

# SUJET DE THESE :

## Simulation *ab initio* des cœurs de dislocation dans les métaux

<b>Doctorant :</b> Lisa VENDELON	<b>Financement :</b> CFR
<b>Responsable CEA :</b> François Willaime	<b>Université d'inscription :</b> Université Claude Bernard Lyon 1
<b>Directeur universitaire :</b> Xavier Blase	<b>École doctorale et DEA :</b> École doctorale de Physique et Astrophysique (Lyon) DEA Physique et Ingénieries (Université Joseph Fourier, Grenoble)
<b>Service d'accueil :</b> Service de Recherches de Métallurgie Physique, DMN, CEA/Saclay	<b>Date de début de thèse :</b> 3 janvier 2006

---

### 1 Contexte

Cette étude s'inscrit dans le cadre de la démarche de modélisation multi-échelle de la plasticité des métaux et alliages. Les codes de dynamique des dislocations permettent de décrire le comportement collectif des dislocations. Pour en renforcer le fondement physique, les données d'entrée, comme les lois de mobilité, peuvent être obtenues à partir de calculs à l'échelle atomique de dislocations individuelles. Les propriétés des dislocations des métaux cubiques centrés, dont le fer, sont étroitement liées à la structure de cœur des dislocations et les études menées sur ce sujet depuis les années 70 ont montré que cette structure dépendait elle-même fortement du potentiel interatomique utilisé. Ces études connaissent actuellement un renouveau, du fait que ces défauts peuvent maintenant être étudiés par des méthodes plus précises de calcul de structure électronique *ab initio*.

### 2 Objectifs

L'objectif de cette thèse est de mettre au point une méthodologie d'étude des dislocations en *ab initio* et de l'appliquer au cas de la dislocation vis [111] dans le fer cubique centré. Il s'agit plus précisément de décrire la structure de cœur et les mécanismes de glissement. Ces résultats sont essentiels pour valider et/ou ajuster les potentiels empiriques utilisés aux échelles supérieures.

### 3 Approches

Les calculs *ab initio* ont été effectués dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) avec le code SIESTA [Soler et al. *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 2745 (2002)]. Les résultats obtenus sont comparés avec ceux utilisant le potentiel d'Ackland-Mendeleev [Ackland et al. *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, S2629 (2004)], seul potentiel publié reproduisant la structure non dégénérée du cœur de la dislocation vis, prédite par les calculs *ab initio*.

Les moyens de calculs accrus (cluster de calcul parallèle du SRMP et machines du CCRT) ont permis d'effectuer des calculs *ab initio* sur des cellules contenant jusqu'à 800 atomes. La taille des cellules de simulation restant cependant une des principales limitations de ces calculs, nous avons effectué un travail d'optimisation de la géométrie des cellules de simulation appropriées à l'étude des dislocations, et nous avons testé pour chacune d'entre elles les effets de taille finie. Nous avons ainsi mis en œuvre en parallèle deux types d'approches, usuellement appelés « agrégat » et « dipôle » [1]. Nous avons mis en évidence leurs limitations respectives, dues à l'interaction surface - dislocation dans l'approche « agrégat », et à l'interaction cœur - cœur pour l'approche « dipôle ». Les limitations rencontrées avec ces deux types d'approches nous ont conduites à privilégier l'approche dipolaire avec un arrangement quadripolaire des dislocations, dans lequel les interactions cœur-cœur se compensent.

## 4 Résultats

Afin de comparer les différents modèles énergétiques, nous avons commencé par calculer une grandeur indirectement reliée aux propriétés des dislocations : les surfaces d'énergie de fautes d'empilement généralisées (ou surfaces  $\gamma$ ), qui sont obtenues en déplaçant deux demi-cristaux l'un par rapport à l'autre, sans dislocation [2].

Nous sommes ensuite passés aux études sur la dislocation proprement dite, et nous trouvons en *ab initio* : (1) que le cœur a une structure dite non dégénérée, et (2) qu'il a un volume de relaxation significatif contrairement à ce qui est prédit par la plupart des potentiels empiriques. Même si le potentiel d'Ackland-Mendeleev reproduit globalement bien la structure de cœur, des différences apparaissent sur l'écart à l'élasticité anisotrope des composantes coin. Nous avons mis en œuvre un couplage original calcul atomistique - élasticité anisotrope, qui prend en compte l'effet de dilatation en plus du champ de Volterra. Cette approche permet de rationaliser les effets inattendus observés sur la dépendance en fonction de la taille, et de corriger les effets d'interaction élastiques entre dislocations dans l'approche dipôle [3].

Du point de vue énergétique, il est important d'avoir une bonne description du potentiel de Peierls, qui est la surface d'énergie vue par une dislocation rigide se déplaçant perpendiculairement à son vecteur de Burgers, et qui caractérise la mobilité des dislocations à basse température. Nous pouvons conclure de nos résultats *ab initio* que le potentiel d'Ackland-Mendeleev conduit à une barrière de Peierls qui est trois fois trop basse, mais surtout qui a une forme en double bosse, avec une configuration de cœur métastable à mi-chemin qui n'existe pas en *ab initio* [1,4].

Le glissement de la dislocation vis d'une vallée de Peierls à la suivante se fait par nucléation et propagation de doubles décrochements le long de la ligne de la dislocation. Nous avons effectué des calculs en potentiel empirique pour caractériser les propriétés statiques des décrochements. Nous avons développé une méthodologie permettant d'introduire un seul décrochement dans la cellule de calcul quadripolaire et tri-périodique, afin d'anticiper les calculs *ab initio* de décrochements. Malgré les limitations du potentiel d'Ackland-Mendeleev, un bon accord est obtenu avec les expériences pour les deux types de décrochements [5]. La convergence avec la taille de la cellule (parallèlement et perpendiculairement au vecteur de Burgers) obtenue en potentiel empirique montre qu'il est envisageable d'effectuer des calculs similaires en *ab initio*.

## 5 Conclusions

Nous avons développé avec succès une approche robuste pour étudier sur des cellules de taille réduite les dislocations rectilignes ou avec un simple décrochement. Nous avons mis en évidence un effet de dilatation du cœur dans les dislocations vis dans le fer, et nous avons développé un modèle d'élasticité anisotrope qui le prend en compte. Nous avons par ailleurs obtenu pour la première fois une description quantitative du potentiel de Peierls. Ces résultats montrent les insuffisances des potentiels empiriques utilisés en dynamique moléculaire. Le travail en cours consiste à étudier ce qui se passe lorsque l'on applique une contrainte externe.

## 6 Références des publications

- [1] L. Ventelon et F. Willaime. *Core structure and Peierls potential of screw dislocations in  $\alpha$ -Fe from first principles: cluster versus dipole approach*. *J. Comp. Aided Materials Design* **14**, 85 (2007).
- [2] L. Ventelon et F. Willaime. *Atomistic modelling of  $\gamma$ -surfaces in bcc iron from first principles* (soumis)
- [3] E. Clouet, L. Ventelon et F. Willaime. *Dislocation core energies and core fields from first principles* (en préparation).
- [4] L. Ventelon, F. Willaime, E. Clouet et D. Rodney. *Core structure and Peierls potential of screw dislocations in  $\alpha$ -Fe from first principles* (en préparation).
- [5] L. Ventelon, F. Willaime et P. Leyronnas. *Atomistic simulation of single kinks of screw dislocations in  $\alpha$ -Fe*. *J. Nucl. Mat.* (Sous presse).