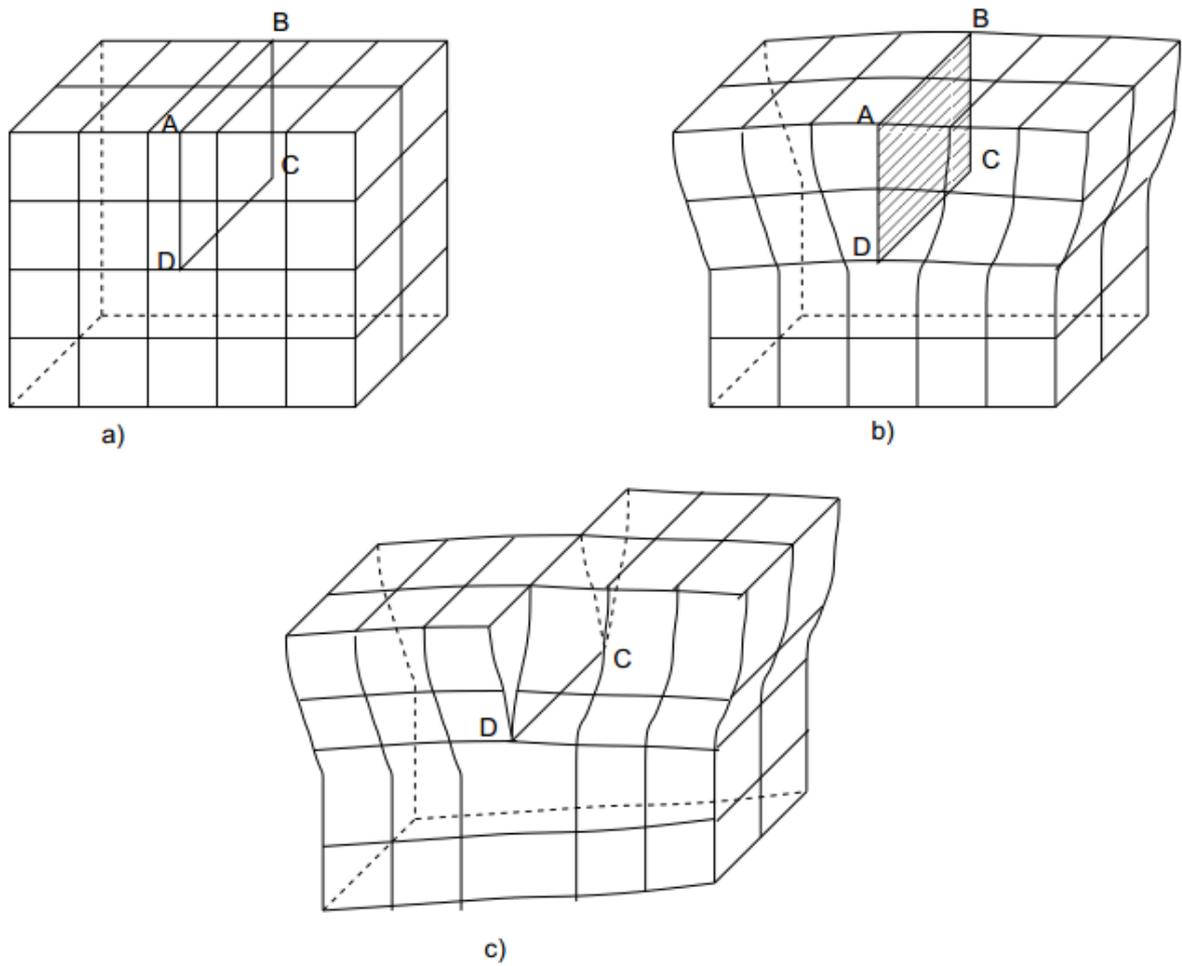
## 2.2 Dislocations

### 2.2.1 Types de dislocations

Dans les solides cristallins, les dislocations peuvent apparaître sous deux types différents. Ces types sont appelés coin et vis. Nous allons maintenant présenter ces 2 types de dislocations.

-La dislocation coin : la figure 2.6(a) représente un cristal sans défaut. Nous insérons ensuite dans la figure 2.6(b) le demi- plan ABCD dans la partie supérieure du cristal créant ainsi une déformation dans la partie supérieure. La ligne DC est alors appelée ligne de dislocation coin et a pour symbole  $\perp$ .

-La dislocation vis : en partant du cristal sans défaut présenté dans la figure 2.6(a), nous cisailons la partie supérieure du cristal suivant le plan ABCD à une distance équivalente à une maille en maintenant la partie inférieure du cristal. Le cisaillement du cristal suivant le plan ABCD se propage alors vers le bas comme représenté sur la figure 2.6(c). On considère alors la ligne DC comme étant une ligne de dislocation vis.



**Figure 2.6** : schéma d'un cristal sans dislocation (a), contenant une dislocation coin (b) et contenant une dislocation vis (c) [Hull 01]

### 2.2.2 Vecteurs de Burgers des dislocations

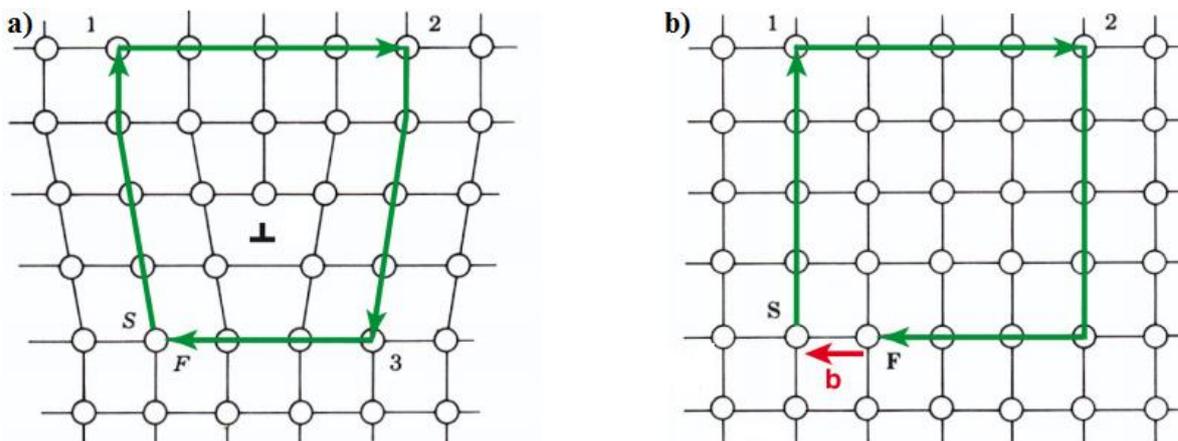
On appelle dislocations les défauts linéaires du réseau cristallin qui, en se déplaçant, sont à l'origine de la déformation plastique du matériau. La description d'une dislocation fait appel au concept de circuit de Burgers et de vecteur de Burgers. Un circuit de Burgers est un chemin d'atomes proches voisins dans un cristal contenant une ligne de dislocation et qui forme une boucle fermée autour de la ligne de dislocation. Ces deux notions sont illustrées sur la figure 2.7. Il est facile de voir que le vecteur de Burgers correspond au défaut de fermeture observé lorsque l'on reproduit, autour de la ligne de dislocation, le circuit de Burgers C du cristal idéal [Hirth et Lothe 82] :

$$\vec{b} = \oint \frac{\partial \vec{u}}{\partial l} dl \quad (2.3)$$

Le caractère local d'une dislocation dépend de l'orientation locale du vecteur unitaire directeur de la ligne de dislocation  $\vec{l}$  par rapport au vecteur de Burgers  $\vec{b}$  :

-Le vecteur de Burgers d'une dislocation coin est perpendiculaire à la ligne de dislocation.

-Le vecteur de Burgers d'une dislocation vis est parallèle à la ligne de dislocation



**Figure 2.7 :** (a) Circuit de Burgers autour d'une dislocation coin. (b) Le vecteur de Burgers  $\vec{b}$  correspond au défaut de fermeture observé en retraçant ce circuit dans le cristal idéal [Hirth et Lothe82].

### 2.2.3 Dislocations dans les matériaux de structure hexagonale

Les vecteurs de Burgers dans les structures hexagonales peuvent être représentés à l'aide d'un double tétraèdre (figure 2.8) dérivé du tétraèdre de Thompson utilisé dans les matériaux cubiques faces centrées. Nous pouvons recenser 6 types différents de vecteurs de Burgers, 3 pour les dislocations parfaites et 3 pour les dislocations partielles [Tenckhoff 88] :

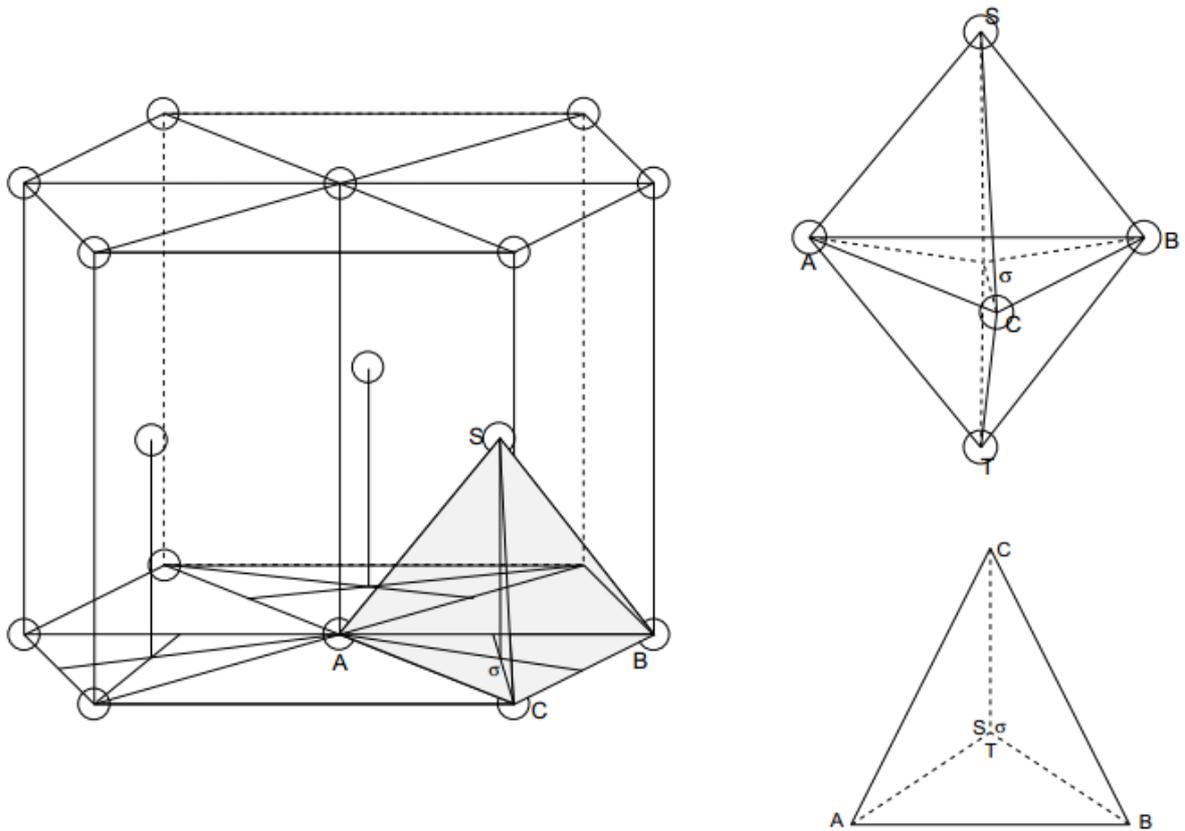
- vecteur de Burgers AB, BC, CA, BA, CB, et AC de type  $1/3[11\bar{2}0]$  désigné par  $a$  pour des dislocations parfaites.
- Vecteur de Burgers ST et TS de type  $[0001]$  désigné par  $C$ .
- Vecteur de Burgers AS/TB, SA/TC, SB/TA, SB/TC, SC/TA et SC/TB pour les dislocations parfaites pyramidales de type  $1/3[11\bar{2}3]$  désigné par  $c + a$ .
- Vecteur de Burgers partiels  $A\sigma$ ,  $B\sigma$ ,  $C\sigma$ ,  $\sigma A$ ,  $\sigma B$  et  $\sigma C$  de type  $1/3[\bar{1}100]$  désigné par  $p$  (dislocations basales imparfaites).
- Vecteur de Burgers  $\sigma S$ ,  $\sigma T$ ,  $S\sigma$ ,  $T\sigma$  de type  $1/2 [0001]$  désigné par  $\frac{c}{2}$
- 12 dislocations partielles désignées par  $\frac{c}{2} + P$  de vecteur de Burgers AS, BS, CS, AT, BT, et CT ainsi que leurs vecteurs négatifs de type  $1/3 [\bar{2}203]$ .

Les carrés du module des différents vecteurs de Burgers  $\vec{b}$  sont proportionnels à l'énergie élastique des dislocations. Si l'on tient compte de cela les dislocations dont le vecteur de Burgers est le plus court sont les plus stables. Par conséquent les dislocations de vecteur de Burgers  $\langle a \rangle$  sont les plus stables suivies des vecteurs de Burgers de type  $\langle c \rangle$  et enfin des types  $\langle c+a \rangle$ . Ce genre de considération énergétique peut également être réalisé pour les dislocations partielles dont les vecteurs de Burgers sont plus courts. Cependant, le fait qu'une dislocation se divise en partielles dépend de l'énergie de faute d'empilement.

Nous avons répertorié dans le tableau 2.2 les différents vecteurs de Burgers possibles pour les dislocations parfaites et imparfaites. Nous y avons aussi reporté leurs différentes désignations ainsi que le module du vecteur de Burgers  $b$  et le module au carré du vecteur de Burgers en fonction de  $a$  dans le cas d'un empilement hexagonal compact.

Dislocations parfaites				Dislocations imparfaites		
<b>Type</b>	AB	ST	SA/TB	A $\sigma$	$\sigma$ S	AS
<b>Désignation</b>	A	C	c+a	P	$\frac{c}{2}$	$\frac{c}{2}+P$
<b>Vecteur de Burgers</b>	$\frac{1}{3}[11\bar{2}0]$	[0001]	$\frac{1}{3}[11\bar{2}3]$	$\frac{1}{3}[\bar{1}100]$	$\frac{1}{2}[0001]$	$\frac{1}{6}[\bar{2}203]$
<b>b</b>	A	C	$(c^2 + a^2)^{\frac{1}{2}}$	$\frac{a}{\sqrt{3}}$	$\frac{c}{2}$	$(\frac{a^2}{3} + \frac{c^2}{4})^{\frac{1}{2}}$
<b>b<sup>2</sup></b>	$a^2$	$c^2 = \frac{8}{3}a^2$	$\frac{11}{3}a^2$	$\frac{1}{3}a^2$	$\frac{2}{3}a^2$	$a^2$

**Tableau 2.2** : Vecteur de Burgers dans la structure hexagonale [Hull 01]



**Figure 2. 8** : Double tétraèdre de Thompson qui représente l'ensemble des vecteurs de Burgers possibles dans les matériaux hexagonaux [Hull 01].

### 2.2.4 Dislocations intergranulaires intrinsèques et extrinsèques

Dans la littérature, on distingue deux types de dislocations interfaciales:

#### a- Dislocation extrinsèques

Elles sont produites quand une dislocation intragranulaire ou de matrice entre dans le plan du joint. C'est un défaut linéaire introduit par une coupure de Volterra et qui subit un mouvement de translation. Ce mouvement produit à travers le cristal une déformation macroscopique dans laquelle le cristal cède aux contraintes appliquées.

#### b- Dislocation intrinsèques

Les dislocations intrinsèques possèdent une géométrie nécessaire à la formation de ce qu'on appelle une interface libre de contrainte. Citons par exemple la structure d'un joint de grains de faible angle.

Ces dislocations, contrairement aux dislocations extrinsèques, ne présentent pas de contraintes à longue distance à cause de la périodicité du déplacement relatif; donc elles n'interagissent ni avec un défaut ponctuel, ni avec un défaut linéaire à grande distance.

### 2.2.5 Populations de dislocations

Dans un grain on distingue deux populations de dislocations, d'une part les dislocations mobiles et d'autre part les dislocations de la forêt [Friedel 64], en général supposées immobiles. Les dislocations de la forêt, largement majoritaires, n'occupent qu'une fraction volumique faible du matériau car elles ont tendance à se rassembler en parois. Chacune de ces deux populations a ses propres cinétiques de création et de destruction. Les dislocations mobiles se multiplient par les mécanismes classiques de sources ; elles peuvent s'annihiler mutuellement ou être immobilisées par le biais des interactions locales (formation de jonctions sessiles aux intersections). Les dislocations immobiles, quant à elles, sont sujettes à la restauration dynamique, par glissement dévié (ou montée) qui tend à limiter leur densité à une valeur maximale. Cette densité maximale est fonction du caractère des dislocations et elle est plus élevée pour les dislocations coin lorsque la température n'est pas suffisante pour activer la montée [Mughrabi 88].

### 2.2.6 Modes de mouvement des dislocations

On distingue deux modes de mouvement : le premier, dit conservatif, n'implique pas de déplacement des atomes du cristal (leur mouvement reste inférieur à une distance interatomique) on parle alors de glissement. Ce mode de mouvement des dislocations est le plus facile. C'est donc le mode le plus courant à basse température. Les déformations créées sont exclusivement des déformations de cisaillement, ce qui implique que la déformation par glissement des dislocations se fait à volume constant. Un second mode de mouvement des dislocations implique au contraire un transport de matière, grâce à la diffusion de lacunes ou d'interstitiels, il s'agit de la montée des dislocations. Ce mouvement de montée est qualifié de mouvement non conservatif car au cours de la montée des dislocations des lacunes, contrairement au glissement, comme la diffusion est mise en jeu, il est clair que le mouvement par montée est plutôt actif à haute température.

## 2.3 Systèmes de glissement

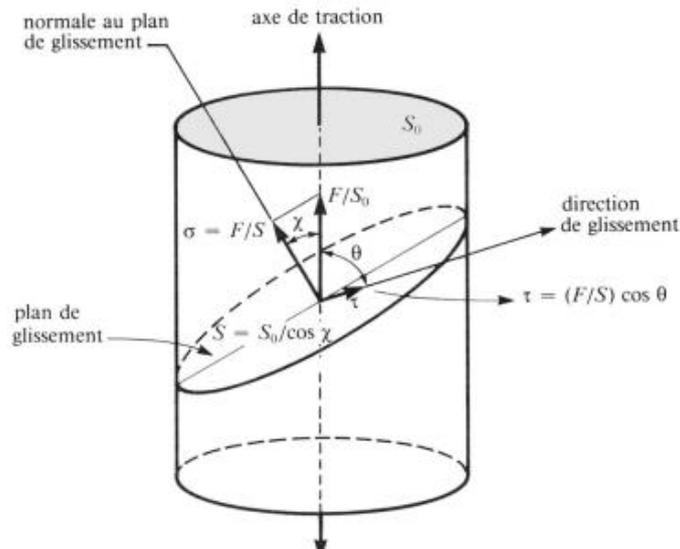
### 2.3.1 Mécanismes de déformation des matériaux

La déformation plastique par glissement a lieu lorsque la contrainte  $\sigma$  rapportée dans le plan de glissement et suivant la direction de glissement devient égale à une certaine valeur  $\tau_c$  dite **Cission Critique de Cisaillement Résolue (CCCR)**. Si on note  $\chi$  l'angle entre la normale au plan de glissement et la direction de la contrainte appliquée et  $\Theta$  l'angle entre la direction de glissement et celle de la contrainte appliquée on obtient :

$$\sigma = \frac{\tau_c}{\cos \chi \cos \Theta} \quad (2.4)$$

Où  $\cos \chi \cos \Theta$  représente le facteur de Schmid.

La loi de Schmid montre qu'un système de glissement particulier est activé, c'est-à-dire qu'il y aura mouvement des dislocations correspondant au plan de glissement en question, si la valeur critique  $\tau_c$  caractéristique de ce glissement est atteinte. Si plusieurs systèmes de glissement sont équivalents, celui qui sera actif en premier est celui qui nécessitera la contrainte appliquée  $\sigma$  la plus faible donc celui ayant le facteur de Schmid le plus élevé (figure 2.9) [Tenckhoff 88].



**Figure 2.9 :** Illustration de la loi de Schmid en traction

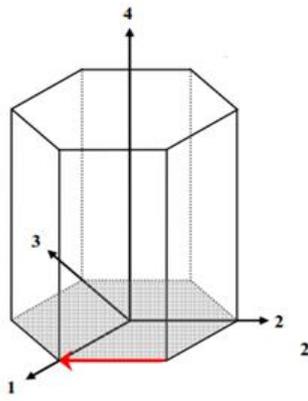
### 2.3.2 Systèmes de glissements dans les matériaux de structure hexagonale

Les métaux de structure hexagonale se déforment suivant des plans dont chacun possède un nombre variable de directions de glissement, la déformation de chaque métal hexagonal met en jeu un glissement principal (basal ou prismatique) et quelques glissements secondaires dans les plans pyramidaux de première et seconde espèce. Pour toutes les structures hexagonales, la direction la plus dense a pour vecteur de Burgers  $1/3 [11\bar{2}0]$ , et est l'intersection du plan de base et de l'un des trois plans prismatiques. Le plan (0001) est, quant à lui, le plan le plus dense, les vecteurs de Burgers les plus courants sont **a** et **c+a**.

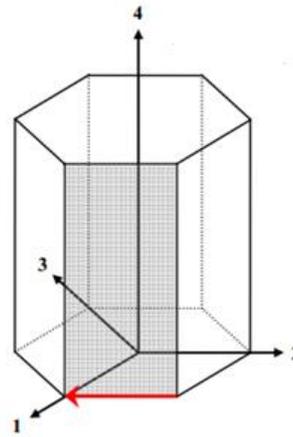
On observe généralement dans les métaux de structure hexagonale [Naka 83] cinq modes de glissement qui sont indiqués dans le tableau ci-dessous donne une liste de ces systèmes avec le nombre de systèmes pour chaque famille et illustrés par le tableau 2.3 et figures 2.10.

Plans de glissement		Directions de glissement Vecteurs de Burgers des dislocations		Systèmes de glissement par famille
Nom	Plan	direction	Symbole	Nombre
Basal	{0001}	$1/3 [11\bar{2}0]$	$\vec{a}$	3
Prismatique	{10 $\bar{1}0$ }	$1/3 [11\bar{2}0]$	$\vec{a}$	3
pyramidal de 1 <sup>ère</sup> espèce	{10 $\bar{1}1$ }	$1/3 [11\bar{2}0]$	$\vec{a}$	6
pyramidal de 1 <sup>ère</sup> espèce	{10 $\bar{1}1$ }	$1/3 [11\bar{2}3]$	$\vec{c} + \vec{a}$	12
pyramidal de 2 <sup>ème</sup> espèce	{11 $\bar{2}2$ }	$1/3 [11\bar{2}3]$	$\vec{c} + \vec{a}$	6

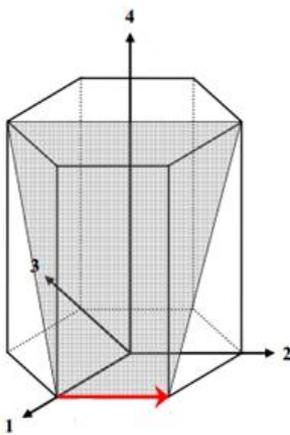
**Tableau 2.3** Systèmes de glissement dans les matériaux de structure hexagonale.



Basal : 3 systèmes  $\{0001\} [11\bar{2}0]$

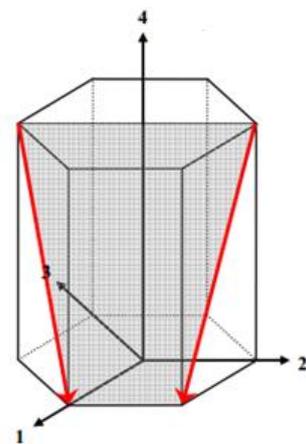


Prismatique : 3 systèmes  $\{1\bar{1}00\} [11\bar{2}0]$



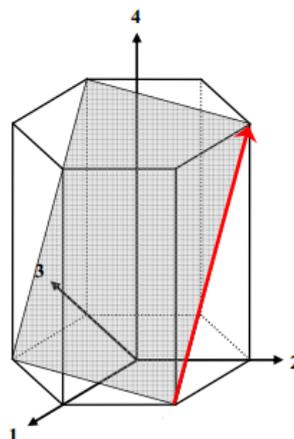
Pyramidal 1<sup>ère</sup> espèce: 6 systèmes

$\{10\bar{1}1\} [\bar{1}2\bar{1}0]$



Pyramidal 1<sup>ère</sup> espèce: 12

$\{10\bar{1}1\} [2\bar{1}1\bar{3}]$



Pyramidal 2<sup>ème</sup> espèce : 6 système  $\{2\bar{1}\bar{1}2\} [\bar{2}11\bar{3}]$

**Figure 2.10 :** Familles des systèmes de glissement dans les matériaux à structures hexagonales

Les trois premiers modes de glissement (basal, prismatique et pyramidal de 1<sup>ère</sup> espèce) possèdent la même direction de glissement  $[11\bar{2}0]$  contenue dans le plans de base. Seuls les systèmes de glissement pyramidaux possèdent une direction de glissement hors du plan de base  $[11\bar{2}3]$ , ce qui permet alors au matériau de se déformer dans les trois directions de l'espace.

### 2.3.3 Facilité des modes de glissement

Le plan de glissement principal varie selon les métaux. Il s'agit, soit du plan de base (Cd, Zn, Mg, Co, Be) soit du plan prismatique (Ti, Zr, Hf, Ru). Ce problème de facilité relative des différents modes de glissement a été abordé de différentes manières. [Naka 83] en propose une revue dans cette partie. Nous ne citerons que les plus significatifs.

#### i- Approche de Peierls –Nabarro

Une première approche s'appuie sur le critère de Peierls- Nabarro [ Peierls 40] qui relie la facilité de glissement à la distance inter-réticulaire  $d$  : le glissement est facile quand  $d$  est grande. Or  $d$  peut être reliée à la compacité des matériaux. Il est généralement admis que pour une valeur de  $c/a$  supérieure à la compacité théorique de 1,633, le plan de glissement principal est le plan de base. Lorsque le rapport  $c/a$  est inférieur à 1,633, c'est alors le plan prismatique qui est le plan de glissement facile. Cependant, quelques métaux, comme le béryllium, font exception à cette règle.

#### ii- Approche de Legrand

Un autre critère fut proposé par [Legrand 84]. Ce critère se base sur le rapport  $R$  des énergies de fautes d'empilement ( $\gamma$ ) corrigées par les modules élastiques intervenant dans les propriétés de dissociation.

$$R = \frac{\gamma_{\text{basal}}}{\gamma_{\text{prismatique}}} \frac{c_{66}}{c_{44}} \quad (2.5)$$

- Si  $R < 1$  alors le système de glissement principal est le système basal.
- Si  $R > 1$  Alors le système de glissement principal est le système prismatique.
- Si  $R \approx 1$  Alors le système glisse aussi facilement dans le plan prismatique que dans le plan basal.

Legrand a calculé ce facteur pour plusieurs métaux. Il trouve un facteur  $R < 1$  pour le cobalt, le magnésium, le béryllium, le zinc et le cadmium. Ces métaux ont pour plan de glissement principal le plan basal.

