

**RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITÉ DES FRÈRES MENTOURI CONSTANTINE 1
FACULTÉ DES SCIENCES EXACTES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**

N° d'ordre :

Série :

THÈSE

**Pour obtenir le grade de
DOCTEUR EN SCIENCES EN PHYSIQUE**

Spécialité : sciences des matériaux

Option : métallurgie

THÈME

**INTERACTION ÉLASTIQUE DISLOCATION – JOINTS
INTERPHASES DANS DES MATÉRIAUX DE STRUCTURE
CUBIQUE À FACES CENTREES**

PAR :

OUCHTATI ASSIA

Soutenue le : 23 / 02 / 2017

JURY

Président : R. BENSAHA Professeur à l'Université des Frères Mentouri Constantine 1

Rapporteur : O. KHALFALLAH Professeur à l'Université des Frères Mentouri Constantine 1

Examineurs :

F. MOSBAH Professeur à l'Ecole Nationale Polytechnique Constantine.

A. NOURI Professeur à l'Université d'Oum El-Bouaghi.

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé au laboratoire des Microstructures et Défauts dans les Matériaux, Département de Physique, Faculté des Sciences Exactes, Université des Frères Mentouri Constantine.

Je voudrais tout d'abord remercier mon directeur de thèse Monsieur **Omar KHALFALLAH**, Professeur au Département de Physique de la Faculté des Sciences Exactes de Université des Frères Mentouri Constantine 1, qui est à l'origine de ce travail. C'est un honneur pour moi de travailler avec lui et je ne peux qu'admirer son talent. Je lui suis infiniment reconnaissante, non seulement parce qu'il a accepté de me prendre en thèse, mais aussi parce qu'il a partagé ses idées avec moi. Il a dirigé ma thèse avec beaucoup de patience et il a dédié beaucoup de temps à mon travail en étant toujours très disponible ce qui m'a énormément encouragée. Je le remercie aussi d'avoir lu très sérieusement beaucoup de versions préliminaires de ces travaux.

Je suis très reconnaissante à Monsieur **Rabah BENSAHA**, Professeur à l'université des Frères Mentouri Constantine 1, pour avoir acceptée de présider ce jury.

J'exprime toute ma gratitude à Monsieur **Fayçal MOSBAH**, Professeur à l'école Polytechniques de Constantine, pour avoir accepté de faire partie du jury et d'examiner mon travail.

Je remercie vivement Monsieur **Abdelkader NOURI**, Professeur à l'université d'Oum el Bouaghi, d'avoir accepté d'être examinateur de ma thèse.

Je remercie également toute personne qui ma aidée de prés ou de loin pour réaliser ce travail.

Enfin je ne saurais oublier de remercier mes chères amis et mes collègues, en particulier Hanene Bensouyad, pour leurs encouragement, leurs confiance et leurs soutient morale.

Sommaire

Introduction générale.....	1
----------------------------	---

Chapitre 1 : Dislocations et joints interphases

Partie 1 : Dislocations

1.1 - Introduction.....	3
1.2 - Description géométrique des dislocations.....	4
1.2.1 - Modèle de dislocation.....	4
1.2.2 - Vecteur de Burgers	4
1.2.3 - Types de dislocations.....	5
1.2.4 - Boucles de dislocations	6
1.3 - Propriétés élastiques des dislocations.....	7
1.3.1 - Champ des contraintes autour d'une dislocation.....	7
1.3.2 - Energie d'une dislocation	9
1.4 - Mouvement des dislocations.....	10
1.4.1 - Glissement.....	10
1.4.2 - Montée.....	11
1.5 - Dislocations dans les matériaux CFC	12
1.5.1 - Système de glissement dans la structure CFC.....	12
1.5.2 - Dislocation parfaite	12
1.5.3 - Dislocations partielles ou imparfaites.....	13
1.5.4 - Dissociation des dislocations parfaites	14

Partie 2 : Joints interphases

1.6 - Joint interphase cohérent	18
1.6.1 - Géométrie et structure des interfaces cohérentes.....	18
1.6.2 - Energie des joints interphase Cohérents.....	20
1.6.3 - Analogie avec le joint de grains	21

1.7 - Joint interphase semicohérent.....	21
1.7.1 - Géométrie et structure des interfaces semicohérentes.....	21
1.7.2 - Énergie des interfaces semicohérentes.....	23
1.7.3 - Analogie avec le joint de grains.....	25
1.8 - Joint interphase incohérent.....	26
1.8.1 - Géométrie et structure des interfaces incohérentes.....	26
1.8.2 - Énergie des interfaces incohérentes.....	26
1.8.3 - Analogie avec le joint de grains.....	26
1.9 - Interfaces entre deux phases différentes en réseaux de Bravais.....	27

Chapitre 2 : Synthèse bibliographique

Partie 1 : Interaction dislocation-inhomogénéité

2.1 - Interaction dislocation-joints interphases.....	30
2.1.1 - Interaction dislocation-inhomogénéité semi-infini.....	30
2.1.2 - Interaction dislocation-joint interphase fixe.....	31
2.1.3 - Attraction mutuelle d'une dislocation mixte.....	32
2.1.4 - Dislocation rectiligne dans un gradient d'élasticité.....	34
2.1.5 - Interaction dislocation-joint interphase CC/CFC.....	36
2.2 - Interaction dislocation-inhomogénéité circulaires.....	37
2.2.1 - Interaction dislocation-inhomogénéité circulaire biphasée.....	37
2.2.2 - Interaction dislocation-inhomogénéité circulaire triphasée.....	38
2.2.3 - Interaction dislocation-joint interphase annulaire.....	40
2.2.4 - Interaction dislocation-interface imparfaite.....	40
2.2.5 - Interaction dislocation-nano inhomogénéité circulaire.....	41
2.3 - Interaction dislocation-couches minces.....	42
2.3.1 - Interaction dans une structure bicouches minces.....	42
2.3.2 - Dislocation dans une structure multicouche plane.....	42
2.3.3 - Dislocation dans une structure multicouche circulaire.....	44

Partie 2 : Introduction à la dynamique moléculaire

2.4 - Équations du mouvement.....	46
2.5 - Intégration des équations du mouvement.....	47
2.6 - Ensembles thermodynamiques.....	48
2.6.1 - Ensemble NVE.....	48
2.6.2 - Ensemble NVT.....	48
2.6.3 - Ensemble NPT.....	49
2.7 - Aspects techniques.....	49
2.7.1 - Espace de phases.....	49
2.7.2 - Boite de simulation.....	50
2.7.3 - Conditions périodiques aux limites.....	51
2.7.4 - Pas d'intégration.....	51
2.8 - Potentiel interatomique.....	52
2.9 - Exemples d'application de la dynamique moléculaire.....	54
2.9.1 - Structure de joints.....	54
2.9.2 - Le joint source de dislocations.....	54

Chapitre 3 : Elasticité anisotrope et force image

3.1 - Théorie de l'élasticité linéaire anisotrope.....	56
3.1.1 - Dislocation dans le cristal infini.....	56
3.1.2 - Dislocation à l'interface.....	61
3.2 - Calcul de la force image.....	64
3.3 - Force image dans les matériaux de structure cubique.....	66
3.4 - Force de friction du réseau : force de Peierls-Nabarro.....	68

Chapitre 4 : Matériaux, configurations et technique d'étude

4.1 - Matériaux.....	70
4.2 - Configurations dislocations - interfaces.....	71

4.2.1 - Dislocation	71
4.2.2 - Joints interphases	71
4.3 - Méthode de calcul	74
4.3.1 - Principe	74
4.3.2 - Représentation des résultats	75

Chapitre 5 : Résultats et discussion

5.1 - Bicristaux à base de Plomb Pb-X.....	76
5.1.1- Energies d'interaction extrêmes.....	76
5.1.2 - Effet de la désorientation	79
5.1.3 - Effet des modules de cisaillement.....	80
5.1.4 - Effet du caractère de la dislocation.....	81
5.1.5 - Effet de la symétrie cristalline	83
5.1.6 - Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image.....	85
5.2 - Bicristaux à base de Aluminium Al-X	91
5.2.1 - Energies d'interaction extrêmes	91
5.2.2 - Effet de la désorientation	93
5.2.3 - Effet des modules de cisaillement	94
5.2.4 - Effet du caractère de la dislocation	95
5.2.5 - Effet de la symétrie cristalline	97
5.2.6 - Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image.....	98
5.3 - Bicristaux à base d'Or Au-X	102
5.3.1 - Energies d'interaction extrêmes	102
5.3.2 - Effet de la désorientation.....	103
5.3.3 - Effet des modules de cisaillement	104
5.3.4 - Effet du caractère de la dislocation	106
5.3.5 - Effet de la symétrie cristalline	108
5.3.6 - Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image.....	108
5.4 - Bicristaux à base d'Argent Ag-X	112
5.4.1 - Energies d'interaction extrêmes.....	112
5.4.2 - Effet de la désorientation	113

5.4.3 - Effet des modules de cisaillement	114
5.4.4 - Effet du caractère de la dislocation	115
5.4.5 - Effet de la symétrie cristalline	117
5.4.6 - Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image.....	118
5.5 - Bicristaux à base de Cuivre Cu-X	121
5.5.1 - Energies d'interaction extrêmes	121
5.5.2 - Effet de la désorientation	122
5.5.3 - Effet des modules de cisaillement	123
5.5.4 - Effet du caractère de la dislocation.....	125
5.5.5 - Effet de la symétrie cristalline	126
5.5.6 - Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image.....	126
5.6 - Bicristaux à base de Nickel Ni-X	129
5.6.1 - Energies d'interaction extrêmes	129
5.6.2 - Effet de la désorientation	130
5.6.3 - Effet des modules de cisaillement	131
5.6.4 - Effet du caractère de la dislocation	131
5.6.5 - Effet de la symétrie cristalline	133
5.6.6 - Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image.....	134
5.7 - Influence de désaccord sur l'interaction dislocation-joint interphase.....	136
5.7.1 - Joint cohérent.....	136
5.7.2 - Joint semi-cohérent	137
5.7.3 - Joint incohérent.....	138
5.8 - Discussion	139
<hr/>	
Conclusion générale	148
Références Bibliographiques	152
Annexe 1 : Energies d'interaction élastique extrêmes.....	157
Annexe 2 : Cartes d'isoénergies.....	170
Annexe 3 : Distance d'efficacité de la force image	208

Introduction Générale

Introduction Générale

Les défauts et les imperfections structurales sont omniprésents dans les matériaux. Ils peuvent y être multipliés lors des transformations ou de la mise en service. Ils jouent un rôle prépondérant lors de l'endommagement et de la ruine du matériau.

La majorité des propriétés mécaniques des matériaux, élastiques et plastiques sont déterminées par les interactions entre les défauts présents dans le cristal, tels que les défauts électriques, les défauts thermiques, les défauts atomiques, et les défauts de structure étendus.

Les interactions élastiques entre un défaut ponctuel et une dislocation et entre les dislocations ont permis d'établir le fondement des comportements du monocristal monophasé. Les interactions entre les dislocations et les joints de grains nous permettent de comprendre les propriétés du polycristal monophasé. Les interactions entre les dislocations et les joints interphase nous permettent d'approcher les propriétés des alliages polyphasés qui sont moins bien connues.

Dans un bicristal biphasé de matériaux élastiquement anisotropes ou non, le bilan des forces s'exerçant sur une dislocation de matrice proche et parallèle d'une interface comprend un terme lié à la présence de l'interface et qualifié de force image. L'expression de la force image pour une dislocation vis a été établie par Head [1]. Une expression similaire pour un vecteur de Burgers arbitraire dans un demi-espace anisotrope a été établie par Barnett et Lothe [2]. Dans les bicristaux monophasés la force image est due à l'anisotropie élastique, alors que dans les bicristaux biphasés cette force est due à la présence de la deuxième phase.

L'objectif principal de notre travail est l'étude de l'influence des paramètres élastiques et cristallographiques sur le mouvement des dislocations. Les dislocations considérées dans l'étude sont proches et parallèles d'un joint interphase qui sépare deux cristaux de même structure CFC mais de natures différentes. En absence de contraintes extérieures le mouvement des dislocations est dominé par les effets de la force image, la portée et l'efficacité de cette force sont examinés dans des bicristaux constitués de paires de métaux de structure CFC : Pb, Al, Au, Ag, Cu, et Ni.

La force image est dérivée de l'énergie d'interaction élastique entre les dislocations et les joints interphases. Cette énergie est calculée pour un ensemble de désorientations dans l'intervalle $[0^\circ, 90^\circ]$ autour d'un axe de rotation $R = [110]$.

Le mémoire est articulé autour de cinq chapitres en plus d'une introduction générale et d'une conclusion

Le premier chapitre est divisé en deux parties. La première présente un bref historique sur la théorie des dislocations. Il traite des généralités sur les dislocations, une description géométrique des dislocations, leurs propriétés élastiques et leurs mouvements. La seconde partie décrit les joints interphases et résume les différents types de joints interphases ainsi que leurs structures et leurs énergies.

Le deuxième chapitre est une synthèse bibliographique, il est constitué également de deux parties. Dans la première les différents résultats disponibles sont résumés, anciens et récents, sur les interactions des dislocations avec les différents types d'inhomogénéités : joints interphases, inclusions circulaires et couches minces. La seconde partie est une description générale de l'une des techniques de simulations parmi les plus utilisées pour analyser les différents types d'interaction dislocation-inhomogénéité. Elle présente la dynamique moléculaire, l'aspect technique, les potentiels interatomiques, et quelques exemples d'application.

Le troisième chapitre présente la théorie de l'élasticité linéaire anisotrope.

Le quatrième chapitre est consacré aux matériaux, configurations et techniques d'étude qui ont été utilisés tout le long de ce travail.

Le cinquième chapitre présente les résultats obtenus et leur discussion. Il est consacré au calcul de l'énergie d'interaction élastique et de la force image et au rôle des paramètres cristallographiques et élastiques sur les conditions de la mise en mouvement de dislocations en interaction avec des joints interphases.

Le mémoire est complété par trois annexes :

✓ La première présente une analyse détaillée de la variation de l'énergie d'interaction extrême avec la désorientation pour les bicristaux biphasés étudiés.

✓ La deuxième présente les cartes d'isoénergies pour chaque configuration étudiée.

✓ La troisième présente les courbes d'évolution de la force image et de la force de friction avec la distance dislocation-joint interphase, dans toutes les configurations étudiées. Pour une dislocation vis parfaite, et les deux dislocations partielles de Shockley.

Chapitre 1

Dislocations et joints interphases

1 - Dislocations et joints interphases

« Ce sont les défauts qui donnent vie au matériau. Sans défauts, le cristal serait mort à l'instar de l'univers s'il était vide »

(E. Kröner)

Partie 1 : Dislocations

1.1 - Introduction

Les défauts et les imperfections structurales sont omniprésents dans les matériaux. Ils peuvent y être multipliés lors des transformations ou de la mise en service. Ils jouent un rôle prépondérant lors de l'endommagement et de la ruine du matériau.

L'impact des défauts sur les propriétés est extrêmement varié. Il concerne la croissance des cristaux, leurs propriétés électriques, magnétiques, optiques et mécaniques. L'exemple le plus connu est celui de la dislocation. Le concept des dislocations fut proposé en 1907 par Volterra [3] comme la discontinuité d'un champ de déformation cylindrique d'un solide élastique isotrope, leur implication dans la valeur de la limite d'élasticité des cristaux fut envisagée par G. I. Taylor, E. Orowan et E. Polanyi [4]

Une dislocation est définie comme un défaut linéaire correspondant à une discontinuité dans l'organisation de la structure cristalline [5,6]. Elle peut être vue simplement comme un "quantum" de déformation élémentaire qui possède un champ de contraintes à longue distance.

Les dislocations sont d'une importance essentielle pour les propriétés physiques des matériaux cristallins :

- En se déplaçant elles propagent la déformation plastique et permettent ainsi la mise en forme des pièces métalliques.
- Les déformations du réseau cristallin qu'elles induisent facilitent la diffusion des atomes. Elles peuvent ainsi piéger des défauts autour d'elles.
- Elles influencent les propriétés électroniques des semi-conducteurs

1.2 - Description géométrique des dislocations

1.2.1 - Modèle de dislocation

Le concept de dislocation peut être introduit de manière formelle dans un milieu continu à partir du processus proposé par Volterra, [figure 1.1](#).

Le processus consiste à:

- Couper un volume selon une surface quelconque S limitée par la ligne L .
- Déplacer l'une des lèvres de la coupure par rapport à l'autre selon un vecteur (appelé plus tard "vecteur de Burgers"). Dans les solides cristallins ce vecteur est toujours une translation du réseau.
- Recoller les deux lèvres de la coupure
- Relaxer les contraintes induites par le déplacement.

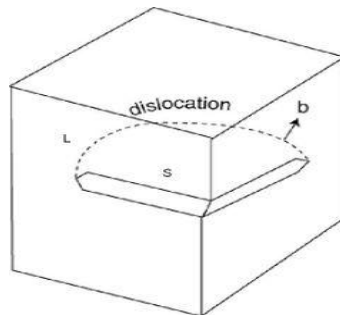


Figure 1.1: Processus de Volterra

On obtient ainsi une dislocation entourée par une déformation élastique parfaite (une continuité des contraintes finales à travers toute la surface de la coupure). La ligne de dislocation ainsi créée est définie par la position géométrique de la ligne L et par le déplacement des deux lèvres ou vecteur de déplacement.

1.2.2 - Vecteur de Burgers

Le vecteur de Burgers est défini comme étant le défaut de fermeture d'un circuit atomique effectué dans le cristal parfait, [figure 1.2.a](#), par rapport au même circuit, autour de la dislocation, dans le cristal avec défaut, [figure 1.2.b-c](#).

Ce circuit prend son départ sur un atome quelconque du cristal; il est parcouru dans le sens des aiguilles d'une montre et comporte un nombre identique de pas dans chaque direction. Il doit entourer la ligne de dislocation.

Physiquement, le vecteur de Burgers représente l'amplitude de la déformation transportée par la dislocation. Il est le même pour toute la longueur de la dislocation.

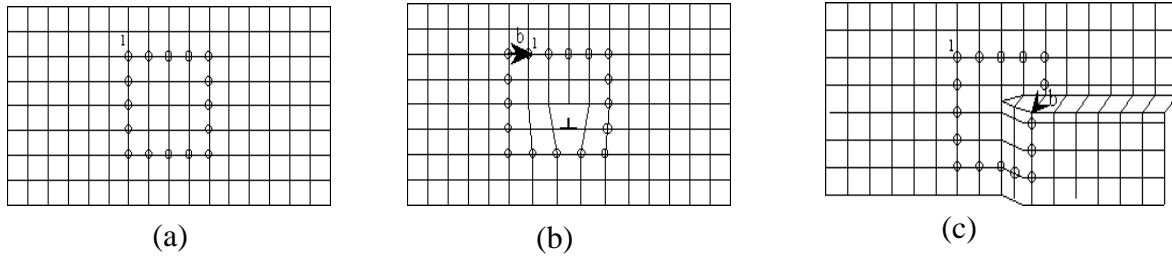


Figure 1.2: Circuit de Burgers et vecteur de Burgers. (a) Circuit dans un cristal parfait, (b) circuit autour d'une dislocation coin et (c) circuit autour d'une dislocation vis

1.2.3 - Types de dislocations [7]

Le caractère de la dislocation est défini comme l'angle entre la ligne de dislocation et le vecteur de Burgers.

- a) **Dislocations coin** : le caractère coin est attribué à la dislocation lorsque le vecteur de Burgers est perpendiculaire à la ligne de dislocation. Dans ce cas un demi-plan supplémentaire est inséré dans le cristal, [figure 1.3](#).
- b) **Dislocation vis** : le caractère vis est attribué à la dislocation lorsque le vecteur de Burgers est parallèle à la ligne de dislocation, [figure 1.4](#).
- c) **Dislocation mixte** : le caractère mixte d'une dislocation est le cas général. L'angle entre le vecteur de Burgers et la dislocation est alors quelconque (θ), [figure 1.5](#). On chaque point de la ligne de dislocation, on définit deux composantes : une composante coin avec $b_{\text{coin}} = b \cdot \sin(\theta)$ et une composante vis $b_{\text{vis}} = b \cdot \cos(\theta)$
- d)

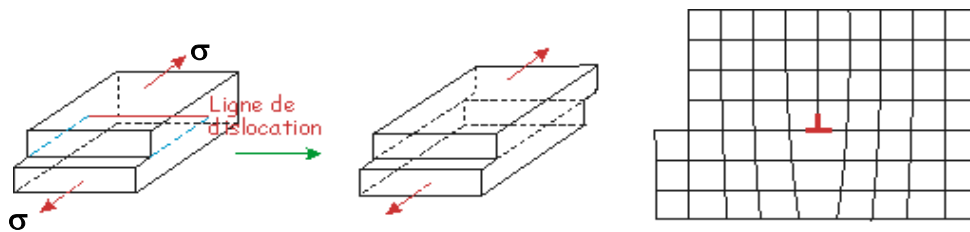


Figure 1.3: Dislocation Coin

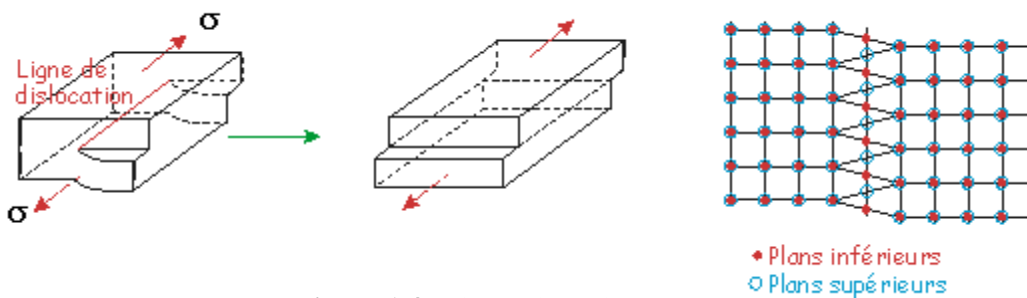


Figure 1.4: Dislocation Vis

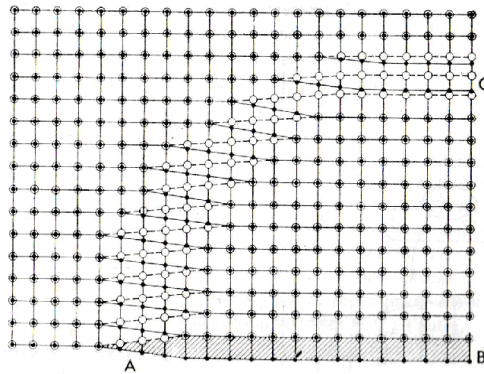


Figure 1.5: Dislocation mixte, de caractère vis en A et coin en C (d'après Read) [8]

Le vecteur de Burgers \vec{b} est constant, mais la ligne de dislocation L peut changer d'orientation dans le cristal, dans le cas limite où elle se referme sur elle-même elle forme une boucle de dislocation

1.2.4 - Boucles de dislocations

La dislocation a deux comportements possibles [9]:

- Elle peut aboutir sur un autre défaut du cristal, soit pour former un cran, quand elle émerge à la surface, soit pour s'incorporer dans un joint de grains.
- Elle peut se refermer sur elle-même pour former une boucle de dislocation.

- Si le vecteur de Burgers \vec{b} appartient au plan de la boucle, [figure 1.6.a](#), la ligne de dislocation présente des parties purement coin, [figure 1.6.b](#), et des parties purement vis, [figure 1.6.c](#), ailleurs la dislocation est de caractère mixte.