Pour le zirconium, le titane, l'yttrium et le ruthénium, ses calculs donnent  $R > 1$ , ce qui correspond au système de glissement principal prismatique de ces métaux.

Il trouve également un facteur  $R$  proche de 1 pour le rhénium qui a comme plan principal les plans prismatique et basal.

Les calculs réalisés par Legrand montrent que ce critère est efficace pour la majorité des matériaux hexagonaux. Il a montré que la facilité du glissement est reliée aux énergies de fautes d'empilement du matériau considéré (tableau 2.4).

Cristaux	Mode principal	Mode secondaire
Cd	B	$\pi_1, \pi_2, P$
Zn	B	$\pi_2, P$
Mg	B	$\pi_2, P$
Co	B	$\pi_1$
Tl	B, P	/
Zr	P	$\pi_1, B, \pi_2$
Ti	P	$\pi_1, B, \pi_2$
Hf	P	B, $\pi_2$
Y	P	B
Be	B	P, $\pi_2$

**Tableau 2.4** : Systèmes de glissement principaux et secondaires pour les métaux hexagonaux.

B : Basal, P: prismatique,  $\pi_1$ : Pyramidal de 1<sup>ère</sup> espèce,  $\pi_2$  : Pyramidal de 2<sup>ème</sup> de espèce [Legrand 84].

### iii Approche par dissociations

Les deux systèmes de glissement principaux basal et prismatique étant deux systèmes de type  $\langle a \rangle$ , il peut être intéressant d'étudier les différents modes de dissociation d'un vecteur de Burgers de type  $\frac{1}{3}[11\bar{2}0]$ . A l'aide du tétraèdre de Thompson, le vecteur de Burgers  $\vec{b}$  peut s'écrire comme une somme de vecteurs du tétraèdre. En effet une dislocation dissociée ne peut glisser que dans son plan de dissociation. Les dissociations les plus stables impliquent alors le choix du système de glissement le plus facile. Pour cela, il est nécessaire de recenser les différentes dissociations et l'énergie de faute associée.

#### a- Dissociation dans le plan basal

Les dislocations de type  $\langle a \rangle$  peuvent, dans le plan basal, se dissocier en deux partielles de Shockley de la manière suivante :

$$\frac{1}{3}[11\bar{2}0] \rightarrow \frac{1}{3}[10\bar{1}0] + \frac{1}{3}[01\bar{1}0] \quad (2.6)$$

L'empilement de départ de type ABABAB...devient alors ABABCB...cette dissociation introduit de fait dans le plan basal un ruban de faute d'empilement de type cubique à faces centrées. Cette dissociation bien observée dans le Cobalt avec la mise en évidence de deux dislocations partielles de Shockley [Korner 83]. On observe aussi cette dissociation dans le Zinc et le Magnésium mais bordée cette fois de deux partielles de Frank [Samllman70]. Cela semble indiquer que la faute d'empilement basale n'a pas une énergie élevée et expliquerait pourquoi ces matériaux glissent facilement dans le plan basal.

#### b- Dissociation dans le plan prismatique

Plusieurs schémas de dissociation ont été proposés dans le plan prismatique. En considérant un modèle de sphères dures, Tyson [Tyson 67] a proposé la dissociation suivante :

$$\frac{1}{3}[11\bar{2}0] \rightarrow \frac{1}{18}[24\bar{6}\bar{3}] + \frac{1}{18}[42\bar{6}3] \quad (2.7)$$

Cette faute ne respecte pas la compacité de l'empilement parfait. L'évolution de son énergie doit être réalisée par calcul à l'échelle atomique.

Aldinger et Jonsson, [Aldinger 77], ont proposé un autre modèle de dissociation :

$$\frac{1}{3}[11\bar{2}0] \rightarrow \frac{1}{6}[10\bar{1}0] + \frac{1}{3}[12\bar{3}0]$$

## *Chapitre 3*

### *Configurations étudiées*

### 3- Configurations étudiées

#### 3.1 Matériaux

Dans le cadre de ce travail nous avons choisi des bicristaux formés par deux métaux de structure HCP et de nature différente. Le calcul de l'énergie d'interaction entre une dislocation et un joint interphase a été effectué pour dix métaux qui sont caractérisés par leurs paramètres cristallographiques, tableau 3.1, et par leurs paramètres élastiques : les constantes d'élasticité  $C_{ij}$ , les rapports d'anisotropie de compression  $A_c$  et de cisaillement  $A_s$  et le facteur d'anisotropie  $H$ , tableau 3.2.

Métal	a(Å)	c(Å)	c/a
Be	2.99	3.58	1.56
Tl	3.65	5.73	157
Y	3.65	5.12	1.57
Ti	2.95	4.68	1.59
Zr	3.23	5.15	1.59
Hf	3.19	5.05	1.58
Co	2.51	4.07	1.62
Mg	3.21	5.21	1.62
Zn	2.66	4.95	1.86
Cd	2.98	5.62	1.88

**Tableau 3.1** : Paramètres structuraux a et c en [Å], et leur rapport c/a [Leipfrid 78]

Métal	C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>13</sub>	C <sub>33</sub>	C <sub>44</sub>	C <sub>66</sub>	H	A <sub>c</sub>	A <sub>c</sub> *	A <sub>s</sub>	A <sub>s</sub> *
Be	29.2	2.67	1.40	33.64	16.3	13.3	6.07	0.90	0.10	1.22	0.46
Y	7.79	2.92	2.00	7.69	2.431	2.44	-0.008	1.18	0.16	0.998	0.39
Cd	11	4.04	3.83	4.69	1.56	3.48	-3.84	6.78	8.73	0.53	8.87
Co	30.7	16.5	10.3	35.81	7.53	7.1	0.86	1.04	0.009	1.06	2.63
Hf	18.1	7.70	6.60	19.7	5.57	5.20	0.76	0.96	0.007	1.07	0.32
Mg	5.97	2.62	2.17	6.17	1.64	1.675	-0.07	1.05	0.01	0.98	0.34
Ti	16.2	9.20	6.90	18.1	4.67	3.5	2.34	1.04	0.005	1.33	1.74
Tl	4.08	3.54	2.90	5.28	0.726	0.27	0.91	0.77	0.15	2.69	15.56
Zn	16.4	3.64	5.30	6.35	3.88	6.38	-5	8.00	9.88	0.59	13.73
Zr	14.4	7.28	6.53	16.5	3.21	3.56	-0.7	0.87	0.07	0.90	1.08

**Tableau 3.2** : Paramètres élastiques des métaux de structure hexagonale étudiés [Huntington 75], [Edington 75].

- **C<sub>ij</sub>** : Constantes élastiques en [ $10^{-11}$  dyn/cm<sup>2</sup>].
- **A<sub>c</sub>** : Rapport d'anisotropie de compression.
- **A<sub>s</sub>** : Rapport d'anisotropie de cisaillement.
- **H** : Facteur d'anisotropie en [ $10^{-11}$  dyn/cm<sup>2</sup>].

### 3.2 Interfaces

Nous avons retenu les bicristaux dont l'écart des modules de cisaillement est soit variable en signe, soit négatif ou positif.

➤ **Interfaces avec le signe de  $\Delta\mu$  variable :**

Interfaces des bicristaux Zn-X : Zn est choisi comme cristal (1) et X comme cristal (2), L'écart des deux modules de cisaillement  $\Delta\mu$  change de signe.

➤ **Interfaces avec  $\Delta\mu < 0$  :**

Interfaces des bicristaux Be- X : ils ont un cristal (1) plus dur que le cristal (2), l'écart des modules de cisaillement  $\Delta\mu$  est toujours négatif ( $\mu_X - \mu_{Be} < 0$ ).

➤ **Interfaces avec  $\Delta\mu > 0$  :**

Interfaces des bicristaux Tl-X : ils ont un cristal (2) plus dur que le cristal (1), l'écart des modules de cisaillement  $\Delta\mu$  est toujours positif ( $\mu_X - \mu_{Tl} > 0$ ).

### 3.3 Dislocations

Nous calculons l'énergie d'interaction élastique entre une dislocation et l'interface pour des lignes des dislocations  $\langle UVTW \rangle$  avec U, V, W des entiers tels que :

$$-8 \leq U \leq 8, -8 \leq V \leq 8, -8 \leq W \leq 8$$

Nous choisissons les vecteurs de Burgers des dislocations parfaites les plus courants de type  $\langle a \rangle$  et  $\langle a+c \rangle$  sont ceux qui appartiennent aux plans de glissement:

- Dans le plan Basal (0001) : le vecteur de Burgers de type  $\langle a \rangle$  est  $\frac{1}{3} [11\bar{2}0]$ .
- Dans les plans prismatiques : plan  $(1\bar{1}00)$  le vecteur est  $\frac{1}{3} [11\bar{2}0]$ , plan  $(01\bar{1}0)$  le vecteur de Burgers est  $\frac{1}{3} [2\bar{1}\bar{1}0]$  et le plan  $(10\bar{1}0)$  le vecteur de Burgers est  $\frac{1}{3} [\bar{1}2\bar{1}0]$ .
- Dans le plan pyramidal  $\pi_1 (\bar{1}011)$  : le vecteur de Burgers de type  $\langle a \rangle$  est  $\frac{1}{3} [1\bar{2}10]$  et de type  $\langle a+c \rangle$  est  $\frac{1}{3} [11\bar{2}3]$ .
- Dans le plan pyramidal  $\pi_2 (11\bar{2}2)$  : le vecteur de Burgers de type  $\langle a+c \rangle$  est  $\frac{1}{3} [\bar{1}123]$ .

### 3.3 Systèmes de glissement

Les systèmes de glissement considérés sont le glissement basal, prismatique, pyramidal ( $\pi_1$ ) et pyramidal ( $\pi_2$ ), le tableau ci-dessous donne une liste ces systèmes

Système Nom	Plan Indices	Direction Indices
Basal	(0001)	$[11\bar{2}0]$
Prismatique	$(\bar{1}\bar{1}00)$	$[11\bar{2}0]$
	$(01\bar{1}0)$	$[2\bar{1}\bar{1}0]$
	$(10\bar{1}0)$	$[\bar{1}2\bar{1}0]$
Pyramidal 1 <sup>ère</sup> espèce	$(\bar{1}011)$	$[11\bar{2}0]$ $[11\bar{2}3]$
Pyramidal 2 <sup>ème</sup> espèce	$(11\bar{2}2)$	$[\bar{1}\bar{1}23]$

**Table 3.3 :** Systèmes de glissement considérés dans cette étude.

## *Chapitre 4*

### *Energie d'interaction*

## 4- Energie d'interaction

### 4.1 Méthode de calcul

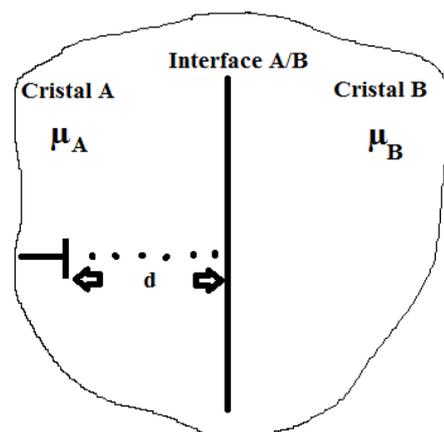
Le calcul des énergies d'interaction élastique est effectué dans le cadre de la théorie de l'élasticité linéaire anisotrope, en utilisant la méthode de **Barnett et Lothe** [Barnett et Lothe 74].

L'énergie d'interaction élastique  $\Delta E$  est une fonction de  $E^{(1)}$  le facteur pré-logarithmique de l'énergie d'une dislocation située dans la cristal (1) infini à une distance  $d$  du joint interphase et de  $E^{(1/2)}$  le facteur pré-logarithmique de l'énergie de la même dislocation située à l'interface :  $\Delta E = -[E^{(1/2)} - E^{(1)}]$ .

La force image qui est exercée sur une dislocation située à la distance  $d$  de l'interface est :  $F_i = \Delta E/d$ .

La force image peut être répulsive si  $\Delta E > 0$ , ou attractive si  $\Delta E < 0$ .

Nous appliquons cette démarche pour calculer les énergies d'interaction élastique dislocation -interface dans les matériaux biphasés élastiquement anisotropes dans la structure hexagonale pour divers systèmes de glissement.



**Figure 4.1** : Configuration géométrique utilisée pour le calcul de l'interaction entre une dislocation rectiligne et une interface qui lui est parallèle. L'interface sépare les milieux anisotropes (A) et (B) d'un bicristal.

## 4.2 Technique d'étude

L'utilisation des techniques de simulation est de plus en plus importante dans la compréhension des propriétés des matériaux et un point de passage pour explorer les propriétés mécaniques de ces matériaux. Nous nous proposons d'étudier les variations de l'énergie d'interaction élastique pour les dislocations situées près d'une interface biphasée d'un bicristal constitué de deux métaux de structure hexagonale.

A partir d'une série de programmes nous calculons l'énergie d'interaction élastique entre une dislocation située dans le cristal (A) et l'interface d'un bicristal A/B de même structure mais de composition différente. Ces programmes permettent d'évaluer en élasticité anisotrope, l'énergie d'interaction élastique en fonction de différents paramètres cristallographiques tels que le vecteur de Burgers et les constantes élastiques du matériau considéré.

### ➤ Programmes:

- **Dislohex.For** : Construction du fichier des 2600 directions de lignes de dislocations.
- **BiHex.f90** : Calcul de l'énergie d'interaction dislocation- joint interphase  $\Delta E$  pour chaque ligne de dislocation.
- **Select. For** : Sélection des lignes de dislocations qui appartiennent à un même plan de glissement et de leurs énergies d'interaction.

Etudier l'énergie d'interaction  $\Delta E$  en fonction du caractère de la dislocation, angle (L,b), pour chaque système de glissement.

- Utilisation d'un logiciel graphique, «Origine pro 8» pour tracer les graphes de l'énergie d'interaction en fonction du caractère des dislocations.

## *Chapitre 5*

### *Résultats et discussion*

## 5- Résultats et discussion

### 5.1- Effet du module de cisaillement

#### 5.1.1- Interfaces Zn-X :

Les énergies d'interaction élastique pour les différents bicristaux et pour les sept systèmes de glissement sont représentés dans les figures 5.1a à 5.1g en fonction du caractère des dislocations.

L'énergie d'interaction élastique peut être positive ou négative. Elle est corrélée à  $\Delta\mu$  l'écart des modules de cisaillement des deux cristaux constituant le bicristal en signe et en intensité. L'énergie maximale est positive et égale à 194pJ/m, elle est obtenue pour le bicristal Zn-Be qui présente la plus grande valeur de  $\Delta\mu$ . Be, comme deuxième cristal, est le métal dont le module de cisaillement est le plus grand parmi les métaux HCP considérés dans cette étude figure 5.1a. Les forces image sont répulsives et les dislocations sont toujours repoussées loin de l'interface. L'énergie minimale est négative et égale à (-299 pJ/m). Elle est obtenue pour Zn-Tl, Tl est le métal dont le module de cisaillement est le plus petit parmi les métaux HCP considérés dans cette étude. Les forces images sont attractives et les dislocations sont toujours attirées vers l'interface.

Nous constatons que l'arrangement des énergies d'interaction par rapport aux valeurs de  $\Delta\mu$  pour les différents bicristaux Zn-X (X= Be, Co, Hf, Ti, Zr, Cd, Y, Mg, Tl) ne suivent pas toujours le signe de  $\Delta\mu$ . Il y a quelques cas où les énergies sont positives quand l'écart des modules de cisaillement est négatif, interface Zn-Ti dans tous les systèmes de glissement, figures 5.1a à 5.1g et interface Zn-Zr dans le système de glissement pyramidal de 1<sup>ère</sup> et de 2<sup>ème</sup> espèce figure 5.1e et 5.1 g.

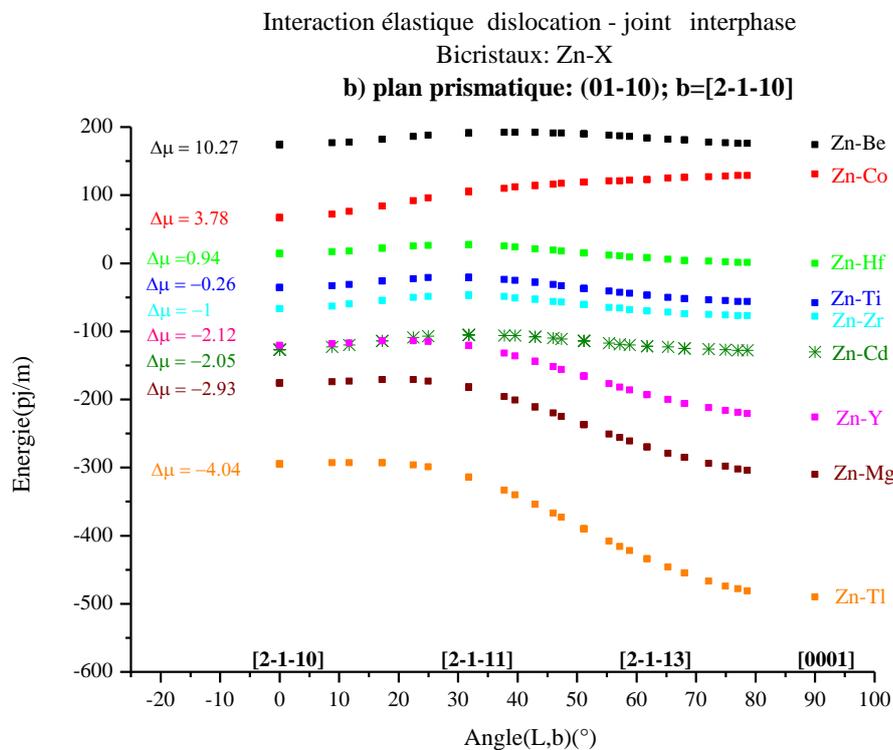
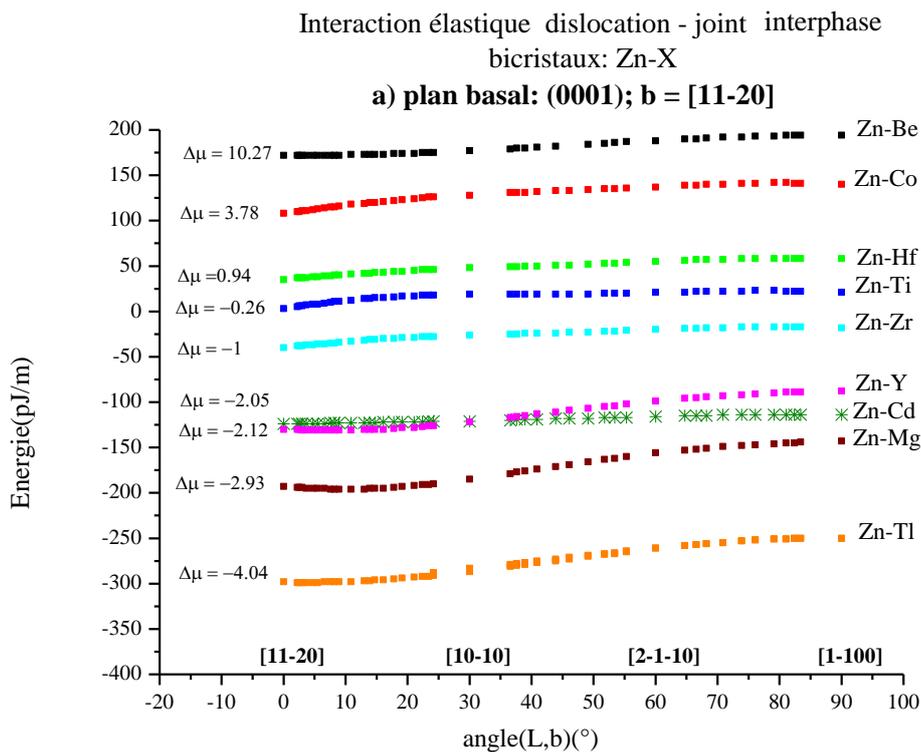
Dans le système de glissement basal, figure 5.1a, l'énergie d'interaction élastique pour le bicristal Zn-Cd ( $\Delta\mu = -2.05$ ) est la seule qui ne suit pas le classement dans l'ordre des  $\Delta\mu$ .

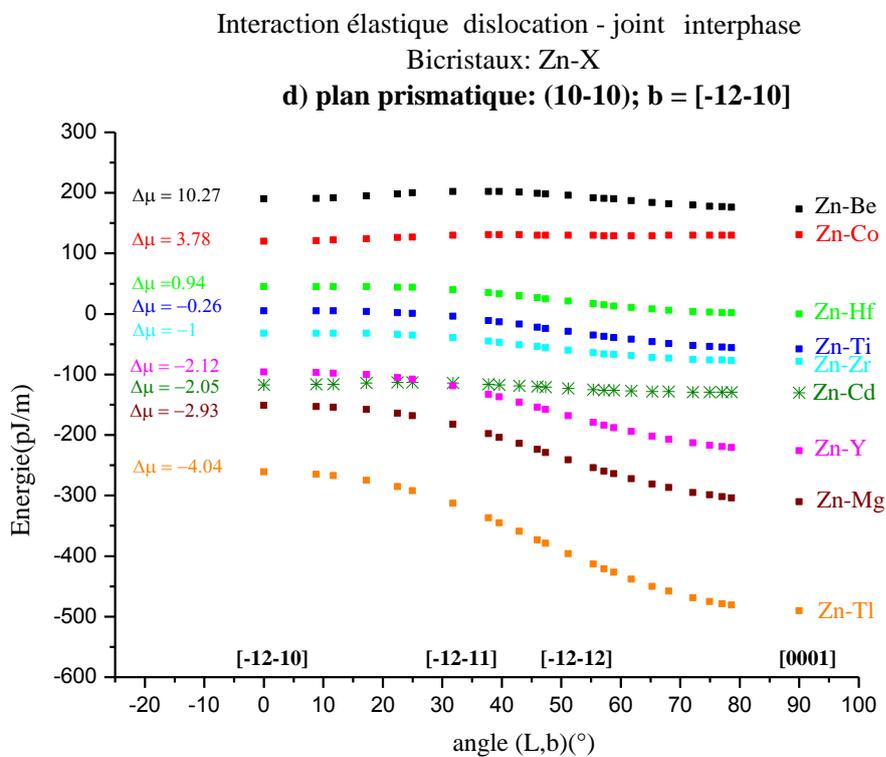
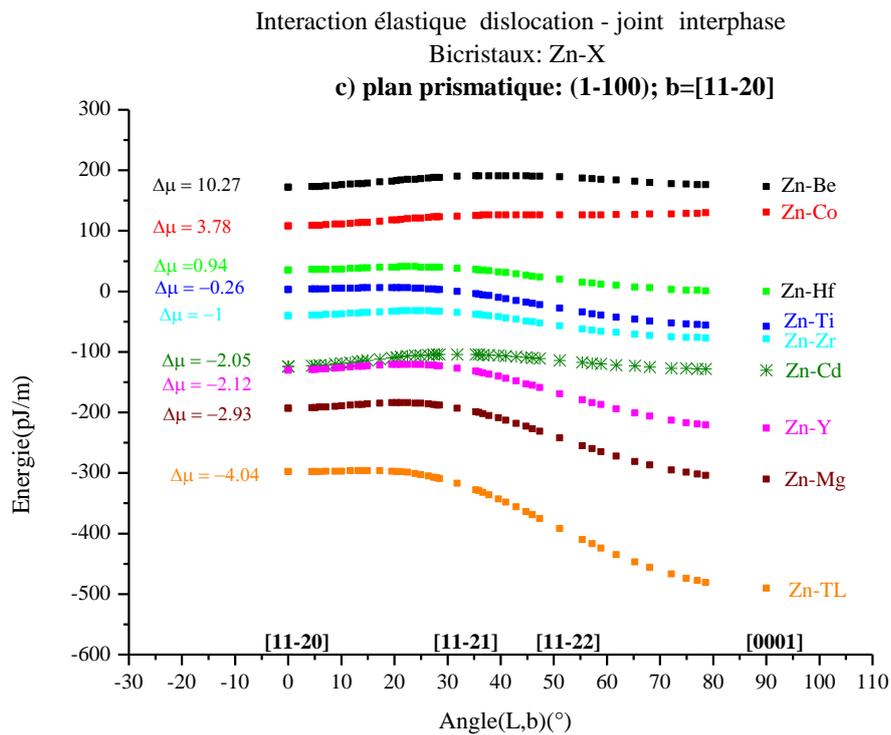
Pour le système de glissement prismatique, plan (1-100) et vecteur de Burgers  $\frac{1}{3} [11\bar{2}0]$ , les énergies d'interaction pour les bicristaux Zn-X sont ordonnées comme les valeurs de  $\Delta\mu$  figure 5.1c.

Pour les glissements prismatiques, plan (01 $\bar{1}$ 0) de vecteur de Burgers  $\frac{1}{3} [2\bar{1}\bar{1}0]$  et plan (10 $\bar{1}$ 0) de vecteur de Burgers  $\frac{1}{3} [\bar{1}2\bar{1}0]$ , l'énergie d'interaction pour le bicristal Zn-Cd ne suit

pas l'ordre des  $\Delta\mu$  pour les lignes de dislocation proches de la dislocation vis  $[2\bar{1}\bar{1}0]$ ,  $[\bar{1}2\bar{1}0]$  respectivement et le suivent pour les lignes proches des dislocations coin  $[0001]$ , figures 5.1b et 5.1d.

Dans les systèmes de glissement pyramidaux, glissement pyramidal 1<sup>ère</sup> espèce  $(\bar{1}011)$  de vecteur de Burgers  $\frac{1}{3}[11\bar{2}3]$  ou  $\frac{1}{3}[1\bar{2}10]$  et glissement pyramidal de 2<sup>ème</sup> espèce  $(11\bar{2}2)$  de vecteur Burgers  $\frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}3]$ , figure 5.1 e, f et g, les valeurs des énergies d'interaction élastique pour les bicristaux Zn-X sont ordonnées comme les valeurs de  $\Delta\mu$ . Cet ordre n'est pas respecté dans le cas du bicristal Zn-Cd.