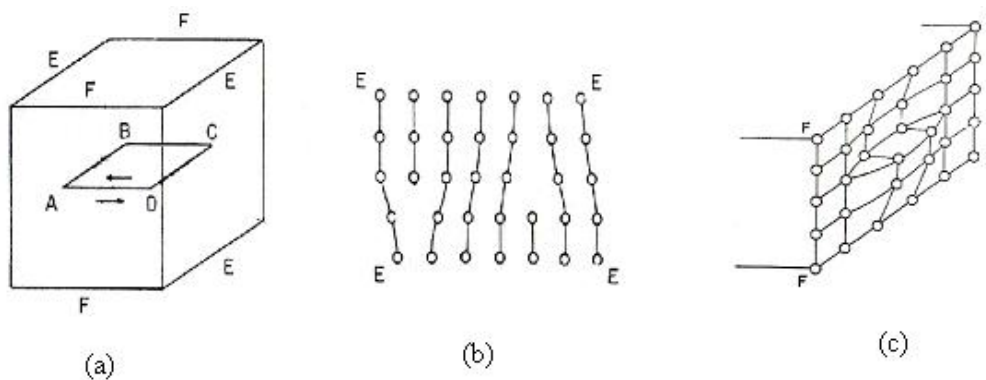


Figure 1.6: Boucle de dislocation [22]

- Si \vec{b} est perpendiculaire au plan de la boucle, la boucle est totalement coin, [figure 1.7.a](#), cette boucle est dite boucle de dislocation prismatique.

Les boucles de dislocations prismatiques peuvent résulter du rassemblement de défauts ponctuels, lacunes ou interstitiels. On distingue alors deux types de boucles coin, boucle interstitielle, [figure 1.7.b-c](#), et boucle lacunaire, [figure 1.7-c](#).

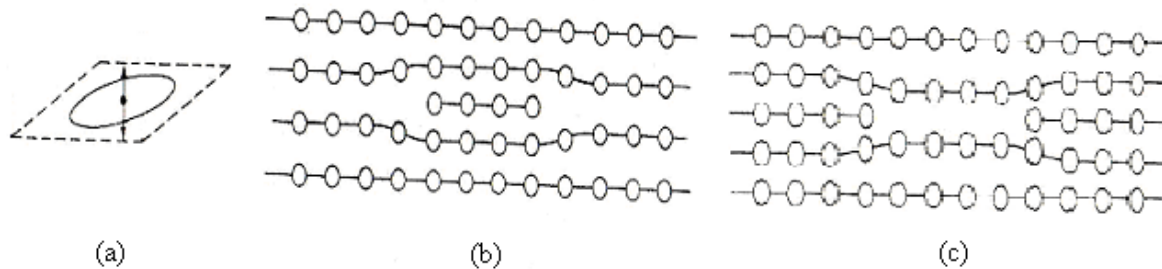


Figure 1.7: (a) Boucle de dislocation prismatique, (b) boucle interstitielle, (c) boucle lacunaire [4]

1.3 - Propriétés élastiques des dislocations

1.3.1 - Champ des contraintes autour d'une dislocation

La présence d'une dislocation dans un cristal induit une déformation et donc un champ de contrainte [10-11]. Soit r_0 le rayon de cœur de la dislocation, c'est-à-dire la largeur du domaine de matière perturbée; r_0 est de l'ordre de 2 à 3 distances interatomiques ($3x_a$)

Considérons un point M, distant de r de la ligne de dislocation:

- Si $r < r_0$, les déformations sont très importantes, on ne peut décrire le champ de contrainte par la théorie de l'élasticité des milieux continus.
- Si $r > r_0$, les déplacements sont faibles, la théorie de l'élasticité linéaire des milieux continus est utilisée pour déterminer les champs de contraintes et de déformations dus à la présence de la dislocation ainsi que l'énergie de déformation.

a) Dislocation vis

Considérons une ligne $L//OZ$, le vecteur de Burgers est parallèle à la ligne de dislocation, [figure 1.8](#).

On définit le vecteur déplacement \vec{u} par:

$$\vec{u} = \begin{cases} u_x = 0 \\ u_y = 0 \\ u_z = \frac{b\theta}{2\pi} \end{cases} \quad \vec{r} = |\overline{OM}|$$

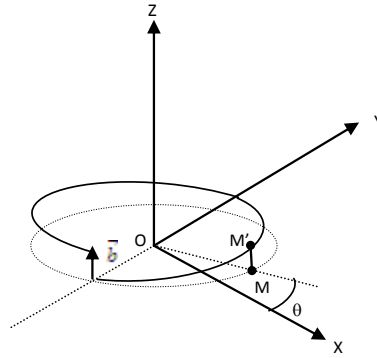


Figure 1.8 : Configuration géométrique utilisée pour le calcul de la contrainte autour d'une dislocation Vis

Du fait de la présence de la dislocation, un point $M(x,y,z)$ se déplace en $M'(x+u_x, y+u_y, z+u_z)$,

$$\text{Avec : } \begin{cases} x = r \cos(\theta) \\ y = r \sin(\theta) \end{cases}$$

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \operatorname{arctg} \frac{y}{x} \quad (1.1)$$

Les déformations élastiques autour de la dislocation vis sont représentées par le tenseur $\bar{\varepsilon}$:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{b}{4\pi r^2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & -y \\ 0 & 0 & x \\ -y & x & 0 \end{bmatrix} \quad (1.2)$$

Les termes ε_{ii} sont nuls, donc il n'y a pas de variation de volume et le champ de contraintes généré par la dislocation est une scission pure.

Suivant la loi de Hooke le tenseur des contraintes est:

$$\bar{\sigma} = \frac{\mu b}{4\pi r^2} \begin{bmatrix} 0 & 0 & -y \\ 0 & 0 & x \\ -y & x & 0 \end{bmatrix} \quad (1.3)$$

b) Dislocation coin

Une dislocation coin provoque une déformation plane. Si la dislocation est parallèle à l'axe OX par exemple, il n'y a pas de déformation suivant l'axe OZ. Donc les champs des déformations et des contraintes sont de la forme suivante:

$$\bar{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & 0 \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (1.4)$$

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (1.5)$$

c) Dislocation mixte

Dans le cas d'une dislocation mixte, le vecteur de Burgers est décomposé en deux composantes coin et vis. Les champs de déformations ou de contraintes est la superposition des deux champs dus aux composantes vis et coin.

1.3.2 - Energie d'une dislocation

La création d'une dislocation dans un cristal requiert une certaine énergie, elle est la somme de l'énergie élastique due aux champs de contrainte et de déformation étudiés précédemment et de l'énergie de cœur (difficile à évaluer compte tenu du caractère très fortement déformé de la région de cœur) généralement faible devant la contribution élastique :

$$E_{\text{dislocation}} = E_{\text{élastique}} + E_{\text{cœur}} \approx E_{\text{élastique}}$$

L'énergie élastique, par unité de longueur de ligne, stockée dans un cylindre de rayon R centré sur la dislocation est:

- Pour une dislocation vis : $U_{\text{vis}/L} = \frac{\mu b^2}{4\pi} \log \frac{R}{r_0}$
- Pour une dislocation coin : $U_{\text{coin}/L} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \log \frac{R}{r_0}$
- Pour une dislocation mixte : $U_{\text{mixte}/L} = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} (1-\nu \cos(\theta)) \log \frac{R}{r_0}$

$$r_0 \approx 5b, \quad R \in [10^5, 10^8] b.$$

Si nous prenons le rapport $R/r_0 \sim 10^4 - 10^6$, le paramètre logarithmique est souvent petit, il ne diffère pas de 4π . Donc, l'énergie élastique par unité de longueur de ligne de dislocation peut être prise dans une simple approximation comme : $U_{\text{dislocation}/L} \approx \mu b^2$

	Pb	Al	Au	Ag	Cu	Ni
$U_{\text{dislocation}/L} \approx \mu b^2$ (10^{-7} mJ/m)	12.37	21.73	25.80	28.27	35.58	58.67

Tableau 1.1 : Energie élastique par unité de longueur de ligne de dislocation dans des métaux structure CFC

1.4 - Mouvement des dislocations

Les dislocations se déplacent principalement selon deux types de mouvement: le glissement et la montée [14-16].

1.4.1 - Glissement

Ce mouvement est dit « conservatif » car il ne nécessite pas de transport de matière. Il s'effectue de proche en proche par la rupture et le recollement des liaisons atomiques. Ce type de mouvement est particulièrement efficace pour propager la déformation, et se produit généralement sans autre apport énergétique qu'une faible contrainte extérieure.

Le glissement se produit sur un très grand nombre de plans parallèles équidistants qui constituent alors une bande de glissement, l'espacement des bandes de glissement est généralement constant. Le glissement d'une dislocation a lieu sous l'effet d'une scission.

On définit le **système de glissement** (Plan, Direction), [figure 1.9-a](#), pour lequel:

- La direction est la direction cristallographique la plus dense (car c'est dans ce cas que l'énergie de déplacement de la dislocation est la plus faible).
- Le plan de glissement est un plan de densité atomique élevée, mais pas toujours maximale.

Les systèmes de glissement des structures métalliques sont représentés dans le [tableau 1.2](#).

Structure	Direction de glissement	Plan de glissement
CFC	$\langle 110 \rangle$	$\{111\}$
CC	$\langle 111 \rangle$	$\{110\}, \{110\}, \{123\}$
HC	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$\{0001\}, \{10\bar{1}0\}, \{10\bar{1}1\}, \{11\bar{2}2\}$

Tableau 1.2: Systèmes de glissement à température ambiante [5]

Pour chaque structure cristalline, le glissement des dislocations ne peut avoir lieu que pour des systèmes (P, D) bien définis, [figure 1.9 b-c](#).

Dans le cas des dislocations vis, il y a une possibilité de glissement dévié. Si une dislocation vis est bloquée par un obstacle, elle peut changer de plan et continuer son glissement dans la même direction.

Dans le cas le plus général, où la dislocation comprend des parties vis et des parties coins, les parties coins ne peuvent pas changer de plan de glissement et restent bloquées, les parties vis continuent leur mouvement grâce à la possibilité de glissement dévié.

1.4.2 - Montée

Ce mouvement intervient uniquement dans le cas de la dislocation coin, figure 1.9d. Pour déplacer une dislocation en dehors de son plan de glissement, il est nécessaire de déplacer des atomes sur de longues distances : le processus est non conservatif et a lieu grâce à la diffusion de lacunes ou d'atomes interstitiels vers le cœur de la dislocation.

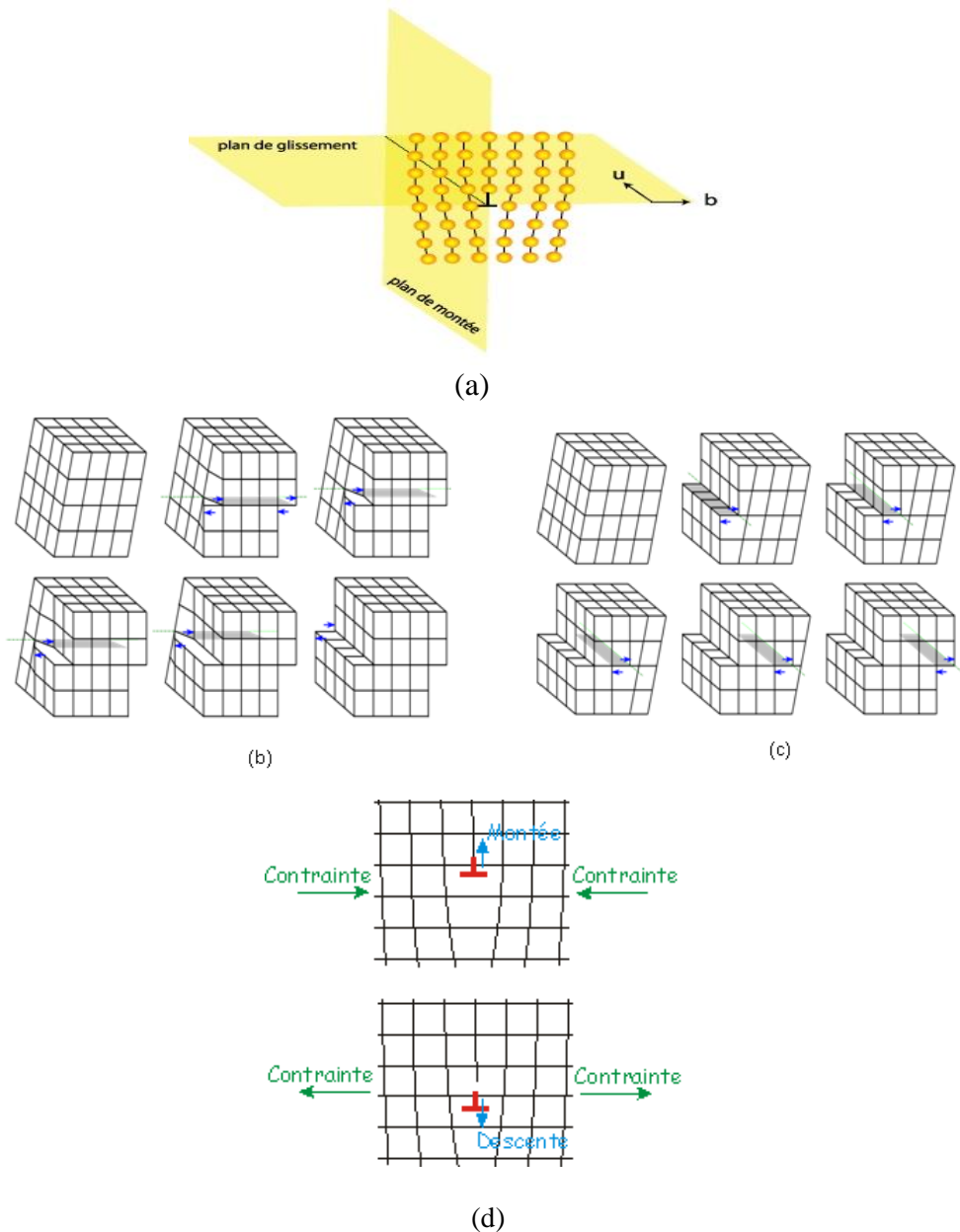


Figure 1.9: Mouvements des dislocations : (a) système de glissement, (b) glissement d'une dislocation vis, (c) glissement d'une dislocation coin, (d) montée d'une dislocation

1.5 - Dislocations dans les matériaux de structure CFC

Nous nous intéressons au comportement des dislocations dans des matériaux de structure Cubique à Faces Centrées (CFC).

1.5.1 - Systèmes de glissement dans les matériaux de structure CFC

Lorsqu'un matériau polycristallin est soumis une contrainte extérieure, une déformation plastique se produit. Celle-ci est générée principalement par un mécanisme de glissement des dislocations sur des plans cristallins précis et/ou par un maclage mécanique. Le déclenchement d'un mécanisme ou l'autre dépend de l'énergie de faute d'empilement γ_{SF} du matériau.

Les valeurs des énergies de faute d'empilement, γ_{SF} (SF, stacking fault), pour certains matériaux de structure CFC sont rassemblées dans le [tableau 1.3](#)

Matériaux	Au	Ag	Pb	Cu	Ni	Al
Energie de faute d'empilement						
γ_{SF} (mJ/m ²) [16]	41	21	9	43	126	150

Tableau 1.3: Energies de faute d'empilement des différents matériaux CFC

Dans les matériaux de structure CFC, la déformation plastique, à température ambiante, s'effectue essentiellement par glissement des dislocations parfaites sur les plans denses (P) de type {111} (le nombre d'atomes par unité de surface y est le plus élevé) et dans les directions denses (D) $\langle 110 \rangle$ (distance interatomique la plus courte). Comme il y a quatre plans possibles et sur chaque plan trois directions, il existe douze systèmes de glissement potentiellement équivalents.

Le glissement est prépondérant dans les matériaux à forte et moyenne énergie de faute d'empilement. Pour les matériaux à faible γ_{SF} , le maclage mécanique (sur des plans {111} juxtaposés) surtout à basse température et le glissement des dislocations partielles concurrencent le glissement des dislocations parfaites [17].

1.5.2 - Dislocation parfaite

Le terme dislocation parfaite s'applique à une dislocation qui, quand elle se déplace dans son plan de glissement laisse les atomes en des positions équivalentes à celles qu'ils occupaient à l'origine. Le vecteur de Burgers de la dislocation parfaite est égal à une translation du réseau

a. Si a est le paramètre de réseau d'un cristal CFC, la plus petite translation de réseau est égale à $\frac{a}{\sqrt{2}}$. On peut écrire le vecteur de Burgers d'une dislocation parfaite comme :

$$\vec{b}_p = \frac{a}{2}[110], \text{ le carré de ce vecteur est } b_p^2 = \frac{a^2}{2} \text{ (l'énergie interne par unité de longueur d'une}$$

ligne de dislocation est proportionnelle au carré du vecteur de Burgers).

Comme illustré dans le paragraphe précédent, le glissement ne s'effectue que dans les plans (111). Sur ces plans, les dislocations peuvent se dissocier en dislocations partielles avec une énergie interne inférieure.

1.5.3 - Dislocations partielles

a) Dislocation sessile de Frank

On peut créer une dislocation sessile de Frank en enlevant ou en insérant dans le réseau une portion de plan compact. Les conséquences d'une telle action sont mises en évidence dans la figure 1.10.

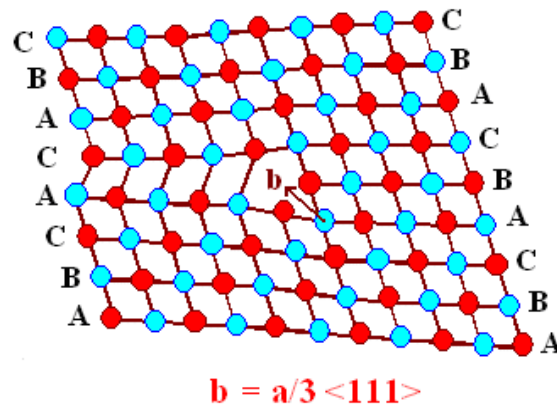


Figure 1.10: (A, B, C) empilement de plans (111), dislocation partielle de Frank créée par disparition d'une partie de plan B et création d'une faute d'empilement [18].

Le vecteur de Burgers d'une dislocation de Frank est dirigé perpendiculairement au plan (111) et a pour longueur $\frac{a}{\sqrt{3}}$, $\vec{b}_F = \frac{a}{3}[111]$

Il serait extrêmement difficile à une dislocation de Frank de se déplacer dans un plan de glissement, qui est normal au plan (111). Pour cette raison une dislocation de Frank est dite "sessile", elle ne peut se déplacer que par montée.

b) Dislocation glissile de Shockley

Une dislocation partielle n'est pas nécessairement sessile. Il existe une dislocation imparfaite mobile appelée dislocation de Shockley, figure 1.11.

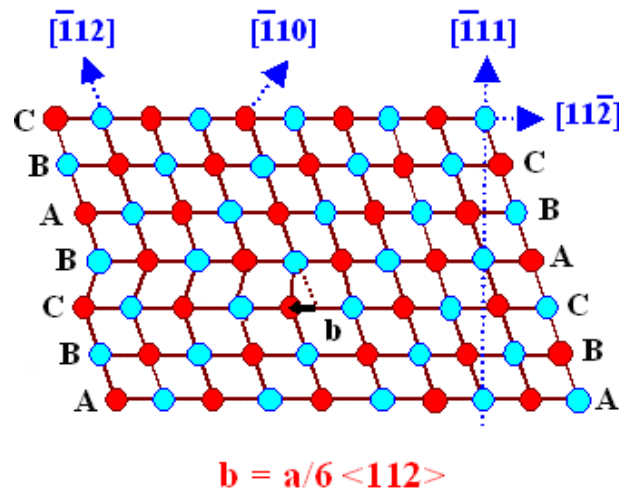


Figure 1.11: Dislocation partielle de Shockley [18].

Le vecteur de Burgers de la dislocation de Shockley pointe dans une direction $[11\bar{2}]$ et a pour longueur $\frac{a}{\sqrt{6}}$, $\vec{b}_{sh} = \frac{a}{6}[11\bar{2}]$. La dislocation et son vecteur de Burgers sont dans le plan (111) , celui-ci est le plan de glissement de la dislocation. Les dislocations de Shockley sont mobiles dans les plans (111) .

1.5.4 - Dissociation des dislocations parfaites

La réaction la plus importante impliquant des dislocations parfaites et partielles est la dissociation d'une dislocation parfaite de vecteur de Burgers b_p en deux dislocations partielles de Shockley de vecteurs de Burgers b_{sh1} et b_{sh2} .

Considérons une dislocation parfaite de vecteur $\vec{b}_p = \frac{a}{2}[110]$ glissant sur le plan (-111) . Son passage à pour effet de faire glisser le plan B sur le plan sous jacent A d'une quantité égale à $\overline{BB'}$, figure 1.12. Vu la structure de ces plans, il serait énergétiquement plus facile de profiter des creux des plans A en faisant suivre aux atomes B le trajet ACB' [8]. Mais le glissement du plan B en C crée une faute d'empilement. Celle-ci disparaîtra par le deuxième glissement CB'.

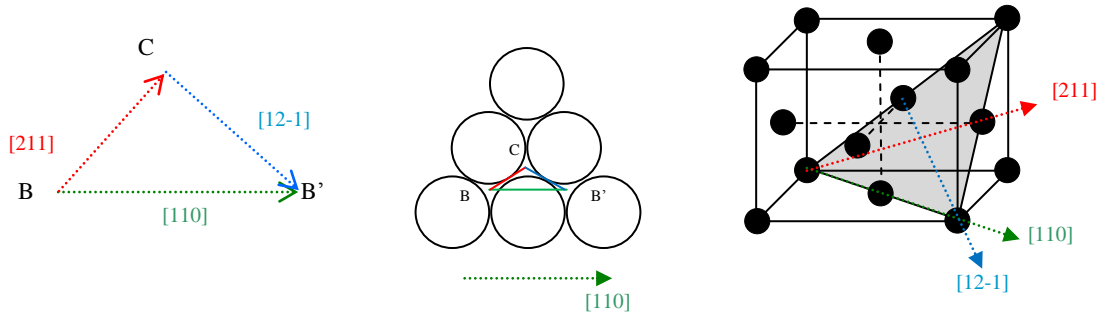


Figure 1.12: Dissociation de la dislocation parfaite de vecteur de Burgers $\vec{b}_p = \frac{a}{2}[110]$, en deux partielles de vecteurs de Burgers $\vec{b}_{sh1} = \frac{a}{6}[211]$ et $\vec{b}_{sh2} = \frac{a}{6}[12-1]$.

Le premier glissement correspond au glissement d'une dislocation partielle de vecteur de Burgers $\vec{BC} = \vec{b}_{sh1}$, le deuxième à une dislocation partielle de vecteur de Burgers $\vec{CB}' = \vec{b}_{sh2}$

La dissociation est exprimée par la réaction suivante :

$$\vec{b}_p = \vec{b}_{sh1} + \vec{b}_{sh2} \tag{1.6}$$

$$\frac{a}{2}[110] = \frac{a}{6}[211] + \frac{a}{6}[12\bar{1}] \tag{1.7}$$

Les deux dislocations partielles résultantes sont séparées par un ruban de faute d'empilement de largeur d , [figure 1.13](#).

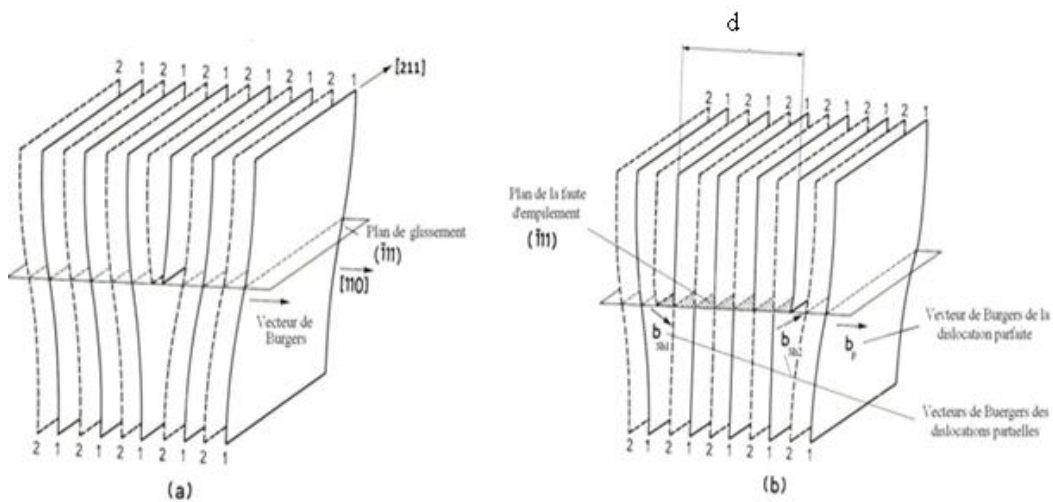


Figure 1.13 : Représentation spatiale d'une dislocation avec un vecteur de Burgers dans une structure CFC : (a) Dislocation coin parfaite, (b) deux dislocations partielles limitant une région de faute d'empilement. [19]

La distance de séparation d entre les partielles est la résultante de la force répulsive due à l'interaction élastique entre les deux partielles qui tend à les éloigner, l'interaction est proportionnelle à l'inverse de la distance de séparation, et de la force d'attraction due à la présence du ruban de faute d'empilement qui tend à les rapprocher.

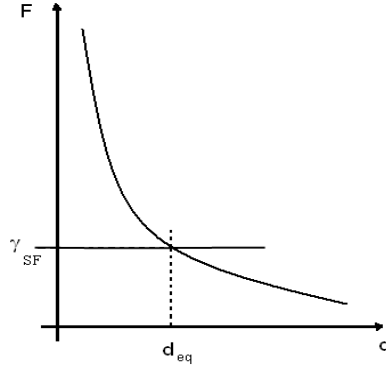


Figure 1.14: Configuration utilisée pour le calcul de la distance d'équilibre [19].

A l'équilibre cette distance, $d=d_{\text{eq}}$, est déterminée par l'intersection entre la courbe de la force répulsive, $F_{\text{int}} = F(d)$ qui diminue avec l'augmentation de la distance entre les dislocations, et la droite de la force constante γ_{SF} due à la faute d'empilement, [figure 1.14](#).

La force d'interaction élastique entre les deux dislocations parallèles dans le même plan de glissement peut être calculée en considérant les interactions entre leurs composantes vis et leurs composantes coin :

$$F_{\text{int}} \begin{cases} F_{\text{int}}^v = -\frac{\mu \vec{b}_{Sh1}^v \vec{b}_{Sh2}^v}{2\pi d} \\ F_{\text{int}}^c = \frac{\mu \vec{b}_{Sh1}^c \vec{b}_{Sh2}^c}{2\pi(1-\nu)d} \\ F_{\text{int}} = F_{\text{int}}^v + F_{\text{int}}^c \end{cases} \quad (1.8)$$

$$F_{\text{int}} \approx \frac{\mu \vec{b}_{Sh1} \vec{b}_{Sh2}}{2\pi d} \quad (1.9)$$

$$F_{\text{int}} \approx \frac{\mu b_{Sh1} b_{Sh2} \cos(\theta)}{2\pi d} \quad (1.10)$$

$$F_{\text{int}} \approx \frac{\mu b_{Sh}^2}{4\pi d}, \begin{cases} \theta = \frac{\pi}{3} \\ b_{Sh} = b_{Sh1} = b_{Sh2} = \frac{a}{\sqrt{6}} \end{cases} \quad (1.11)$$

A l'équilibre ($d=d_{eq}$)

$$\gamma_{SF} = F_{\text{int}}^{eq} \quad (1.12)$$

$$\gamma_{SF} = \frac{\mu b_{Sh}^2}{4\pi d_{eq}} \quad (1.13)$$

$$d_{eq} = \frac{\mu b_{Sh}^2}{4\pi\gamma_{SF}} \quad (1.14)$$

Dans les métaux de structure CFC d_{SF} peut varier de 5 à 200 Å. Les valeurs de la distance d'équilibre entre les dislocations partielles de Shockley pour certains matériaux de structure CFC sont rassemblées dans le [tableau 1.4](#)

	Matériaux					
	Pb	Al	Au	Ag	Cu	Ni
γ_{SF} (mJ/m ²)	9	150	41	21	43	126
d_{eq} (Å)	36,34	3,84	16,70	35,73	21,96	12,71
d_{eq} (b_{Sh})	18	2	10	21	15	9
d_{eq} (b_p)	10	1	6	12	9	5

Tableau 1.4 : Valeurs des distances d'équilibre entre les dislocations partielles d_{eq} pour certains matériaux de structure CFC.

Une dislocation parfaite peut également se dissocier en une dislocation de Frank et une de Shockley.

$$\frac{a}{2}[01\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{2}1\bar{1}] + \frac{a}{3}[11\bar{1}] \quad (1.15)$$

Du point de vue de l'énergie d'interaction élastique la dissociation est neutre. La prise en compte de l'énergie de la faute d'empilement conduit à conclure que la dissociation soit défavorisée.

Partie 2 : Joints interphases

La plupart des matériaux industriels ont une structure polycristalline, ils sont constitués de cristaux de petite taille. Un polycristal monophasé contient naturellement des joints de grains séparant des cristaux plus ou moins parfaits, et plus ou moins désorientés les uns par rapport aux autres. Un polycristal polyphasé contient également des joints d'interphases séparant des cristaux de composition chimique (de nature) différente.

Les joints interphases sont d'une très grande importance car ils conditionnent les propriétés d'usage des matériaux, la résistance à la corrosion, les propriétés mécaniques, les propriétés électriques et optiques, les transformations de phase et la microstructure des matériaux.....

La compréhension globale de la microstructure de joint interphase et de son influence sur les propriétés macroscopiques des matériaux nécessite la connaissance détaillée des structures des joints interphases et des propriétés des interphases elles-mêmes.

Trois types d'interfaces interphases (ou de joint *interphase*; joint de phase) sont généralement considérés : cohérent ou commensurable, semi-cohérent ou dis-commensurable et incohérent ou incommensurable.

1.6 - Joint interphase cohérent

1.6.1 - Géométrie et structure des interfaces cohérentes

Une interface est parfaitement cohérente quand les deux cristaux s'accordent à l'interface plane de telle manière que leurs réseaux soient continus au travers de l'interface, [figure 1.15](#). Quelles que soient les espèces chimiques, le plan de l'interface a la même configuration atomique dans les deux phases, ce qui requiert une orientation relative préférentielle des deux cristaux.

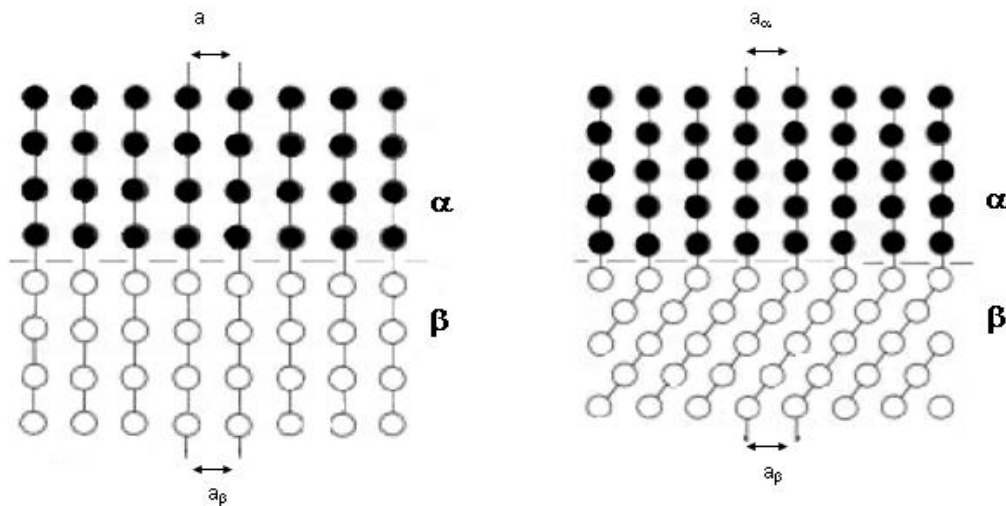


Figure 1.15: Schémas des interfaces parfaitement cohérentes [20].

Le plus souvent, le plan du joint est un plan dense dans chacun des cristaux et les directions denses sont parallèles entre elles. Les distances entre atomes le long des rangées denses dans l'interface, soit a_α et a_β , sont égales ou sensiblement égales. Si elles sont strictement égales, l'énergie interfaciale ne dépend que de la différence des espèces chimiques de part et d'autre de l'interface, alors $\gamma_{\text{cohérent}} = \gamma_{\text{chimique}}$. L'énergie d'une interface parfaitement cohérente est très faible, de l'ordre de quelques $\text{mJ}\cdot\text{m}^{-2}$. Si les distances entre atomes dans les deux phases diffèrent quelque peu, la cohérence peut être maintenue grâce à des distorsions au voisinage de l'interface donnant lieu à des contraintes dites "de cohérence", [figure 1.16](#). Ces contraintes introduisent un terme en volume, qu'il faut introduire dans le bilan énergétique [20]. L'énergie d'une interface cohérente augmente alors jusqu'à des valeurs de l'ordre de $200 \text{ mJ}/\text{m}^2$.

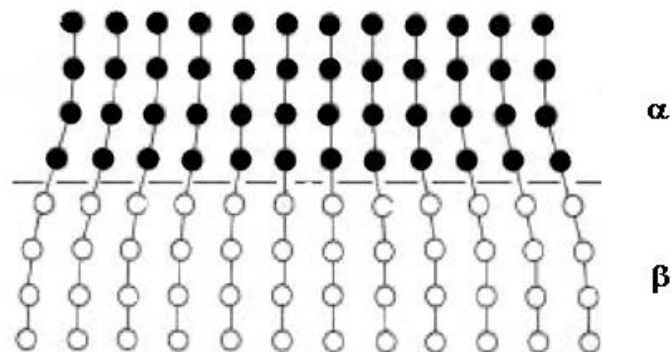


Figure 1.16: Schéma d'une interface cohérente entre deux cristaux présentant un léger désaccord des distances atomiques dans le plan de joint, ce qui entraîne le développement de contraintes élastiques de cohérence dans les deux phases [20].

1.6.2 - Energie des joints interphase cohérents

Les traitements discutés s'appliquent au cas spécial de deux phases avec la même structure cristallographique mais de compositions différentes [21]. Trois traitements de ce type d'interface sont décrits, dont deux sont basés sur le modèle des liaisons coupées et le troisième emploie une approche en milieu continu [22]).

a) *Modèle de Becker*

Le calcul de l'énergie d'une interface totalement cohérente entre deux phases α et β qui diffèrent en composition a été fait par Becker [23]. Il a employé le modèle des liaisons coupées aux premiers proches voisins pour obtenir l'énergie des joints interphase cohérents solide-solide, $\gamma_{Cohérente}^{ss}$, en supposant que les deux phases sont homogènes jusqu'à l'interface et que le joint est infiniment mince. Dans ce modèle, on n'inclut pas l'épaisseur du joint comme variable thermodynamique.

La théorie du **gradient d'énergie** et les modèles de **réseau discret de plans**, qui suivent montrent que cette hypothèse est seulement valide pour des alliages avec une forte valeur positive de l'enthalpie de mélange à 0 K.

b) *Modèle de Cahn-Hilliard (Modèle gradient d'énergie)*

Cahn et Hilliard ont développé **en milieu continu** une description de l'énergie des joints interphases cohérents [24], en considérant un plan d'interface de surface A entre deux phases isotrope α et β de composition C_α et C_β . L'énergie libre interfaciale spécifique $\gamma_{Cohérente}^{ss}$, est définie comme la différence par unité de surface, entre l'énergie libre du système de composition non homogène et celle du même système de composition homogène

c) *Modèle du réseau discret de plans (DLP)*

Lee et Aaronson [25] ont développé un modèle de réseau discret de plans (**Discret Lattice Plane**) en solution régulière pour calculer l'énergie des joints interphase et les profils de concentration interfaciale à travers des joints interphase cohérents.

Le modèle DLP a été développé notamment par Wynblatt et Ku [26] pour analyser la ségrégation en surface. Le problème est réduit au calcul des variations d'enthalpie, ΔH , et d'entropie, ΔS . Comme dans l'analyse précédente de Cahn - Hilliard, l'énergie d'interface est définie comme la différence d'énergie libre entre deux phases équilibrées α et β , et les phases homogènes de composition à l'équilibre α et β continues jusqu'à l'interface.

1.6.3 - Analogie avec le joint de grains

Par rapport à la classification des joints de grains, on peut faire une analogie entre une interface parfaitement cohérente et un joint de grains parfaitement coïncident, ex : joint de macle, dans la mesure où, aucune dislocation de désaccord, dans un cas, et aucune dislocation secondaire, dans l'autre cas, n'est présente.

Cependant cette analogie se heurte à la question de l'énergie qui n'est pas faible pour tout joint coïncident. Les relations privilégiées qui s'établissent entre deux phases s'apparentent aux relations de coïncidence pouvant conduire à des joints favorisés mais, dans les deux cas, c'est le plan du joint qui décide de la valeur l'énergie.

1.7 - Joint interphase semicohérent

1.7.1 - Géométrie et structure des interfaces semicohérentes

Lorsque le désaccord entre les distances atomiques de part et d'autre de l'interface augmente, les contraintes qu'il engendre dépassent la limite élastique des cristaux, des dislocations périodiques dites "de désaccord" (misfit dislocations) apparaissent. On parle d'une relaxation d'interface accommodée par un réseau de dislocations de désaccord, [figure 1.7](#). Cette interface est appelée semicohérente.

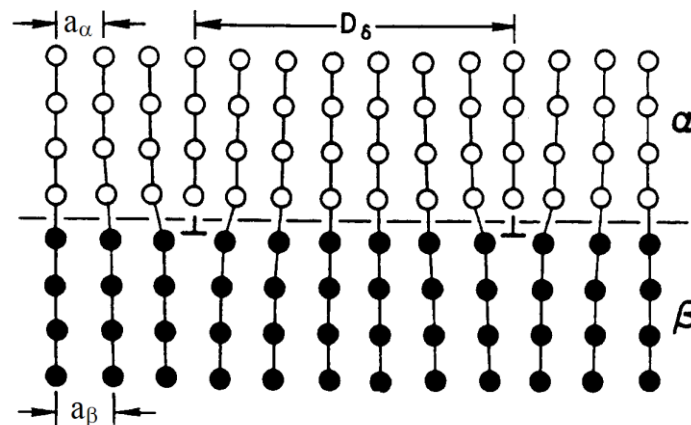


Figure 1.17 : Modèle atomique d'une interface semicohérente dans un cristal cubique simple où $a_\beta > a_\alpha$. [21].

Considérons deux phases α et β cubiques simples alignées à travers l'interface et différentes par le paramètre du réseau, [figure 1.17](#). Nous sommes intéressés par la situation où il y a des

liaisons relativement fortes à travers l'interface α - β , de sorte que la relaxation de l'interface se produise et que le désaccord soit localisé aux dislocations dans l'interface, [figure 1.17](#).

Entre les dislocations de désaccord, distribuées périodiquement, les plans dans les deux réseaux se raccordent parfaitement. Si le paramètre de réseau de la phase α est a_1 et celui de la phase β est a_2 , la distance D_δ entre les dislocations de désaccord est donnée par :

$$D_\delta = n \cdot a_1 = (n + 1) \cdot a_2 \quad (1.16)$$

Où n est un nombre entier de pas dans l'un ou l'autre des réseaux. À la différence des dislocations isolées qui augmentent l'énergie d'un matériau monophasé, ces dislocations conduisent à une réduction de l'énergie de la structure.

Il est parfois commode de mesurer le désaccord δ entre deux réseaux en termes de réseau de référence dont le paramètre est la moyenne des paramètres des deux réseaux plutôt qu'en termes de l'un ou l'autre des deux réseaux. Si nous utilisons un réseau moyen de référence, son paramètre de réseau est donné par:

$$a' = \frac{a_1 + a_2}{2} \quad (1.17)$$

L'équation (1.16) devient

$$D_\delta = \left(n + \frac{1}{2}\right) a' \quad (1.18)$$

$$n = \frac{a_2}{(a_1 - a_2)} \quad (1.19)$$

Et substituant dans l'équation (1.18) on obtient l'expression suivante pour la période des dislocations de désaccord :

$$D_\delta = \frac{(a_1 + a_2)^2}{4(a_1 - a_2)} \quad (1.20)$$

Le désaccord δ entre le réseau de la phase α et le réseau de la phase β peut alors être défini par le rapport du paramètre du réseau de référence à la distance de répétition soit $\delta = a'/D_\delta$.

Ainsi,

$$\delta = \frac{2(a_1 - a_2)}{a_1 + a_2} = \frac{a_1 - a_2}{a'} \quad (1.21)$$

et le désaccord est donné comme le rapport de la différence des paramètres des réseaux de α et de β au paramètre du réseau de référence. Notons que les paramètres des réseaux sont donnés en unités de longueur (nanomètres) de sorte que δ soit sans dimensions. La réécriture

de l'équation (1.20) dans la base de l'équation (1.21) donne la distance entre les dislocations de désaccord :

$$D_{\delta} = \frac{a'}{\delta} \cong \frac{b}{\delta} \quad (1.22)$$

Où b est la longueur du vecteur de Burgers des dislocations de désaccord.

1.7.2 - Énergie des interfaces semicohérentes :

L'énergie d'une interface semicohérente entre deux phases α et β , qui diffèrent en composition, peut être considérée comme constituée de deux contributions :

- une contribution liée aux défauts structuraux à l'interface.
- une contribution due aux liaisons compositionnelles défavorables à travers l'interface.

L'accord dans l'interface est bon sauf autour des cœurs des dislocations, l'énergie de l'interface semi cohérente $\gamma_{Semicohérente}^{SS}$ peut être déterminée en additionnant les contributions compositionnelle (chimique) $\gamma_{Chimique}^{SS}$ et structurale $\gamma_{Structurale}^{SS}$ (contrainte élastique) - énergie élastique des dislocations présentes par unité d'aire de l'interface - pour obtenir l'énergie interfaciale totale [27] :

$$\gamma_{Semicohérente}^{SS} = \gamma_{Chimique}^{SS} + \gamma_{Structurale}^{SS} \quad (1.23)$$

Pour de faibles valeurs de δ , l'énergie liée aux dislocations est sensiblement proportionnelle à leur densité c'est-à-dire à l'inverse de leur distance et donc proportionnelle au désaccord δ .

L'énergie d'une interface semicohérente se situe entre 200 mJ/m² et 800 mJ/m² environ.

Le calcul de l'énergie d'un joint semi cohérent a été réalisé en considérant plusieurs situations et plusieurs facteurs :

a) Désaccord dans une seule direction

L'énergie d'une interface semi cohérente a été analysée la première fois par Frank et Van der Merwe [28,29]. Le désaccord est considéré dans une seule direction, [figure 1.17](#), et la relaxation atomique est autorisée dans la proximité des dislocations de désaccord. Les interactions des atomes à travers le joint interphase sont supposées suivre une loi de force sinusoïdale et l'interaction dans une phase donnée est traitée sur la base de l'élasticité des milieux continus. D'après cette approche l'expression de l'énergie de la dislocation de désaccord au joint α/β , $\gamma_{Structurale}^{SS}$ [30], est une fonction de μ et δ .

b) Désaccord dans plusieurs directions [31]

Il est habituel de trouver un désaccord dans deux directions mutuellement perpendiculaires comme dans les joints interphase {100} dans les cristaux de semi-conducteurs, et dans les trois directions à 120° comme entre les plans {111} et (0001) des cristaux cubique et hexagonal. Ainsi il est possible d'avoir des réseaux de dislocations comme ceux illustrés sur la figure 1.18.

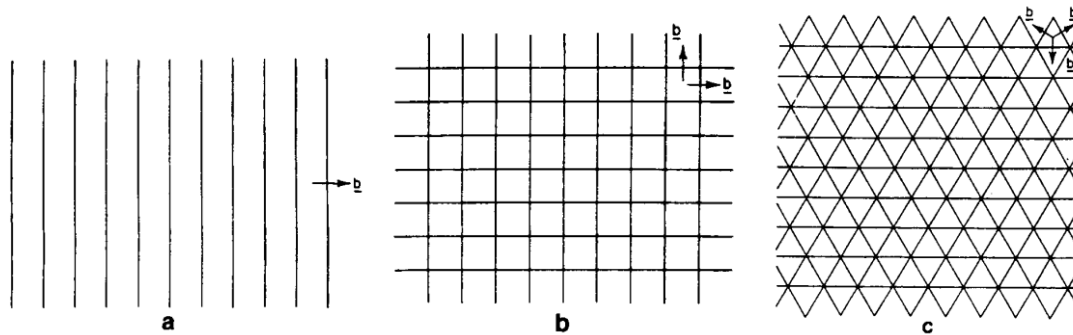


Figure 1.18 : Réseau de dislocations de désaccord pour

- (a) Un seul réseau de dislocations parallèles
- (b) deux réseaux perpendiculaires de dislocations
- (c) trois réseaux de dislocations à 120° .

Quand il y a deux réseaux perpendiculaires de dislocations coins parallèles, figure 1.18b, chacun a une énergie $\gamma_{Structurak}^{SS}$. En première approximation l'énergie d'interaction entre les deux réseaux de dislocations peut être négligée, et les énergies des deux réseaux de dislocations peuvent être additionnées pour donner la partie structurale de l'énergie interfaciale comme $2\gamma_{Structurak}^{SS}$.

L'exemple des trois réseaux de dislocations dans la figure 1.18c est plus compliqué et l'énergie d'interaction élastique entre les réseaux de dislocations n'est plus négligeable.

c) Effet des modules élastiques

Il est aussi important de considérer les effets des autres facteurs tels que les modules élastiques sur l'énergie interfaciale $\gamma_{Structurak}^{SS}$. Le rapport μ_α/μ_β (μ_α et μ_β sont les modules de cisaillement des phases α et β , respectivement) désigné sous le nom de dureté relative du bicristal. Pour une valeur donnée de la dureté relative des phases (μ_α/μ_β), $\gamma_{Structurak}^{SS}$ augmente sensiblement avec le désaccord δ .

d) Cas des couches minces

Une autre situation qu'il est important de considérer est quand l'épaisseur L d'une des phases, soit la phase α , est plus petite que la distance entre dislocations D_δ . Cette situation se produit dans le cas des couches minces, et s'applique également à des petits précipités de désaccord dans une matrice.

1.7.3 - Analogie avec le joint de grains

Les interfaces semi-cohérentes sont équivalentes aux joints de grains vicinaux, joints de grains 'proches' de joints de coïncidence avec des dislocations interfaciales proches et régulièrement espacées, ex : joint à faible angle de désorientation. L'équation (1.22) est analogue à l'équation développée pour les joints de grains dans le modèle de Read et Shockley [32]. La distance d entre dislocations interfaciales est $d = b/\theta$ et la distance D entre dislocations de misfit est $D = b/\delta$. L'angle de rotation θ est remplacé par le désaccord δ .

Dans le cas des joints interphase semicohérents, la relaxation est accommodée par un réseau de dislocations de désaccord, d'une façon similaire, dans les joints de grains, l'accommodation des réseaux cristallographiques à l'interface peut également avoir lieu par la formation de marches. Il faut noter la ressemblance avec le modèle de Read et Shockley pour les joints de grains. Pour des dislocations bien séparées et des phases avec des modules élastiques semblables où $\mu_\alpha = \mu_\beta = \mu$, l'équation de l'énergie interfaciale $\gamma_{Structural}^{SS}$ se simplifie en

$$\gamma_{Structural}^{SS} = \frac{\mu a' \delta}{4\pi(1-\nu)} (A_0 - \ln \delta), \quad (1.24)$$

Où A_0 est une énergie de cœur de dislocation, ν est le rapport de Poisson.

Si δ est remplacé par θ , le facteur $(1 - \nu)$ est remplacé par l'unité, et a' est remplacé par b pour un système homophasé, l'équation (1.24) devient la relation pour obtenir γ_{gb} l'énergie d'un joint de torsion de faible angle avec un angle de rotation θ .

$$\gamma_{gb} = E_0 \theta (A_0 - \ln \theta) \quad (1.25)$$

$$E_0 = \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} \quad (1.26)$$

$$A_0 = 1 + \ln\left(\frac{b}{2\pi r_0}\right) \quad (1.27)$$

Par conséquent, l'origine des énergies des dislocations interfaciales est semblable pour les interfaces homophasé et hétérophasé.