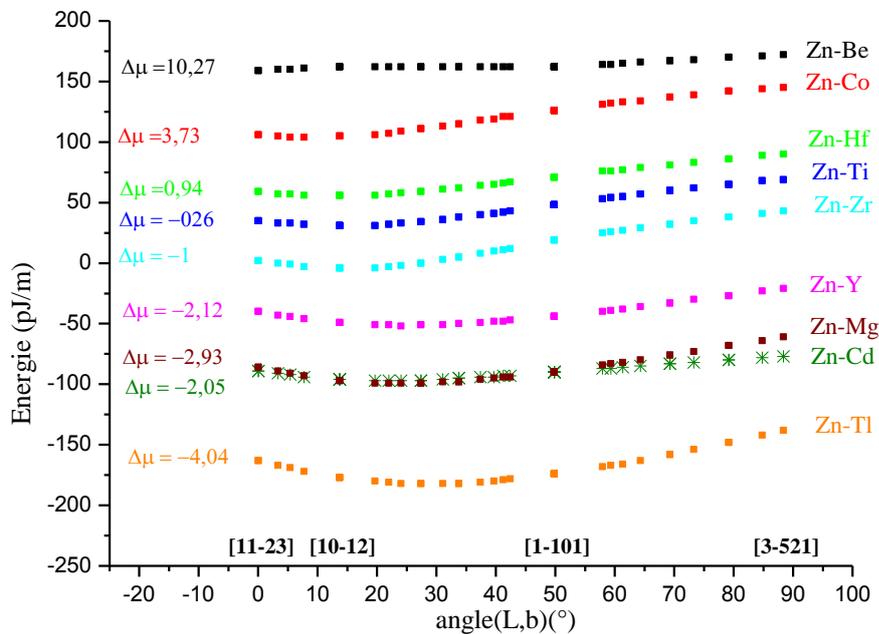




Interaction élastique dislocation - joint interphase

Bicristaux: Zn-X

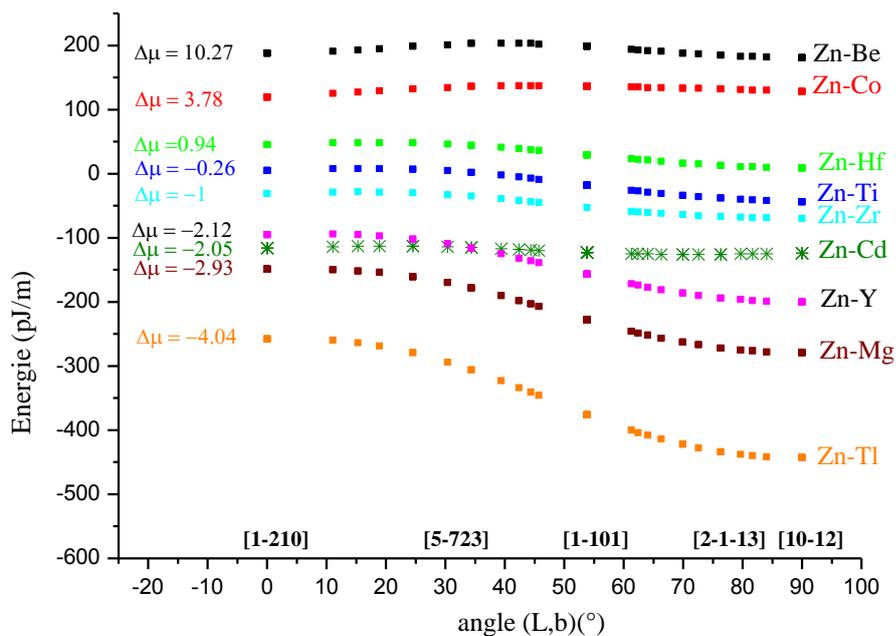
e) plan pyramidal: (-1011); b = [11-23]

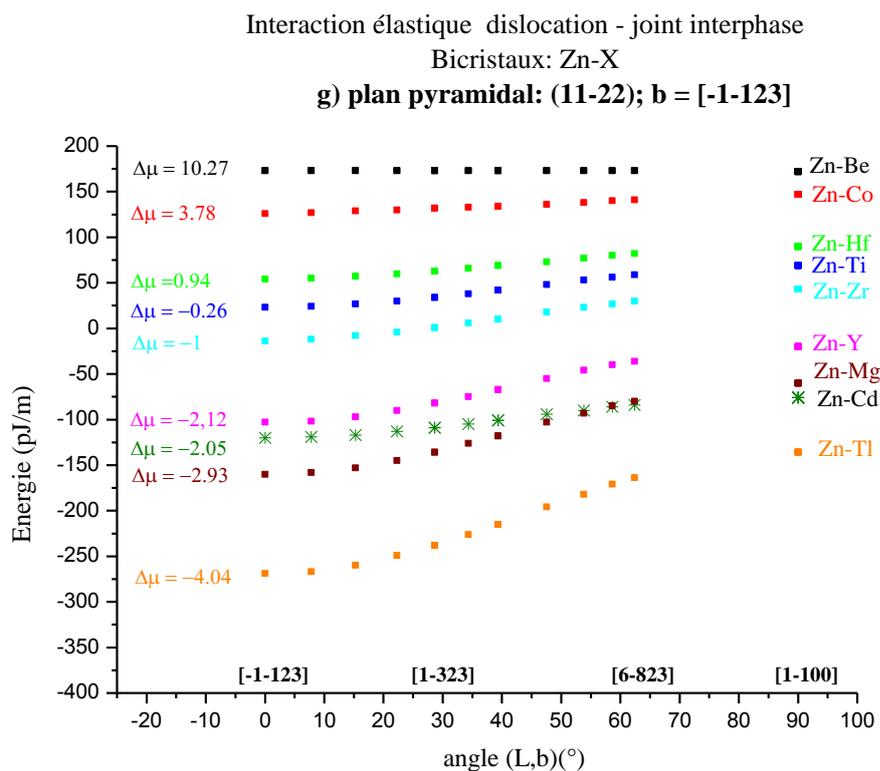


Interaction élastique dislocation - joint interphase

Bicristaux: Zn-X

f) plan pyramidal: (-1011); b = [1-210]





**Figures 5.1(a) à (g) :** Bicristaux Zn-X, (X= Be, Co, Hf, Ti, Zr, Cd, Y, Mg, Tl).

Familles de courbes des énergies d'interaction dislocation – joint interphase en fonction du caractère des dislocations de vis à coin pour les sept systèmes de glissement, (a) à (g).

- R= [0001] : Axe de rotation
- $\Theta = 0^\circ$  : Angle de rotation:
- $\Delta\mu = \mu_1 - \mu_2$  ( $10^{-3} \text{ N.m}^{-1}$ )
- $\alpha$  (L, b) : angle entre la ligne de dislocation et le vecteur de Burgers
  - (a) : glissement basal (0001)
  - (b), (c), (d) : glissements prismatiques  $\{10\bar{1}0\}$
  - (e), (f) : glissements pyramidaux de 1<sup>ère</sup> espèce  $(\bar{1}011)$
  - (g) : glissement pyramidal de 2<sup>ème</sup> espèce  $(11\bar{2}2)$

Nous avons résumé dans le tableau 5.1 les différents résultats obtenus pour l'énergie d'interaction élastique dislocation– joints interphases comparés aux écarts des modules de cisaillement caractérisant les bicristaux Zn-X.

<b>Joint interphase Zn-X</b>				
<b>Plan de glissement</b>	<b>systèmes de Glissement</b>	<b>Vecteur de Burgers</b>	<b>observations (Classement en fonction de <math>\Delta\mu</math>)</b>	<b><math>\Delta\mu_{\text{Zn-X}}</math> (<math>10^{-3} \text{N.m}^{-2}</math>)</b>
(0001)	Basal	$\frac{1}{3} [11\bar{2}0]$	•Zn-Cd pas bien classé pour ( $30^\circ < \alpha < 90^\circ$ ) Fig. 5.1 a	• $\Delta\mu_{\text{Zn-Be}} = 10.27$ • $\Delta\mu_{\text{Zn-Co}} = 3.78$ • $\Delta\mu_{\text{Zn-Hf}} = 0.94$
(01 $\bar{1}0$ )	Prismatique	$\frac{1}{3} [2\bar{1}\bar{1}0]$	•Zn-Cd pas bien classé ( $0^\circ < \alpha < 20^\circ$ ) Fig. 5.1 b	• $\Delta\mu_{\text{Zn-Ti}} = - 0.26$ • $\Delta\mu_{\text{Zn-Zr}} = -1$
(1 $\bar{1}00$ )	Prismatique	$\frac{1}{3} [11\bar{2}0]$	•Bien classé ( $0^\circ < \alpha < 90^\circ$ ) Fig. 5.1.c	• $\Delta\mu_{\text{Zn-Cd}} = - 2.05$
(10 $\bar{1}0$ )	Prismatique	$\frac{1}{3} [\bar{1}2\bar{1}0]$	•Zn-Cd pas bien classé ( $0^\circ < \alpha < 30^\circ$ ) Fig. 5.1.d	• $\Delta\mu_{\text{Zn-Y}} = - 2.12$ • $\Delta\mu_{\text{Zn-Mg}} = - 2.93$
( $\bar{1}011$ )	Pyramidal 1 <sup>ère</sup> espèce	$\frac{1}{3} [11\bar{2}3]$	•Zn-Cd pas bien classé ( $0^\circ < \alpha < 90^\circ$ ) : fig 5.1.e	• $\Delta\mu_{\text{Zn-Tl}} = - 4.04$
( $\bar{1}1011$ )	Pyramidal 1 <sup>ère</sup> espèce	$\frac{1}{3} [1\bar{2}10]$	•Zn-Cd pas bien classé ( $0^\circ < \alpha < 35^\circ$ ) Fig. 5.1.f	
(11 $\bar{2}2$ )	Pyramidal 2 <sup>ème</sup> espèce	$\frac{1}{3} [\bar{1}\bar{1}23]$	•Zn-Cd pas bien classé ( $0^\circ < \alpha < 90^\circ$ ) Fig. 5.1. g	

**Tableau 5.1 :** Effet de l'écart des modules de cisaillement sur l'énergie d'interaction élastique dislocation-interface dans les bicristaux Zn-X.

### 5.1.2 - Interfaces Be-X : $\Delta\mu < 0$

On considère les bicristaux Be-X avec la dislocation située dans le cristal le plus dur Be. L'écart des modules de cisaillement est toujours négatif. Les figures 5.2a à 5.2g montrent la variation de l'énergie d'interaction avec le caractère des dislocations pour les différents bicristaux Be-X.

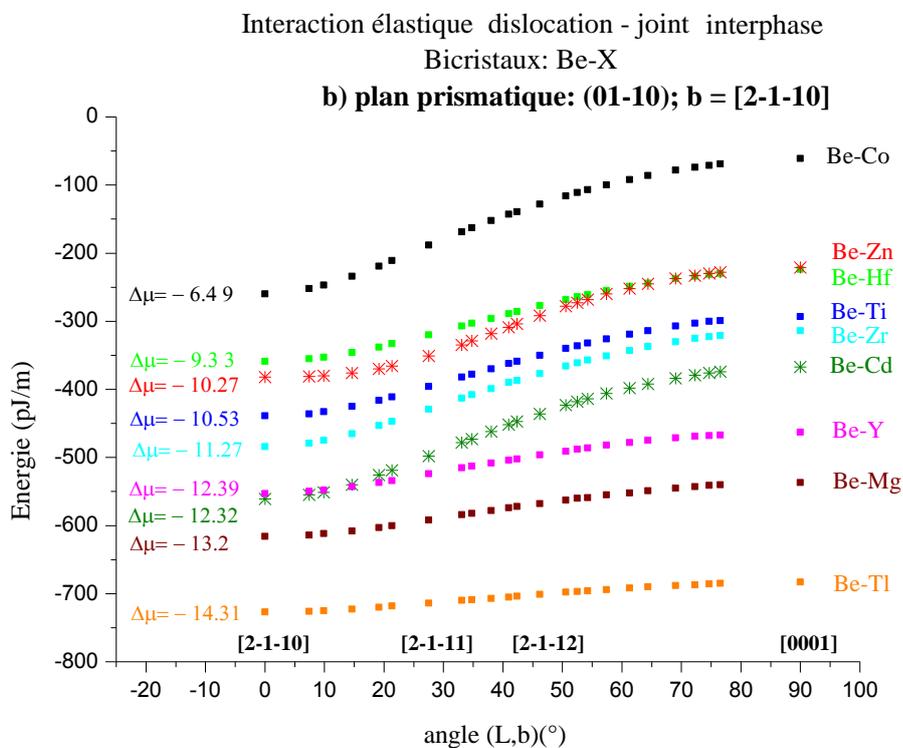
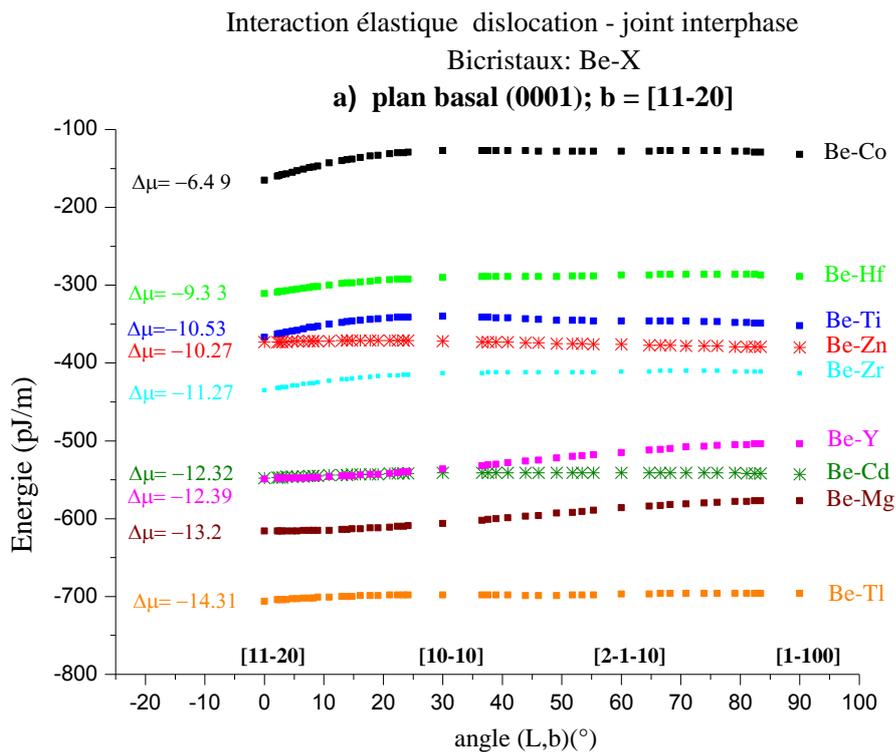
L'énergie d'interaction dislocation –interface est toujours négative, elle peut atteindre quelques centaines de pico joule/mètre. Les forces images sont attractives et les dislocations sont toujours attirées vers l'interface. L'intensité de la force image augmente avec  $\Delta\mu$  l'écart des modules de cisaillement.

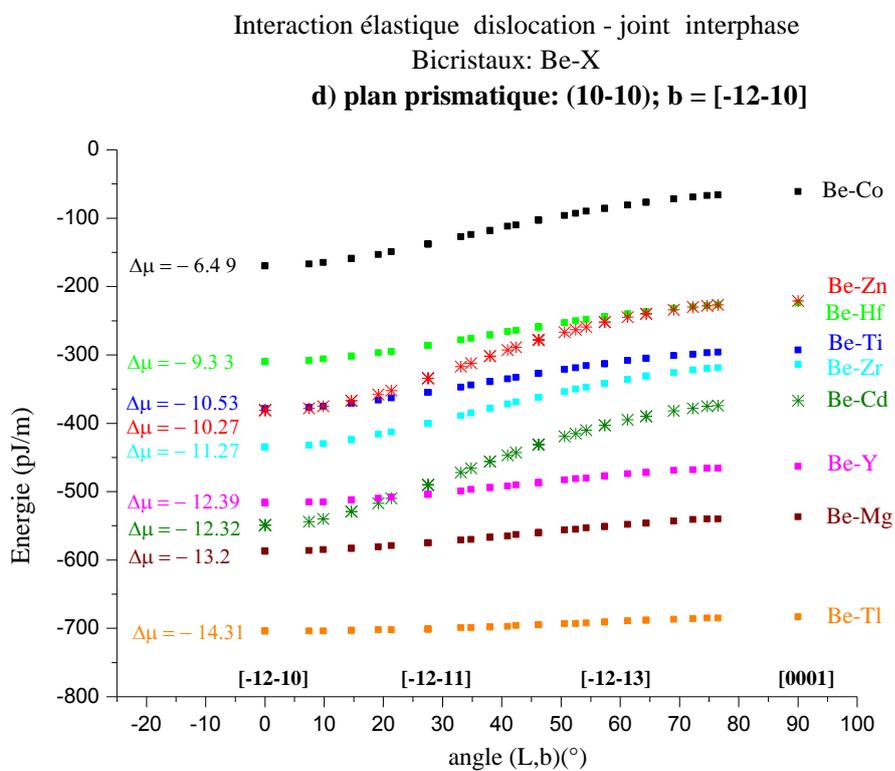
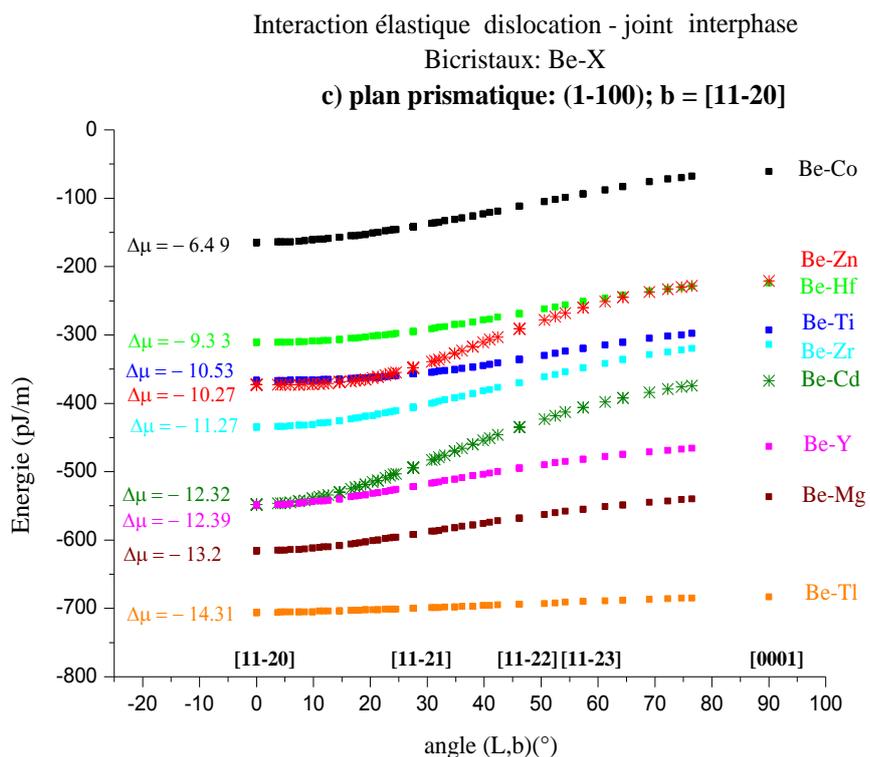
Les valeurs les plus grandes des énergies d'interaction sont obtenues pour le bicristal Be-Co dont l'écart  $\Delta\mu$  est le plus petit. Les énergies minimales sont obtenues pour le bicristal Be-Tl, pour lequel l'écart  $\Delta\mu$  est le plus grand.

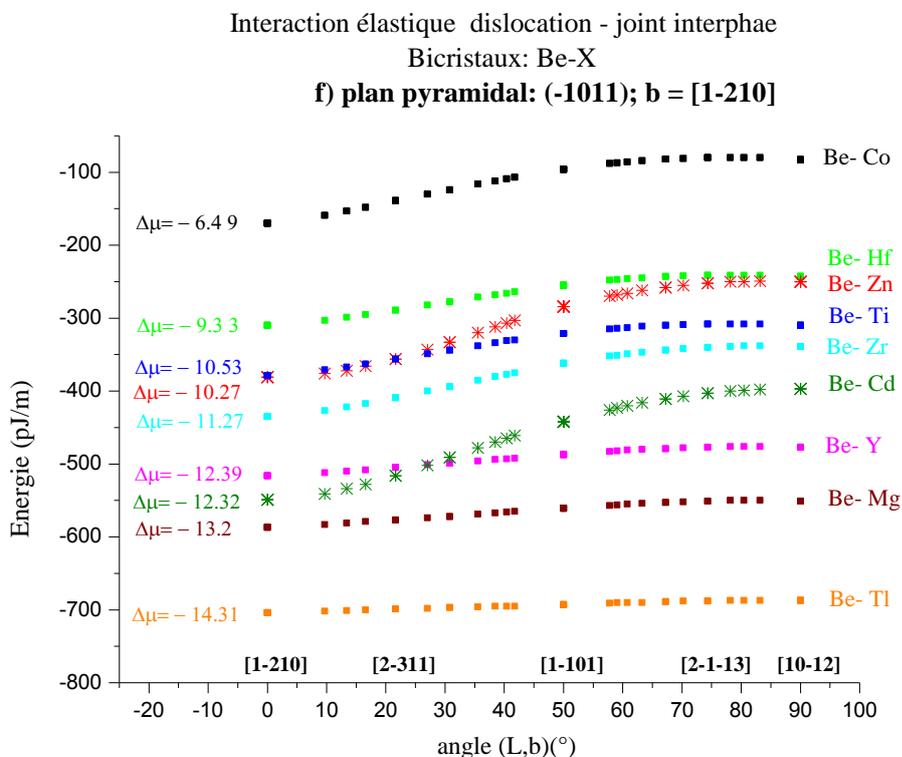
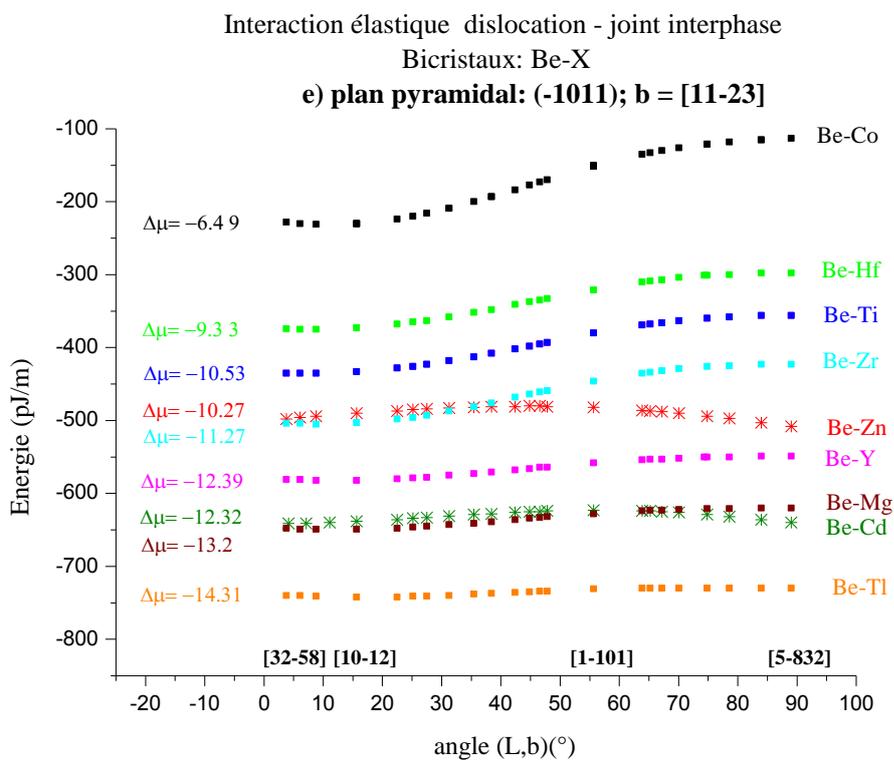
Dans le glissement basal (0001), les courbes des énergies d'interaction pour chaque bicristal sont ordonnées suivant l'ordre des  $\Delta\mu$ . On distingue deux cas particuliers, Be-Zn ( $\Delta\mu = -10.27$ ) et Be-Cd ( $\Delta\mu = -12.32$ ), pour lesquels les courbes sont décalées pour certaines lignes de dislocations figure 5.2a.

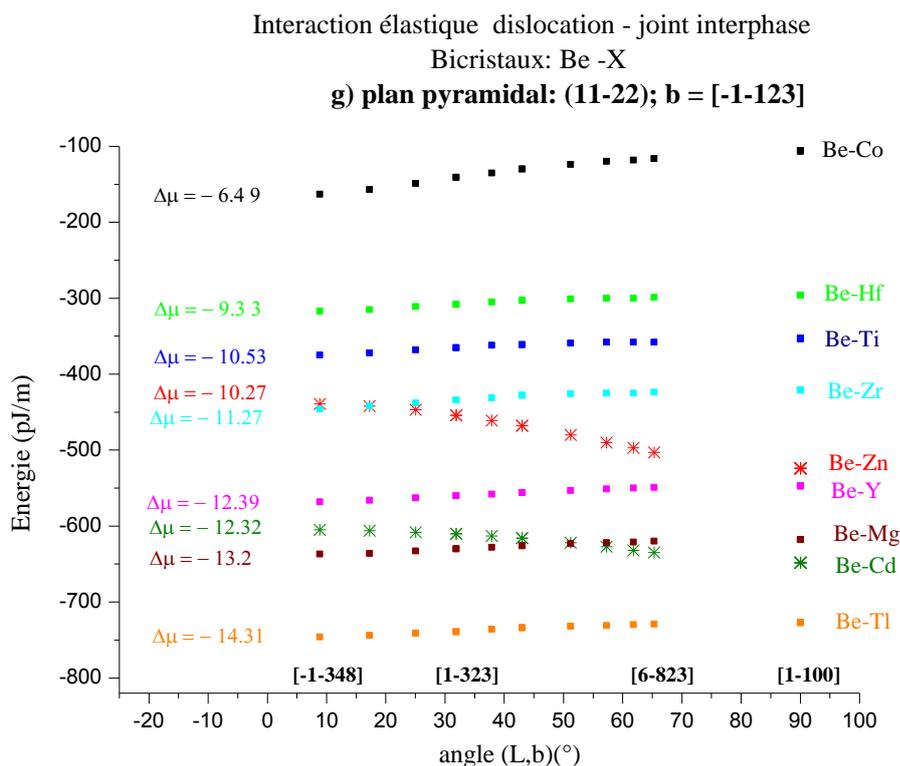
Dans les plans de glissement prismatiques, les valeurs des énergies sont classées dans l'ordre des différences des modules de cisaillement  $\Delta\mu$ , sauf pour les dislocations de caractère proche de coin dans le bicristal Be-Zn ( $\Delta\mu = -10.27$ ). De même pour les dislocations proches de la vis  $[2\bar{1}\bar{1}0]$  dans les bicristaux Be-Cd ( $\Delta\mu = -12.32$ ).

Dans les plans de glissement pyramidaux, les énergies d'interaction des dislocations situées dans les bicristaux Be-X sont ordonnées comme les valeurs de  $\Delta\mu$ , mais on relève les cas singuliers des deux bicristaux Be-Zn et Be-Cd dont les courbes sont fortement décalées, figures 5.2 e,f,g.









**Figures 5.2(a) à (g):** Bicristaux Be-X, (X= Co, Hf, Zn, Ti, Zr, Cd, Y, Mg, Tl).

Familles de courbes des énergies d'interaction dislocation –joint interphase en fonction du caractère des dislocations de vis à coin pour les sept systèmes de glissement, (a) à (g).

- R= [0001] : Axe de rotation
  - $\Theta = 0^\circ$  : Angle de rotation
  - $\Delta\mu = \mu_1 - \mu_2$  ( $10^{-3} \text{ N.m}^{-2}$ )
  - $\alpha$  (L, b) : Angle entre la ligne de dislocation et le vecteur de Burgers
- (a) : glissement basal (0001)
  - (b), (c), (d) : glissement prismatiques  $\{10\bar{1}0\}$
  - (e), (f) : glissement pyramidaux 1<sup>ère</sup> espèce ( $\bar{1}011$ )
  - (g) : glissement pyramidal 2<sup>ème</sup> espèce ( $11\bar{2}2$ )

Nous avons résumé dans le tableau 5.2 les différents résultats obtenus pour l'énergie d'interaction élastique dislocation – joints interphases comparés aux écarts des modules de cisaillement caractérisant les bicristaux Be-X.