1.8 - Joint interphase incohérent

1.8.1 - Géométrie et structure des interfaces incohérentes

Lorsque le désaccord augmente, la distance entre dislocations diminue. Au-delà d'une certaine valeur de δ , en général $\pm 0,25$, les cœurs des dislocations interfaciales se chevauchent, il est alors difficile de distinguer les régions en bon accord de celles en désaccord dans l'interface qui devient incohérente.

Une interface incohérente résulte généralement d'une orientation relative quelconque des deux cristaux, [figure 1.19](#). Mais elle peut aussi apparaître entre deux cristaux présentant une relation d'orientation privilégiée si le plan de l'interface est quelconque. (**Raison 1**)

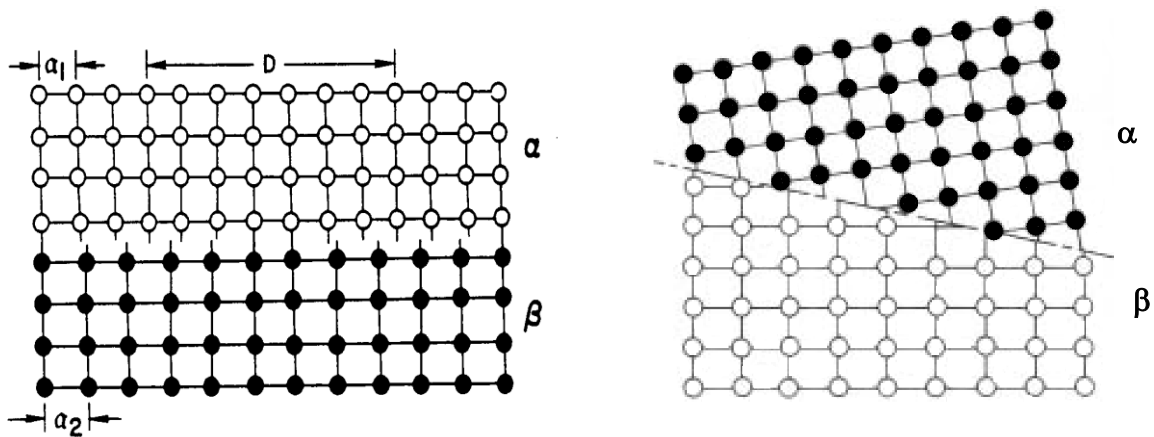


Figure 1.19 : Schéma d'une interface incohérente, (a) avec une faible interaction à l'interface, (b) avec une orientation relative quelconque des deux cristaux [21].

1.8.2 - Energie des Interfaces incohérentes

Les énergies des interfaces incohérentes varient entre 800 et 2500 mJ/m² et sont relativement insensibles aux variations de l'orientation du plan de l'interface. Une interface incohérente peut aussi être considérée comme celle où l'espacement entre les dislocations de désaccord est comparable à la largeur de leurs cœurs. (**Raison 2**)

1.8.3 - Analogie avec le joint de grains

Pour la première raison on peut faire une analogie avec les joints de grains où, pour une même coïncidence, le plan peut être symétrique ou asymétrique, constitué de plans denses des cristaux ou de plans quelconques.

Pour les deux raisons précédentes, les interfaces incohérentes sont équivalentes aux joints de grains généraux. Joints de grains à forte désorientation qui s'éloignent de toute relation de coïncidence d'indice faible.

1.9 - Interfaces entre deux phases différentes en réseaux de Bravais :

Relations d'orientation [33,34]

Plusieurs interfaces hétérophases se forment entre deux phases différentes par leurs réseaux de Bravais. Ce sont les interfaces les plus compliquées, mais elles montrent un comportement semblable afin de réduire au minimum l'énergie du joint interphase. Ces joints interphases peuvent être du type métal-métal, métal-céramique, céramique-polymère et semiconducteur- semiconducteur.

Une couche mince déposée sur un substrat ayant une structure cristallographique différente présente une forte tendance à l'alignement des plans denses et des directions denses des deux structures. Ceci est désigné sous le nom d'arrangement de rangées atomiques et le même phénomène se produit pour les interfaces hétérophases entre deux cristaux semi-infinis avec des structures cristallographiques différentes.

Dans le cas d'une transformation martensitique, les deux phases peuvent avoir la même composition mais différentes structures cristallines, telles que l'interface c.f.c.-h.c. dans l'alliage cobalt-nickel, cependant dans une transformation diffusionnelle, les phases peuvent changer en structure et en composition, comme pour une interface c.f.c.-h.c. dans un alliage aluminium-argent.

Pour ces deux cas, la relation d'orientation entre les deux phases est

- **Relation d'orientation de Shoji- Nishiyama (SN) [35]**

$$(111)_{c.f.c.} \parallel (0001)_{h.c.} ; [10-1]_{c.f.c.} \parallel [11-20]_{h.c.}$$

Notons que le plan d'interface, souvent nommé plan d'habitat en se rapportant aux précipités sous forme de plaquettes ou de lattes, est parallèle aux plans denses dans les deux structures. Les paramètres du réseau sont tels que l'arrangement hexagonal des atomes dans les plans denses $\{111\}$ et (0001) s'accordent au mieux et de grandes interfaces cohérentes sont formées. Dans ce cas, il n'y a aucune liaison coupée entre les plus proches voisins à travers l'interface, seulement des liaisons qui ont une composition différente.

En conséquence, les interfaces sont de faible énergie qui est de l'ordre de 15 à 30 mJ/m² à température ambiante.

Comme dans l'exemple de l'interface c.f.c.-h.c. ci-dessus, le bon arrangement atomique relatif se produit entre les plans denses des phases c.c. et les phases c.f.c. et h.c., ceci mène à d'autres relations d'orientation:

- **Relation d'orientation de Kurdjumov- Sachs (KS) [36]**

Où les plans denses et la direction dense dans les phases c.f.c. et c.c. sont parallèles

$$(111)_{\text{c.f.c.}} \parallel (110)_{\text{c.c.}}; [0-11]_{\text{c.f.c.}} \parallel [1-11]_{\text{c.c.}},$$

- **Relation d'orientation de Burgers [37]**

Où les plans et les directions denses des phases c.c. et h.c. sont parallèles.

$$(110)_{\text{c.c.}} \parallel (0001)_{\text{h.c.}}; [1-11]_{\text{c.c.}} \parallel [11-20]_{\text{h.c.}},$$

- **Relation d'orientation de Nishiyama- Wasserman (NW) [38]**

Les directions denses dans le c.f.c. et c.c. sont tournés hors de l'alignement par 5.26° de sorte que $[011]_{\text{c.f.c.}} \parallel [001]_{\text{c.c.}}$

- **Relation d'orientation de Pitsch- Schrader [39]**

Situation semblable à la précédente dans le système c.c.-h.c. où $[110]_{\text{c.c.}} \parallel [01-10]_{\text{h.c.}}$

Chapitre 2

Synthèse bibliographique

2 - Synthèse bibliographique

Partie 1 : Interaction dislocation-inhomogénéité

Introduction

L'étude des dislocations en interaction avec des inhomogénéités est motivée par le besoin d'atteindre une meilleure compréhension de certains mécanismes de solidification et de durcissement dans les matériaux tels que dans le durcissement par précipitation, lorsque la mobilité des dislocations est réduite par des inhomogénéités au sein des grains d'un solide cristallin. De tels problèmes sont traités sur la base de la théorie de l'élasticité. L'interaction élastique résulte du fait que l'énergie potentielle totale du corps et les contraintes appliquées dépendent des positions relatives dislocation-inhomogénéités.

Seules quelques situations très idéalisées ont été analysées par Dundurs [40], parce que chaque cas individuel exige une solution élastique particulière. Une grande révolution de la théorie des dislocations [1953-1969] a été ébauchée et de nombreux phénomènes observés peuvent être expliqués en considérant le réseau cristallin comme un continuum élastique. Le succès de la théorie de l'élasticité des milieux continus dans le comportement des dislocations est dans une large mesure dû à deux facteurs.

- Le comportement des dislocations est dominé par les variations de l'énergie du système.
- Les contraintes du réseau sont amoindries quand on s'éloigne de la dislocation.

Du fait de la diminution lente des contraintes, la plus grande partie de l'énergie associée à la dislocation est stockée dans la partie du cristal où la théorie de l'élasticité linéaire donne des résultats précis. Les travaux sur les dislocations ont clarifié et étendu les concepts classiques, tels que l'incompatibilité, la contrainte résiduelle, et la force sur une singularité élastique.

La première étude pour évaluer l'interaction des dislocations avec des inhomogénéités de grande échelle a été faite par Head [41], en utilisant le modèle de deux solides jointés semi-infinis avec différentes constantes élastiques, et une dislocation rectiligne parallèle à l'interface. Dans cette configuration, la dislocation est repoussée ou attirée par l'interface. Head a été le premier à donner le critère **attraction-répulsion** au comportement des dislocations. Dundurs et Mura [42] ont indiqué, pour le cas de l'inhomogénéité limitée, qu'une dislocation coin peut avoir des positions d'équilibre stables proches de l'interface

même en absence de désaccord de volume entre la matrice et l'inclusion. Ce résultat suggère un mécanisme de piégeage des dislocations proches des inhomogénéités.

En l'absence d'une contrainte appliquée et de contraintes résiduelles provoquées par le désaccord, l'interaction des dislocations avec les inclusions ou les inhomogénéités de la seconde phase résulte de deux sources.

- La perturbation locale dans les arrangements atomiques aux interfaces;
- La différence entre les constantes élastiques des deux phases.

Lorsque les dislocations ne sont pas « trop » proches de l'interface et que la taille de l'inclusion est assez grande, l'interaction élastique devrait être prédominante.

Dans la première partie de ce chapitre on va résumer les différents résultats disponibles sur l'interaction d'une dislocation avec les différents types d'inhomogénéités :

- Les joints interphases,
- Les inclusions circulaires,
- Les interfaces entre couches minces.

La seconde partie est une introduction à la simulation par la technique de la dynamique moléculaire. C'est la simulation, au niveau atomique, la plus utilisée pour analyser les différents types d'interaction dislocation-inhomogénéité.

2.1 - Interaction dislocation-joints interphases.

2.1.1 - Interaction dislocation-inhomogénéité semi infinie

Dundurs et Sendekyj [43] ont examiné le problème de deux demi-espaces jointés élastiquement isotropes, avec différentes constantes élastiques l'un des deux contenant une ligne de dislocation coin parallèle à l'interface interphase. En examinant la force de Peach-Koehler sur la dislocation produite par la présence d'une deuxième phase, ils ont montré que pour tous les choix des constantes élastiques correspondant à des demi-espaces élastiques stables, l'une des deux possibilités suivantes a lieu:

- (i) La dislocation est attirée vers l'interface d'un côté et est repoussée loin de l'interface de l'autre côté;
- (ii) La dislocation est repoussée loin de l'interface, quel que soit le demi-espace contenant la dislocation.

La possibilité de l'attraction de la dislocation vers l'interface des deux côtés ne peut pas se produire pour des dislocations coin pures.

Le cas (i), que nous appellerons attraction-répulsion, est l'état habituel des interactions. Comme règle approximative, l'attraction vers l'interface se produit lorsque la dislocation est située dans le demi-espace le plus dur élastiquement et que la répulsion loin de l'interface se produit lorsque la phase la plus molle élastiquement est disloquée. En l'absence d'une définition précise des termes "élastiquement plus dur " et " élastiquement plus mou", la règle reste approximative.

2.1.2 - Interaction dislocation-joint interphase fixe

Ting et Barnett [44] ont employé des expressions explicites des fonctions de Green pour déterminer la force image exercée sur une dislocation placée dans un demi-espace élastiquement anisotrope. Ils ont trouvés que :

- La force image pour un joint libre attire toujours la dislocation vers le joint.
- La force image pour un joint fixe (joint solide ; pas de déplacements à travers le joint) est toujours répulsive.

L'intensité de la répulsion associée à un joint fixe est toujours égale ou supérieure à celle de l'attraction associée à un joint libre. Ils ont montré également comment la force image pour un demi-espace peut être déduite de la force image pour deux demi-espaces différents jointés.

Pour un bi-matériau (1/2), $C_{ijkl}(1) = \lambda \cdot C_{ijkl}(2)$; où λ est une constante réelle positive $\lambda \geq 0$.

- $\lambda = 0$, lorsque le matériau 2 est le vide,
- $\lambda = 1$, si les deux matériaux sont identiques,
- $\lambda = \infty$, lorsque le matériau 2 est un corps très rigide.

Ils ont trouvés qu'un joint libre est équivalent à un bi-matériau avec $\lambda = 0$. Un joint fixe est équivalent à un bi-matériau avec $\lambda = \infty$.

Benlahsen et al. [45], ont étudié l'influence de la force image sur la traversée d'une interface parfaitement jointée par des dislocations glissiles. Pour décrire les interactions dislocations-interfaces ils ont utilisé la méthode des dislocations images. Ils ont trouvé que la traversée de ces interfaces n'est contrôlée que par l'effet des modules d'élasticité $K = (\mu_2 - \mu_1) / (\mu_2 + \mu_1)$.

2.1.3 - Attraction mutuelle d'une dislocation mixte

Barnett et Lothe [46] ont étudié la force image exercée sur une dislocation rectiligne parallèle à une interface entre deux demi-espaces stables, élastiques, différents, parfaitement collés et anisotropes.

En général, la dislocation est repoussée loin de l'interface quand elle est située dans le demi-espace isotrope le plus mou, et elle est attirée vers l'interface lorsqu'elle est située dans le demi-espace isotrope le plus dur.

Barnett et Lothe [2] et plus tard Rice [47] ont examiné le problème général d'une dislocation et un bi-matériau constitué de deux demi-espaces élastiquement linéaires, anisotropes et parfaitement collés, ils ont montré que la force image qui tend à attirer la dislocation ou la repousser est donnée par :

$$f_i = \frac{E(1-2) - E(j)}{h}; j = 1,2. \quad (2.1)$$

Où j désigne le demi-espace contenant la ligne de dislocation (qui est rectiligne, infiniment longue et parallèle à l'interface), h est la distance entre la dislocation et l'interface, $E(j)$ est le facteur pré-logarithmique d'énergie pour une dislocation qui se trouve dans le demi-espace j et $E(1-2)$ est le facteur pré-logarithmique d'énergie pour la même dislocation située à l'interface entre les deux milieux,

- $f_i > 0$ indique la répulsion loin de l'interface
- $f_i < 0$ indique l'attraction vers l'interface.
- f_i est nulle lorsque les deux demi-espaces sont identiques.

Barnett et Lothe [46] ont prouvé que la règle approximative attraction-répulsion convient pour un bi-matériau élastique, linéaire et proportionnellement anisotropes, c.à.d. deux demi-espaces parfaitement collés pour lesquels $C_{ijkl}(2) = \lambda \cdot C_{ijkl}(1)$, où la constante λ est positive ($0 < \lambda < +\infty$). Ils ont trouvés que la force image, f_i est une fonction croissante de λ .

- $f_i > 0$ pour $1 < \lambda < +\infty$.
- $f_i < 0$ pour $0 < \lambda < 1$ et
- f_i est nulle lorsque $\lambda = 1$,

Donc pour une dislocation dans un milieu (1) la répulsion se produit lorsque $\lambda > 1$ et l'attraction se produit lorsque $\lambda < 1$. De telle sorte lorsque $\lambda > 1$ (< 1), le milieu 2 est élastiquement plus dur (plus mou) que le milieu 1.

La règle approximative ne tient pas toujours, depuis Dundurs et Sendeckyj [43], une dislocation purement coin dans un bi-matériau composé de deux demi-espaces parfaitement collés différents et isotropes, subit une attraction-répulsion, ou bien une répulsion mutuelle. La possibilité de l'attraction mutuelle ne se produit pas pour une dislocation coin pure. Le travail de Barnett et Lothe [46] est considéré comme une extension du travail de Dundurs et Sendeckyj [43], c.à.d. que la possibilité de l'attraction mutuelle peut exister pour une ligne de dislocation mixte parallèle à une interface entre deux demi-espaces différents.

Ils ont considéré un bi-matériau composé de deux demi-espaces différents, isotropes, stables, élastiques et parfaitement collés dont les modules de cisaillement et les rapports de Poisson sont respectivement μ_1, ν_1 et μ_2, ν_2 . Ils ont caractérisé les demi-espaces par :

- $\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1 > 0$,
- $\kappa_i = 3 - 4\nu_i$,
- $\tau_i = \mu_i / (1 - \nu_i)$ avec ($i = 1, 2$)

Le cas de $\Delta\mu = 0$ ne permet pas l'attraction mutuelle d'après leurs calculs.

Barnett et Lothe [46] ont montré que l'attraction mutuelle est possible pour des dislocations mixtes, à condition que les constantes élastiques des deux demi-espaces et les composantes de la dislocation vis soient convenablement choisies.

Pour sélectionner les constantes élastiques permettent la possibilité de l'attraction mutuelle il faut.

- Choisir $\mu_1 > 0$
- Choisir $\frac{5}{3} < \kappa_1 < 7, -1 < \nu_1 < \frac{1}{3}$
- Sélectionner μ_2 ($\Gamma = \mu_2 / \mu_1$) de tel sorte que:

$$1 < \Gamma < \frac{25\kappa_1 - 31}{3\kappa_1^2 - \kappa_1 + 4}.$$

$$1 < \frac{\mu_2}{\mu_1} < 1.58$$

- Choisir $\kappa_2, \kappa_2 > 3$ donc $-1 < \nu_2 < 0$

Le milieu avec le module de cisaillement le plus petit doit posséder le rapport de Poisson le plus grand et le rapport de Poisson doit être compris entre -1 et 1/3 (le rapport de Poisson le plus petit est négatif), alors que le rapport des modules de cisaillement ne doit pas dépasser 1,58. Ainsi, un demi-espace isotrope, stable, dont le rapport de Poisson est supérieur à 1/3 ne

peut pas être parfaitement collé à un autre demi-espace isotrope stable de façon à permettre une attraction mutuelle.

2.1.4 - Dislocation rectiligne dans un gradient de l'élasticité

La description de l'interaction élastique entre une dislocation et une interface est habituellement basée sur la résolution des problèmes des joints par la théorie de l'élasticité linéaire classique. Ce type des solutions décrivent avec succès le domaine élastique des dislocations loin des interfaces et loin des lignes de dislocation, ils sont valables dans les cas des interactions à long distance entre les dislocations et les interfaces, cependant, elles ne sont pas applicables, indéterminé, à courte portée ($\approx 2b$, b est le module du vecteur de Burgers). Cela concerne principalement la singularité ou la discontinuité des champs élastiques de la dislocation sur sa ligne et la singularité de la force d'interaction entre la dislocation et l'interface, force image, dans le cas où la dislocation est très proche ou à l'interface. Afin éliminer ces singularités on peut appliquer la théorie de gradient de l'élasticité.

La théorie de gradient de l'élasticité linéaire est une extension de la théorie de l'élasticité linéaire classique. Une simple modification de la forme standard de la loi de Hooke à été introduite par [Ru et Aifantis \[48\]](#) permis d'écrire la solution par la théorie de gradient d'élasticité comme la somme de la solution classique et un terme de gradient supplémentaire.

$$\sigma^{(gr)} = \sigma^{(cl)} - c\nabla^2\sigma^{(cl)} \quad (2.2)$$

$$\sigma^{(gr)} = \lambda(tr\varepsilon^{(gr)})I + 2\mu\varepsilon^{(gr)} \quad (2.3)$$

$$\varepsilon^{(gr)} = \varepsilon^{(cl)} - c\nabla^2\varepsilon^{(cl)} \quad (2.4)$$

$$\sigma^{(gr)} = \lambda(tr\varepsilon^{(cl)})I + 2\mu\varepsilon^{(cl)} - c\nabla^2[\lambda(tr\varepsilon^{(cl)})I + 2\mu\varepsilon^{(cl)}] \quad (2.5)$$

Où $(\sigma, \varepsilon)^{cl}$ et $(\sigma, \varepsilon)^{gr}$ sont les tenseurs de contrainte et de déformation élastiques, classique et gradient, μ et λ sont les constantes de lamé, I est le tenseur d'unité, ∇^2 est Laplacien, c est le coefficient de gradient, pour un réseau atomique $\sqrt{c} \approx \frac{a}{4}$ [48] a est le paramètre de réseau.

Dans le cadre de la théorie du gradient de l'élasticité, [Gutkin et al. \[49\]](#), ont considéré l'influence d'un joint interphase sur une dislocation vis rectiligne parallèle à une interface plane entre deux milieux élastiquement isotropes avec des constantes de Lamé différentes (μ , λ)_{1,2} et des coefficients de gradient différents c_1 et c_2 . Les particularités de l'interaction à courte distance entre la dislocation et l'interface sont alors décrites, ce qui était impossible par la théorie classique de l'élasticité linéaire.

Ils ont calculé le champ de contrainte élastique de la dislocation et la force image exercée par l'interface sur cette dislocation. Ils ont montré que les deux composantes du champ de contrainte, $\sigma_{xz}^{(gr)}$, $\sigma_{yz}^{(gr)}$, n'ont pas de singularité sur la ligne de dislocation et restent continues à travers l'interface, contrairement à la solution classique ayant une singularité sur la ligne de dislocation et permettant un saut pour l'une des deux composantes, $\sigma_{yz}^{(cl)}$, à travers l'interface. La continuité des contraintes à travers l'interface permet d'éliminer la singularité classique de la force l'image pour une dislocation émergeant à l'interface, [figure 2.1](#).

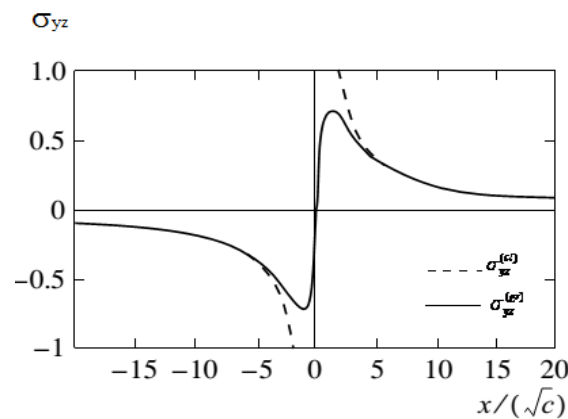


Figure 2.1 : Distribution de la composante σ_{yz} du champ de contrainte d'une dislocation vis à l'interface pour $\mu_2/\mu_1=10$ et $c_1/c_2=1$. Les solutions classique $\sigma_{yz}^{(cl)}$ et gradient $\sigma_{yz}^{(gr)}$ [49].

Ils ont déterminé la force image élastique supplémentaire due à la différence des coefficients de gradient des deux phases en contact est à courte portée, elle atteint sa valeur maximale à l'interface et conduit à expulsée la dislocation vis dans le matériau qui a le coefficient de gradient le plus grand.

En général, lorsque les modules de cisaillement μ_i et les coefficients de gradient c_i ($i=1,2$) pour les deux phases sont différents, la force image globale peut agir différemment à l'interface, selon les rapports μ_2/μ_1 et c_2/c_1 , [figure 2.2.a](#), bien que sa composante à longue distance reste la même que dans la théorie classique de l'élasticité.

Une dislocation coin dans une situation similaire a été étudiée par [K.N. Mikaelyan et al. \[50\]](#), la même chose que pour la vis, pas de singularité du champ de contrainte sur la ligne de dislocation et la force image reste continue à travers l'interface. Elle atteint sa valeur maximale à l'interface et expulse la dislocation coin dans le matériau qui a le coefficient de gradient le plus petit. Pour des modules de cisaillement μ_i et des coefficients de gradient c_i

($i=1,2$) différents, la force image peut agir différemment à l'interface, selon les rapports μ_2/μ_1 et c_2/c_1 , figure 2.2.b.