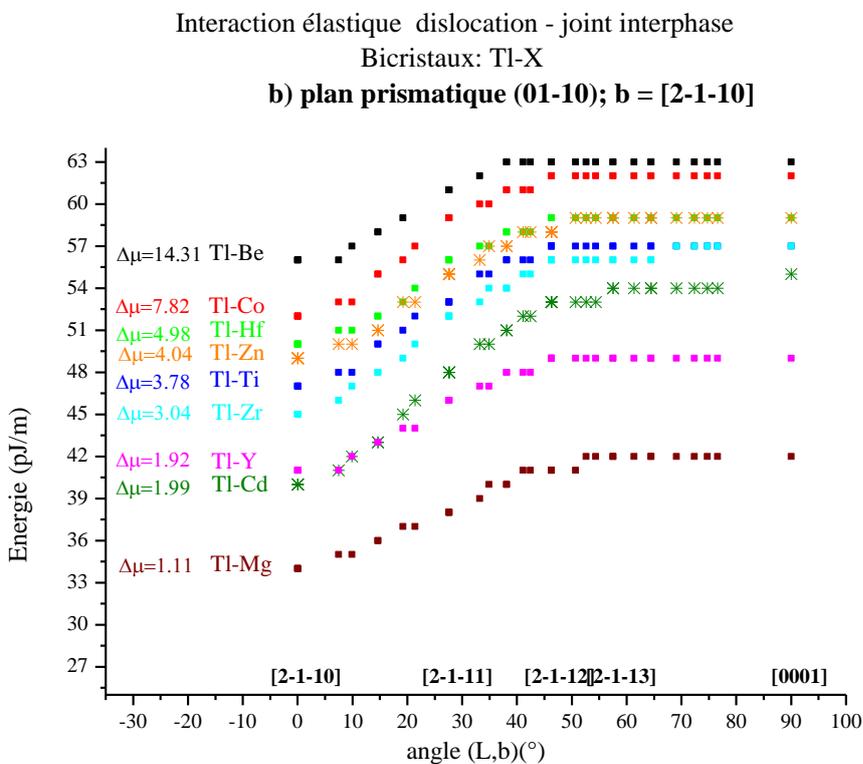
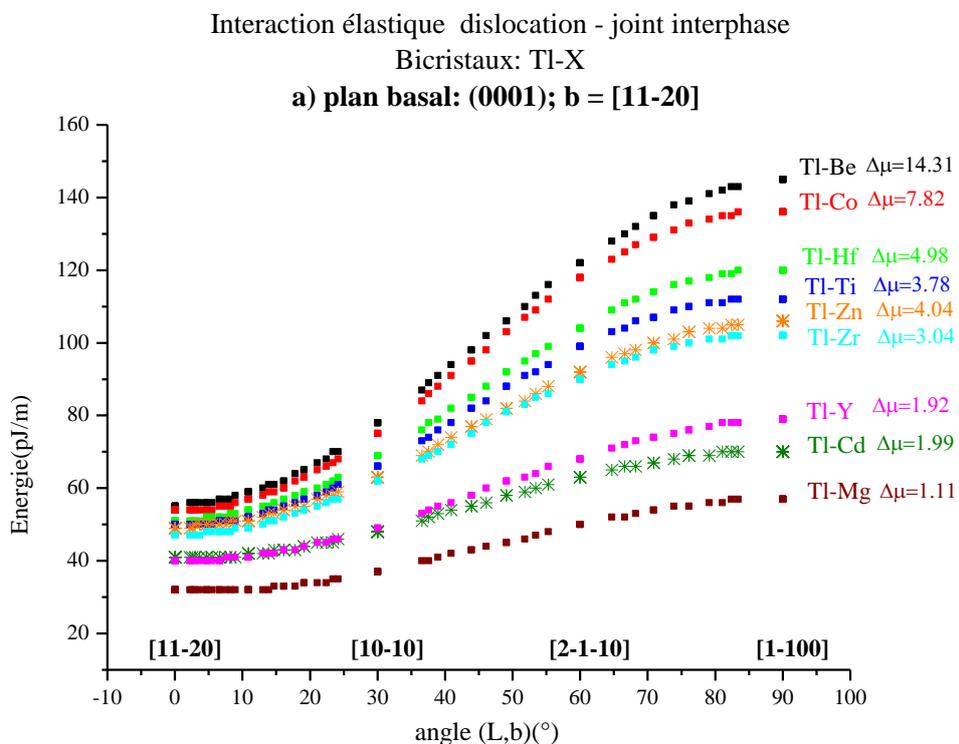
<b>Joint interphase Be-X</b>				
<b>Système de glissement</b>	<b>Plan de glissement</b>	<b>Vecteur de Burgers</b>	<b>Classement en fonction de <math>\Delta\mu</math></b>	<b><math>\Delta\mu_{Zn-X}</math> (<math>10^{-3} \text{ N.m}^{-2}</math>)</b>
<b>Basal</b>	(0001)	$1/3[11\bar{2}0]$	•Be-Zn pas bien classé ( $0^\circ < \alpha < 90^\circ$ ) •Be-Cd pas bien classé ( $30^\circ < \alpha < 90^\circ$ ) Fig. 5.2.a	• $\Delta\mu_{Be-Co} = -6.49$ • $\Delta\mu_{Be-Hf} = -9.99$
<b>Prismatique</b>	(01 $\bar{1}$ 0)	$1/3[2\bar{1}\bar{1}0]$	•Be-Zn pas bien classé ( $\alpha = 90^\circ$ ) •Be-Cd pas bien classé ( $0 < \alpha < 10$ ) Fig. 5.2.b	• $\Delta\mu_{Be-Zn} = -10.27$ • $\Delta\mu_{Be-Ti} = -10.53$ • $\Delta\mu_{Be-Zr} = -11.27$
<b>Prismatique</b>	(1 $\bar{1}$ 00)	$1/3[11\bar{2}0]$	•Be-Zn pas Bien classé : ( $0^\circ < \alpha < 20^\circ$ ) ( $\alpha = 90^\circ$ ) Fig. 5.2.c	• $\Delta\mu_{Be-Cd} = -12.32$ • $\Delta\mu_{Be-Y} = -12.39$
<b>Prismatique</b>	(10 $\bar{1}$ 0)	$1/3[\bar{1}2\bar{1}0]$	•Be-Zn pas bien classé : ( $\alpha = 0^\circ, 90^\circ$ ) •Be-Cd pas bien classé ( $0 < \alpha < 20$ ) Fig. 5.2.d	• $\Delta\mu_{Be-Mg} = -13.2$ • $\Delta\mu_{Be-Tl} = -14.31$
<b>Pyramidal 1<sup>ère</sup> espèce</b>	( $\bar{1}$ 011)	$1/3[11\bar{2}3]$	•Be-Zn pas bien Classé ( $0^\circ < \alpha < 90^\circ$ ) • Be-Cd pas bien classé ( $0^\circ < \alpha < 90^\circ$ ) Fig. 5.2.e	
<b>Pyramidal 1<sup>ère</sup> espèce</b>	( $\bar{1}$ 011)	$1/3[1\bar{2}10]$	•Be-Zn pas bien classé ( $0^\circ < \alpha < 15^\circ$ ) •Be-Cd pas bien classé ( $0^\circ < \alpha < 20^\circ$ ) Fig. 5.2.f	
<b>Pyramidal 2<sup>ème</sup> espèce</b>	(11 $\bar{2}$ 2)	$1/3[\bar{1}\bar{1}23]$	•Be-Zn pas bien classé ( $0^\circ < \alpha < 25^\circ$ ) •Be-Cd pas bien classé ( $55^\circ < \alpha < 90^\circ$ ) Fig. 5.2.g	

**Tableau 5.2 :** Effet du module de cisaillement sur l'énergie d'interaction élastique dislocation-interface dans les bicristaux Be-X.

### 5.1.3 - Interfaces Tl-X : $\Delta\mu > 0$

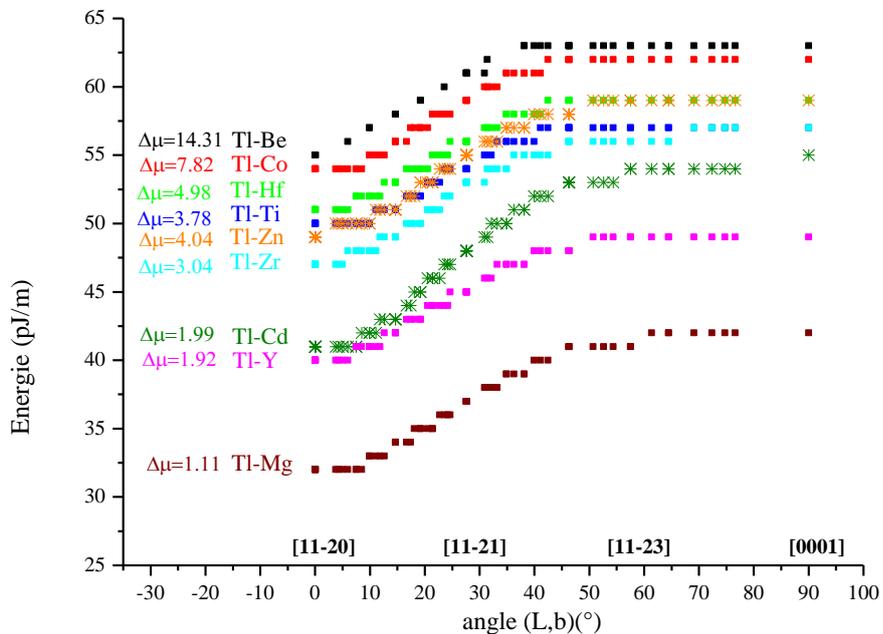
Ces interfaces ont un cristal (X) plus dur que le cristal (Tl),  $\Delta\mu > 0$ . Les énergies d'interaction des dislocations situées dans le cristal Tl, cristal (1) d'un bicristal Tl-X, sont positives. La force image est répulsive, et les dislocations sont toujours repoussées loin de l'interface quel que soit le métal constituant le cristal (2). L'intensité de la force image augmente avec l'écart des modules de cisaillement. Figures 5.3a à 5.3g.

Les intensités des énergies d'interaction sont ordonnées comme les valeurs des écarts des modules de cisaillement  $\Delta\mu$ . Seuls les deux bicristaux Tl-Zn et Tl-Cd font exception à cette règle, les métaux Zn et Cd possèdent les plus faibles facteurs d'anisotropie  $H$  et les rapports d'anisotropie  $A_c$  et  $A_s$  les plus grands.



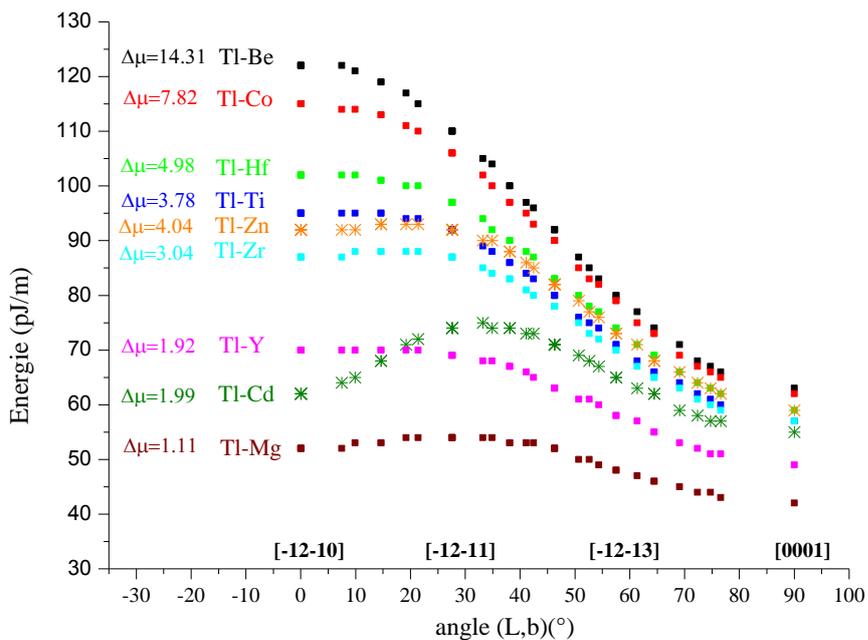
Interaction élastique dislocation - joint interphase  
Bicristaux: Tl-X

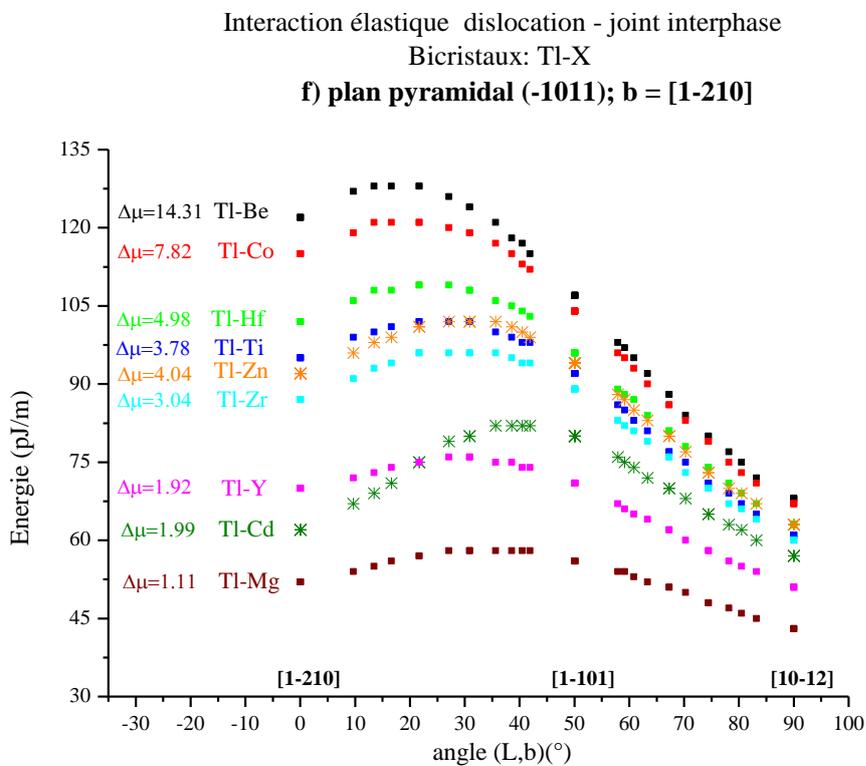
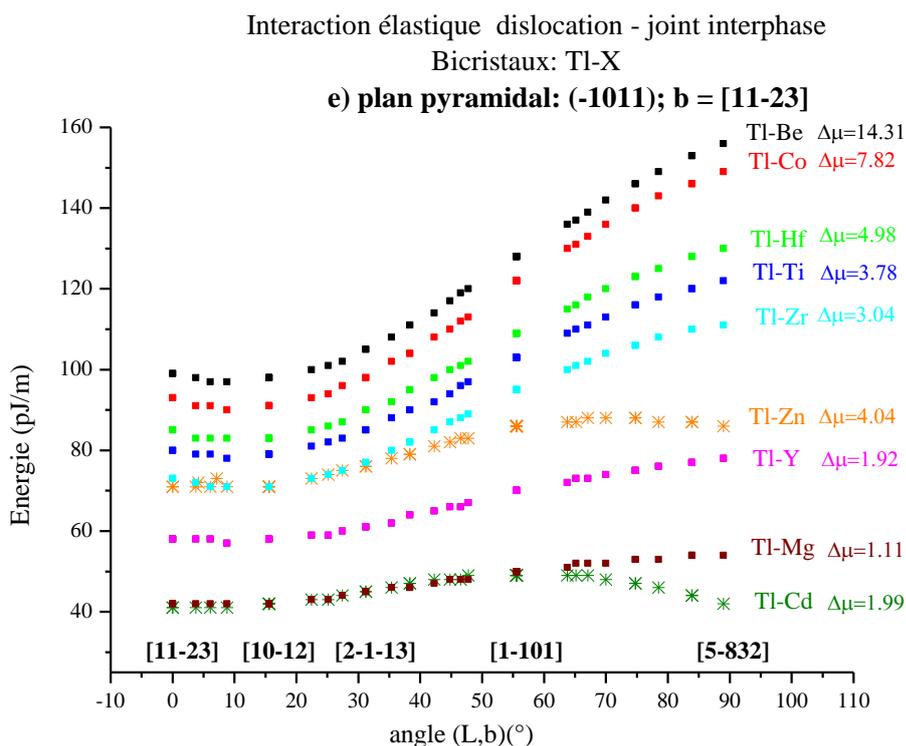
c) plan prismatique: (1-100); b = [11-20]

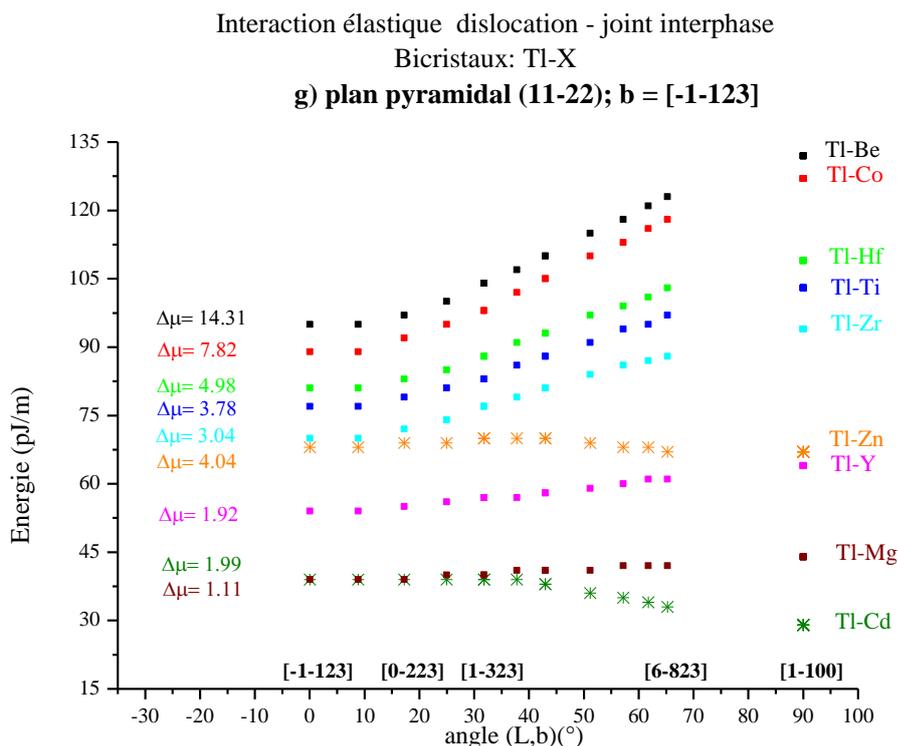


Interaction élastique dislocation - joint interphase  
Bicristaux: Tl-X

d) plan prismatique (10-10); b = [-12-10]







**Figures 5.3 (a) à (g) :** Bicristaux Tl-X, (X= Be, Co, Hf, Zn, Ti, Zr, Cd, Y, Mg).

Familles de courbes des énergies d'interaction dislocation –joint interphase en fonction du caractère des dislocations de vis à coin pour les sept systèmes de glissement, (a) à (g).

- Axe de rotation :  $R = [0001]$
- Angle de rotation :  $\Theta = 0^\circ$
- $\alpha (L, b)$  : angle entre la ligne de dislocation et le vecteur de Burgers
  - (a) : glissement basal (0001)
  - (b), (c) : (d) : glissements prismatiques  $\{10\bar{1}0\}$
  - (e), (f) : glissements pyramidaux de 1<sup>ère</sup> espèce ( $\bar{1}011$ )
  - (g) : glissement pyramidal de 2<sup>ème</sup> espèce ( $11\bar{2}2$ )

Nous avons résumé dans le tableau 5.3 les différents résultats obtenus pour l'énergie d'interaction élastique dislocation – joints interphases avec la différence du module de cisaillement caractérisant les bicristaux Tl-X.

Joint interphase Tl-X				
Plan de glissement	Systèmes de Glissement	Vecteur de Burgers	(Classement en fonction de $\Delta\mu$ )	$\Delta\mu_{Zn-X}$ ( $10^{-3} \text{ N.m}^{-2}$ )
(0001)	Basal	$\frac{1}{3}[11\bar{2}0]$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tl-Zn pas bien classé (<math>0^\circ &lt; \alpha &lt; 90^\circ</math>)</li> <li>• Tl-Cd pas bien classé (<math>25^\circ &lt; \alpha &lt; 90^\circ</math>)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>\Delta\mu_{Tl-Be} = 14.34</math></li> <li>• <math>\Delta\mu_{Tl-Co} = 7.82</math></li> <li>• <math>\Delta\mu_{Tl-Hf} = 4.98</math></li> </ul>
(01 $\bar{1}0$ )	Prismatique	$[2\bar{1}\bar{1}0]$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tl-Cd pas bien classé (<math>0^\circ &lt; \alpha &lt; 25^\circ</math>)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>\Delta\mu_{Tl-Zn} = 4.04</math></li> <li>• <math>\Delta\mu_{Tl-Ti} = 3.78</math></li> </ul>
(1 $\bar{1}00$ )	Prismatique	$\frac{1}{3}[11\bar{2}0]$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tl-Zn pas Bien classé <math>\alpha=0^\circ</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>\Delta\mu_{Tl-Zr} = 3.04</math></li> <li>• <math>\Delta\mu_{Tl-Cd} = 1.99</math></li> </ul>
(10 $\bar{1}0$ )	Prismatique	$\frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0]$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tl-Zn pas bien classé (<math>0^\circ &lt; \alpha &lt; 20^\circ</math>)</li> <li>• Tl-Cd pas bien classé (<math>0^\circ &lt; \alpha &lt; 15^\circ</math>)</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>\Delta\mu_{Tl-Y} = 1.92</math></li> <li>• <math>\Delta\mu_{Tl-Mg} = 1.11</math></li> </ul>
( $\bar{1}011$ )	Pyramidal 1 <sup>ère</sup> espèce	$\frac{1}{3}[11-23]$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tl- Zn pas bien Classé (<math>0^\circ &lt; \alpha &lt; 90^\circ</math>)</li> <li>• Tl- Cd pas bien classé (<math>65^\circ &lt; \alpha &lt; 90^\circ</math>)</li> </ul>	
( $\bar{1}011$ )	Pyramidal 1 <sup>ère</sup> espèce	$\frac{1}{3}[1\bar{2}10]$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tl-Zn pas bien Classé (<math>0^\circ &lt; \alpha &lt; 25^\circ</math>)</li> <li>• Tl-Cd pas bien Classé (<math>0^\circ &lt; \alpha &lt; 25^\circ</math>)</li> </ul>	
(11 $\bar{2}2$ )	Pyramidal 2 <sup>ème</sup> espèce	$\frac{1}{3}[\bar{1}\bar{1}23]$	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Tl-Zn pas bien classé (<math>0^\circ &lt; \alpha &lt; 90^\circ</math>)</li> <li>• Tl-Cd pas bien Classé (<math>25^\circ &lt; \alpha &lt; 90^\circ</math>)</li> </ul>	

**Tableau 5.3** Effet de l'écart des modules de cisaillement sur l'énergie d'interaction élastique des bicristaux Tl-X de structure HCP pour chaque système de glissement.

## 5.2 - Effet de la désorientation

L'énergie d'interaction élastique entre les dislocations et les joints d'interphases Zn-X peut être contrôlée en ajustant l'angle de désorientation.

Nous étudions la variation de l'énergie d'interaction élastique dislocation-joint interphases dans le plan basal (0001) et nous élargissons cette étude à chacun des sept systèmes de glissement de la structure hexagonale.

### 5.2.1 Système de glissement basal : (0001) $[11\bar{2}0]$

Pour les quatre désorientations,  $0^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $90^\circ$ , nous avons tracé les courbes de variation de l'énergie d'interaction élastique en fonction du caractère des dislocations figures 5.4a à 5.4i.

L'effet de la désorientation est faible : les écarts restent inférieurs à 100 pJ/m

Pour la désorientation nulle, i.e il n'y a que l'effet de l'écart des modules d'une figure à l'autre. La variation de  $\Delta E$  est très faible pour  $\Delta\mu$  proche de 1, Zn-Co, Zn-Hf, Zn-Ti et Zn-Zr. La variation est plus accentuée quand  $\Delta\mu$  est important quel que soit le signe : Zn-Be et les autres.

Pour la désorientation  $\Theta = 30^\circ$  : variation en S quel que soit  $\Delta\mu$ , faible ou nulle pour la dislocation vis et relativement important pour la dislocation coin.

Pour la désorientation  $\Theta = 60^\circ$  : Variation de  $\Delta E$  en S quand  $\Delta\mu$  est grand. Variation avec un minimum pour la dislocation à  $30^\circ$  quand  $\Delta\mu$  est faible.

Pour  $\Theta = 90^\circ$ , l'allure des courbes est comparable à celles de la désorientation  $\Theta = 0^\circ$  et peuvent être confondues.

Les valeurs des énergies d'interaction extrêmes calculées et les lignes des dislocations correspondantes, pour tous les bicristaux Zn-X étudiés dans le plan basal sont représentés dans le tableau 5.4.

Système de glissement Basal						
Bicristaux Zn-X	$\Delta E_{\min}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	Dislocation	$\Delta E_{\max}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	Dislocation
Zn-Be	167	90°, 60°	$[11\bar{2}0]$ $[43\bar{7}0]$	194	0°	$[1\bar{1}00]$
		90°	$[21\bar{3}0]$ $[32\bar{5}0]$ $[53\bar{8}0]$			
Zn-Co	65	30°	$[11\bar{2}0]$	156	30°	/
Zn-Hf	14	/	/	69	/	/
Zn-Ti	-36	/	/	40	/	/
Zn-Zr	-67	/	/	-4	/	/
Zn-Cd	-127	/	$[11\bar{2}0]$ $[21\bar{3}0]$ $[32\bar{5}0]$ $[54\bar{9}0]$	-112	/	/
Zn-Y	-131	0°, 90°	$[21\bar{3}0]$ $[53\bar{8}0]$	-88	0°, 60°, 90°	/
Zn-Mg	-196	/	$[21\bar{3}0]$ $[53\bar{8}0]$ $[63\bar{9}0]$	-143	/	/
Zn-Tl	-299	/	$[43\bar{7}0]$ $[540\bar{9}]$	-250	0°, 30°, 60°, 90°	/

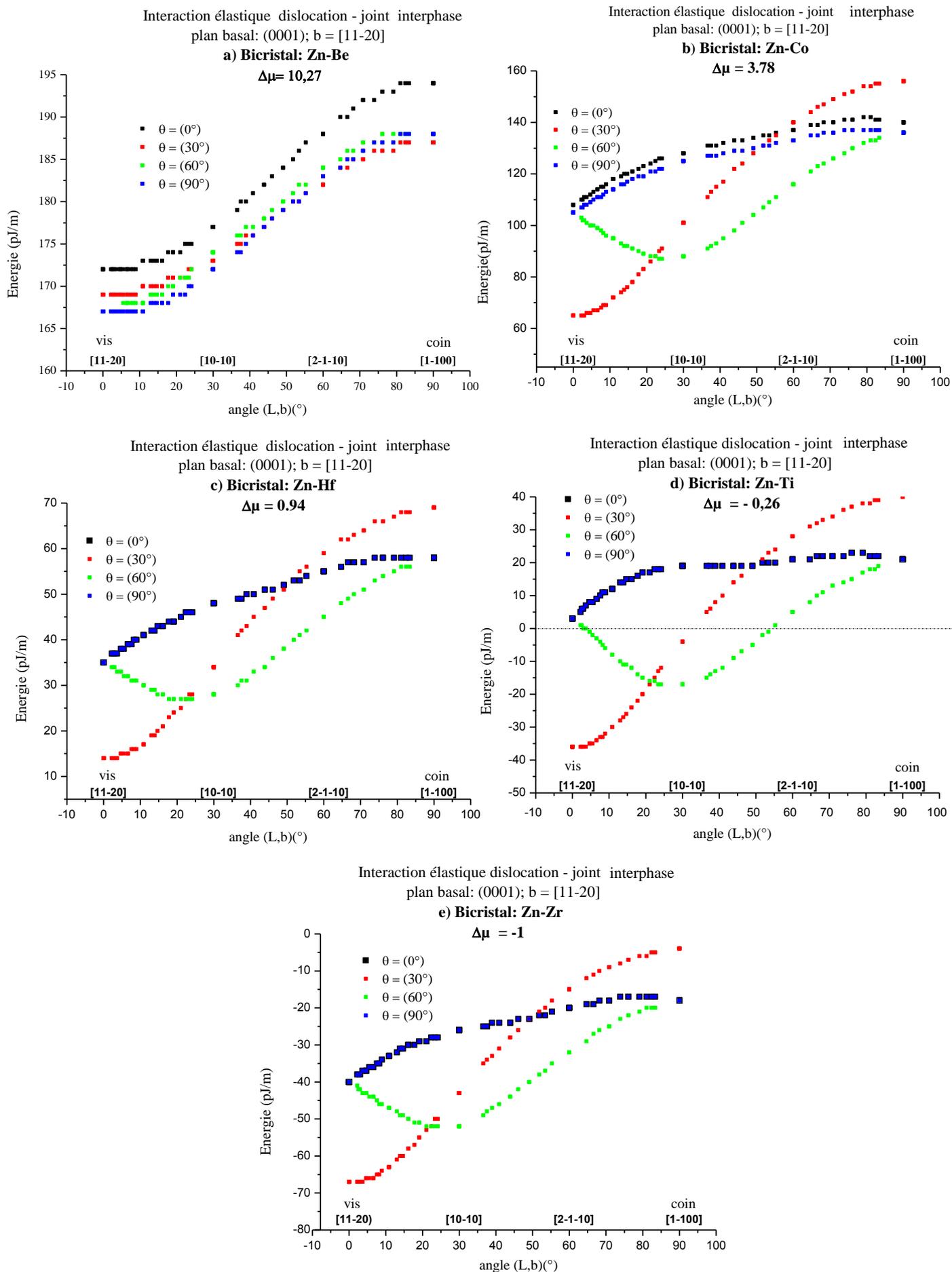
**Tableau 5.4 :** Energies d'interaction élastique dislocations-joints interphases pour les bicristaux Zn-X dans le système de glissement basal.

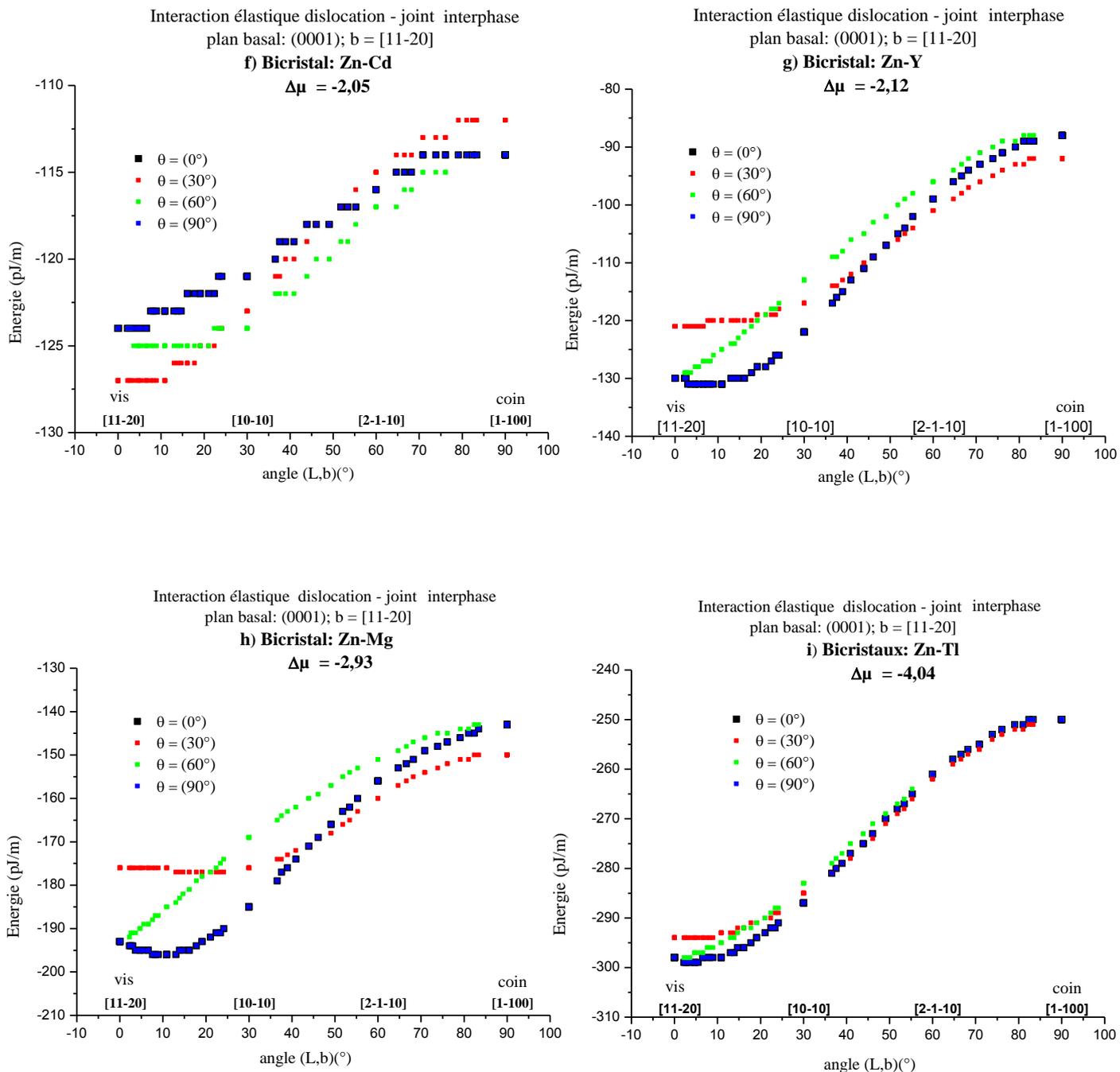
-  $\Delta E_{\max}$ : Energie d'interaction maximale

-  $\Delta E_{\min}$ : Energie d'interaction minimale

-  $b = [11\bar{2}0]$  : vecteur de Burgers

-  $R = [0001]$  : axe de rotation





**Figures 5.4 (a) à (i) :** Variations des énergies d’interaction élastique dislocation- joints d’interphases Zn-X avec la désorientation dans le système de glissement basal.

- Angle de rotation  $\Theta$  : (0°) courbe noire, (30°) courbe rouge, (60°) courbe verte, (90°) courbe bleue.

- système de glissement basal (0001)  $[11\bar{2}0]$ .

- bicristaux Zn-X : X= Be, Co, Hf, Ti, Zr, Cd, Y, Mg, Tl.

### 5.2.2- Système de glissement prismatique I : $(\bar{1}\bar{1}00)$ $[11\bar{2}0]$

Nous avons tracé les courbes de variation des énergies figures 5.5a à 5.5i afin d'étudier l'évolution des énergies d'interaction avec la désorientation pour chacun des bicristaux. Les résultats de nos calculs sont regroupés dans le tableau 5.5.

Nous constatons que pour l'interface Zn-Be figure 5.5a la désorientation induit une très faible variation de l'énergie d'interaction. Les courbes sont confondues. L'énergie d'interaction est positive pour toutes les lignes de dislocations. La force image est répulsive, les dislocations coin  $[0001]$  et la dislocation vis  $[11\bar{2}0]$  sont toujours repoussées avec une faible intensité de l'ordre de quelques pico joules par mètre. Un maximum de la répulsion est observé pour les dislocations mixtes inclinées de  $40^\circ$  sur le vecteur de Burgers.

Pour l'interface Zn-Co la figure 5.5b, montre que l'intensité de l'interaction est la même pour  $\Theta$  égale ( $0^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ ) varie différemment pour  $\Theta$  égale  $30^\circ$ . La dislocation coin correspond au maximum de la répulsion quelle que soit la désorientation. Le minimum est obtenu pour la dislocation vis à la désorientation  $\Theta$  égale  $30^\circ$ .

Cas de Zn-Hf, Zn-Ti, Zn-Zr : les courbes de variation de l'énergie d'interaction en fonction du caractère des dislocations sont confondues sauf pour la désorientation  $\Theta$  égale  $30^\circ$ . Pour Zn-Hf la dislocation coin a une interaction nulle quelle que soit la désorientation figure 5.5c. Cette dislocation correspond au maximum de l'attraction pour Zn-Ti et Zn-Zr figures 5.5d et 5.5e.

Cas de Zn-Y, Zn-Mg, Zn-Tl : Les courbes sont confondues pour les trois bicristaux et la dislocation coin correspond au maximum de l'attraction figures 5.5g, h et i.

Système de glissement Prismatique I : $(1\bar{1}00)$ $[11\bar{2}0]$						
Bicristaux Zn-X	$\Delta E_{\min}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	Dislocation	$\Delta E_{\max}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	dislocation
Zn-Be	172	$0^{\circ}, 60^{\circ}, 90^{\circ}$	$[11-20]$	192	$30^{\circ}$	$[22\bar{4}3]$
Zn-Co	67	$0^{\circ}$	$[11-20]$	131	$0^{\circ}, 30^{\circ}, 60^{\circ}, 90^{\circ}$	$[0001]$
Zn-Hf	0	$0^{\circ}, 30^{\circ}, 60^{\circ}, 90^{\circ}$	$[0001]$	41	$0^{\circ}, 60^{\circ}, 90^{\circ}$	$[33\bar{6}2]$
Zn-Ti	-58	/	/	6	/	$[22\bar{4}1]$
Zn-Zr	-78	/	/	-32	/	$[33\bar{6}2]$
Zn-Cd	-130	/	/	-104	/	$[11\bar{2}1]$
Zn-Y	-226	/	/	-114	$30^{\circ}$	$[33\bar{6}2]$
Zn-Mg	-310	/	/	-171	/	$[22\bar{4}1]$
Zn-Tl	-490	/	/	-292	/	/

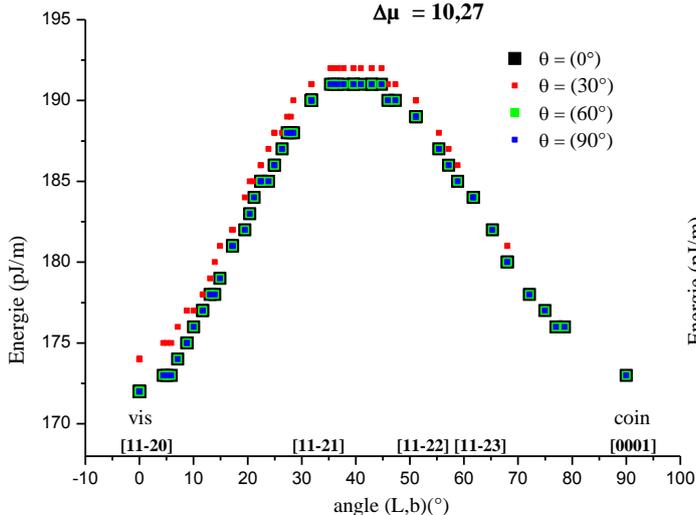
**Tableau 5.5 :** Energies d'interaction élastique dislocations-joints interphases dans les bicristaux Zn-X de structure hexagonale dans le système de glissement prismatique I

- $\Delta E_{\max}$  : Energie d'interaction maximale
- $\Delta E_{\min}$  : Energie d'interaction minimale
- $R = [0001]$  : axe de rotation
- $\Theta$  : angle de rotation
- $b = \frac{1}{3} [11\bar{2}0]$  vecteur de Burgers

Interaction élastique dislocation - joint interphase  
plan prismatique: (1-100); b = [11-20]

a) Bicristal: Zn-Be

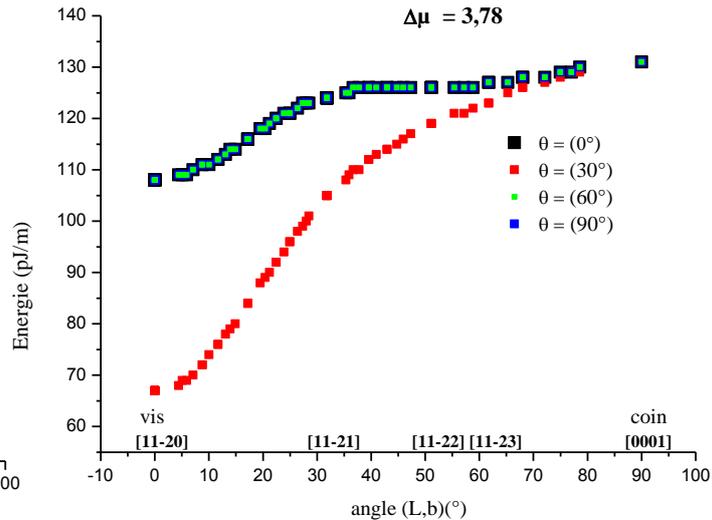
$\Delta\mu = 10,27$



Interaction élastique dislocation - joint interphase  
plan prismatique: (1-100); b = [11-20]

b) Bicristal: Zn-Co

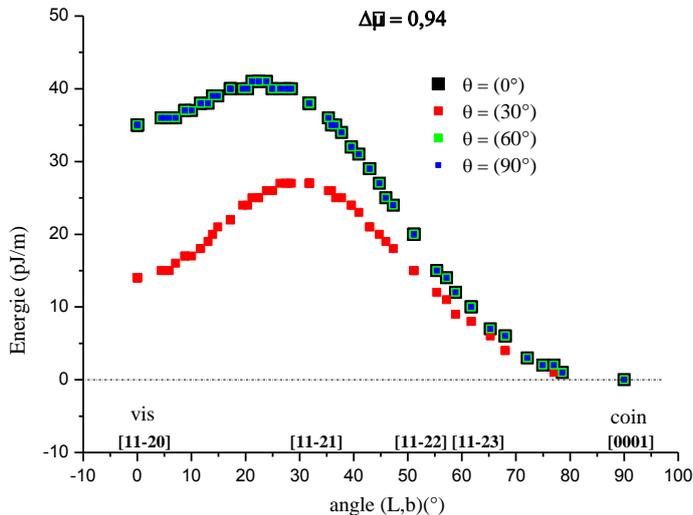
$\Delta\mu = 3,78$



Interaction élastique dislocation - joint interphase  
plan prismatique: (1-100); b = [11-20]

c) Bicristal: Zn-Hf

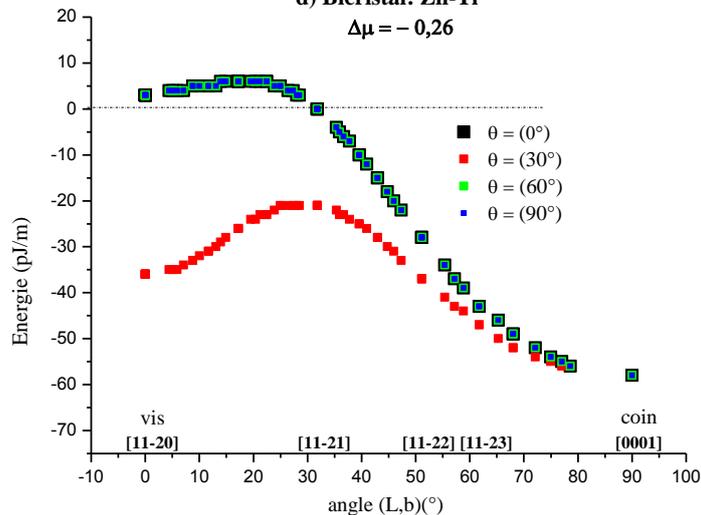
$\Delta\mu = 0,94$



Interaction élastique dislocation - joint interphase  
plan prismatique: (1-100); b = [11-20]

d) Bicristal: Zn-Ti

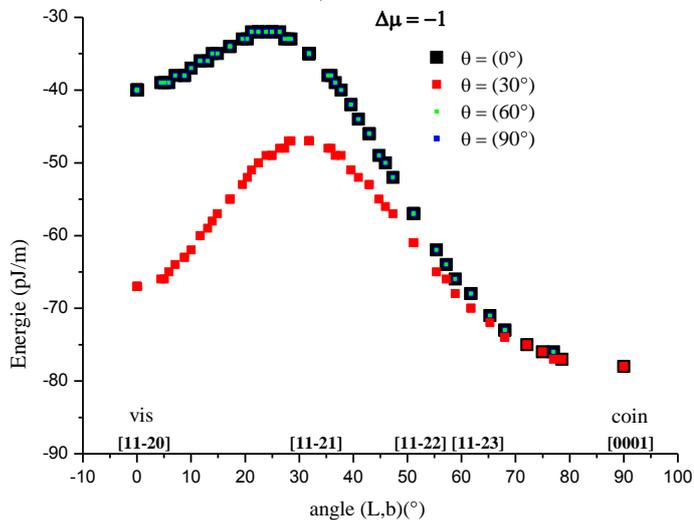
$\Delta\mu = -0,26$

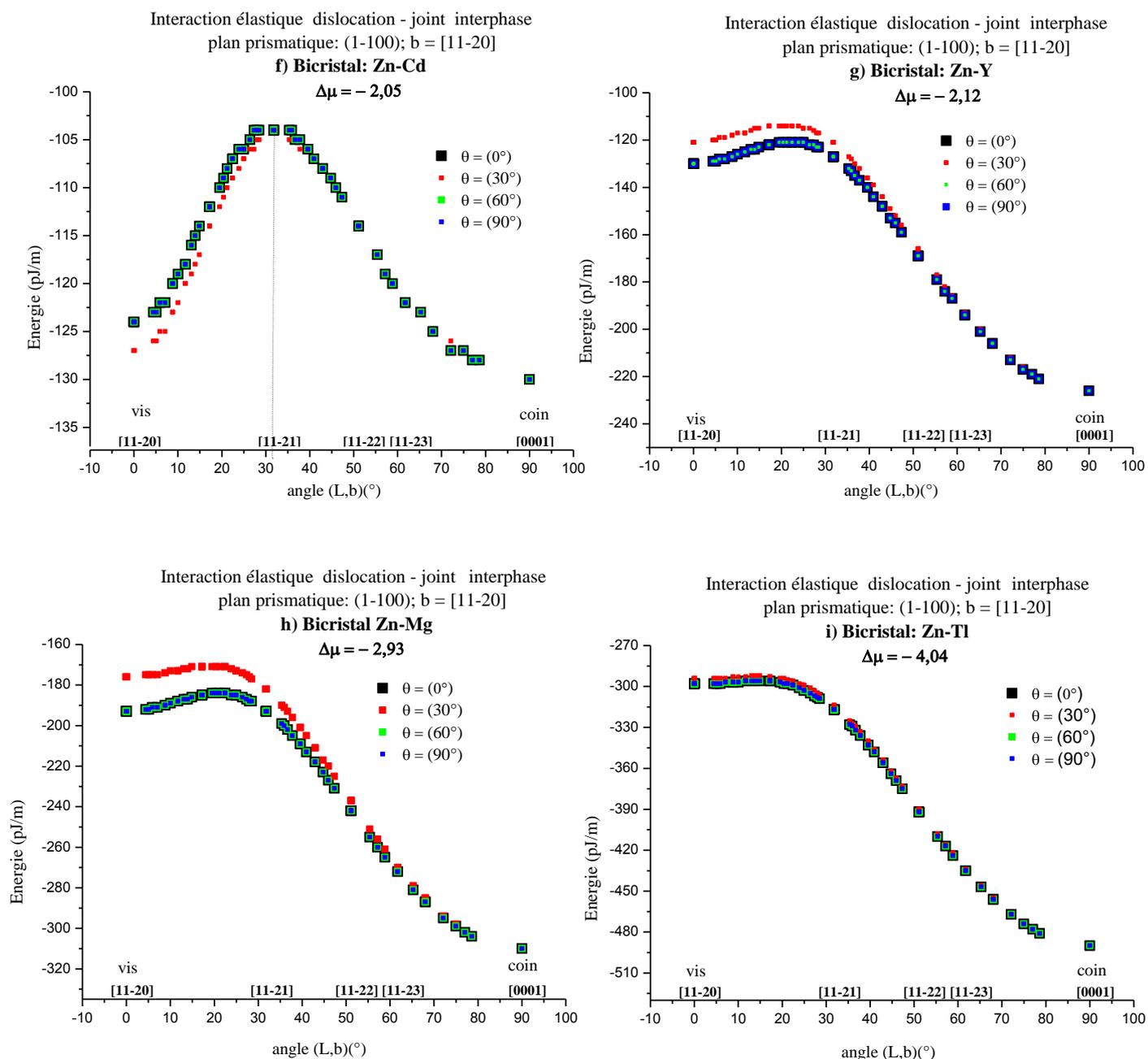


Interaction élastique dislocation - joint interphase  
plan prismatique: (1-100); b = [11-20]

e) Bicristal: Zn-Zr

$\Delta\mu = -1$





**Figures 5.5 (a) à (i) :** Variations des énergies d'interaction élastique dislocation- joints interphases Zn-X avec la désorientation dans le système de glissement prismatique I.

- système de glissement prismatique I : (1-100) [11-20].

- Bicristaux Zn-X: X= Be, Co, Hf, Ti, Zr, cd, Y, Mg, Tl

- Angles de rotation  $\Theta$  : ( $0^\circ$ ) courbe noire, ( $30^\circ$ ) courbe rouge, ( $60^\circ$ ) courbe verte, ( $90^\circ$ ) courbe bleue.

### 5.2.3 - Système de glissement prismatique II : $(01\bar{1}0)$ $[2\bar{1}\bar{1}0]$

Nous avons calculé les énergies d'interaction élastique entre les dislocations et les interfaces Zn-X, dans le système de glissement prismatique II :  $(01\bar{1}0)$   $[2\bar{1}\bar{1}0]$ .

Nous avons tracé les courbes de variation des énergies figures 5.6a à 5.6i afin d'étudier l'évolution des énergies d'interaction avec la désorientation pour chacun des bicristaux. Les résultats de nos calculs sont regroupés dans le tableau 5.6.

Nous constatons que pour l'interface Zn-Be, figure 5.6a la désorientation induit une très faible variation de l'énergie d'interaction de l'ordre du pJ/m. Les courbes sont pratiquement confondues. L'énergie d'interaction est positive pour toutes les lignes de dislocations. La force image est répulsive. Les dislocations coin  $[0001]$  et la dislocation vis  $[11\bar{2}0]$  sont toujours repoussées avec une faible intensité de l'ordre de quelques pico joules par mètre. Un maximum de la répulsion est observé pour les dislocations mixtes inclinées de  $40^\circ$  sur le vecteur de Burgers.

Pour l'interface Zn-Co la figure 5.6b, montre que l'intensité de l'interaction est la même pour  $\Theta$  égale  $0^\circ$  et  $90^\circ$  d'une part et  $\Theta$  égale à  $30^\circ$  et  $60^\circ$  d'autre part. La dislocation coin correspond au maximum de la répulsion quelle que soit la désorientation. Deux minima sont obtenus pour la dislocation vis aux désorientations  $\Theta$  égale  $30^\circ$  et  $60^\circ$  et  $0^\circ$  et  $90^\circ$ .

Cas de Zn-Hf, Zn-Ti, Zn-Zr : les courbes de variation de l'énergie d'interaction en fonction du caractère des dislocations sont confondues pour les désorientations  $\Theta$  égale  $30^\circ$  et  $60^\circ$  d'une part et  $\Theta$  égale  $0^\circ$  et  $90^\circ$  d'autre part. Pour Zn-Hf la dislocation coin a une interaction nulle quelle que soit la désorientation. Cette dislocation correspond au maximum de l'attraction pour Zn-Ti et Zn-Zr, figures 5.6 c, d et e.

Cas de Zn-Cd : Les courbes sont confondues : pas d'effet de la désorientation. Les deux dislocations vis et coin correspondent aux maxima d'attraction, figure 5.6f.

Cas de Zn-Y, Zn-Mg, Zn-Tl : Les courbes sont confondues pour les trois bicristaux et la dislocation coin correspond au maximum de l'attraction, figures 5.6 g, h et i.

Le tableau 5.6 indique les valeurs extrêmes des énergies d'interaction pour les bicristaux Zn-X dans le plan Prismatique (01 $\bar{1}$ 0) pour le vecteur de Burgers [11 $\bar{2}$ 0].

Système de glissement Prismatique II : (01 $\bar{1}$ 0) [ $\frac{1}{3}$ 2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]						
Interphases Zn-X	$\Delta E_{\min}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	Dislocation	$\Delta E_{\max}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	dislocation
Zn-Be	172	30°,60°	[ $\frac{1}{3}$ 2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]	192	0°,90°	[2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 1]
Zn-Co	67	0°,90°	/	131	0°, 30°,60°, 90°	[0001]
Zn-Hf	0	0°,30°, 60°,90°	[0001]	41	30°,60°	[6 $\bar{3}$ $\bar{3}$ 2]
Zn-Ti	-58	/	/	6	/	[4 $\bar{2}$ $\bar{2}$ 1]
Zn-Zr	-78	/	/	-32	/	[6 $\bar{3}$ $\bar{3}$ 2]
Zn-Cd	-130	/	/	-104	/	[2 $\bar{1}$ $\bar{1}$ 1]
Zn-Y	-226	/	/	-114	0°,90°	[4 $\bar{2}$ $\bar{2}$ 1]
Zn-Mg	-310	/	/	-171	/	/
Zn-Tl	-490	/	/	-293	/	/

**Tableau 5.6 :** Energies d'interaction élastique dislocations-joints interphases Zn-X de structure hexagonale dans le système de glissement prismatique (01 $\bar{1}$ 0) [ $\frac{1}{3}$ 2 $\bar{1}$  $\bar{1}$ 0].