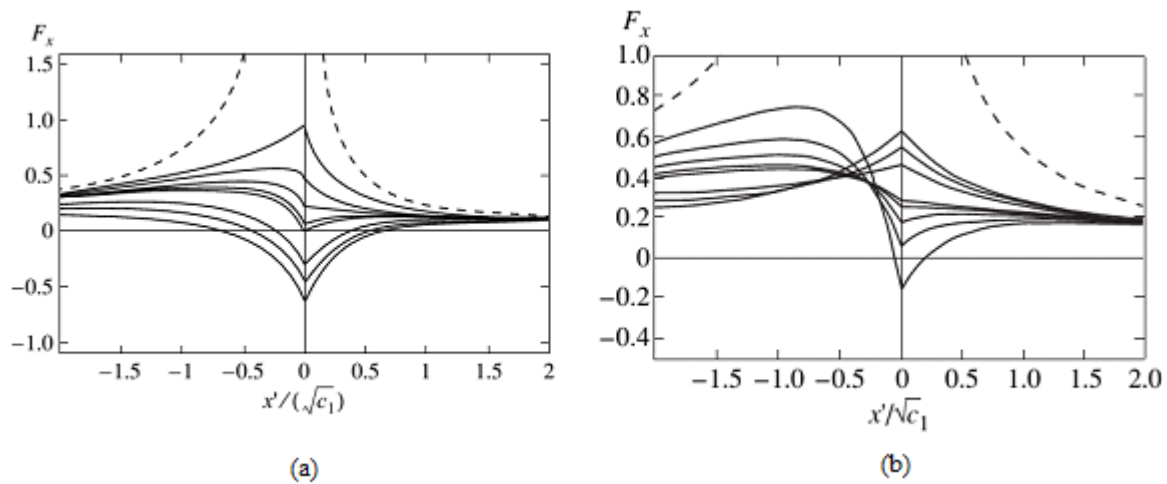


Figure 2.2 : Force image, $F^{(gr)}$, en fonction de la distance entre la dislocation et l'interface,

(a) dislocation vis, $\mu_2/\mu_1=3$ et $c_2/c_1=0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 1.2, 3$ et 5 (du haut vers le bas, $x=0$),

(b) dislocation coin, $\mu_2/\mu_1=3$ et $c_2/c_1=5, 3, 1.2, 0.9, 0.7, 0.5$ et 0.3 (du haut vers le bas, $x=0$).

Les courbes en pointillés décrivent la solution classique [49,50]

Pour les deux cas, vis et coin, les deux théories d'élasticité classique et gradient coïncident loin de la dislocation et loin de l'interface (à une distance plus grande que $10\sqrt{c}$).

2.1.5 - Interaction dislocation joint interphase CC/CFC

Lasko et al. [51], ont étudié la génération, le blocage et la possibilité de pénétration des dislocations dans un joint entre deux structures différentes CC/CFC. Le mouvement des dislocations coin passant à travers le joint interphase dans le système Fe/Cu a été simulé par la méthode de la Dynamique Moléculaire (DM) en utilisant des potentiels à N- corps du type « Méthode de l'atome enchâssé », (EAM).

Le modèle étudié comprend deux types de structures: la moitié gauche est du fer (CC) avec les directions $[111]$, $[1-10]$ et $[-1-12]$ parallèles à x , y et z respectivement. La moitié droite se compose de Cu (CFC) avec les directions $[110]$, $[1-11]$ et $[-112]$ parallèles à x , y et z , respectivement. Le plan de glissement préféré pour la dislocation coin dans le fer est le plan $(1-10)$. Dans la partie adjacente, Cu, ce plan se continue dans le plan $(1-11)$ qui est le plan de glissement favorable pour une structure CFC. La rotation est de 30° autour de l'axe z , le plan de glissement de la dislocation dans Cu $(1-11)$ est incliné de 30° par rapport au plan de

glissement (1-10) de la dislocation coin dans le Fe. Une contrainte extérieure de cisaillement est appliquée.

Dans le matériau CFC l'énergie de déformation élastique est réduite par la dissociation d'une dislocation parfaite en deux partielles de Shockley. Le vecteur de Burgers de la dislocation parfaite $1/2 [110]$ peut être représenté par la somme des deux partielles :

$$1/2 [110] = 1/6 [21-1] + 1/6 [112].$$

- **Mouvement de la dislocation coin de Fe vers Cu.**

Quand la dislocation partielle de tête atteint le joint interphase, elle le traverse. La dislocation partielle de tête va apparaître dans Cu suivie de la faute d'empilement. Quand la dislocation partielle de tête avance dans Cu, la région occupée par la faute d'empilement s'élargit alors que la dislocation partielle de queue reste bloquée dans le joint interphase.

- **Mouvement de la dislocation coin de Cu vers Fe.**

La dislocation dans Cu se dissocie en deux partielles. Les deux partielles sont attirées par le joint interphase, elles ne pénètrent pas dans Fe, elle sont absorbées par le joint interphase.

2.2 - Interaction dislocation-inhomogénéité circulaire

2.2.1 - Interaction dislocation - inhomogénéité circulaire biphasée

L'interaction des dislocations avec les inhomogénéités permet d'étudier les mécanismes de solidification et de durcissement des matériaux. Cela est principalement dû au fait que la mobilité des dislocations peut être influencée par les diverses inhomogénéités présentes dans les matériaux. Les inhomogénéités comme les précipités dans les alliages, en raison de leur interaction avec les dislocations, jouent un rôle important dans les propriétés mécaniques des métaux.

Dans le cadre de la théorie classique de l'élasticité, [Dundurs et Mura \[42\]](#) ont étudié l'interaction entre des dislocations et des inhomogénéités semi-infinies, en considérant une dislocation coin dans le voisinage d'une inclusion circulaire dont les propriétés élastiques sont différentes de celles de la matrice.

Ils ont montré que l'interaction ne se limite à une simple attraction ou répulsion ; sous certaines conditions la dislocation peut avoir une position d'équilibre stable à une distance finie de l'interface. L'énergie d'interaction présente un minimum à la position d'équilibre

stable et la dislocation est bloquée dans cette position. L'interaction est très influencée par l'orientation du vecteur de Burgers par rapport à l'inclusion.

Les résultats de [Dundurs et Mura \[42\]](#) indiquent également que l'interaction dislocation-inhomogénéité est influencée par les constantes élastiques des matériaux. En plus de l'effet produit par la différence des modules de cisaillement, il existe une forte dépendance à la différence des rapports de Poisson. Par conséquent, tout raisonnement qui simplifie trop les aspects géométriques du problème soit l'influence des constantes du matériau peut facilement conduire à des conclusions erronées.

[Dundurs \[40\]](#) a étudié l'interaction dislocation vis -inhomogénéité circulaire en utilisant la méthode des images, cette interaction dépend des modules de cisaillement des deux matériaux ($\Gamma = \mu_2/\mu_1$) et de la distance entre la dislocation et le centre de l'inclusion circulaire.

- $\Gamma > 1$, inclusion dure, la dislocation est repoussée dans la matrice.
- $\Gamma < 1$, inclusion molle, la dislocation est attirée vers l'inclusion.
- Le centre de l'inclusion est une position d'équilibre pour la dislocation vis, cette position est stable si $\Gamma < 1$, et instable si $\Gamma > 1$.

2.2.2 - Interaction dislocation - inhomogénéité circulaire triphasée

[Xiao et Chen \[52\]](#) et [Feng et al. \[53\]](#) ont examiné l'interaction entre une dislocation vis et une inhomogénéité circulaire de fibre revêtue d'une couche de revêtement dans un matériau isotrope.

Le problème à examiner est représenté sur la [figure 2.3](#), où la dislocation vis de vecteur de Burgers $b = b_z$ est située au point $(e, 0)$, $e > b$ proche d'une inclusion revêtue.

- La région circulaire interne $r \leq a$ (phase 1) est la fibre avec un rayon a et les propriétés élastiques κ_1, μ_1 .
- La couche intermédiaire $a \leq r \leq b$ (phase 2), est le matériau de revêtement avec des propriétés élastiques κ_2, μ_2 .
- La couche extérieure $r \geq b$ (phase 3) est le matériau de la matrice avec des propriétés élastiques κ_3, μ_3 .

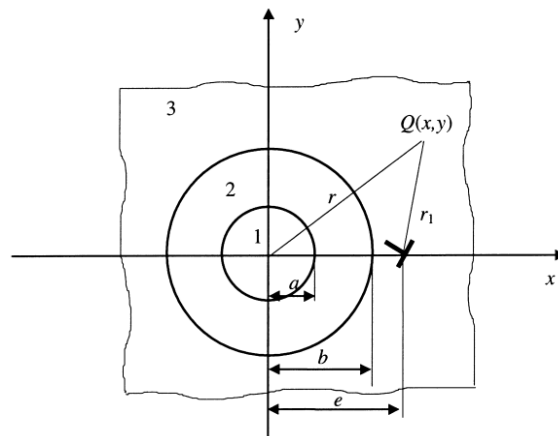


Figure 2.3 : Représentation géométrique d'une dislocation vis proche d'une inclusion revêtue [52]

- Lorsque la couche de revêtement est épaisse, les propriétés élastiques de la fibre (inclusion) n'ont pas d'influence significative sur la force qui s'exerce sur la dislocation.

- Lorsque la couche de revêtement est mince,

- ✓ Si à la fois l'inclusion et la couche de revêtement sont mous, ils ont les modules les plus faibles, $\frac{\mu_1}{\mu_3} < 1$ et $\frac{\mu_2}{\mu_3} < 1$, par rapport à la matrice, la dislocation est toujours attirée par l'inclusion

- ✓ Si l'inclusion et le revêtement sont durs, ils ont les modules les plus forts, $\frac{\mu_1}{\mu_3} > 1$ et $\frac{\mu_2}{\mu_3} > 1$, par rapport à la matrice, la dislocation est toujours repoussée par l'inclusion.

En conséquence, il n'y a pas de position d'équilibre pour ces deux conditions.

- ✓ Si l'inclusion est plus dure et le revêtement plus mou que la matrice, $\frac{\mu_1}{\mu_3} > 1$ et $\frac{\mu_2}{\mu_3} < 1$, la dislocation est d'abord attirée, puis elle est repoussée par l'inclusion revêtue. Il y a au moins une position d'équilibre instable à proximité de l'interface revêtement- matrice.

- ✓ Si l'inclusion est plus molle et le revêtement plus dur que la matrice, $\frac{\mu_1}{\mu_3} < 1$ et $\frac{\mu_2}{\mu_3} > 1$, la dislocation est d'abord repoussée, puis elle est attirée par l'inclusion revêtue. Il y a au moins une position d'équilibre stable à proximité de l'interface revêtement -matrice.

2.2.3 - Interaction dislocation-joint interphase annulaire.

Liu et al. [54] ont examiné l'influence des paramètres du joint interphase sur le comportement des dislocations. Ils ont considéré un milieu infini isotrope contenant une inhomogénéité circulaire et un joint interphase annulaire, comme représenté sur la figure 2.4, dont R_1 et R_2 sont les rayons interne et externe de l'anneau interphase. Une dislocation vis est située au point z_0 , qui se trouve dans l'inhomogénéité ou dans la matrice (z_0 se trouve dans la matrice, figure 2.4).

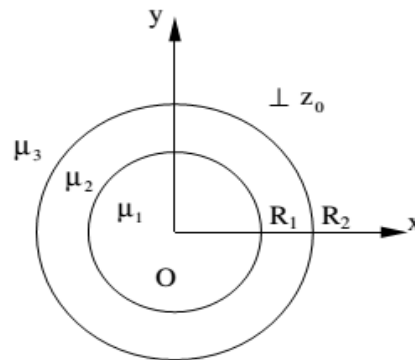


Figure 2.4 : Dislocation vis en interaction avec une inhomogénéité et un joint interphase [54].

Où les indices 1, 2 et 3 se réfèrent à l'inhomogénéité, le joint interphase et la matrice, respectivement

Leurs résultats coïncident très bien avec les résultats de Xiao et Chen [52]. Ils ont trouvé que pour un joint interphase très mou et/ou un joint interphase très épais, la dislocation est toujours attirée vers le joint. Cette force attractive est très grande lorsque la dislocation est proche du joint interface. Elle diminue quand la dislocation s'éloigne du joint interphase dans la matrice, alors qu'elle s'annule au centre de l'inhomogénéité.

Ils ont prouvé que les propriétés du joint interphase peuvent être le facteur dominant de la force d'interaction pour une caractéristique importante : joint très dur ou très mou et/ou joint interphase épais. Même pour un joint interphase très mince, il existe une petite région où la force sur la dislocation est principalement déterminée par la propriété du joint.

2.2.4 - Interaction dislocation-interface imparfaite

Les interfaces imparfaites apparaissent et ont des effets importants dans de nombreuses situations en mécanique des matériaux. En particulier, la prévision des propriétés effectives des matériaux composites (multicouches, fibreux ou à inclusions) nécessitent souvent la prise en compte des effets des interfaces imparfaites. La plupart des résultats

existants dans le domaine de l'interaction dislocation-interface sont traités avec des interfaces parfaites où les déplacements sont continus à travers les interfaces. En réalité, les déplacements à travers les interfaces peuvent présenter un saut.

Sudak [55] a étudié l'interaction entre une dislocation vis et une inhomogénéité circulaire. L'interface matrice-inhomogénéité est supposée être imparfaite. Selon Sudak le degré d'imperfection interfaciale et la nature de la liaison le long de l'interface ne peuvent être ignorés.

L'interface imparfaite introduit une nouvelle variable non-dimensionnelle, M , qui caractérise l'efficacité des liaisons à l'interface ou le degré d'imperfection interfaciale,.

Pour une dislocation vis proche d'une interface plane, la force agissant sur la dislocation due à la présence d'une interface imparfaite varie entre celle d'une surface libre qui correspond à une très faible valeur de M , et celle d'une interface parfaite correspondant à une très grande valeur de M .

Sudak [55] a montré que :

- Lorsque l'inhomogénéité est molle, quel que soit le niveau d'imperfection de l'interface, parfaite ou imparfaite, l'inhomogénéité attire toujours la dislocation ($\frac{\mu_2}{\mu_1} < 1$). Aucune position d'équilibre n'existe.
- Lorsque l'inhomogénéité est dure ($\frac{\mu_2}{\mu_1} > 1$), une position d'équilibre instable existe, elle dépend de l'état de l'interface et du rapport des modules de cisaillement $\frac{\mu_2}{\mu_1}$.
 - ✓ Si M est faible, $M < 1$, la dislocation est attirée par l'inhomogénéité et aucune position d'équilibre n'existe.
 - ✓ Si M est grande, $M > 1$, l'inhomogénéité repousse la dislocation et aucune position d'équilibre n'existe.
 - ✓ Si $M = 1$ la dislocation est d'abord attirée et ensuite repoussée par l'inhomogénéité. Dans ce cas, une position d'équilibre instable existe.

2.2.5 - Interaction dislocation -nano inhomogénéité circulaire

Fang et Liu [56] ont étudié l'influence de l'interface sur l'interaction entre une dislocation coin et une inhomogénéité circulaire de taille nanométrique. En utilisant la méthode de la variable complexe, ils ont montré que les paramètres élastiques de l'inhomogénéité jouent un rôle très important. L'influence de la taille sur la force devient significative lorsque le rayon

de l'inhomogénéité est réduit jusqu'à l'échelle nanométrique. A cette échelle, la tension interfaciale joue un rôle important dans la compréhension de l'interaction entre les dislocations.

Les résultats de [Ou et Pang \[57\]](#) indiquent qu'à l'échelle nanométrique l'influence de la contrainte interfaciale sur le mouvement de la dislocation devient importante et la force image agissant sur la dislocation dépend de la taille de l'inhomogénéité.

Dans le cadre de la théorie du gradient de l'élasticité, [Davoudi et al \[58\]](#), [Ahmadzadeh-Bakhshayesh et al. \[59\]](#) ont examiné le champ de contrainte d'une dislocation vis située à l'intérieur d'un nano-fil intégré dans une matrice. Ils ont montré qu'il n'y a pas de singularité de la contrainte et toutes ses composantes sont continues et régulières à travers l'interface, contrairement aux résultats obtenus avec la théorie classique de l'élasticité. La force sur une dislocation dépend de la position de la dislocation, de la taille du nano-fil, du rapport des modules de cisaillement et des coefficients du gradient des matériaux constitutifs.

2.3 - Interaction dislocation-couche mince

L'étude des dislocations dans les structures multicouches est très importante pour comprendre les propriétés mécaniques des composites et des couches minces.

2.3.1 - Dislocation dans une structure bicouche minces

[Chu \[60\]](#) a étudié le comportement d'une dislocation vis rectiligne parallèle à une interface entre deux phases de films minces élastiquement isotropes d'épaisseurs égales. Ils ont trouvé que la force image sur une dislocation près de l'interface peut être attractive ou répulsive selon que la dislocation est située dans la phase dure ou molle.

Loin de l'interface interphase l'effet de la surface libre est considérable. Pour une dislocation située dans la phase molle, la dislocation vis se trouve instable près de l'interface, la force image totale tend à la pousser vers la surface libre.

3.3.2 - Dislocation vis dans une structure multicouche plane

Le comportement élastique des dislocations dans de telles structures est influencé par la proximité des phases ayant des propriétés élastiques différentes. [La méthode des images](#) est

l'une des techniques très utilisée pour déterminer l'interaction entre une dislocation et une interface dans une structure multicouche

Kamat et al. [61] ont calculé la force sur une dislocation vis infinie, rectiligne et parallèle à l'interface dans une structure multicouche, ayant des couches alternées de A et B d'épaisseurs égales, h , enfermées dans deux couches semi-infinies. Les phases A et B sont supposées être élastiquement isotropes, figure 2.5. Ils ont étudié le cas de trois, quatre et cinq couches

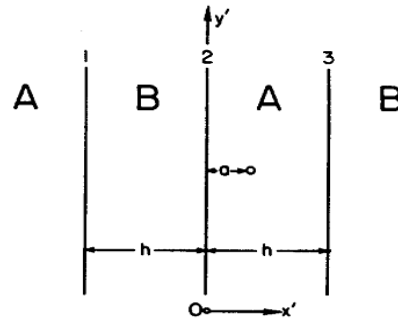


Figure 2.5 : Géométrie du système multicouche, exemple de trois couches [61]

Ils ont trouvé que l'intensité de la force image augmente avec l'augmentation de γ , $\gamma = \frac{\mu_1 - \mu_2}{\mu_1 + \mu_2}$, elle dépend du nombre de couches constituant le système multicouche et de la distance entre les couches.

Wang et al. [62] ont utilisé la technique de la décomposition de l'image pour étudier le comportement d'une dislocation mixte placée dans un système simple à trois couches anisotropes avant de le généraliser à un système de N-couches. Le multicouche est constitué d'un nombre arbitraire de couches de différents matériaux (cubique ou hexagonal) et de différentes épaisseurs, figure 2.6.

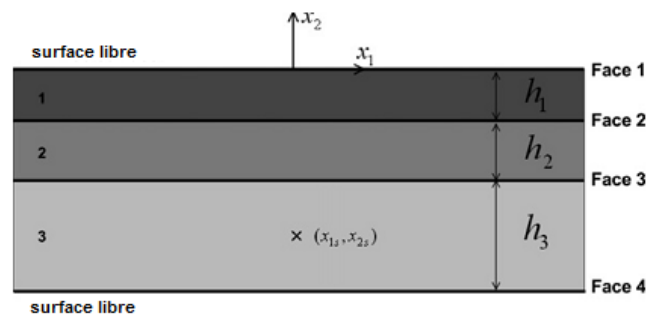


Figure 2.6 : représentation géométrique d'un système à trois couches anisotropes [62].

Les solutions pour une dislocation mixte dans une structure multicouche générale (contrairement à une dislocation coin pur ou vis pur dans un bi-matériau ou multicouche

périodique) basée sur la méthode de l'image sont rapportées pour la première fois par Wang et al. [62]. Ils ont prouvé que :

(a) L'attraction, la répulsion et l'intensité de la force image sont reliée à l'inhomogénéité des matériaux γ ($\gamma = \frac{\mu_1 - \mu_2}{\mu_1 + \mu_2}$).

(b) La force image sur une dislocation proche d'une interface, dépend des épaisseurs des couches voisines quand le rapport des épaisseurs des couches est inférieur à 0,5.

(c) L'intensité de la force image dépend du caractère des dislocations et de l'anisotropie élastique des matériaux

Les valeurs réelles des forces image ne peuvent être déterminées que par un modèle de calcul capable de traiter simultanément tous ces facteurs.

2.3.3 - Dislocation dans une structure multicouche circulaire

Honein et al. [63], ont étudié l'interaction entre une dislocation vis et un joint interphase multicouche entre une inclusion circulaire et une matrice. Les couches sont des cylindres coaxiaux de sections transversales annulaires ayant des rayons arbitraires et des modules de cisaillement différents. Le nombre de couches peut également être arbitraire. La traction et le déplacement à travers toutes les interfaces sont supposés être continus.

Ils ont traité deux positions particulières de la dislocation vis, à l'intérieur de la matrice et dans le noyau de l'inclusion, figure 2.7.

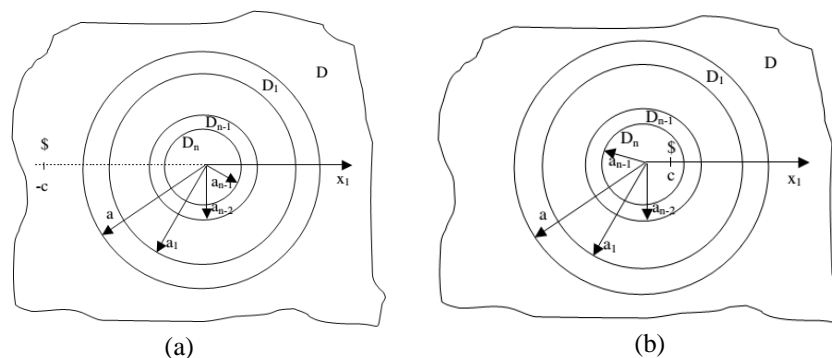


Figure 2.7 : Dislocation vis dans une structure multicouche circulaire, (a) dans la matrice, (b) dans l'inclusion [63].

Dans les deux cas, la force de Peach-Koehler calculée ne dépend que des rayons des différentes couches et de leurs modules de cisaillement.

Le domaine des interactions dislocation-inhomogénéité est très vaste, on ne peut pas le résumer dans quelques pages, à chaque fois qu'on change l'un des paramètres physiques de la configuration étudiée tels que : caractère de la dislocation, position de la dislocation, nature et structure ou même forme du matériaux, type d'interface, ou la méthode d'étude : forme des potentiels, type de modélisation, technique de simulation, théorie, de nouveaux résultats apparaissent.

Récemment [Zhou et al. \[64\]](#) ont assemblé de nouveaux travaux sur les interactions dislocation inhomogénéité dans les milieux infinis avec des méthodes d'étude différentes, alors que [Dong et al. \[65\]](#) ont étudié la mobilité et la stabilité d'une dislocation coin devant une interphase amorphe dans une matrice nanocomposite de matériaux renforcés . [Tao et al. \[66\]](#) sont allés plus loin en examinant le comportement d'une boucle de dislocation dans un bimatériau avec une interface imparfaite.

Partie 2 : Introduction à la dynamique moléculaire

La dynamique moléculaire (DM) est une méthode permettant de simuler l'évolution temporelle (dynamique) d'un système de particules (molécules) en interaction par le biais d'un potentiel..

Elle repose généralement sur l'utilisation de la relation fondamentale de la dynamique de Newton. En utilisant des mécanismes de contrôle de la température (thermostat) et de la pression (barostat), la dynamique moléculaire permet de calculer, grâce à des approches statistiques, des propriétés énergétiques, thermodynamiques ou structurales.