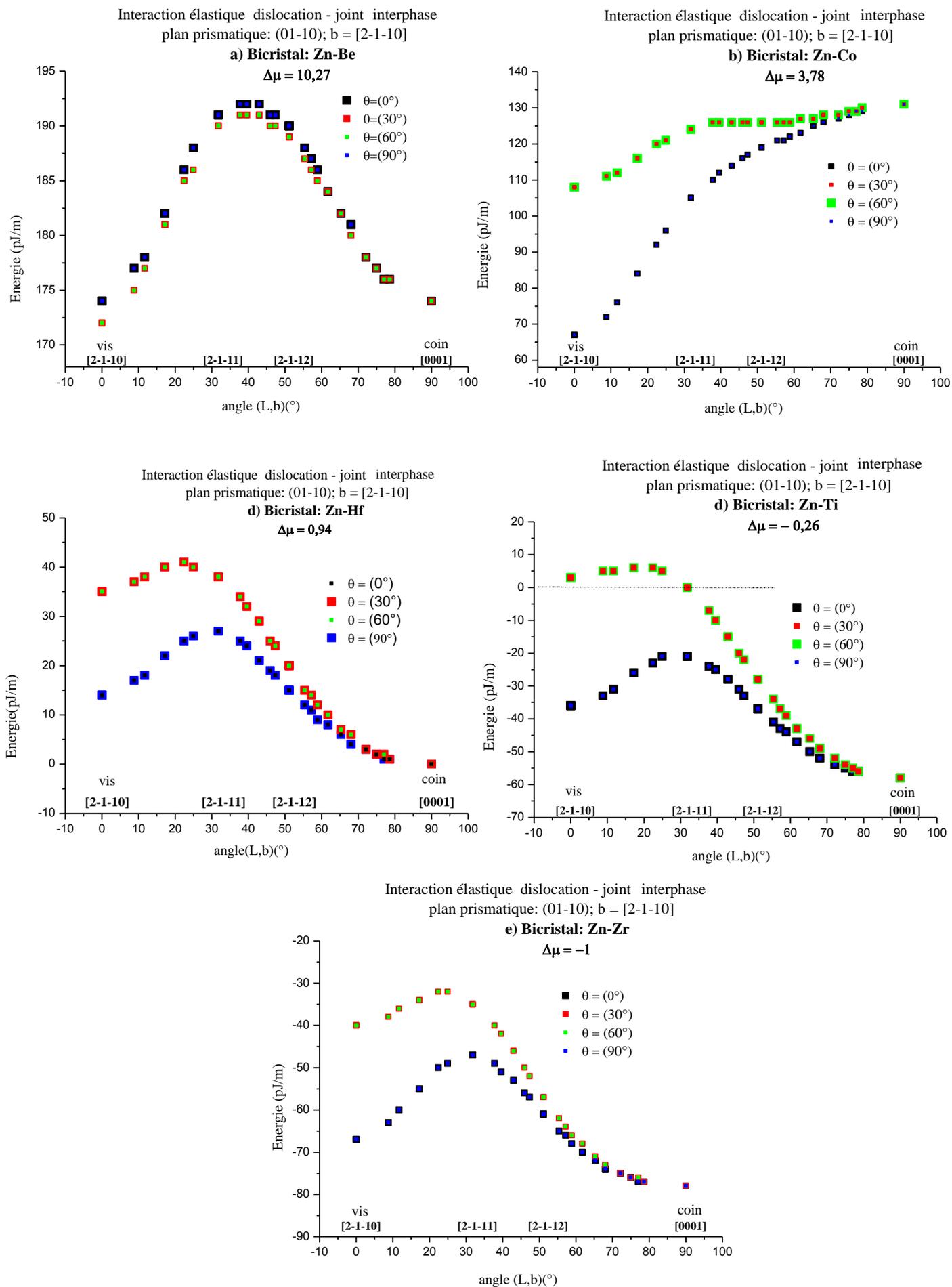
-  $\Delta E_{\max}$ : Energie d'interaction maximale

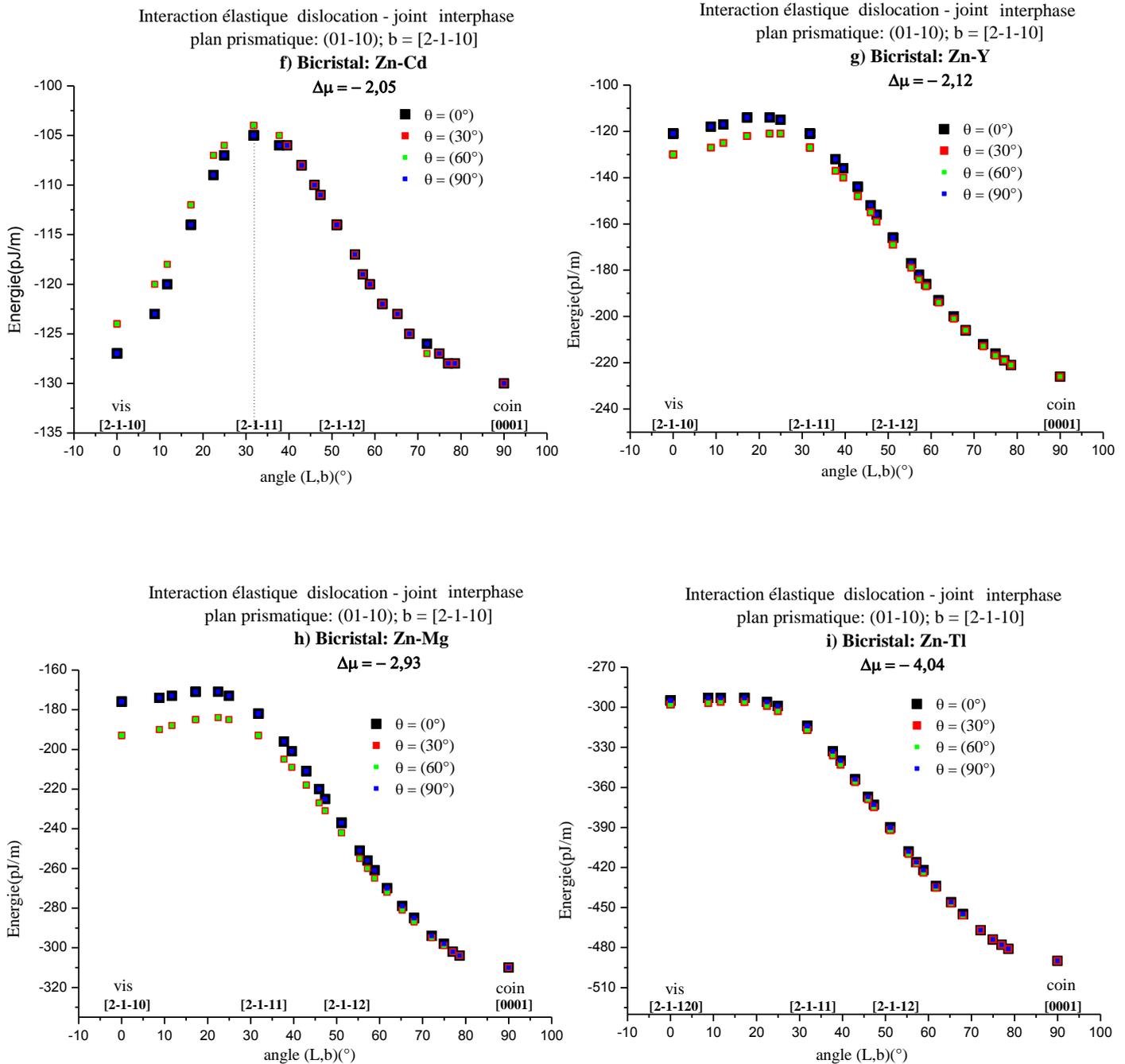
-  $\Delta E_{\min}$ : Energie d'interaction minimale

- R = [0001] : axe de rotation

-  $\Theta$  : angle de rotation

-  $b = \frac{1}{3}$  [ $\frac{1}{3}$ 2 $\bar{1}$  $\bar{1}$ 0]: vecteur de Burgers





**Figures 5.6 (a) à (i):** Variations des énergies d'interaction élastique dislocation- joints d'interphases Zn-X avec la désorientation dans le système de glissement prismatique II.

-Angle de rotation  $\Theta$  : ( $0^\circ$ ) courbe noire, ( $30^\circ$ ) courbe rouge, ( $60^\circ$ ) courbe verte, ( $90^\circ$ ) courbe bleue.

-système de glissement prismatique II :  $(01\bar{1}0)$   $[2\bar{1}\bar{1}0]$ .

-Bicristaux Zn-X: X= Be, Co, Hf, Ti, Zr, cd, Y, Mg, Tl

#### 5.2.4 Système de glissement prismatique III : $(10\bar{1}0)$ $[\bar{1}2\bar{1}0]$

Etudions maintenant l'évolution des énergies d'interaction élastique avec la désorientation dans le plan prismatique  $(10\bar{1}0)$   $[\bar{1}2\bar{1}0]$  pour chacun des bicristaux :

- Zn-Be : pas d'effet de la désorientation figure 5.7a.
- Zn-Co : Les courbes de  $0^\circ$  et  $90^\circ$  sont séparées des courbes  $30^\circ$  et  $60^\circ$ . La dislocation coin subit la même attraction quelle que soit la désorientation figure 5.7b.
- Zn- autres X : pas d'effet de la désorientation et la dislocation coin subit l'attraction maximale figures 5.7c à i.

Les valeurs des énergies d'interaction extrêmes calculées et les lignes des dislocations correspondantes pour tous les bicristaux Zn-X étudiés dans le plan prismatique  $(10\bar{1}0)$  sont représentés dans le tableau 5.7.

Le tableau 5.7 indique les valeurs extrêmes des énergies d'interaction pour les bicristaux Zn-X étudiés dans le plan prismatique  $(10\bar{1}0)$  de vecteur de Burgers  $[\bar{1}2\bar{1}0]$ .

Système de glissement Prismatique III: $(10\bar{1}0)$ $[\bar{1}2\bar{1}0]$						
Bicristaux Zn-X	$\Delta E_{\min}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	Dislocation	$\Delta E_{\max}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	dislocation
Zn-Be	173	$0^{\circ}, 30^{\circ}, 60^{\circ}, 90^{\circ}$	$[0001]$	202	$0^{\circ}, 90^{\circ}$	$[\bar{1}2\bar{1}1]$
Zn-Co	120	$0^{\circ}, 90^{\circ}$	$[\bar{1}2\bar{1}0]$	145	$30^{\circ}$	/
Zn-Hf	0	$0^{\circ}, 30^{\circ}, 60^{\circ}, 90^{\circ}$	$[0001]$	59	/	$[\bar{1}2\bar{1}0]$
Zn-Ti	-58	/	/	28	/	/
Zn-Zr	-78	/	/	-15	/	/
Zn-Cd	-130	/	/	-112	$0^{\circ}, 30^{\circ}, 60^{\circ}$	$[\bar{3}6\bar{3}5]$
Zn-Y	-226	/	/	-96	$0^{\circ}, 90^{\circ}$	$[\bar{1}2\bar{1}0]$
Zn-Mg	-310	/	/	-151	/	/
Zn-Tl	-490	/	/	-261	$0^{\circ}, 30^{\circ}, 60^{\circ}, 90^{\circ}$	/

**Tableau 5.7 :** Energies d'interaction élastique dislocations-joints interphases Zn-X de structure hexagonale dans le système de glissement prismatique  $(10\bar{1}0)$   $[\bar{1}2\bar{1}0]$ .

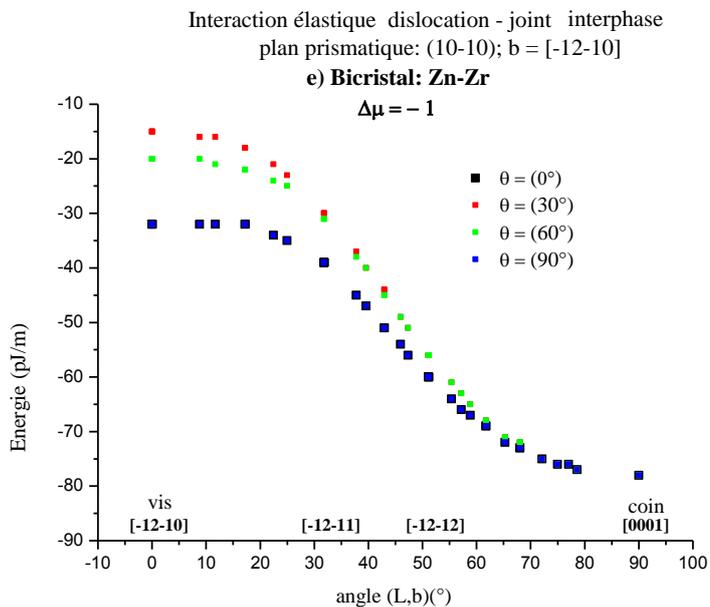
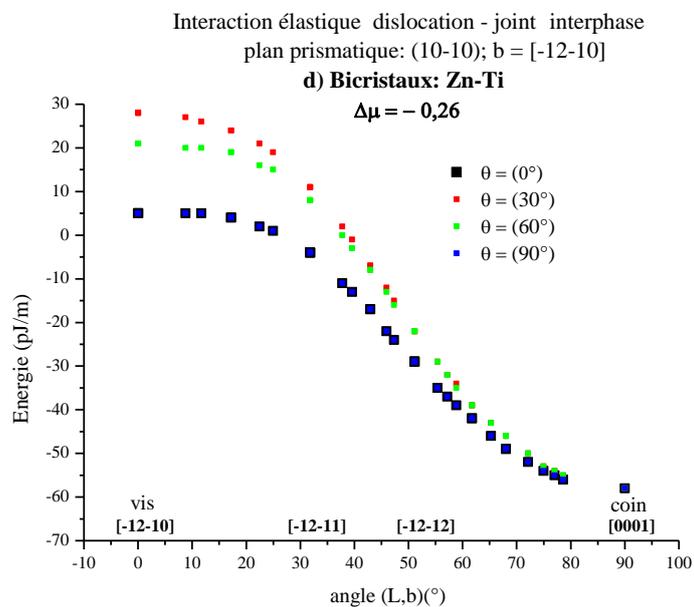
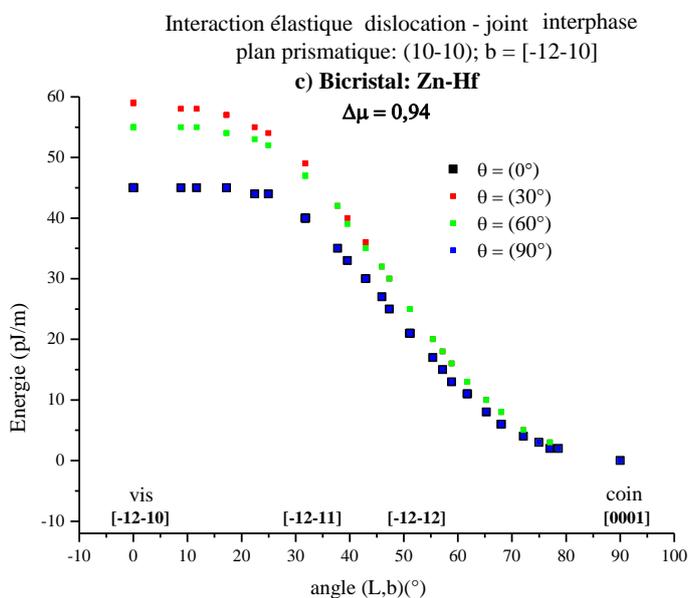
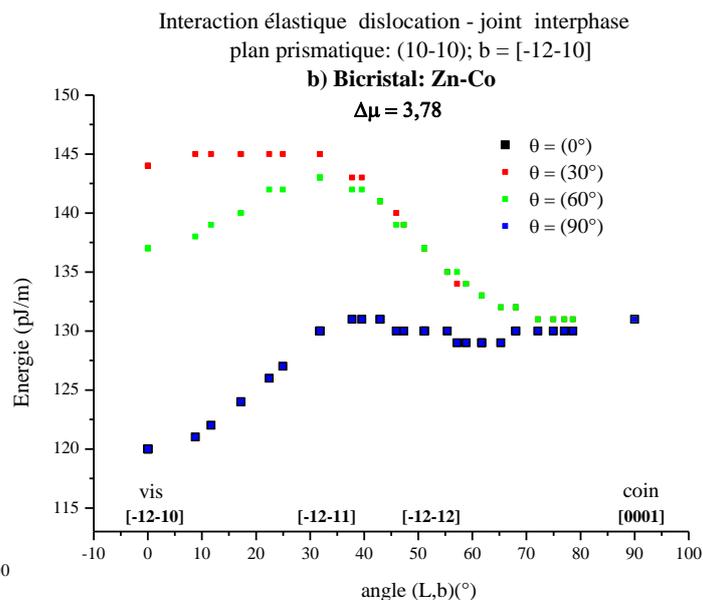
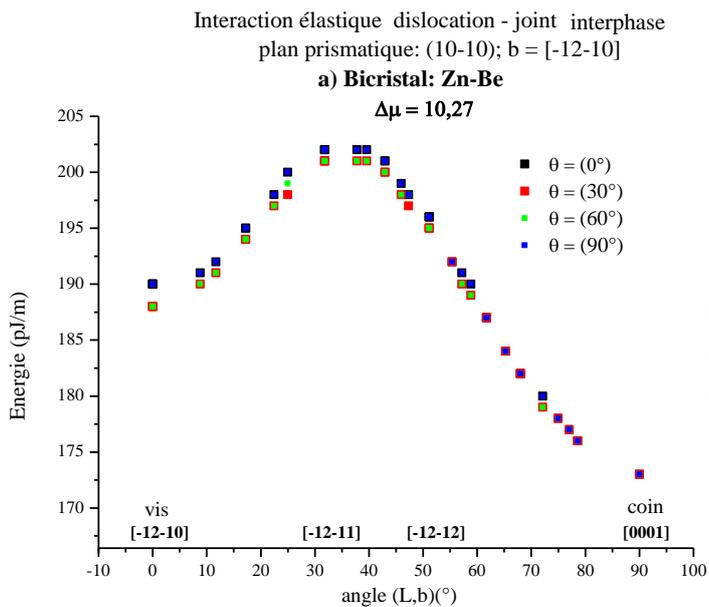
-  $\Delta E_{\max}$  : Energie d'interaction maximale

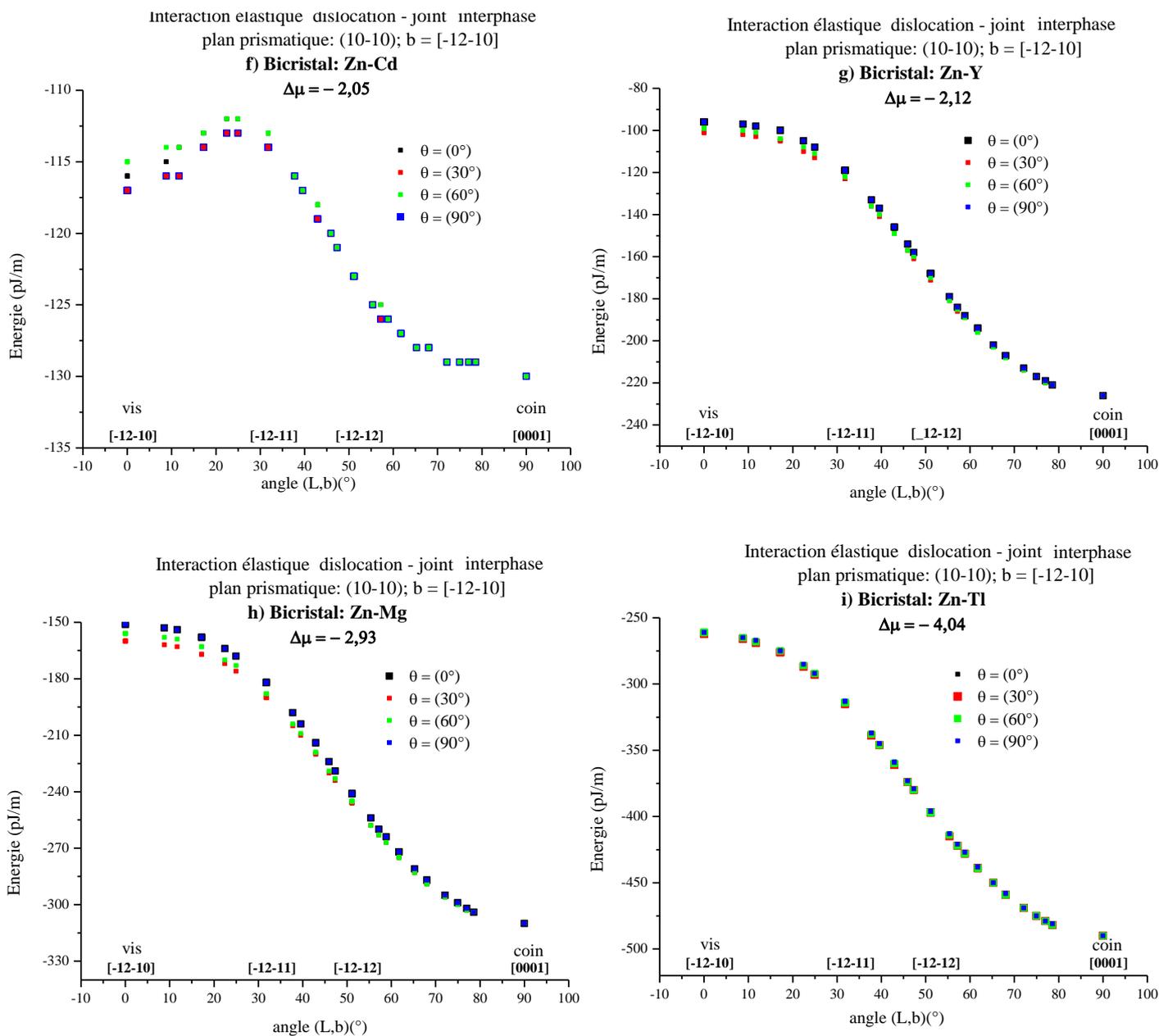
-  $\Delta E_{\min}$  : Energie d'interaction minimale

-  $b = \frac{1}{3} [\bar{1}2\bar{1}0]$  : vecteur de Burgers

-  $R = [0001]$  : axe de rotation

-  $\Theta$  : angle de rotation





**Figures 5.7 (a) à (i):** Variations des énergies d’interaction élastique dislocation- joints d’interphases Zn-X avec la désorientation dans le système de glissement prismatique III.

-Angle de rotation  $\theta$  : (0°) courbe noire, (30°) courbe rouge, (60°) courbe verte, (90°) courbe bleue.

-système de glissement prismatique III : (10 $\bar{1}$ 0) [ $\bar{1}2\bar{1}$ 0].

-Bicristaux Zn-X: X= Be, Co, Hf, Ti, Zr, cd, Y, Mg, Tl

### 5.2.5 Système de glissement pyramidal $\pi_1$ : $(\bar{1}011)$ $[1\bar{2}10]$

Au vu de l'ensemble des figures 5.8a à 5.8i qui présentent les courbes de variation des énergies d'interaction élastique dislocation joint interface dans les bicristaux Zn-X selon la désorientation, nous constatons que :

- Zn-Be : pas d'effet de la désorientation, les dislocations vis et coin sont repoussées.
- Zn-Co et Zn-Hf : Effet faible de la désorientation, les dislocations vis et coin sont repoussées.
- Zn-Ti : Petit effet de la désorientation, la dislocation vis est repoussée et la dislocation coin est attirée.
- Zn-Cd : Petit effet de la désorientation, les dislocations vis et coin ne correspondent pas aux extrema.
- Zn-Y, Zn-Mg, Zn-Tl : Effet faible ou très faible de la désorientation, la dislocation vis correspond au minimum de l'attraction et la dislocation coin correspond au maximum de l'attraction.

Les valeurs des énergies d'interaction extrêmes calculées et les lignes des dislocations correspondantes, pour tous les bicristaux Zn-X étudiés dans le plan pyramidal  $\pi_1$  ont été regroupés dans le tableau 5.8.

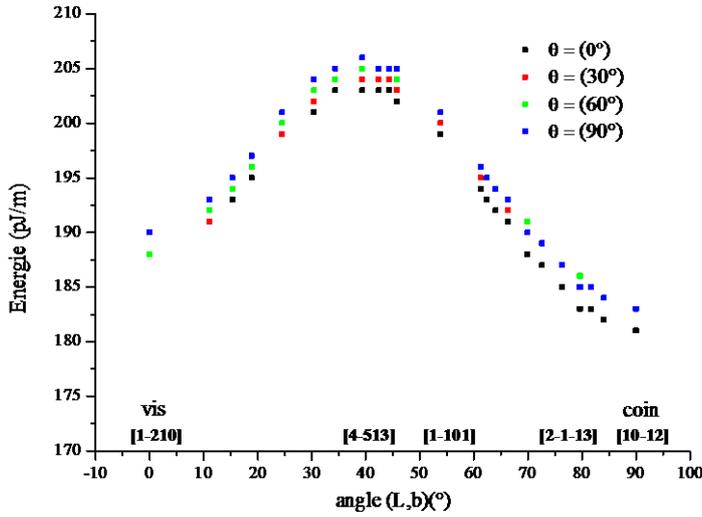
Le tableau 5.8 indique les valeurs extrêmes des énergies d'interaction pour les bicristaux Zn-X étudiés dans le plan pyramidal ( $\bar{1}011$ ) de vecteur de Burgers  $[1\bar{2}10]$ .

Système de glissement Pyramidal $\pi_1$ ( $\bar{1}011$ ) $[1\bar{2}10]$						
Bicristaux Zn-X	$\Delta E_{\min}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	Dislocation	$\Delta E_{\max}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	dislocation
Zn-Be	181	0°	$[10\bar{1}2]$	206	90°	$[4\bar{5}13]$
Zn-Co	119	/	/	153	30°	$[2\bar{3}11]$
Zn-Hf	7	0°,30°	/	61	/	$[3\bar{5}21]$
Zn-Ti	-47	/	/	30	/	$[4\bar{7}31]$
Zn-Zr	-71	/	/	-14	/	$[3\bar{5}21]$
Zn-Cd	-127	30°,60°,90°	/	-113	0°, 30°,60°	$[2\bar{3}11]$
Zn-Y	-202	90°	/	-94	0°	$[4\bar{7}31]$
Zn-Mg	-282	/	/	-149	/	$[1\bar{2}10]$
Zn-Tl	-448	/	/	-258	/	/

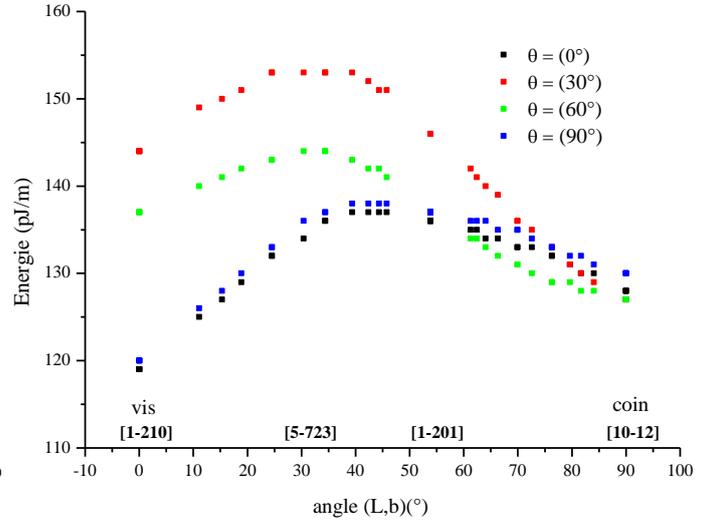
**Tableau 5.8 :** Energies d'interaction élastique dislocations-joints interphases Zn-X de structure hexagonale dans le système de glissement pyramidal  $\pi_1$  : ( $\bar{1}011$ ).

- $\Delta E_{\max}$ : Energie d'interaction maximale
- $\Delta E_{\min}$ : Energie d'interaction minimale
- $R = [0001]$  : axe de rotation
- $\Theta$  : angle de rotation
- $b = \frac{1}{3} [1\bar{2}10]$  : vecteur de Burgers

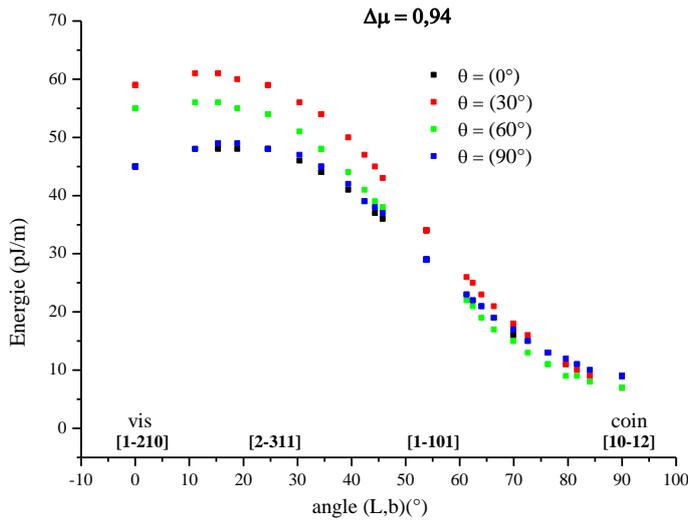
Interaction élastique dislocation - joint interphase  
 plan pyramidal: (-1011); b = [1-210]  
**a) Bicristal: Zn-Be**



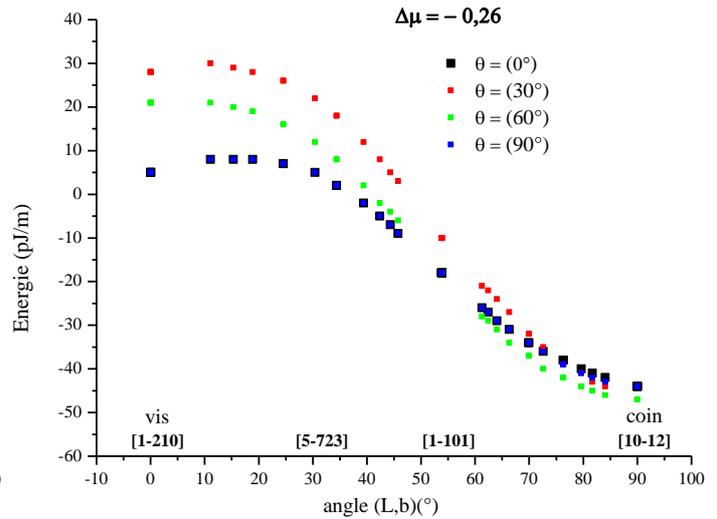
Interaction élastique dislocation - joint interphase  
 plan pyramidal: (-1011); b = [1-210]  
**b) Bicristal: Zn-Co**



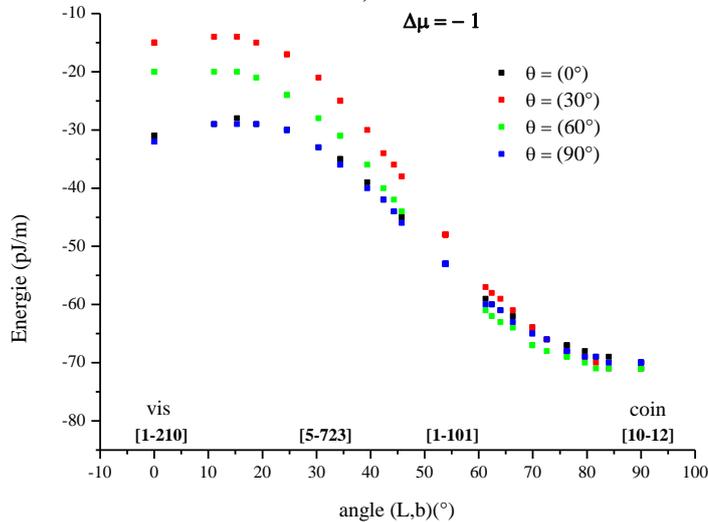
Interaction élastique dislocation - joint interphase  
 plan pyramidal: (-1011); b = [1-210]  
**c) Bicristal: Zn-Hf**

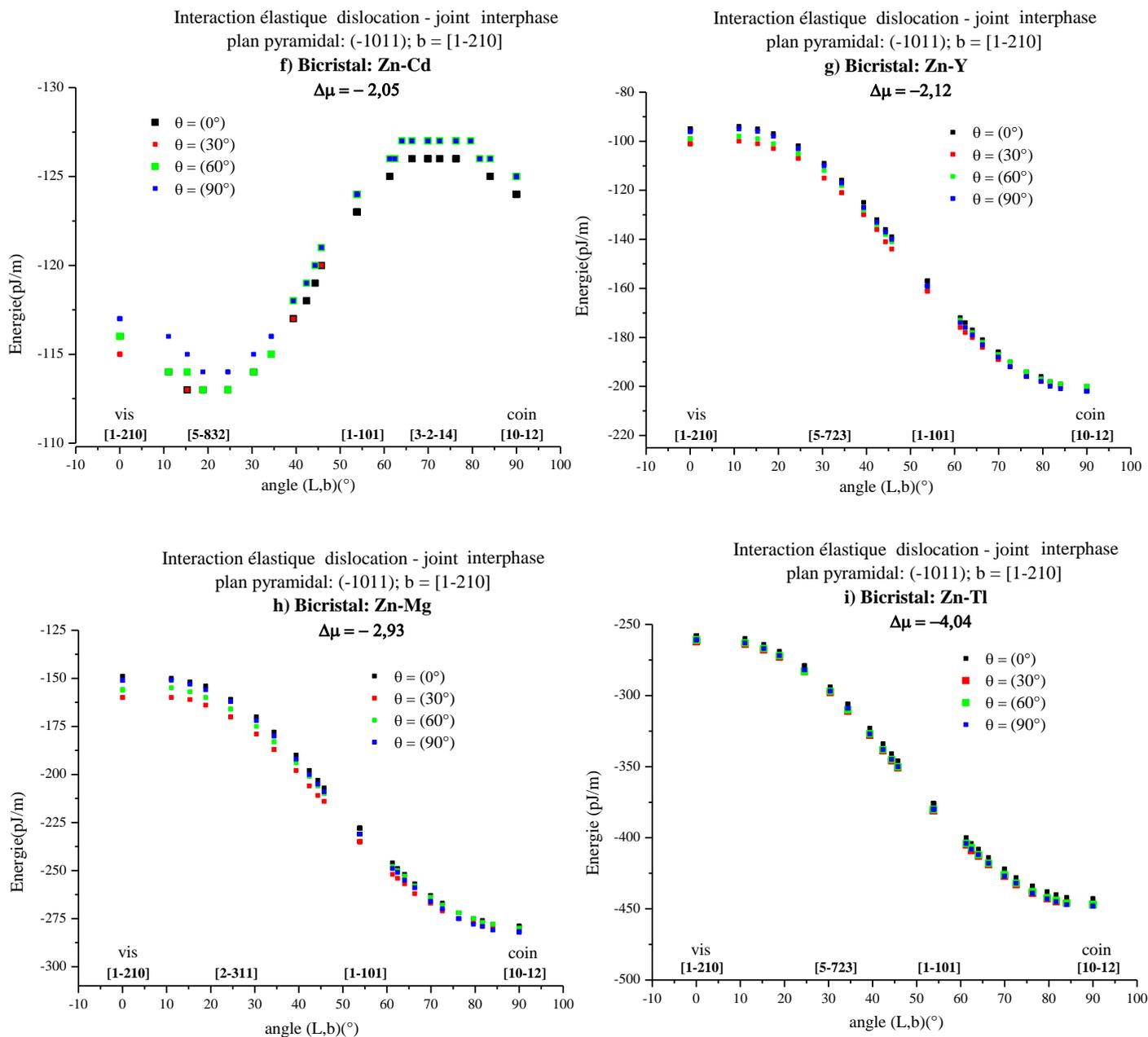


Interaction élastique dislocation - joint interphase  
 plan pyramidal: (-1011); b = [1-210]  
**d) Bicristal: Zn-Ti**



Interaction élastique dislocation - joint interphase  
 plan pyramidal: (-1011); b = [1-210]  
**e) Bicristal: Zn-Zr**





**Figures 5.8(a) à (i):** Variations des énergies d’interaction élastique dislocation- joints d’interphases Zn-X avec la désorientation dans le système de glissement pyramidal 1<sup>ère</sup> espèce ( $\pi_1$ ).

-Angle de rotation  $\Theta$  : (0°) courbe noire, (30°) courbe rouge, (60°) courbe verte, (90°) courbe bleue.

-système de glissement pyramidal  $\pi_1$  :  $(\bar{1}011)$   $[1\bar{2}10]$ .

-Bicristaux Zn-X : X= Be, Co, Hf, Ti, Zr, cd, Y, Mg, Tl.

### 5.2.6 Système de glissement pyramidal $\pi'_1 : (\bar{1}011) [11\bar{2}3]$

Les figures 5.9a à 5.9i ne montrent pas d'effet notable de la désorientation. Les dislocations vis et coin sont repoussés pour les bicristaux : Zn-Be, Zn-Co, Zn-Hf, Zn-Ti, Zn-Zr. Elles sont attirées pour Zn-Cd, Zn-Y, Zn-Mg, Zn-Tl.

Les valeurs des énergies d'interaction extrêmes calculées et les lignes des dislocations correspondantes, pour tous les bicristaux Zn-X étudiés dans le plan pyramidal  $\pi'_1$  ont été regroupés dans le tableau 5.9.

Le tableau 5.9 indique les valeurs extrêmes des énergies d'interaction pour les bicristaux Zn-X étudiés dans le plan Pyramidal ( $\bar{1}011$ ) de vecteur de Burgers [ $11\bar{2}3$ ].

Système de glissement Pyramidal $\pi'_1 : (\bar{1}011) [11\bar{2}3]$						
Bicristaux Zn-X	$\Delta E_{\min}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	Dislocation	$\Delta E_{\max}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	dislocation
Zn-Be	159	0°,30°,60°,90°	[ $11\bar{2}3$ ]	172	0°,30°,60°,90°	[ $3\bar{5}21$ ]
Zn-Co	103	30°	[ $21\bar{3}5$ ]	149	30°	/
Zn-Hf	55	0°,90°	[ $10\bar{1}2$ ]	92	0°, 90°	/
Zn-Ti	30	30°,60°	/	74	60°	/
Zn-Zr	-5	/	/	46	30°, 60°	/
Zn-Cd	-97	0°, 30°,60°,90°	[ $2\bar{1}\bar{1}3$ ]	-76	/	/
Zn-Y	-52	/	/	-21	0°,60°, 90°	/
Zn-Mg	-99	/	/	-61	0°, 90°	/
Zn-Tl	-182	/	/	-138	0°, 30°,60°,90°	/

**Tableau 5.9 :** Energies d'interaction élastique dislocations-joints interphases Zn-X de structure hexagonale dans le système de glissement pyramidal  $\pi'_1 : (\bar{1}011)$ .

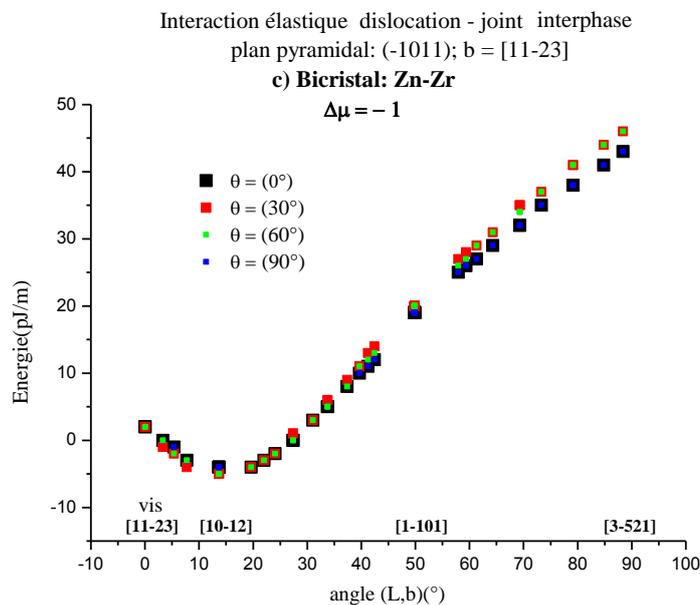
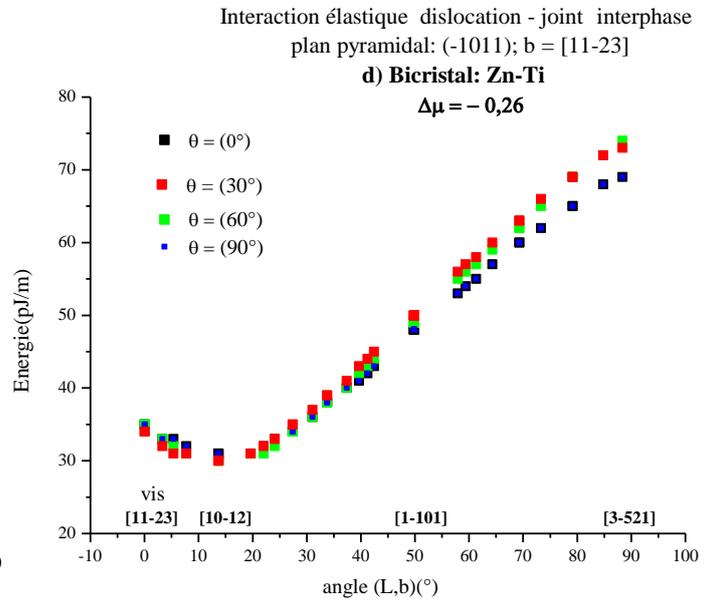
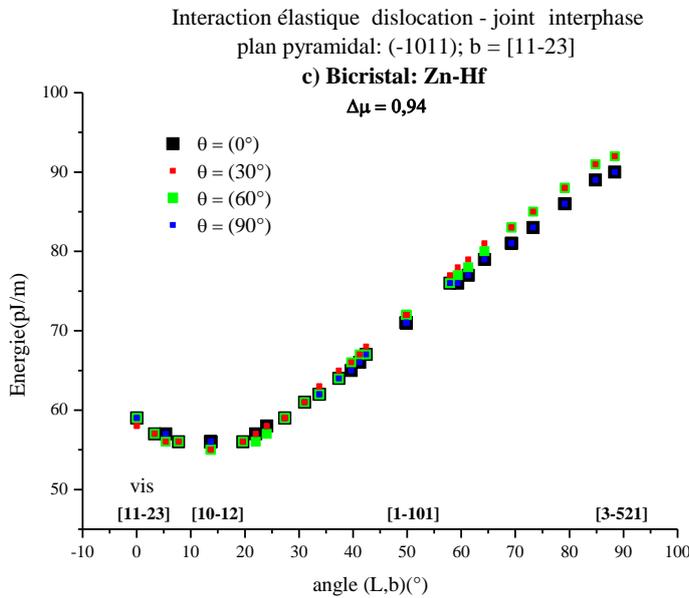
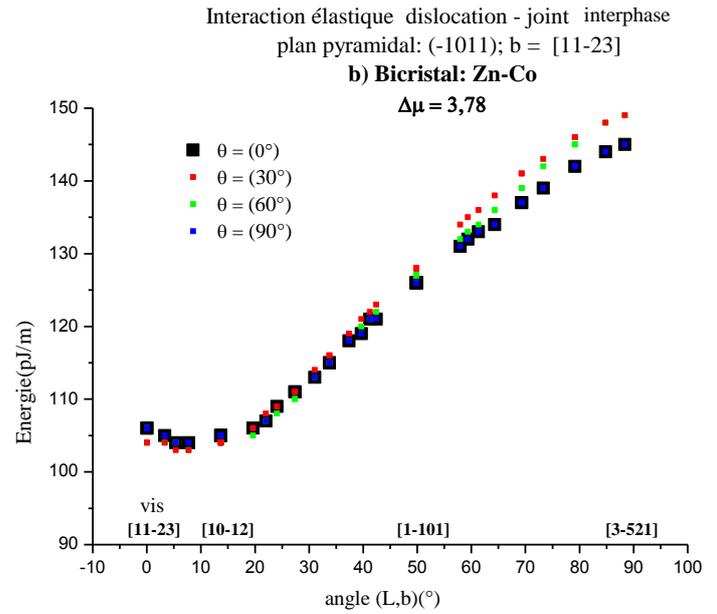
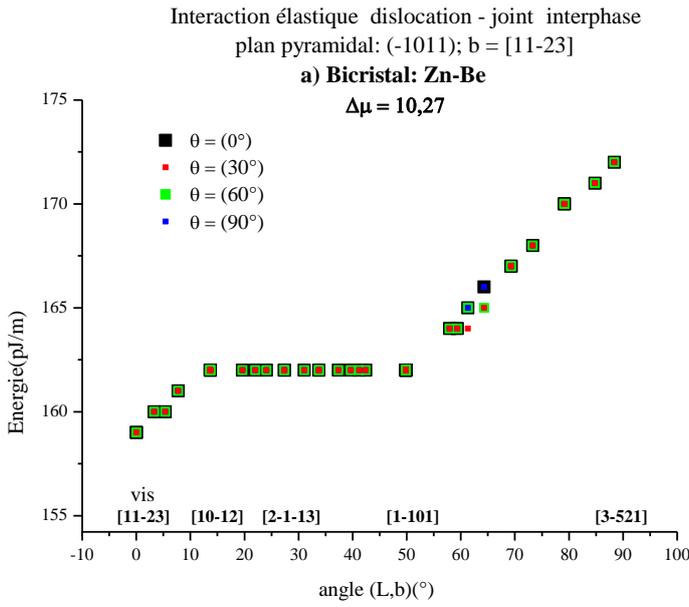
-  $\Delta E_{\max}$  : Energie d'interaction maximale

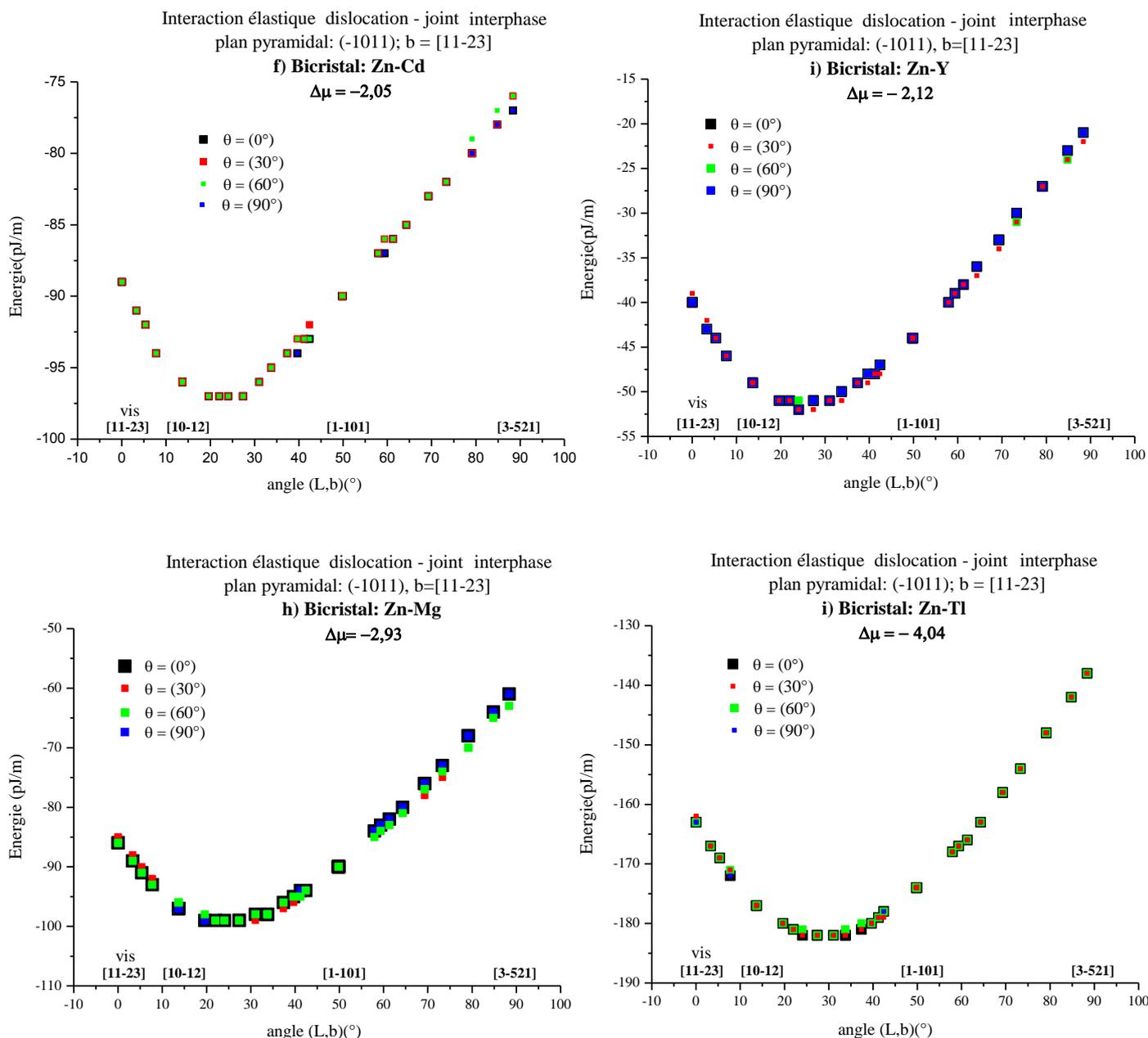
-  $\Delta E_{\min}$  : Energie d'interaction minimale

-  $b = \frac{1}{3} [11\bar{2}3]$  : vecteur de Burgers

-  $R = [0001]$  : axe de rotation

-  $\Theta$  : angle de rotation





**Figures 5.9 (a) à (i):** Variations des d'interaction élastique dislocation- joints d'interphases Zn-X avec la désorientation dans le système de glissement pyramidal 1<sup>ère</sup> espèce ( $\pi'_1$ )

-Angle de rotation  $\Theta$  : (0°) courbe noire, (30°) courbe rouge, (60°) courbe verte, (90°) courbe bleue.

-système de glissement pyramidal  $\pi'_1$  :  $(\bar{1}011)$   $[11\bar{2}3]$ .

-Bicristaux Zn-X: X= Be, Co, Hf, Ti, Zr, cd, Y, Mg, Tl.

### 5.2.7 Système de glissement pyramidal $\pi_2$ : $(11\bar{2}2)$ $[\bar{1}\bar{1}23]$

Pour ce système de glissement, il n'y a pas d'effet de la désorientation, figures 5.10a à 5.10i. L'énergie d'interaction augmente avec le caractère de la dislocation de vis à coin pour tous les bicristaux. A part le bicristal Zn-Be qui présente un comportement particulier : l'énergie d'interaction reste constante quel que soit le caractère de la dislocation et diminue brutalement à l'approche du caractère coin, figure 5.10a.

Les valeurs des énergies d'interaction extrêmes calculées et les lignes des dislocations correspondantes, pour tous les bicristaux Zn-X étudiés dans le plan pyramidal  $\pi_2$  sont représentés dans le tableau 5.10.

Le tableau 5.10 indique les valeurs extrêmes des énergies d'interaction pour les bicristaux Zn-X étudiés dans le plan Pyramidal  $\pi_2 : (11\bar{2}2)$  de vecteur de Burgers  $[\bar{1}\bar{1}23]$ .

Système de glissement Pyramidal $\pi_2 : (11\bar{2}2)$ $[\bar{1}\bar{1}23]$						
Bicristaux Zn-X	$\Delta E_{\min}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	Dislocation	$\Delta E_{\max}$ (pJ/m)	Désorientation $\Theta(^{\circ})$	dislocation
Zn-Be	172	0°,30°,60°,90°	$[\bar{1}\bar{1}23]$ $[1\bar{3}23]$	172	0°,30°,60°,90°	$[1\bar{1}00]$
Zn-Co	126	/	$[\bar{1}\bar{1}23]$	154	30°	/
Zn-Hf	54	/	/	94	/	/
Zn-Ti	23	/	/	76	/	/
Zn-Zr	-14	/	/	-47	0°	/
Zn-Cd	-120	0°, 30°,60°,90°	/	-76	0°, 60°,90°	/
Zn-Y	-103	/	/	-20	/	/
Zn-Mg	-160	/	/	-60	/	/
Zn-Tl	-262	30°	/	-136	0°, 30°,60°,90°	/

**Tableau 5.10 :** Energies d'interaction élastique dislocations-joints interphases Zn-X de structure hexagonale dans le système de glissement pyramidal  $\pi_2 : (11\bar{2}2)$ .