2.4 - Équations du mouvement

La dynamique moléculaire (DM) classique est fondée sur la mécanique newtonienne : les propriétés d'un ensemble d'atomes ou particules sont déterminées en étudiant la trajectoire de chaque particule au cours du temps. Pour cela, on applique les lois de la mécanique classique aux atomes qui sont assimilés à des masses ponctuelles. On résout donc simultanément, pour tous les atomes i d'un système, les équations classiques du mouvement :

$$\vec{f}_i = m_i \vec{\gamma}_i \quad (2.6)$$

Où f_i est la somme des forces s'exerçant sur l'atome i , m_i sa masse et γ_i son accélération.

Les forces d'interaction (ou le potentiel dont elles dérivent) peuvent être obtenues à partir des premiers principes de la mécanique quantique, on parle alors de DM *ab initio*, mais le plus souvent (pour des raisons de taille du système à simuler) elles dérivent d'un potentiel fixé empiriquement ; on parle alors de DM classique.

L'intégration des équations du mouvement est effectuée numériquement, en choisissant un pas de temps δt fini et en approximant les équations différentielles par des équations aux différences finies. À partir de ces calculs, on prédit les nouvelles positions, vitesses et forces de toutes les particules à l'instant $t + \delta t$. On peut ainsi remonter au comportement macroscopique d'un matériau : par exemple, mouvement et réarrangement des atomes/défauts...

Les échelles de taille et de temps accessibles par la DM sont de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres, et de quelques picosecondes. Les informations obtenues peuvent être, soit

utilisables telles quelles (vitesse de propagation des dislocations, nombre et arrangement des défauts créés par irradiation...) ou comme données de départ pour des calculs à une échelle plus large (éléments finis par exemple).

Les données d'entrée d'un calcul de DM sont donc : un ensemble d'atomes, des potentiels interatomiques et, éventuellement, une série de contraintes imposées par le milieu extérieur (température, pression...).

2.5 - Intégration des équations du mouvement : qualités d'un bon algorithme

Le choix d'un algorithme d'intégration des équations de mouvement est guidé par sa rapidité d'exécution, c'est-à-dire la possibilité d'avoir des pas d'intégration δt les plus grands possibles tout en conservant l'énergie du système : on se contente souvent de $\Delta E/E \approx 10^{-4}$ [67]. Notons que le but d'un tel algorithme n'est pas de prédire de façon exacte la trajectoire d'un atome particulier (la nature chaotique du mouvement à N-corps rend impossible cette prédiction), mais bien de prédire un comportement d'ensemble, avec comme critère principal de convergence, la conservation de l'énergie.

L'algorithme le plus simple est celui mis au point par Verlet [68,69] qui dérive d'un développement de Taylor de $\vec{r}_i(t)$:

$$\begin{cases} \vec{r}_i(t + \delta t) = 2\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(t - \delta t) + \delta t^2 \cdot \vec{a}_i(t) \\ \vec{v}_i(t) = \frac{\vec{r}_i(t + \delta t) - \vec{r}_i(t - \delta t)}{2\delta t} \end{cases} \quad (2.6)$$

On constate que cet algorithme donne les positions à l'instant $(t + \delta t)$ et les vitesses à l'instant t . Pour pallier ce problème, des versions plus élaborées de l'algorithme de Verlet ont été mises au point.

Citons notamment l'algorithme leapfrog [70], où l'on calcule les vitesses au milieu du pas d'intégration, par exemple, en appliquant :

$$\begin{cases} \vec{v}_i\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) = \vec{v}_i\left(t - \frac{\delta t}{2}\right) + \delta t \cdot \vec{a}_i(t) \\ \vec{x}_i(t + dt) = \vec{x}_i(t) + \delta t \cdot \vec{v}_i\left(t + \frac{\delta t}{2}\right) \end{cases} \quad (2.7)$$

ou bien l'algorithme de Verlet vitesse [71] qui prend la forme suivante :

$$\begin{cases} \vec{r}_i(t + \delta t) = \vec{r}_i(t) + \delta t \cdot \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2} \delta t^2 \cdot \vec{a}_i(t) \\ \vec{v}_i(t + \delta t) = \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2} \delta t \cdot [\vec{a}_i(t) + \vec{a}_i(t + \delta t)] \end{cases} \quad (2.8)$$

D'autres algorithmes très utilisés sont les algorithmes prédicteurs-correcteurs tels ceux mis au point par Gear [72]. Dans un premier temps, on prédit les valeurs des positions, vitesses, accélérations, etc. par développement de Taylor. À partir de ces nouvelles positions, on calcule les forces. De ces forces on déduit l'accélération que l'on compare alors à l'accélération obtenue par le développement de Taylor et l'on applique un facteur correctif.

Le choix d'un algorithme résulte d'un compromis entre rapidité et justesse. À titre d'exemple, l'algorithme de Verlet est, de manière générale, plus rapide, mais moins juste que les algorithmes type prédicteurs-correcteurs. Il n'existe hélas pas de « recette » qui dicte le choix d'un algorithme et l'optimum dépend du problème traité. La meilleure stratégie consiste donc à tester les différents algorithmes en comparant le rapport justesse/temps de calcul.

2.6 - Ensembles thermodynamiques : contraintes imposées par l'extérieur

2.6.1 - Ensemble NVE

Par principe, la DM explore l'ensemble micro-canonique NVE pour lequel le nombre d'atomes (N), le volume étudié (V) et l'énergie du système (E) sont fixes. Pour les autres ensembles (canonique NVT, isotherme-isobare NPT), on doit modifier les équations de Newton.

2.6.2 - Ensemble NVT

Pour travailler dans l'ensemble canonique NVT, trois grandes méthodes sont utilisées :

- **Le scaling des vitesses** : on calcule l'énergie cinétique du système E_k et celle que celui-ci devrait avoir $E_k^{Consigne}$ et on multiplie toutes les vitesses par le facteur adéquat : par exemple $E_k^{Consigne}/E_k$.
- **Le thermostat d'Andersen** : le système est couplé à un thermostat qui impose la température. Le couplage est représenté par des forces stochastiques qui agissent de temps en

temps sur des particules sélectionnées au hasard. Entre les collisions aléatoires, le système évolue à énergie constante suivant les lois de Newton habituelles.

- **Le thermostat de Nosé-Hoover** : on introduit un terme de frottement ζ dans l'équation du mouvement :

$$m_i \dot{\vec{v}}_i = \vec{f}_i - m_i \zeta \vec{V}_i \quad (2.9)$$

Son évolution temporelle est liée à la différence entre l'énergie cinétique mesurée et l'énergie cinétique désirée :

$$\dot{\zeta} = (E_k/E_k^{Consigne})/Q_T \quad (2.10)$$

Où Q_T détermine la rapidité de la réponse du thermostat.

2.6.3 - Ensemble NPT

Pour l'ensemble isotherme-isobare NPT, on peut selon la méthode de Nosé-Hoover rajouter un degré supplémentaire de liberté représentant le volume de la boîte de simulation. Ce volume V devient une variable dynamique donnée par :

$$\dot{V} = (P/P^{Consigne})/Q_P \quad (2.11)$$

Où Q_P détermine la rapidité de la réponse du barostat. Si l'on veut imposer, non pas une pression, mais un état de contrainte donné, une variante de la méthode précédente consiste à introduire cette fois neuf autres degrés de liberté qui correspondent aux trois vecteurs définissant la boîte de simulation. Il s'agit de la méthode Parrinello-Rahman [73,74]. Chaque degré de liberté est une variable dynamique qui évolue en fonction de l'état de contrainte désiré.

2.7 - Aspects techniques

2.7.1 - Espace des phases

On modélise généralement les matériaux comme un système comprenant N particules interagissant entre elles à travers un potentiel d'interaction. Chaque particule est caractérisée par sa position dans l'espace r_i et sa vitesse v_i . L'espace $\{r_i, v_i\}$ à $6N$ dimensions ($3N$ pour $\{r_i\}$ et $3N$ pour $\{v_i\}$) est appelé espace des phases. C'est un objet fondamental de la physique statistique. La simulation du solide considéré revient à résoudre le système d'équations différentielles couplées. Ces équations doivent conserver l'énergie totale du système.

Afin de simuler un solide cristallin infini dans une, deux ou trois dimensions on commence par considérer un pavage de l'espace selon une certaine géométrie (cubique,.....). Il suffit ensuite d'étudier le système sur un seul pavé (boite, cellule) et de tenir compte de la périodicité de l'espace et des conditions aux limites des boites (boite centrale et boites images).

2.7.2 - Boîte de simulation

La taille de la boîte de simulation construite et le nombre des atomes à l'intérieur de celle-ci dépendent de la nature, de l'orientation de l'atome et de la distance entre l'atome et les bords de la boîte.

Si la simulation comprend N particules, il y a $N(N - 1)/2$ interactions entre paires possibles. Cette croissance en N^2 génère un nombre important de calculs. Pour réduire le nombre d'interactions entre paires à déterminer, on restreint les calculs d'interactions aux particules les plus proches, c'est-à-dire que l'on détermine une distance seuil, ou rayon de coupure (cutoff), [figure 2.8](#), au-delà duquel les interactions sont négligées.

- La boîte de simulation est répliquée dans toutes les directions de l'espace
- Les particules quittant la boîte centrale sont réintroduites du côté opposé
- La boîte de simulation peut prendre plusieurs formes (cubique,).

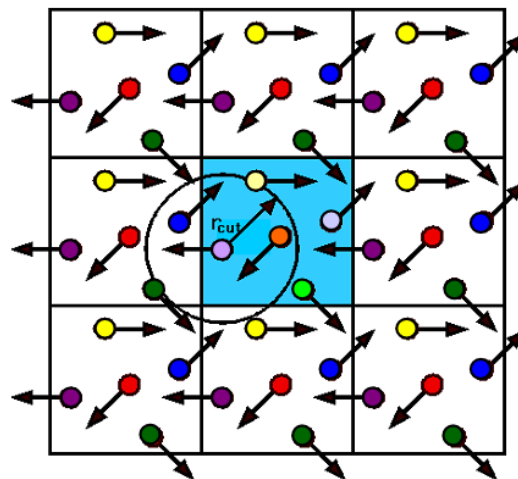


Figure 2.8 : Volume de contrôle associé aux conditions de triple périodicité [75]

2.7.3 - Conditions périodiques aux limites

Les conditions périodiques sont utilisées afin d'éviter les effets de bord tout en ayant un système contenant un nombre fini de particules. Les particules du système simulé sont introduits dans une boîte entourée de boîtes identiques, images l'une de l'autre par translation de la boîte initiale dans les trois directions de l'espace.

Ainsi les particules proches des bords de la boîte centrale sont entourées de particules de la même manière qu'une particule qui se trouve au centre de la boîte.

Lorsqu'une particule sort de la boîte centrale, et pénètre dans une boîte voisine, elle est aussitôt remplacée dans la boîte centrale par son image provenant de la boîte voisine opposée. Ce processus s'applique à l'ensemble des boîtes images (en 3D). Une situation analogue à une carte du monde : l'extrémité ouest de la carte correspond également à l'extrémité est.

Principe de mouvement de reconfiguration : les forces induites par l'ensemble des autres particules du système tendent à faire déplacer les particules vers des conformations de moindre énergie. Un algorithme de simulation de dynamique moléculaire, utilise les forces dérivées de l'énergie potentielle et les vitesses associées à l'énergie cinétique pour calculer une nouvelle position au temps suivant. Cette procédure est répétée de façon itérative un grand nombre de fois pour simuler des mouvements sur un temps le plus long possible.

La mise en œuvre d'une simulation comprend différentes étapes : après avoir construit le système et l'avoir immergé dans une boîte de simulation, l'ensemble du système est tout d'abord relaxé afin de minimiser les tensions, puis on commence la dynamique moléculaire.

2.7.4 - Pas d'intégration

La dynamique moléculaire est un processus itératif qui tente de reproduire le comportement naturel des particules. Le choix de la durée de cette itération est primordial. Un pas trop court mènerait à des simulations très longues. Cependant, le pas doit être assez court pour avoir une bonne résolution du mouvement le plus rapide dans tout le système. Généralement, il s'agit de la vibration interatomique qui dure une dizaine de femtosecondes ($\delta t \approx 10^{-15}$ s). Un pas d'intégration de 1 fs est donc adéquat.

2.8 - Potentiel interatomique : un ingrédient clef des simulations

L'ingrédient principal des simulations est la description des forces d'interactions entre les atomes ou, plus généralement, la connaissance de la dépendance de l'énergie totale du système avec la position des atomes. La justesse du modèle d'interaction entre les atomes influence bien évidemment la qualité du résultat et sa complexité détermine le temps de calcul nécessaire à l'obtention du résultat.

Deux approches peuvent être mises en œuvre pour le calcul des forces agissant sur les atomes:

- les méthodes dites *ab initio*, prenant en compte la structure électronique des particules et le caractère quantique des interactions mises en jeu. Elles sont très coûteuses en temps et leur introduction dans un code de simulation à l'échelle atomique n'est possible que pour des systèmes de petites tailles (quelques dizaines d'atomes).
- les méthodes dites classiques faisant intervenir des potentiels empiriques ou semi-empiriques. C'est la partie généralement la plus coûteuse en temps de calcul.

Le potentiel d'interaction interatomique est une fonction des positions des atomes qui représente l'énergie potentielle du système. Cette fonction est invariante vis-à-vis des translations et des rotations d'ensemble et elle est généralement construite à partir des positions relatives des atomes entre eux plutôt qu'à partir de leur position absolue. Les forces sur les atomes sont ensuite obtenues en calculant le gradient du potentiel.

La mise au point de tels potentiels se fait en deux étapes. D'abord, on choisit la forme analytique de la fonction (elle dépend souvent du type de liaisons mises en jeu), que l'on peut paramétrer. Puis, on ajuste la fonction suivant un certain nombre de propriétés physiques judicieusement choisies : énergie de cohésion, constantes d'élasticité, énergie de formation des lacunes, énergies de surface, énergie d'interface, spectre des phonons, relation pression-volume... , en fonction du domaine d'application.

Les premières simulations dans les métaux utilisèrent des modèles d'interaction de paires pour lesquels l'énergie d'un système de particules est obtenue comme la somme d'interactions entre paires de particules. Ces modèles sont faciles à mettre en œuvre et peu coûteux en temps de calcul ; mais ils ne donnent pas de bons résultats lorsque la densité

atomique n'est pas uniforme donc, par exemple, pour simuler des surfaces ou des interfaces. De plus, il est bien connu que dans les métaux, l'intensité de la liaison entre deux atomes dépend de la coordinence (du nombre de voisins). Cela n'est pas pris en compte dans la formulation des potentiels de paires qui ne peuvent également pas être utilisés pour simuler des liaisons à caractère angulaire comme celles mises en jeu dans les matériaux covalents. Pour pallier aux problèmes générés par les potentiels de paires, il faut prendre en compte la nature à N-corps des interactions entre les atomes. Vers le début des années 1980, un certain nombre de modèles de potentiels à N-corps (ou potentiels de fonctionnelle de paires) ont vu le jour.

➤ La méthode de l'atome entouré (enchâssé) (Embedded Atom Method EAM) mise au point par Baskes et Daw [76],

➤ Les approximations au second moment de la méthode des liaisons fortes avec les potentiels de Finnis et Sinclair [77], ceux de Ducastelle et Cyrot- Lackmann [78], ceux de Rosato, Guillopé et Legrand [79], ceux de Parrinello-Rahman [80,81]

➤ la théorie du milieu effectif (Effective Medium Theory) de Norskov et al. [82],

➤ le « glue model » de Ercolessi, Tosatti et Parinello [83]...

La différence entre ces méthodes, qui sont pour la plupart chacune fondées sur une interprétation physique de la mécanique quantique, tient essentiellement à la manière de choisir les fonctions paramétriques. Les paramètres de ces fonctions peuvent être soit déterminés par des calculs *ab initio*, soit traités de manière purement empirique.

Un des problèmes récurrents de ces potentiels est leur transférabilité, c'est-à-dire leur aptitude à modéliser correctement le matériau souhaité dans des conditions éloignées de celles utilisées lors de l'ajustement des paramètres. Par exemple, il n'est pas du tout certain (et c'est même rarement le cas) qu'un potentiel ajusté sur des propriétés d'équilibre du fer cubique centré, puisse être utilisé pour modéliser le fer cubique à faces centrées. De même, un potentiel ajusté sur les propriétés élastiques d'un matériau (ses constantes d'élasticité, par exemple) donnera-t-il des résultats satisfaisants dans des études mettant en jeu des problèmes de diffusion ou encore de glissement de dislocations ? Pour conclure, le modèle de cohésion constitue la clef de la simulation et il est nécessaire de bien le caractériser avant de commencer toute simulation.

2.9 - Exemples d'application de la dynamique moléculaire

Dans ce qui suit, deux exemples originaux d'application de la DM sont proposés. Le premier est une analyse détaillée des structures de joint de grain dans des nanocristaux de Cu et de Ni. Le deuxième est une étude du mécanisme atomique responsable de l'émission des dislocations partielles de joints de grains dans les métaux nanocristallins.

2.9.1 - Structure de joints

H. Van Swygenhoven et al [84] ont réalisés une simulation détaillée d'une déformation uniaxiale pour des nanocristaux (nc) Cu et Ni avec une taille de grain entre 5nm et 12nm, à des température entre 300-400k et une contrainte uniaxiale de 0.05 à 1.5 GPa, afin d'analyser les structures de joint de grain dans des nanocristaux tridimensionnels Cu et Ni.

Ils ont analysé le comportement de deux classes du joints : le comportement aléatoire de joints de grains de grande désorientation et le comportement texturé de joints de grains de faible désorientation, $<17^\circ$.

Ils ont prouvé que la structure intergranulaire dans les matériaux nanocristallins est en fait similaire à celle des polycristaux à gros grains.

Ils ont construit les nano-grains suivant la construction de Voronoi, avec des orientations arbitraires des grains. Après relaxation des nano-grains en utilisant la dynamique moléculaire, un équilibre métastable, de densité 96%-97% du cristal parfait, est atteinte. Pour décrire les interactions atomiques, dans une cellule de 10^6 atomes, ils ont utilisé les potentiels de second moment dans l'approximation de Parrinello-Rahman.

2.9.2 - Le joint source de dislocations

La plupart des études réalisées par MET sur les matériaux nc déformés et non déformés confirment l'idée qu'il n'y a pas de réseau de dislocations à l'intérieur des grains contrairement aux cas des polycristaux à gros grains. Les simulations ont montré que le comportement en déformation est gouverné par les dislocations, mais les dislocations ne sont pas générées par les sources classiques de Frank-Read situées à l'intérieur du grain, mais aux joints de grains, GB's, avec des dislocations qui voyagent à travers le grain pour finir dans le joint de grains opposé.

H. Van Swygenhoven et al. ont étudié le mécanisme atomique responsable de l'émission des dislocations partielles de joints de grains dans les métaux nanocristallins. Ils ont montré que dans des matériaux dont la taille des grains est de 12 et 20 nm, les joints de grain contenant des dislocations interfaciales peuvent émettre une dislocation partielle lors de la déformation. L'analyse temporelle des configurations atomiques pendant l'émission de la dislocation indique que la création et la propagation des dislocations partielles pourraient être des processus séparés dans le temps.

Chapitre 3

Elasticité anisotrope et force image

3 - Elasticité anisotrope et force image

« La théorie, c'est quand on sait tout et que rien ne fonctionne. La pratique, c'est quand tout fonctionne et que personne ne sait pourquoi. Si la pratique et la théorie sont réunies, rien ne fonctionne... et on ne sait pas pourquoi. »

(Albert Einstein)

3.1 - Théorie de l'élasticité linéaire anisotrope

3.1.1 - Dislocation dans le cristal infini [86]

Soit une dislocation parallèle à l'axe Ox_3 d'un repère orthonormé (Ox_1, Ox_2, Ox_3) dans un milieu continu élastiquement anisotrope.

Les contraintes σ sont liées aux déformations ε par :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} = \sigma_{ji} \quad (3.1)$$

Et les déformations aux déplacements par :

$$\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial U_k}{\partial x_l} + \frac{\partial U_l}{\partial x_k} \right] = \varepsilon_{lk} \quad (3.2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \end{array} \right. \quad \text{pour } i, j = 1, 2, 3 \quad (3.3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{i\alpha} = C_{i\alpha k\beta} \cdot \frac{\partial U_k}{\partial x_\beta} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} i, k = 1, 2, 3 \\ \alpha, \beta = 1, 2 \end{array} \quad (3.4)$$

En portant (3.4) dans (3.3) il vient:

$$C_{i\alpha k\beta} \cdot \frac{\partial^2 U_k}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} = 0 \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.5)$$

L'expression (3.5) est un système de trois équations aux dérivées partielles en U dont la solution est de la forme :

$$\begin{cases} U_k = A_k \cdot f(\eta) \\ \eta = x_1 + px_2 \end{cases} \quad (3.6)$$

Où p et A_k sont des constantes et $f(\eta)$ une fonction analytique.

En substituant dans (3.5), U par son expression dans (3.6) :

$$[C_{i1k1} + (C_{i1k2} + C_{i2k1})p + C_{i2k2}p^2] \cdot A_k \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial \eta^2} = 0 \quad (3.7)$$

et sous forme contractée après simplification :

$$a_{ik} \cdot A_k = 0 \quad (3.8)$$

Le système d'équations linéaires (3.8) n'a de solution non nulle que si le déterminant de la matrice $\{a_{ik}\}$ est nul :

$$|\{a_{ik}\}| = 0 \quad (3.9)$$

L'expression (3.9) est une équation du sixième degré en p . Pour chaque racine p_n , $n=1, 2, \dots, 6$, il existe un ensemble de constantes $A_k(n)$ satisfaisant l'équation (3.8).

Les racines p_n sont des paires de nombres complexes conjugués :

$$p_4 = p_1^*, \quad p_5 = p_2^*, \quad p_6 = p_3^*$$

De même que les constantes $A_k(n)$ et les variables η .

$$\begin{aligned} A_k(4) &= A_k(1)^* & \eta_4 &= \eta_1^* \\ A_k(5) &= A_k(2)^* & \eta_5 &= \eta_2^* \\ A_k(6) &= A_k(3)^* & \eta_6 &= \eta_3^* \end{aligned}$$

En choisissant $A_3(n) = 1$, il vient

$$A_1(n) = \begin{vmatrix} a_{12}(n) & a_{13}(n) \\ a_{22}(n) & a_{23}(n) \end{vmatrix} \div \begin{vmatrix} a_{11}(n) & a_{12}(n) \\ A_{21}(n) & A_{22}(n) \end{vmatrix}$$

$$A_2(n) = \begin{vmatrix} a_{11}(n) & a_{13}(n) \\ a_{21}(n) & a_{23}(n) \end{vmatrix} \div \begin{vmatrix} a_{11}(n) & a_{12}(n) \\ A_{21}(n) & A_{22}(n) \end{vmatrix}$$

$$A_3(n) = 1$$

Les déplacements U sont réels:

$$U_k = \text{Re} \sum_{n=1}^3 A_k(n) \cdot f_n(\eta_n) \quad (3.10)$$

La fonction analytique f est de la forme :

$$f_n(\eta_n) = -\frac{D(n)}{2\pi i} \ln(\eta_n) \quad (3.11)$$

Où D est le défaut de fermeture de la fonction f pour un circuit autour de la ligne de dislocation.

Avec

$$\Delta U_k = b_k \quad (3.12)$$

b_k est la composante du vecteur de Burgers de la dislocation. On obtient alors

$$\text{Re} \left[\sum_{n=1}^3 \pm A_k(n) D(n) \right] = b_k \quad (3.13)$$

Si la partie imaginaire de p est positive, on considère le signe (+) et inversement.