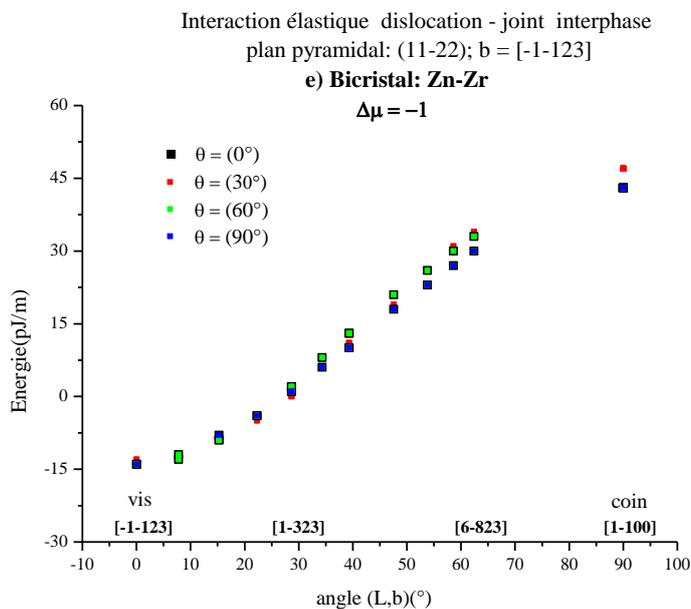
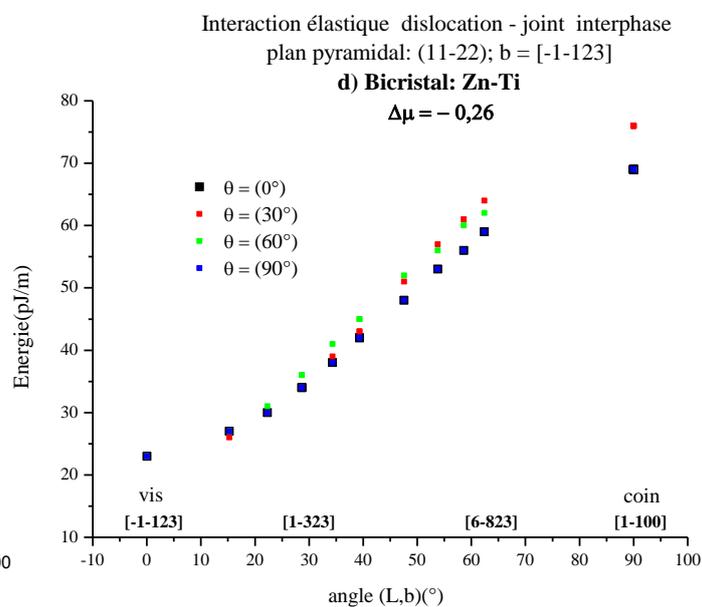
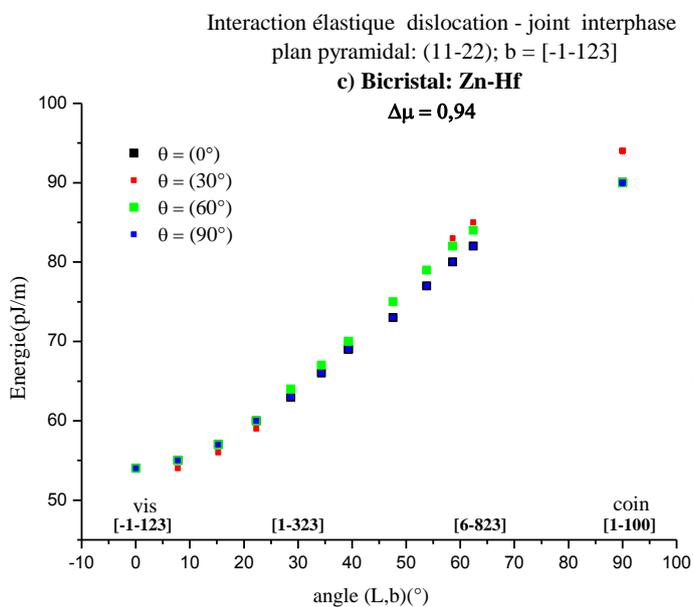
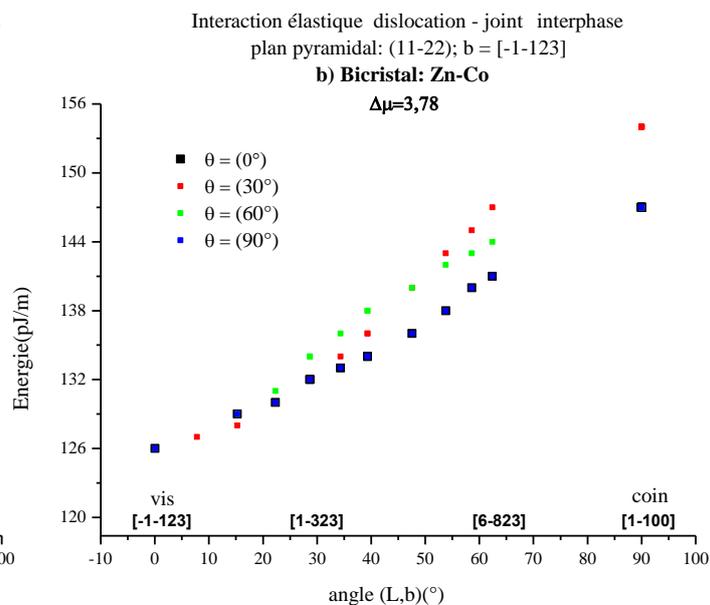
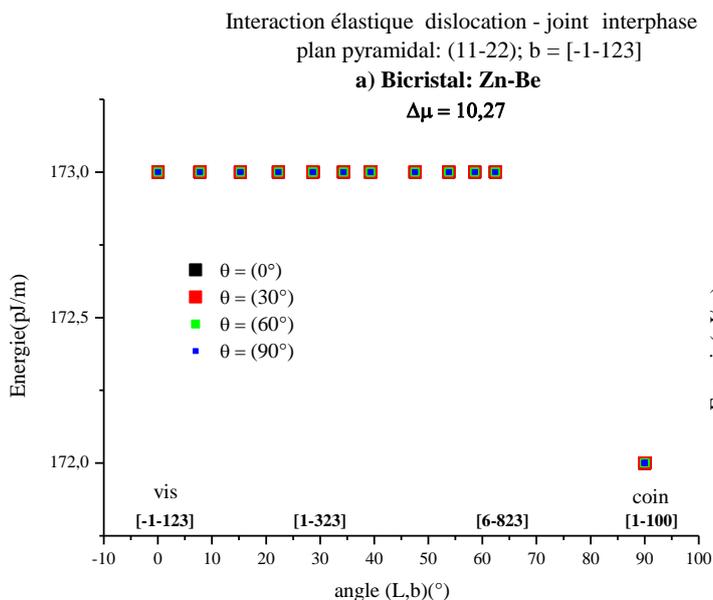
-  $\Delta E_{\max}$  : Energie d'interaction maximale

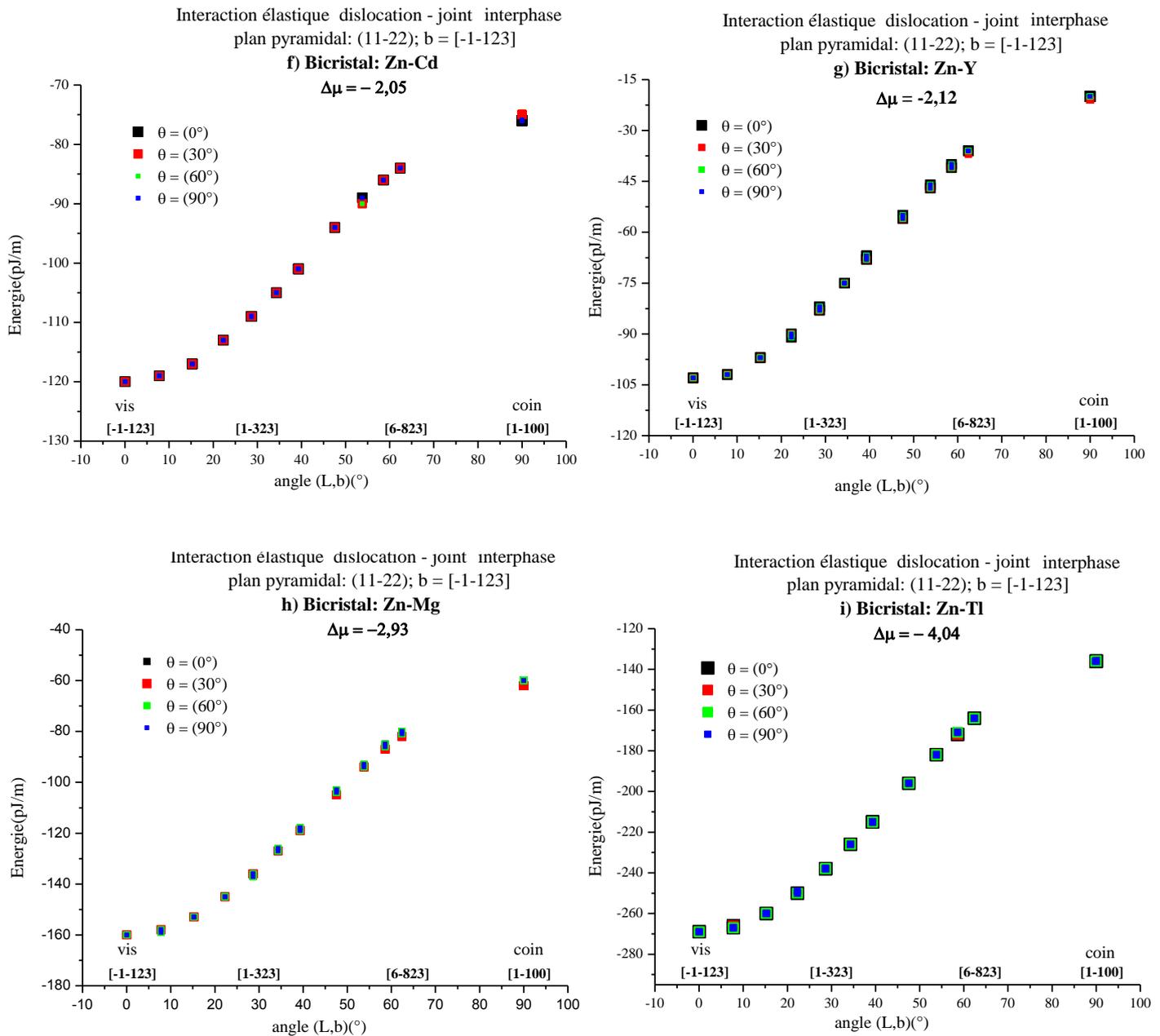
-  $\Delta E_{\min}$ : Energie d'interaction minimale

-  $\mathbf{b} = \frac{1}{3} [\bar{1}\bar{1}23]$  : vecteur de Burgers

-  $\mathbf{R} = [0001]$  : axe de rotation

-  $\Theta$  : angle de rotation





**Figures 5.10 (a) à (i):** Variations des d'interaction élastique dislocation- joints d'interphases Zn-X avec la désorientation dans le système de glissement pyramidal 2<sup>ème</sup> espèce  $\pi_2$  : (11 $\bar{2}$ 2)

-Angle de rotation  $\Theta$  : (0°) courbe noire, (30°) courbe rouge, (60°) courbe verte, (90°) courbe bleue.

-système de glissement pyramidal 2<sup>ème</sup> espèce (11 $\bar{2}$ 2) [ $\bar{1}\bar{1}$ 23].

-Bicristaux Zn-X (X= Be, Co, Hf, Ti, Zr, Cd, Y, Mg, Tl).

### 5.3- Effet du plan de glissement

Nous avons tenté d'établir un classement des plans de glissement selon leur facilité d'activation pour la mise en mouvement de la dislocation. Pour ce faire, nous avons déterminé les énergies d'interaction élastique dislocation - interface dans les bicristaux Zn-X dans les différents plans des glissements. Les résultats sont résumés dans le tableau 5.11.

$\Delta E_{\text{Max}}$ (pJ/m)								
Zn-X	$\Delta\mu_{\text{Zn-X}}$ ( $10 \cdot \text{N} \cdot \text{m}^{-1}$ )	Basal (0001)	Prismatique (01 $\bar{1}$ 0)	Prismatique (1 $\bar{1}$ 00)	Prismatique (10 $\bar{1}$ 0)	pyramidal $\pi_1:(\bar{1}011)$	pyramidal $\pi'_1:(\bar{1}011)$	pyramidal $\pi_2:(11\bar{2}2)$
Zn-Be	10.27	194	192	191	202	172	<b>203</b>	173
Zn-Co	3.78	142	131	131	131	145	119	<b>147</b>
Zn-Hf	0.94	58	41	41	45	<b>92</b>	45	90
Zn-Ti	- 0.26	23	58	58	58	<b>69</b>	44	<b>69</b>
Zn-Zr	-1	40	<b>78</b>	<b>78</b>	<b>78</b>	43	70	47
Zn-Cd	- 2.05	124	<b>130</b>	<b>130</b>	<b>130</b>	97	121	120
Zn-Y	- 2.12	131	<b>226</b>	<b>226</b>	<b>226</b>	52	200	103
Zn-Mg	- 2.93	196	<b>310</b>	<b>310</b>	<b>310</b>	99	282	160
Zn-Tl	- 4.04	299	<b>490</b>	<b>490</b>	<b>490</b>	182	443	294

**Tableau 5.11:** Energies d'interaction élastique extrêmes pour chaque plan de glissement et chaque bicristal Zn-X, avec X= Be, Co, Hf, Ti, Zr, Cd, Y, Mg, Tl.

Le tableau 5.11 montre que la dislocation est plus facilement mise en mouvement selon l'écart des modules de cisaillement et dans le plan de glissement :

- pyramidal  $\pi'_1:(\bar{1}011)$  pour Zn-Be
- pyramidal  $\pi_2:(11\bar{2}2)$  pour Zn-Co
- pyramidal  $\pi_1:(\bar{1}011)$  pour Zn-Hf
- pyramidal  $\pi_1:(\bar{1}011)$  et pyramidal  $\pi_2:(11\bar{2}2)$  pour Zn-Ti

Pour les bicristaux Zn-Zr, Zn-Cd, Zn-Y, Zn-Mg et Zn-Tl, les dislocations sont mises en mouvement dans les plans de glissement prismatiques avec les mêmes énergies pour les trois plans de glissement.

## 5.4 Effet du caractère des dislocations

Nous avons restreint la discussion au cas de la famille des bicristaux Zn-X et pour le plan de glissement pyramidal de 2<sup>ème</sup> espèce. Les résultats sont résumés par les figures 5.10a à 5.10i.

- Dans un même bicristal, l'énergie d'interaction élastique dislocation - interface varie avec le caractère de la dislocation.

- L'énergie d'interaction élastique augmente quand le caractère de la dislocation varie de vis à coin pour tous les bicristaux. Notons le cas particulier du bicristal Zn-Be, figure 4.10a, où l'énergie d'interaction est constante puis elle varie brusquement pour la dislocation coin bien que cette variation soit très faible.

- La force image peut être attractive ou répulsive selon le caractère de la dislocation et la nature du bicristal :

- Bicristal Zn-Be (fig. 5.10a) : l'énergie d'interaction élastique est la plus élevée autour de la dislocation vis. La force image est répulsive quel que soit le caractère de la dislocation.
- Bicristaux Zn-X, avec X = Co, Hf et Ti (figs 5.10 b,c,d) : l'intensité de la force image répulsive agissant sur la dislocation de caractère coin est supérieure à celle sur les dislocations vis.
- Bicristal Zn-Zr (fig. 5.10e) : la force image est répulsive pour la dislocation coin et elle est attractive pour la dislocation vis. L'intensité de la force image sur la dislocation vis est supérieure à celle des dislocations coin.
- Bicristaux Zn-X, avec X = Cd, Y, Mg et Ti (figs. 5.10 f,g,i) : la force image est attractive pour toutes les dislocations, son intensité sur la dislocation vis est supérieure à celle sur les dislocations coin.

Notons que les effets de la force image dépendent du caractère des dislocations pour un même bicristal. D'un bicristal à l'autre, ils sont reliés à l'écart des modules de cisaillement.

## *Conclusion*

### Conclusion

Ce travail a été consacré à l'interaction élastique des dislocations de matrice avec les interfaces dans des bimatériaux élastiquement anisotropes de structure hexagonale. L'interaction est caractérisée par l'énergie d'interaction élastique. L'interaction élastique est à l'origine de la force image qui s'exerce sur la dislocation et qui conduit à sa mise en mouvement en l'attirant vers l'interface ou en la repoussant.

Les principaux résultats obtenus sont comme suit :

1- l'énergie d'interaction élastique entre la dislocation et le joint interphase est reliée à l'écart des modules de cisaillement des deux cristaux A et B constituant le bicristal. Quand cet écart change de signe il en est de même pour l'énergie d'interaction qui peut être négative, positive ou nulle. Quand le module de cisaillement du cristal A est plus grand que celui du cristal B, le cristal A plus dur que le cristal B, l'énergie d'interaction est négative et les dislocations sont attirées vers l'interface. Quand l'écart des modules de cisaillement est négatif l'énergie d'interaction est positive et les dislocations sont repoussées. Les énergies d'interaction varient comme les écarts des modules de cisaillement à l'exception de quelques cas tels que le bicristal Zn-X avec (X=Cd, Ti, Zr) et les bicristaux X-Cd et X-Zn avec (X = Be, Tl).

2- La désorientation autour de l'axe  $c$  pour les bicristaux Zn-X ne semble pas avoir une influence très marquée sur l'évolution des énergies d'interaction élastique. L'énergie d'interaction reste faible, de l'ordre de quelque pico-joules par mètre. A l'exception de quelques cas où on note que pour une même dislocation la variation de la désorientation entraîne un changement de sens de la force image.

3- Il semble difficile de décider si le caractère vis ou coin de la dislocation joue un rôle sur le sens de la force image, attractive ou répulsive. Nos résultats indiquent une forte variabilité selon le bicristal considéré.

4- La mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image a été examinée pour les différents systèmes de glissement de la structure hexagonale. Nos résultats indiquent qu'en général la facilité de la mise en mouvement suit l'ordre de l'écart des modules de cisaillement. Dans les plans pyramidaux où les dislocations glissent dans la direction  $\langle a \rangle$  ou la direction  $\langle a+c \rangle$ , la mise en mouvement est plus facile dans les bicristaux Zn-X avec X= Be, Co, Hf, Ti, pour lesquels l'écart des modules de

cisaillement est positif à l'exception du bicristal Zn-Ti. Dans les plans prismatiques la mise en mouvement est plus facile pour les bicristaux Zn-X avec  $X = \text{Zr, Cd, Y, Mg, Tl}$  pour lesquels l'écart des modules de cisaillement est négatif.

Soulignons enfin que l'interaction entre dislocation de matrice et joint interphase pour les bicristaux de métaux de structure hexagonale ne dépend pas uniquement de la cristallographie des bicristaux, désorientation et plan de l'interface, mais également des propriétés élastiques des phases constituant le bicristal.

*Références*  
*Bibliographiques*

## Références bibliographiques

- [Aldinger 77] : F. Aldinger, S. Jonsson, "Beryllium 1977", Metals Society, Londres (1977).
- [Ayadi 10] : A. Ayadi, A. Ouchtati and O. Khalfallah, Materials Science and Engineering 13(2010) 012023.
- [Bacon 78] : D.J. Bacon, D.M. Barnett, et R.O. Scattergood, Prog. Mater. Sci, 23, (1978), 51.
- [Barnett 73] : D.M. Barnett, Lothe, J., J. phys. F : Metal phys. Vol 4, (1973), 299 – 54.
- [Barnett 74] : D.M. Barnett et J.Lothe, J. Phys., F4, (1974), 1618.
- [Bonnet 00] : R. Bonnet, Phy. Stat. Sol., (a) 177, (2000), 219.
- [Bonnet 79] : R. Bonnet, Ecole d'Eté, Matériaux composites à hautes performances CNRS, (1979).
- [Bonnet 81] : R. Bonnet, Acta. Met., Vol 29, (1981), p : 437-445.
- [Bonnet 81] : R. Bonnet, Phil. Mag. A, vol 43, N°5, (1981), p : 1165-1187.
- [Bonnet 87] : R. Bonnet, A.J. Morton, Phil. Mag. A, Vol 56, N°6, (1987), p : 815-830.
- [Bonnet 94] : R. Bonnet, C.R. Acad. Sci. Paris, t.318, serie II, (1994), P : 289-295.
- [Braekhus 71] : J. Braekhus et J. Lothe, J. Phys. Stat. Sol. (b), 43, (1971), p : 651-657.
- [Burgers 39] : J.M. Burgers, Proc. K. Ned. Akad. Wet. Amst., 42, (1939), 278 et 293.
- [Chou 62] : Y.T Chou, J. Appl. Phys., 33, (1962), 2747.
- [Dupeux 80] : M. Dupeux et R. Bonnet, Acta. Met., 28, (1980), 721.
- [Edington 75] : J.W. Edington, "Practical electron microscopy in materials science", (1975), 100, 292.
- [Eshelby 53] : J.D. Eshelby, W.T. Read et W. Shockley, Acta. Met, 1, (1953), 251.
- [Gemperlova 68] : J. Gemperlova, et I. C. Saxl, Zech, J. Phys., B18, (1968), 1085 -93.
- [Hazzledine 84] : P.M. Hazzledine, H.P. Karnthaler and Korner : "The Application of wulff Construction to dislocation problems", Phy.Stat.Sol.(a), 81, (1984), 473.
- [Hirth 79] : J.P. Hirth, D.M. Barnett, et J. Lothe, Phil. Mag., A, 40, (1979), 39.
- [Hirth 82] : J.P. Hirth and J. Lothe. »Theory of dislocations », Second edition, John Wiley and Sons, New York (1982).
- [Hokanson 68] : J.L. Hokanson, et P.G. Winchell, J. Appl. Phys., 39, (1968), 3311.
- [Hull 01] : D. Hull, D.J. Bacon, " Introduction to Dislocations", Butterworth- Heinemann, Oxford, (2001).
- [Huntington 75] : H. B. Huntington, "the elastic constants of crystals", (1975), 66
- [Khalfallah 92] : O. Khalfallah, M. Condat and L. Priester, Phil. Mag. A, (1992), 231.
- [Khalfallah 99] : O. Khalfallah and L. Priester. Materials Science Forum, 294-296, (1999), 687.
- [Korner 83] : A. Korner, H.P. Karnthaler, Phil. Mag. A, 48, (1983), 469.

- [Legrand 84] : B. Legrand, "influence de la structure électronique, sur la facilité relative des glissements dans les métaux de structure hexagonale", Thèse de doctorat d'Etat, Université Paris-sud (1984).
- [Leipfrid 78] : G. Leipfrid, N. Breuer, " Point defects in metals ", tome1, Springer Verlag, (1978), 129.
- [Naka 83] : S. Naka, "Etude des mécanismes de déformation plastique à basse Température de monocristaux de titane de phase  $\alpha$ ", Thèse de doctorat, Université de Paris Sud (Orsay), (1983).
- [Nakahara 73] : S. Nakahara et J.R. Willis, J. phys. F :Metal phys. 3 L, (1973), 299-54.
- [Pande 72] : C.S. Pande et Y. Chou, J. Appl. Phys., 43, (1972) ,840.
- [Partridge 67] : P.G.Partridge, " The cristallography and deformation modes of hexagonal close-packed metals ", Metalurgical Review, 118, (1967), 169.
- [Peierls 40] : R.E. Peierls, Proc. Phys. Soc., 52, (1940), 23.
- [Priester 06] : L. Priester, » Les joints de grains : de la théorie à l'ingénierie ». EDP sciences, (2006).
- [Priester 94] : L. Priester, O. Khalfallah, Phil. Mag. A 69 (1994) 471.
- [Read 50] : W.T. Read, et W. Shockley, Phys. Rev.,78, (1950), 275.
- [Smallman 70] : R.E. Smallman, P.S.Dobson, Metall. Trans., 1, (1970) 2383.
- [Stroh 58] : A.N. Stroh, Phil. Mag., 3, (1958), 625.
- [Stroh 62] : A. N. Stroh, J. Math. Phys., 41, (1962), 77.
- [Tainsne 01] : A.Tainsne., Thèse Université Paris XI, (2001).
- [Tenchkhoff 88] : E. Tenchkhoff, " Deformation mechanisms, texture and anisotropy in Zr and zircalloy", ASTM, STP 966, (1988) 542.
- [Tucker 69] : M.O. Tucker, Phil. Mag., 19, (1969) , 1141.
- [Tyson 67] : W.R. Tyson, Acta. Met, 15 (1967) 574.
- [Vader 49] : J.H. Vander Merwe, et F.C. Frank, Proc. Roy. Soc. A, 108, 205 et 200, 125, (1949).
- [Volterra 07] : V. Volterra, Annales Ecoles Normales supérieures, Paris (3), 24, (1907), 400.
- [Willis 71] : J.R. Willis, J. Mech. Phys. Solids, 19, (1971), 353-68.
- [Willis 90] : J.R. Wilis, Jain, S. C, et Bullough, R., Phil. Mag., A, 62, (1990), 115.
- [Zenati 94] : R. Zenati, R. Bonnet, C. R. Acad. Sci. Paris, t.318, serie II, (1994) p: 31-36.

## ملخص

سلوك الإنخلاعات بالقرب من الحد الثنائي الطور ليست معروفة جيدا، باستثناء عدد قليل من الأزواج من المعادن المكونة للمواد الثنائية الطور. يخصص عملنا لدراسة طاقة التفاعل المرنة للإنخلاعات التي تقع بمسافة  $d$  عن الحد البيني للطورين المختلفين من حيث الطبيعة ومتشابهين في البنية البلورية السداسية في حالة اللاتماثل البلوري. هذا التفاعل يؤثر على الإنخلاعات بفعل قوة الصورة على تحرك هذه الأخيرة.

تم تحديد طاقة التفاعل المرنة لثلاثة أنواع مختلفة لثنائيات الطور،  $Zn-X$ ،  $Be-X$ ،  $Tl-X$  مع  $X = (Be, Co, Hf, Ti, Zn, Zr, Cd, Y, Mg, Tl)$  بالنسبة للحد الثنائي الطور. مفعول معامل القص، التوجيه البلوري حول محور  $[0001]$  بزوايا  $0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ ،  $\Theta$ ، طبيعة الإنخلاعات و مستويات الإنزلاق، تمت دراستها إنطلاقا من منحنيات تغير طاقة التفاعل المرنة بدلالة طبيعة الإنخلاع بالتتابع مع مستويات الإنزلاق للبنية البلورية السداسية القاعدية  $(0001)$ ، الموشورية  $\{1\bar{1}00\}$  والهرمية درجة أولى  $\{\bar{1}011\}$ ، والثانية  $\{11\bar{2}2\}$ ، التفاعل بين الإنخلاع والحد الثنائي الطور يكون على شكل تنافر أو تجاذب أو يكون معدوم مرتبط أساسا بإشارة وشدة معامل القص للطورين البلورين المدروسين. طاقة التفاعل المرنة تتغير من ثنائي طور إلى آخر.

**الكلمات الدلالية:** الإنخلاعات، حد ثنائي الطور، تفاعل مرنة، قوة الصورة، اللاتماثل المناحي، بنية سداسية.

## Abstract

The behavior of dislocations near the interface interphase is not well known, except for a few pairs of metals constituting the material biphasic. This work is consecrated to the study of the elastic interaction energy caused by dislocations located at the distance  $\mathbf{d}$  of an internal interface between two elastically anisotropic heterogeneous hexagonal lattice. This interaction induces an image force on the dislocation with controls this last on the dislocation motion.

The energy of elastic interaction is calculated for different bicrystals constituted of three types of interphases interfaces Zn-X, Be-X, Tl-X with X = (Be, Co, Hf, Ti, Zn, Zr, Cd, Y, Mg, Tl) . The effect of shear modulus for the bicrystal X -Zn, Be-X, X-Tl, disorientation  $\Theta$  around an axis [0001] with  $\Theta = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ , the characters dislocations and the sliding plane for the bicrystal Zn -X are studied. The results are discussed from the typical graphs of elastic interaction energies as a function of dislocation lines character along the various systems of basal sliding (0001) , prismatic  $\{1\bar{1}00\}$  and pyramidal ( $\bar{1}011$ ) of the 1<sup>st</sup> species and (11 $\bar{2}2$ ) the 2<sup>nd</sup> species.. The interaction elastic of energy is a variable which influences the material properties. The results show that the elastic interaction of dislocation-interface may be repulsive, attractive, or without effect depending on the intensity and the sign of the difference in shear modulus between the two phases of the bicrystal. The energies of elastic interactions vary differently from a bicrystal to another.

**Key words :** dislocation, Interphase interface, Elastic interaction, Image Force, Anisotropic elasticity, Hexagonal structure.

## Résumé

Le comportement des dislocations à proximité d'une interface interphase n'est pas bien connu, hormis pour quelques couples de métaux constituant un matériau biphasé. Notre travail est consacré à l'étude de l'énergie d'interaction élastique entre des dislocations situées à la distance  $d$  d'une interface interne entre deux réseaux hexagonaux hétérogènes élastiquement anisotropes. Cette interaction induit une force image sur la dislocation qui contrôle la mise en mouvement de cette dernière.

L'énergie d'interaction élastique est calculée pour différents bicristaux constitués de trois types d'interfaces interphases Zn-X, Be-X, Tl-X avec: X = (Be, Co, Hf, Ti, Zn, Zr, Cd, Y, Mg, Tl). L'effet du module de cisaillement pour les bicristaux Zn-X, Be-X, Tl-X, la désorientation  $\Theta$  autour d'un axe [0001] avec  $\Theta = 0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$ , le caractère des dislocations et le plan de glissement pour la bicristal Zn-X sont étudiés. Les résultats sont discutés à partir de graphes typiques des énergies d'interaction élastique en fonction du caractère des lignes des dislocations suivant les divers systèmes de glissement basal (0001), prismatiques  $\{1\bar{1}00\}$  et pyramidaux  $(\bar{1}011)$  de 1<sup>ère</sup> espèce et  $(11\bar{2}2)$  de 2<sup>ème</sup> espèce. L'énergie d'interaction élastique est une grandeur qui influe sur les propriétés des matériaux. Les résultats montrent que l'interaction élastique dislocation-interface peut être répulsive, attractive, ou nulle selon l'intensité et le signe de l'écart des modules de cisaillement entre les deux phases du bicristal. Les énergies d'interaction élastiques varient de manière différente d'un bicristal à l'autre.

**Mots clés** : Dislocation, Interface interphase, Interaction élastique, Force image, Anisotropie élastique, Structure Hexagonale.