A l'équilibre la résultante des forces sur la dislocation doit être nulle, ce qui se traduit par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Re} \left[\sum_{n=1}^3 B_{i2k}(n) \cdot A_k(n) \cdot D(n) \right] = 0 \\ B_{ijk}(n) = C_{ijkl} + C_{ijk2} \cdot p_n \end{array} \right. \quad (3.14)$$

$$(3.15)$$

Les déplacements sont alors :

$$U_k = \text{Re} \left[-\frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^3 A_k(n) \cdot D(n) \cdot \ln \eta_n \right] \quad (3.16)$$

et les contraintes sont:

$$\sigma_{ij} = \text{Re} \left[-\frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^3 B_{ijk}(n) \cdot A_k(n) \cdot D(n) \cdot \eta_n^{-1} \right] \quad (3.17)$$

L'énergie de la ligne de dislocation est:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{W}{L} = \frac{kb^2}{4\pi} \cdot \ln \frac{R}{r_0} \end{array} \right. \quad (3.18)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} kb^2 = b_i \cdot \ln \sum_{n=1}^3 B_{i2k}(n) \cdot A_k(n) \cdot D(n) \end{array} \right. \quad (3.19)$$

Quand la ligne de dislocation n'est pas une direction de haute symétrie, il n'y a pas d'expression analytique simple du champ de contrainte élastique, il est alors nécessaire de reformuler les solutions en vue de leur traitement numérique. Le formalisme nécessaire a été développé par Stroh [87].

a - Formalisme de STROH

Soit un trièdre direct (m, n, t) et une ligne de dislocation parallèle à t, [figure 3.1](#).

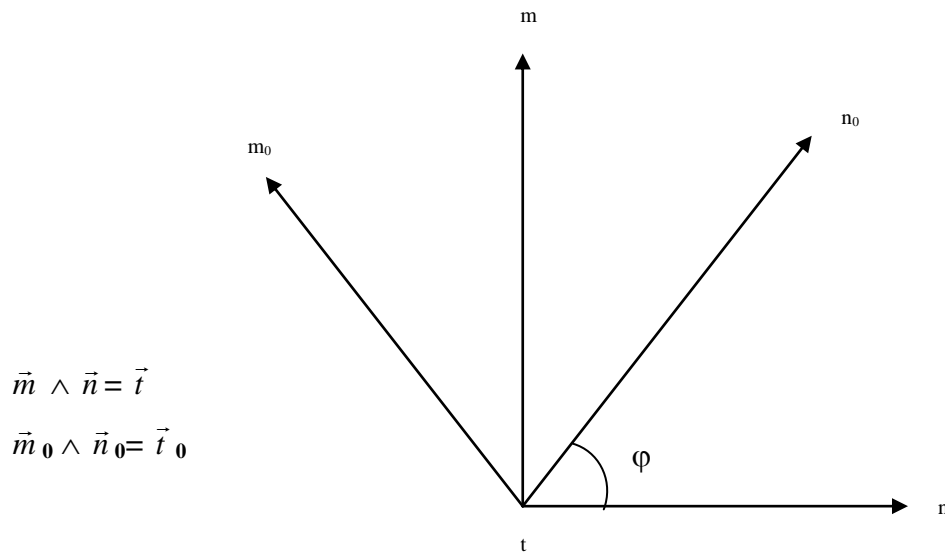


Figure 3.1 : Référentiels pour le formalisme intégral et le formalisme de STROH.

La ligne de dislocation est parallèle à t.

Les déplacements \vec{u} sont décrits par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{u} = \frac{D}{2\pi i} \vec{A} \ln \eta \\ \eta = \vec{m} \cdot \vec{x} + p \vec{n} \cdot \vec{x} \end{array} \right. \quad (3.20)$$

$$\eta = \vec{m} \cdot \vec{x} + p \vec{n} \cdot \vec{x} \quad (3.21)$$

Par substitution de \vec{u} dans l'équation (3.5) et en multipliant par η^2 on obtient :

$$\{(\text{mm}) + [(\text{mn}) + (\text{nm})] \cdot p + (\text{nn}) p^2\} \vec{A} = 0 \quad (3.22)$$

Où les termes du type (mm) sont des matrices 3x3.

Au vecteur \vec{A} , on associe un vecteur \vec{L} , tel que :

$$\vec{L} = -[(\text{nm}) + p(\text{nn})] \vec{A} \quad (3.23)$$

\vec{A} et \vec{L} sont combinés pour former un vecteur $\vec{\Gamma}=(A_1, A_2, A_3, L_1, L_2, L_3)$ à six dimensions. Alors l'équation (3.22) devient une équation aux valeurs propres en p :

$$N. \vec{\Gamma} = p. \vec{\Gamma} \quad (3.24)$$

Où N est une matrice 6x6 constituée de quatre blocs 3x3.

$$N = \begin{bmatrix} -(\text{nn})^{-1} \cdot (\text{nm}) & -(\text{nn})^{-1} \\ -[(\text{mn})(\text{nn})^{-1}(\text{nm}) - (\text{mm})] & -(\text{mn})(\text{nn})^{-1} \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

Les expressions des déplacements, contraintes et énergie sont alors :

$$\vec{U} = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\alpha=1}^6 \pm \vec{A}_{\alpha} [\vec{L}_{\alpha} \cdot \vec{b}] \ln \eta_{\alpha} \quad (3.26)$$

$$\sigma_{ij} = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\alpha=1}^6 \pm C_{ijkl} [m + p_{\alpha} n] \vec{A}_{\alpha k} [\vec{L}_{\alpha} \cdot \vec{b}] \frac{1}{\eta_{\alpha}} \quad (3.27)$$

$$\frac{W}{L} = -\frac{1}{4\pi i} \sum_{\alpha=1}^6 \pm C_{ijkl} [m + p_{\alpha} n] \vec{A}_{\alpha k} [\vec{L}_{\alpha} \cdot \vec{b}] \frac{1}{\eta_{\alpha}} \quad (3.28)$$

b - Formalisme intégral [87]

Ce formalisme a été développé pour résoudre l'équation (3.24).

On considère deux trièdres directs (m, n, t) et (m_0, n_0, t_0) tournés l'un par rapport à l'autre de l'angle φ . La ligne de dislocation est parallèle à t , [figure 3.1](#).

L'équation aux valeurs propres 3.24 devient :

$$N(\varphi). \vec{\Gamma}_{\alpha}(\varphi) = p_{\alpha}(\varphi). \vec{\Gamma}_{\alpha}(\varphi) \quad (3.29)$$

Et la valeur moyenne de l'opérateur $N(\varphi)$ est :

$$\langle N \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} N(\varphi) d\varphi = \begin{bmatrix} S & Q \\ B & S^T \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

et peut être écrite sous la forme :

$$\langle N \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} N(\varphi) d\varphi \quad (3.31)$$

avec

$$S = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (nn)^{-1} (nm) d\varphi \quad (3.32)$$

$$Q = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (nn)^{-1} . d\varphi \quad (3.33)$$

$$B = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} [(mn)(nn)^{-1} (nm) - (mm)] d\varphi \quad (3.34)$$

$$S^T = -\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (mn)(nn)^{-1} . d\varphi \quad (3.35)$$

Les matrices réelles S , Q , B , S^T , sont d'ordre trois et ne dépendent que de la direction de la ligne de dislocation

3.1.2 - Dislocation à l'interface [86]:

Soient deux milieux élastiques, semi-infinis (1) et (2) collés l'un à l'autre par une interface plane et une dislocation rectiligne dans le milieu (1) parallèle à l'interface est à une distance « l » de celle-ci, [figure 3.2](#).

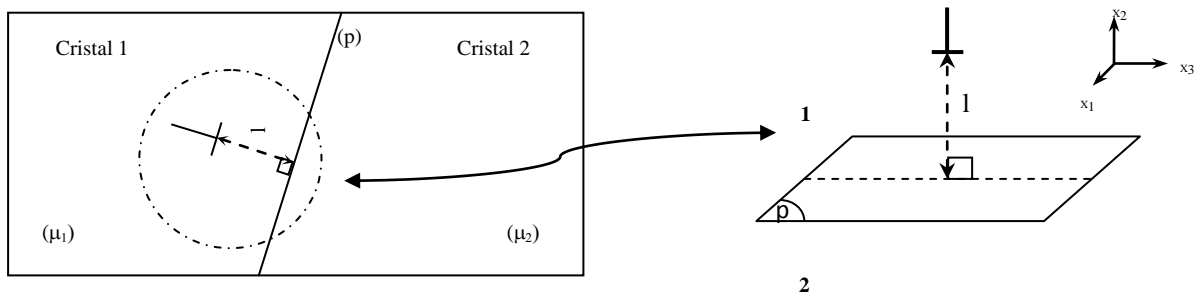


Figure 3.2 : Configuration géométrique utilisée pour le calcul de l'interaction entre une dislocation rectiligne et une interface qui lui est parallèle. L'interface sépare les milieux anisotropes (1) et (2).

Dans une telle configuration les contraintes s'étendent à l'infini et varient en fonction de l'inverse de la distance à la ligne de dislocation.

Considérons l'énergie élastique contenue dans un cylindre dont l'axe est la ligne de dislocation et le rayon R (R grand devant l) et soit r_0 le rayon de cœur de la dislocation, [figure 3.3](#).

Si l varie de δl , les déplacements sur le bord du cylindre de rayon R varient de δu tels que :

$$\delta u = \frac{1}{R} \delta l \quad (3.36)$$

L'énergie élastique E par unité de longueur, résultant du déplacement de la dislocation est proportionnel à :

$$\frac{1}{R^2} \delta l \cdot 2\pi R \quad (3.37)$$

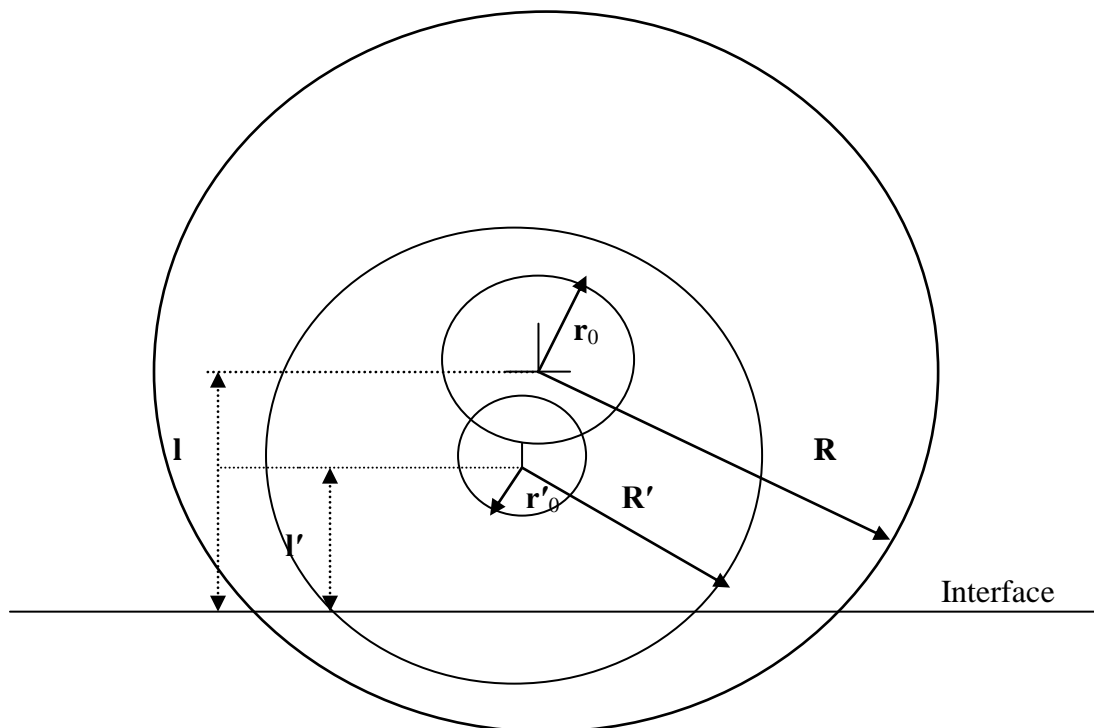


Figure 3.3 : Schéma définissant les paramètres intervenant dans le calcul de l'énergie d'une dislocation interfaciale

Elle est transmise à travers le cylindre de rayon R . cette énergie tend vers zéro quand R tend vers l'infini. Dans la limite où le rayon R du cylindre reste grand devant l , l'énergie hors du cylindre peut être considérée comme indépendante de l . La variation de l'énergie élastique avec l peut donc être calculée en ne considérant que l'énergie à l'interface d'un cylindre de rayon R avec R suffisamment grand.

Supposant que la dislocation se rapproche de l'interface à une distance l' telle que $l' < l$.

Si le rayon de cœur r_0 est changé en r'_0 tel que :

$$r'_0 = \left(\frac{l}{l}\right)r_0 \quad (3.38)$$

et celui du cylindre R est changé en R` tel que :

$$R` = \left(\frac{l}{l}\right)R_0 \quad (3.39)$$

Alors l'énergie dans la couronne cylindrique de rayons R` et r`₀ est inchangée par invariance d'échelle. En revanche, si r₀ et R sont gardés constants, l'énergie dans la couronne varie de:

$$\Delta W = E^{(1)} \cdot \ln\left(\frac{r_0}{r'_0}\right) - Q \quad (3.40)$$

Avec :

$E^{(1)}$: facteur prélogarithmique de l'énergie d'une dislocation dans le milieu (1) infini.

Q : énergie élastique dans le bicristal entre les deux cylindres de rayons R et R`.

Comme R est très grand devant l , les contraintes à la frontière entre les deux cylindres de rayons R et R' peuvent être considérées comme dues à une dislocation située à l'interface entre les deux milieux (1) et (2).

Dans ces conditions, la quantité Q devient l'énergie d'une dislocation interfaciale :

$$Q = E^{(1/2)} \cdot \ln(R/R') \quad (3.41)$$

Où $E^{(1/2)}$ est le facteur prélogarithmique de l'énergie pour une dislocation interfaciale.

Le facteur $E^{(1/2)}$ peut être déterminé à partir de la théorie de l'élasticité anisotrope en considérant les conditions suivantes :

- Continuité des déplacements à l'interface.
- Continuité des contraintes à l'interface.
- Résultante des forces nulle sur la dislocation.

Selon le formalisme de STROH, son expression est :

$$E^{(1/2)} = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\alpha=1}^6 D_{\alpha}^{(1)} \cdot L_{\alpha}^{(1)} \cdot b \quad (3.42)$$

b : vecteur de Burgers de la dislocation.

Par le formalisme intégral, on obtient :

$$E^{(1/2)} = \frac{1}{4\pi} \cdot b \cdot B^{(1/2)} \cdot b \quad (3.43)$$

Avec

$$[B^{(1/2)}]^{-1} = \frac{1}{2}(B_{(1)}^{-1} + B_{(2)}^{-1}) + \frac{1}{2}(B_{(1)}^{-1} \cdot S_{(1)}^T + S_{(2)} \cdot B_{(2)}^{-1}) B_{(2)} \cdot (B_{(1)} + B_{(2)})^{-1} \cdot B_{(1)} \cdot (B_{(1)}^{-1} \cdot S_{(1)}^T + B_{(2)}^{-1}) \quad (3.44)$$

Ou B , S , S^T sont les matrices précédemment définies et relatives aux milieux (1) et (2) respectivement.

Ce calcul de l'énergie d'une dislocation interfaciale permet d'approcher les effets de cette dislocation sur une dislocation de la matrice, et en particulier de résoudre le problème du calcul de la force image.

3.2 - Concept de calcul de la force image

Une dislocation voisine d'une surface libre dans un solide est attirée par celle-ci sous l'effet d'une force image due à une dislocation image. La force image est la force d'interaction entre les deux dislocations, réelle et image, situées dans le même cristal infini.

De même, une dislocation proche d'une interface dans un milieu anisotrope est soumise à une force, attractive ou répulsive selon les constantes élastiques des deux demi-milieux de part et d'autre de l'interface et selon la géométrie des défauts.

La dislocation dans le cristal est considérée comme interagissant avec une distribution continue de dislocations infinitésimales dans l'interface. Pour les joints de grains, la force image provient de la différence des constantes élastiques due à la désorientation entre les deux cristaux et n'intervient que lorsque le matériau est élastiquement anisotrope. Alors que pour les joints interphase, elle provient de la différence de nature des cristaux que les matériaux soient anisotropes ou non.

Théoriquement, le problème de la force image s'exerçant sur une dislocation a été résolu quelle que soit l'orientation de la dislocation par rapport au plan du joint de grains [2,88], mais c'est seulement dans le cas d'une dislocation parallèle au plan du joint, [figure 3.2](#), que des solutions numériques ont été obtenues. Elles reposent sur le théorème de Barnett et Lothe [2].

Sur la base de l'élasticité anisotrope, le calcul de la force image a été effectué pour différents matériaux et interfaces.

Head [1] aborde le problème en considérant trois types d'interfaces :

- La surface libre.
- L'interface rigide, modèle d'un joint de grains à basse température.
- L'interface glissante, modèle d'un joint de grains à haute température.

Son approche ne fait pas référence au terme interfacial $E^{(1/2)}$ mais prend seulement en compte les énergies $E^{(1)}$ d'une dislocation dans le cristal (1) et $E^{(2)}$ de son image dans le cristal (2) dont le vecteur de Burgers est tel que:

$$\frac{b_{image}}{b} = \frac{E^{(2)} - E^{(1)}}{E^{(2)} + E^{(1)}} \quad (3.45)$$

Selon les valeurs relatives de $E^{(1)}$ et $E^{(2)}$, la dislocation est attirée ou repoussée par le joint de grains.

Appliquée à l'étude des dislocations vis dans les matériaux cubiques, cette approche donne les résultats suivants:

- **Dans le fer (c.c)**, la dislocation vis $\frac{a}{2} \langle 111 \rangle$ est repoussées quelle que soit l'orientation relative des deux cristaux. La répulsion est maximale pour la condition $[111]_1 // [100]_2$.
- **Dans le cuivre (c.f.c)**, la dislocation vis $\frac{a}{2} \langle 110 \rangle$ subit une force image dont le signe varie avec l'orientation relative des cristaux ; la répulsion est maximale pour $[110]_1 // [100]_2$ et l'attraction l'est pour $[110]_1 // [111]_2$.

Les conclusions de cette approche qualitative sont réexaminées par Chou [89] qui calcule la force image dans le cas particulier où les grains adjacents ont un plan de symétrie perpendiculaire à la ligne de dislocation. Ses résultats mettent en valeur l'insuffisance de l'approche de Head.

Les calculs sont étendus à des solutions moins particulières d'une part par Tucker [90] et d'autre par Gemperlova et Saxl [91].

Gemperlova [92] étudie de manière plus détaillée la force image pour différentes configurations "joint de grains - dislocation" dans les matériaux de structure cubique centrée. Ses résultats confirment ceux de Head en ce qui concerne la dislocation vis et précisent la relation liant la force image aux paramètres cristallographiques :

- La force image est nulle, quelle que soit la désorientation quand la ligne de dislocation et celle qui lui est parallèle dans le deuxième grain sont toutes deux soit $\langle 100 \rangle$ soit $\langle 111 \rangle$
- Les dislocations coin ou mixte sont attirées selon la désorientation alors que, indépendamment de la désorientation, les dislocations vis sont, soit

toujours attirées soit toujours repoussées selon que le coefficient d'anisotropie A est inférieur ou supérieur à l'unité.

Le calcul de la force image a été ensuite résolu en considérant l'énergie $E^{(1)}$ de la dislocation dans le cristal (1) infini et l'énergie $E^{(1/2)}$ de la même dislocation à l'interface.

Son expression pour la configuration de la [figure 1.3](#) a été obtenue par Barnett et Lothe [2] :

$$F_i = - \frac{E^{(1/2)} - E^{(1)}}{l} \quad (3.46)$$

Pour un vecteur de Burgers et un bicristal donnés, le terme $E^{(1/2)}$ ne dépend que de l'orientation de la ligne de dislocation, il en découle que la force image est identique pour toutes les interfaces ayant la ligne de dislocation pour axe de zone, son signe dépend des valeurs relatives de $E^{(1)}$ et de $E^{(1/2)}$

- $E^{(1)} < E^{(1/2)} \Rightarrow$ la force image, f_i , repousse la dislocation loin de l'interface.
- $E^{(1)} > E^{(1/2)} \Rightarrow$ la force image, f_i , attire la dislocation vers l'interface.
- $E^{(1)} = E^{(1/2)} \Rightarrow$ la force image, f_i , est nulle, la dislocation est en position d'équilibre.

Pour obtenir un ordre de grandeur de l'énergie d'interaction élastique ΔE mise en jeu, on peut considérer le module de cisaillement en élasticité isotrope μ et rappeler que le terme prélogarithmique de l'énergie pour une dislocation vis est :

$$E^{(1)} = \mu b^2 / 4\pi \quad (3.47)$$

La différence entre $E^{(1)}$ et $E^{(1/2)}$ est fonction de l'anisotropie du matériau, mais si on prend $E^{(1/2)} = 0,9.E^{(1)}$, on trouve que la valeur de la force est comparable à celle associée à la contrainte d'écoulement, à toute température, d'un matériaux de structure cubique à faces centrées. Le facteur $E^{(1/2)}$ peut avoir une valeur plus grande ou plus petite que celles de $E^{(1)}$ et $E^{(2)}$ ou une valeur intermédiaire entre celles-ci. Mais, dans l'interprétation de ces valeurs relatives, on ne doit pas oublier que la force image permet seulement à une dislocation de s'approcher ou de s'éloigner du joint et se garder de toute conclusion sur la possibilité pour la dislocation de traverser le joint.

3.3 - Force image dans les matériaux de structure cubique

Une étude exhaustive de plusieurs configurations géométriques, impliquant des dislocations dont les vecteurs de Burgers et les orientations des lignes de dislocations

diffèrent et pour différentes désorientations (axes et angles) des joints de grains, a été menée pour les matériaux de structure cubique [93-95].

Les principaux résultats sont les suivants :

- La force image est nulle lorsque la ligne de dislocation \mathbf{t} est parallèle à un axe de rotation \mathbf{R} de haute symétrie : quaternaire $\langle 100 \rangle$ et ternaire $\langle 111 \rangle$. Ceci est vrai quel que soit le vecteur de Burgers de la dislocation, mais n'est plus vérifié lorsque \mathbf{t} est parallèle à un axe binaire $\langle 110 \rangle$.

- Dans le système CFC, $F_i = 0$ pour une dislocation vis lorsque \mathbf{b} et \mathbf{t} sont parallèles à un axe de rotation $\langle 110 \rangle$.

- Les joints de grains coïncidents n'ont pas un comportement singulier du point de vue de la force image qui varie continûment avec l'angle de désorientation autour d'un axe donné et pour une dislocation donnée.

Chaque courbe d'évolution de l'énergie d'interaction ΔE avec l'angle de désorientation θ présente une symétrie en accord avec l'axe de désorientation correspondant : quaternaire pour $\langle 100 \rangle$, ternaire pour $\langle 111 \rangle$ et binaire pour $\langle 110 \rangle$, ce qui réduit le champ d'investigation angulaire à $\theta \leq 45^\circ$, $\theta \leq 60^\circ$ et $\theta \leq 90^\circ$, respectivement.

- Le rôle de la bicristallographie apparaît pour les joints symétriques de flexion des matériaux CFC : la force image est nulle pour toutes les dislocations parallèles au plan de macle [100].

- Pour un joint de grains donné (θ , $[uvw]$) et une dislocation de vecteur de Burgers \mathbf{b} fixe, les évolutions de ΔE avec l'angle entre \mathbf{b} et \mathbf{t} sont similaires pour différents métaux de même structure, CFC ou CC. Les valeurs maximales et minimales de ΔE correspondent toujours au même caractère de la dislocation.

- Pour les métaux de structure cubique, l'intensité de la force image pour une configuration donnée « dislocation/joint de grains » croît avec le facteur d'anisotropie $H = 2C_{44} - (C_{11} - C_{12})$ et non avec le rapport d'anisotropie $A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12})$. Cette force est répulsive pour la plupart des configurations lorsque H est positif (métaux CFC et nombreux métaux CC), et attractive lorsque H est négatif (certains métaux CC comme le chrome, le molybdène. . .).

- Lorsque $H > 0$ (cas le plus souvent rencontré), il est important de signaler que les dislocations vis sont repoussées de presque tous les joints de grains.

Dans la mesure où les autres forces agissant sur ces dislocations ne peuvent vaincre cette répulsion, les dislocations vis sont confinées à l'intérieur de chaque cristal. La force image apparaît alors comme un obstacle à la déformation d'un polycristal.

Enfin, dans la plupart des cas, l'intensité de la force image est du même ordre de grandeur que celles des autres forces agissant sur la dislocation et doit nécessairement être prise en compte

dans l'analyse de l'interaction d'une dislocation avec un joint de grains d'un matériau anisotrope (argent cuivre, nickel, chrome, fer, silicium. . .).

De manière plus ponctuelle, des calculs de force image ont montré que celle-ci aidait ou freinait le déplacement d'une dislocation vers un joint [96, 101].

À titre d'exemple [102], dans un alliage Fe-4 % Si, les valeurs de la force image pour des dislocations parfaites situées à 10 nm de joints de grains $\Sigma 3$, $\Sigma 9$ et $\Sigma 15$ varient entre -4 et 100 10^{-4} Nm^{-1} , en accord avec les estimations et sont du même ordre de grandeur que les forces entre dislocations. Ces effets ont certainement une importance accrue pour les interfaces interphases et, plus particulièrement, dans les cas de couches minces et de multicouches.

Le cas d'une ligne de dislocation non parallèle à l'interface a été résolu par Lothe [103] et celui d'une dislocation parallèle perçant l'interface par Belov [88].

3.4 - Calcul de la force de Peierls-Nabarro

Les dislocations se mettent à glisser dans leurs plans de glissement lorsque la contrainte appliquée est supérieure ou égale à la friction qu'exerce le réseau cristallin contre le glissement des dislocations. Cette friction qu'exerce le réseau cristallin est représentée par la contrainte de Peierls Nabarro, σ_{PN} , la contrainte nécessaire pour déplacer une dislocation, vaincre tous les frottements du réseau et franchir tous les barrières énergétiques.

Cette contrainte, σ_{PN} , est très sensible à la structure du cœur de la dislocation, w , et à la structure cristalline. Plus le cœur de la dislocation est large plus la contrainte σ_{PN} est faible et vice versa. Les matériaux CFC ont une faible friction de réseau alors que les matériaux CC ont une forte friction de réseau (dans les CFC le cœur de la dislocation est très étendu).

La force de Peierls-Nabarro [104], ou force de friction du réseau, exercée sur une dislocation de vecteur de Burgers b et de largeur de cœur w est donnée par:

$$F_{PN} = \sigma_{PN} \cdot b \quad (3.48)$$

σ_{PN} la contrainte de Peierls-Nabarro maximale est donnée par:

$$\sigma_{PN} = \frac{2\mu}{K} \exp\left(-\frac{2\pi w}{b}\right) \quad (3.49)$$

avec

$$K = \frac{1-\nu}{1-\nu \cos^2(\theta)} \quad (3.50)$$

$$w = \frac{d}{(1-\nu)} \quad (3.51)$$

Le facteur K rend compte de l'influence du caractère de la dislocation, θ l'angle entre le vecteur de Burgers et la ligne de dislocation ($K=1$ pour une dislocation vis et $K=1-\nu$ pour une dislocation coin), μ est le module de cisaillement, et ν coefficient de Poisson, d est la distance inter-réticulaire des plans de glissement.

Pour une structure CFC :

$$d = d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (3.52)$$

$\{hkl\}$ sont les plans compacts $\{111\}$, les plans de glissement CFC ($d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}}$).

Chapitre 4

Matériaux, configurations et technique d'étude

4 - Matériaux, configurations et technique d'étude:

Dans ce qui suit nous étudions l'influence des paramètres élastiques et cristallographiques des matériaux élastiquement anisotropes sur le mouvement des dislocations sous l'effet de la force image. Ces dislocations sont proches et parallèles d'un joint interphase entre deux cristaux semi infinis différents de même structure cubique à faces centrées. Nous présentons dans ce chapitre les matériaux, les configurations retenues dans cette étude et la méthode de calcul utilisée.

4.1 - Matériaux

Nous considérons des bicristaux formés par les couples de deux matériaux de structure CFC parmi : Pb, Al, Au, Ag, Cu et Ni. Ces matériaux sont caractérisés par leurs paramètres structuraux, et par leurs paramètres élastiques, [tableau 4.1](#).

Métal	a (Å)	C ₁₁ (10 ¹⁰ Pa)	C ₁₂ (10 ¹⁰ Pa)	C ₄₄ (10 ¹⁰ Pa)	H (10 ¹⁰ Pa)	A	μ (10 ¹⁰ Pa)
Pb	4.95	4.66	3.92	1.44	2.14	3.90	1.01
Al	4.05	10.82	6.13	2.85	1.01	1.21	2.65
Au	4.08	18.60	15.70	4.20	5.50	2.90	3.10
Ag	4.09	12.40	9.34	4.61	6.16	3.01	3.38
Cu	3.61	16.84	12.14	7.54	10.38	3.21	5.46
Ni	3.52	24.65	14.73	12.47	15.02	2.52	9.47

Tableau 4.1 : - Paramètre structural **a** en Å [105].

- Paramètres élastiques [87] :

- Constantes élastiques **C_{ij}** : C₁₁, C₁₂, C₄₄.
- Facteur d'anisotropie: $\mathbf{H} = 2 C_{44} + C_{12} - C_{11}$.
- Rapport d'anisotropie: $\mathbf{A} = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}}$.
- Module de cisaillement: $\mu = C_{44} - \frac{1}{5} \mathbf{H}$.

Le [tableau 4.1](#) montre que la différence entre les paramètres structuraux, a , est très faible, elle est presque négligeable pour les matériaux Al, Au et Ag. Le facteur d'anisotropie est positif pour tous les matériaux étudiés, l'aluminium à la plus faible valeur, $2,14 \cdot 10^{10}$ Pa, et le nickel à la plus grande valeur, $15,02 \cdot 10^{10}$ Pa.

Les rapports d'anisotropie des matériaux étudiés sont très proches ainsi que les valeurs de modules de cisaillement sont positives varient de $1,01 \cdot 10^{10}$ Pa pour le plomb, le matériau le plus mou, au $9,47 \cdot 10^{10}$ Pa pour le nickel, le matériau le plus dur.

4.2 - Configurations dislocations - interfaces

4.2.1 - Dislocation

Nous considérons un ensemble de lignes de dislocations $\mathbf{t} \langle \mathbf{uvw} \rangle$ avec des directions qui couvrent toute la demi sphère supérieure avec :

$$-10 \leq \mathbf{u} \leq 10, \quad -10 \leq \mathbf{v} \leq 10, \quad -10 \leq \mathbf{w} \leq 10$$

Le vecteur de Burgers des dislocations est $\vec{b} = \frac{a}{2} [110]$.

4.2.2 - Joints interphases

Avec les différentes paires de matériaux nous formons les familles des bicristaux Pb-X, Al-X, Au-X, Ag-X, Cu-X, et Ni-X, avec X= Pb, Al, Au, Ag, Cu, Ni.

Les joints interphases entre les deux cristaux semi infini, sont caractérisés par la désorientation (R, θ) , $R = [110]$ est l'axe de rotation, θ est l'angle de rotation entre les deux cristaux autour de l'axe R, elle est comprise dans l'intervalle $[0^\circ, 90^\circ]$ variant par pas de 10° .

Les caractéristiques élastiques des bicristaux, $\Delta H = H_2 - H_1$ l'écart en facteurs d'anisotropie, $\Delta A = A_2 - A_1$ l'écart en rapports d'anisotropie et $\Delta \mu = \mu_2 - \mu_1$ l'écart en modules de cisaillement sont calculées au [tableau 4.2](#) et représentées en [figure 4.1](#).

	Ecart des facteurs d'anisotropie	Ecart des rapports d'anisotropie	Ecart des modules de cisaillement	Dureté relative
Bicristal	$\Delta H (H_2-H_1)$ (10^{10} Pa)	$\Delta A (A_2-A_1)$	$\Delta \mu (\mu_2-\mu_1)$ (10^{10} Pa)	μ_1/μ_2
Pb-Al	-1.13	-2.69	1.64	0.38
Pb-Au	3.36	-1.0	2.09	0.33
Pb-Ag	4.02	-0.89	2.37	0.30
Pb-Cu	8.24	-0.69	4.45	0.18
Pb-Ni	12.88	-1.38	8.46	0.11
Al-Pb	1.13	2.69	-1.64	2.62
Al-Au	4.49	1.69	0.45	0.85
Al-Ag	5.15	1.80	0.73	0.78
Al-Cu	9.37	2.0	2.81	0.48
Al-Ni	14.01	1.31	6.82	0.28
Au-Pb	-3.36	1	-2.09	3.07
Au-Al	-4.49	-1.69	-0.45	1.17
Au-Ag	0.66	0.11	0.28	0.92
Au-Cu	4.88	0.31	2.36	0.58
Au-Ni	9.52	-0.38	6.37	0.33
Ag-Pb	-4.02	0.89	-2.37	3.35
Ag-Al	-5.15	-1.8	-0.73	1.27
Ag-Au	-0.66	-0.11	-0.28	1.09
Ag-Cu	4.22	0.2	2.08	0.62
Ag-Ni	8.86	-0.49	6.09	0.36
Cu-Pb	-8.24	0.69	-4.45	5.41
Cu-Al	-9.37	-2.0	-2.81	2.06
Cu-Au	-4.88	-0.31	-2.36	1.76
Cu-Ag	-4.22	-0.2	-2.08	1.62
Cu-Ni	4.64	-0.69	4.01	0.58
Ni-Pb	-12.88	1.38	-8.46	3.35
Ni-Al	-14.01	-1.31	-6.82	1.27
Ni-Au	-9.52	0.38	-6.37	1.09
Ni-Ag	-8.86	0.49	-6.09	0.62
Ni-Cu	-4.64	0.69	-4.01	0.36

Tableau 4.2 : Caractéristiques élastiques des bicristaux étudiés.

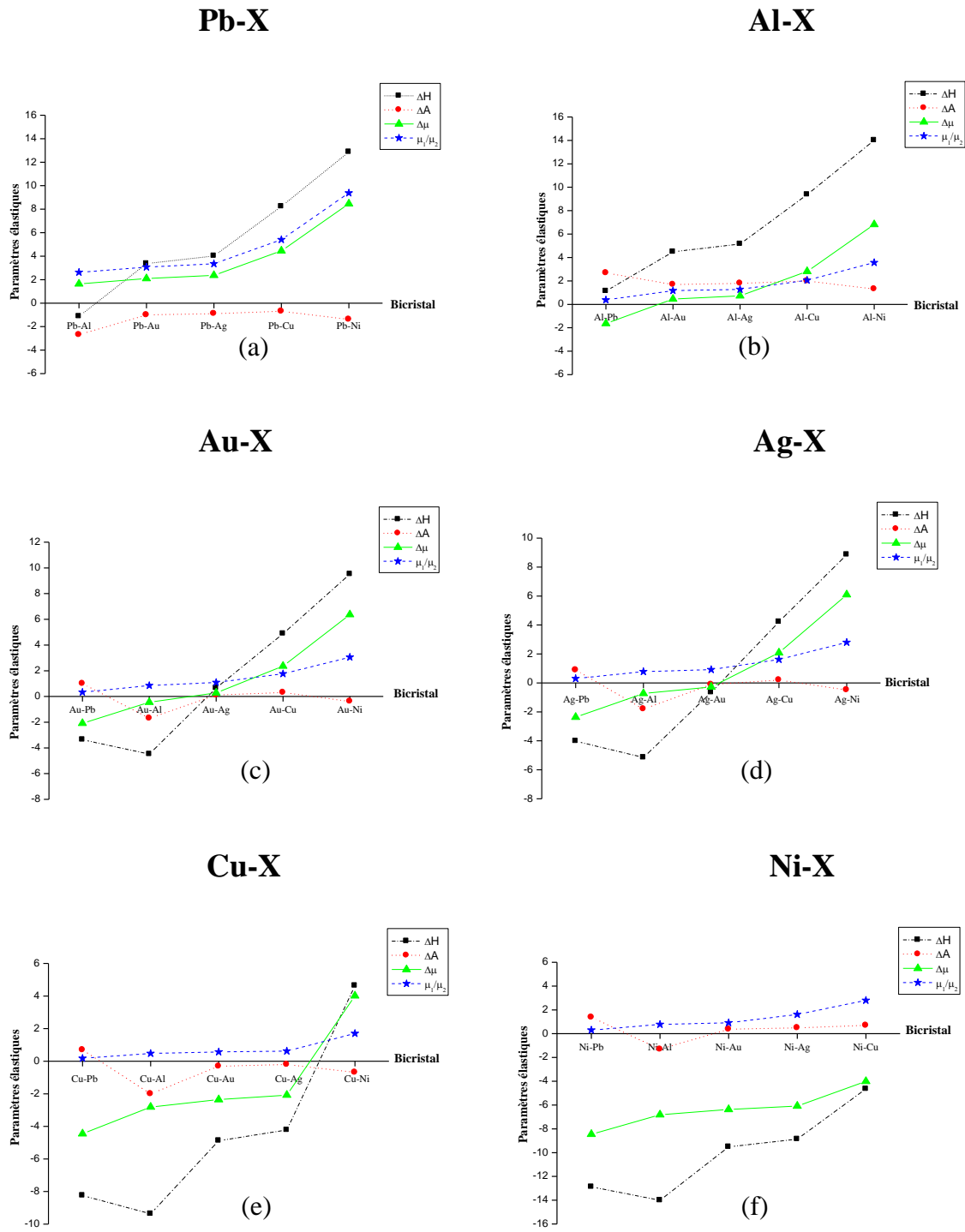


Figure 4.1 : Distribution des paramètres élastiques des bicristaux étudiés,

(a) Pb-X, (b) Al-X, (c) Au-X, (d) Ag-X, (e) Cu-X et (f) Ni-X.

- Ecart en facteur d'anisotropie ΔH
- Ecart en rapport d'anisotropie ΔA
- Ecart en module de cisaillement $\Delta\mu$
- Dureté relative μ_1/μ_2

La figure 4.1, montre que l'écart entre modules de cisaillement, $\Delta\mu$ ($\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$), pour chaque paire peut être positif ou négatif ou bien fort ou faible. Cela nous permet de proposer les groupes suivants :

- Le premier groupe est celui des bicristaux qui ont une valeur de $\Delta\mu$ négative et inférieure à (-1).
- Le deuxième groupe est composé des bicristaux qui ont une valeur de $\Delta\mu$ comprise dans l'intervalle $] -1, 1[$, ces bicristaux sont les combinaisons entre les matériaux Al, Au et Ag.
- Le troisième groupe est celui des bicristaux qui ont une valeur de $\Delta\mu$ positive et supérieure à (+1).

L'écart en facteur d'anisotropie ΔH ($\Delta H = H_2 - H_1$), peut être positif ou négatif, plus ou moins intense selon le bicristal. Pour Au-Ag (Ag-Au) l'écart en facteur d'anisotropie prend une valeur très faible.

Les valeurs de la dureté relative μ_1/μ_2 sont positives pour tous les bicristaux.

4.3 - Méthode de calcul

4.3.1 - Principe

Sur la base de la théorie de l'élasticité linéaire anisotrope et du théorème de Barnett et Lothe [2], la force image \mathbf{F}_i exercée sur une dislocation, dont la ligne \mathbf{t} est parallèle au joint est calculée dans le cadre du formalisme intégral :

$$\mathbf{F}_i = -\frac{E^{(1/2)} - E^{(1)}}{d} = \frac{E^{(1)} - E^{(1/2)}}{d} = \frac{\Delta E}{d} \quad (4.1)$$

Où d est la distance entre la ligne de dislocation et le plan du joint interphase, ΔE est l'énergie d'interaction élastique entre la dislocation et l'interface. ΔE est calculée comme la différence entre $E^{(1)}$, le facteur pré-logarithmique de l'énergie élastique d'une dislocation qui se trouve dans le cristal (1) infini et $E^{(1/2)}$, le facteur pré-logarithmique de la même dislocation située à l'interface interphase. Pour un vecteur de Burgers donné \mathbf{b} et une désorientation (\mathbf{R} , θ) entre les deux cristaux, le terme $E^{(1/2)}$ ne dépend que de l'orientation de la ligne de la dislocation [3].

La force image \mathbf{F}_i , par son intensité et son signe, permet de prédire le comportement de la dislocation. Elle est mise en mouvement ou non selon son intensité par rapport à la force de

freinage du réseau. Elle est attirée ou repoussée selon son signe. Si la force image est négative les dislocations sont attirées vers l'interface, si cette force est positive les dislocations sont repoussées loin de l'interface.

$E^{(1/2)}$ et $E^{(1)}$ n'ont pas des expressions analytiques simples, donc le calcul de ΔE nécessite la mise au point des programmes.

- **Dislopha.for** : Construction d'un fichier de 4850 directions de lignes de dislocations
- **Phase4.for** : calcul de l'énergie d'interaction ΔE entre la dislocation et le joint interphase pour chaque ligne de dislocation et pour chaque configuration, on utilisant les données représenté dans le [tableau 4.1](#).

4.3.2 - Représentation des résultats

L'énergie d'interaction élastique ΔE , entre une dislocation parfaite de matrice et un joint interphase, est calculée pour toutes les directions de la demi-sphère supérieure de l'espace pour chaque configuration géométrique bicristal-désorientation pour les matériaux de structure CFC en utilisant la méthode d'intégrale. Les directions des dislocations sont alors représentées sur une projection stéréographique de centre [001] avec un codage pour les intensités de la force image.

Cette représentation nécessite l'utilisation du code de calcul :

- **Pscub.for** : calcul des coordonnées cartésiennes de chaque pole de direction et construction de la projection stéréographique pour un matériau de structure CFC.

La variation de ΔE est découpée en intervalles à l'aide du code de calcul **Tri.for**. On attribue à chaque pole de ligne de dislocation un symbole et une couleur représentatifs de sa valeur d'énergie d'interaction ΔE , on définit sur la projection stéréographique des domaines dans les quels ΔE reste confiné dans un intervalle. Les lignes d'isoénergie, ΔE constante, sont les frontières entre les intervalles adjacents. L'ensemble de ces lignes pour une configuration donnée forme une carte d'isoénergie.

Chapitre 5

Résultats et discussion

5 - Résultats et discussion

En absence des contraintes extérieures, deux types de contraintes internes agissent sur une dislocation située dans un cristal à proximité d'une interface. Une contrainte élastique à longue distance résultant de l'interaction avec l'interface, dite *force image* et une contrainte à courte distance, contrainte de friction de la dislocation avec le réseau cristallin, dite *force de Peierls-Nabarro*.

La mise en mouvement d'une dislocation en interaction élastique avec un joint interphase sous l'effet de la force image, dépend de l'intensité de l'interaction élastique entre les deux défauts et de la distance à laquelle se trouve la dislocation. La mise en mouvement est effective si l'intensité de la force image est supérieure à l'intensité de la force de Peierls-Nabarro. Une distance limite d'efficacité est déterminée quand l'intensité de la force image et l'intensité de la force de Peierls-Nabarro deviennent égales

Nous étudions la mobilité d'une dislocation parfaite de vecteur de Burgers $\vec{b} = a/2[110]$, en interaction élastique avec un joint interphase dans des bicristaux (1)-(2), de structure cubique à faces centrés. Les bicristaux considérés sont constitués de deux matériaux de même structure CFC, et de nature différentes, Pb, Al, Au, Ag, Cu et Ni. Les bicristaux sont regroupés en familles, chaque famille a un même cristal de base, Pb-X, Al-X, Au-X, Ag-X Cu-X et Ni-X. Les dislocations considérées sont parallèles au plan du joint interphase, chaque dislocation est caractérisée par sa direction t , et son vecteur de Burgers b . La dislocation est située dans le cristal 1 à une distance d du joint interphase. Le joint interphase considéré est caractérisé par un axe de rotation $R=[110]$, et une désorientation θ , entre les deux cristaux, comprise dans l'intervalle $[0^\circ, 90^\circ]$.

5.1 - Bicristaux à base de Plomb : Pb-X

Les bicristaux considérés sont constitués de deux matériaux, le cristal 1 est le plomb, et le cristal 2 est un matériau parmi, Al, Au, Ag, Cu et Ni. Les dislocations étudiées sont situées dans le cristal 1, Pb, à une distance d du joint interphase ($R=[110]$, $\theta \in [0^\circ, 90^\circ]$).

5.1.1- Energies d'interaction extrêmes

Les énergies d'interaction élastique, ΔE , entre les dislocations de matrice ayant un vecteur de Burgers $\vec{b} = a/2[110]$ et les joints interphase, sont calculées pour les désorientations comprises

dans l'intervalle $[0^\circ, 90^\circ]$, et variant par pas de 10° . Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction, maximale ΔE_{\max} et minimale ΔE_{\min} , et les lignes des dislocations correspondantes, sont présentées dans les tableaux A.1.1-5, et les figures A.1.1-5 en annexe 1.

- **Bicristal Pb-Al**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = 87$ pJ/m, est constante pour toutes les désorientations. Elle est obtenue pour la dislocation coin $[1-10]$ quand la désorientation est comprise dans l'intervalle $[0^\circ-20^\circ]$, et pour la dislocation coin $[1-12]$ quand la désorientation est comprise dans l'intervalle $[30^\circ-90^\circ]$, tableau A.1.1.

L'énergie d'interaction minimale, $\Delta E_{\min} = 50$ pJ/m, est constante pour toutes les désorientations, elle est obtenue pour la dislocation vis $[110]$.

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, donc la force image est répulsive sur toutes les dislocations. Les dislocations coins $[1-10]$ et $[1-12]$, subissent la plus forte répulsion et la dislocation vis $[110]$ subit la plus faible répulsion.

- **Bicristal Pb-Au**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = 108$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation coin $[1-10]$ et la désorientation 0° . La minimale, $\Delta E_{\min} = 49$ pJ/m, est constante pour toutes les désorientations.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour les dislocations coins :

- $[1-10]$ dans l'intervalle des désorientations $[0^\circ-20^\circ]$
- $[2-21]$ pour une désorientation 30° .
- $[1-12]$ dans l'intervalle des désorientations $[40^\circ-90^\circ]$

Les énergies d'interaction minimales pour chaque désorientation sont obtenues pour une dislocation vis $[110]$, tableau A.1.2.

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, donc la force est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin $[1-10]$ subit la plus forte répulsion et la dislocation vis $[110]$ subit la plus faible répulsion.

- **Bicristal Pb-Ag**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = 107$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation coin $[1-10]$ et une désorientation 0° . La minimale, $\Delta E_{\min} = 51$ pJ/m, est constante pour toutes les désorientations.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour des dislocations coins :

- [1-10] dans l'intervalle des désorientations [0°-10°]
- [2-21] pour une désorientation 20°.
- [1-12] dans l'intervalle des désorientations [30°-90°]

Les énergies d'interaction minimales pour chaque désorientation sont obtenues pour une dislocation vis [110], tableau A.1.3.

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, donc la force est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte répulsion et la dislocation vis [110] subit la plus faible répulsion.

- **Bicristal Pb-Cu**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = 137$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation coin [1-10] et une désorientation 0°. La minimale, $\Delta E_{\min} = 63$ pJ/m, est constante pour toutes les désorientations.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour des dislocations coins :

- [1-10] dans l'intervalle des désorientations [0°-80°]
- [1-12] pour une désorientation 90°.

Les énergies d'interaction minimales pour chaque désorientation sont obtenues pour une dislocation vis [110], tableau A.1.4.

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, donc la force est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte répulsion et la dislocation vis [110] subit la plus faible répulsion.

- **Bicristal Pb-Ni**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = 162$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation coin [1-10] et une désorientation 0°. La minimale, $\Delta E_{\min} = 74$ pJ/m, est constante pour toutes les désorientations, tableau A.1.5.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour une dislocation coin [1-10], et les minimales sont obtenues pour une dislocation vis [110].

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, donc la force est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte répulsion et la dislocation vis [110] subit la plus faible répulsion.

5.1.2 - Effet de la désorientation

Nous nous proposons d'étudier l'effet de la désorientation sur la variation de l'énergie d'interaction d'une dislocation avec le joint interphase.

Chaque courbe d'évolution de l'énergie d'interaction est une fonction périodique continue de l'angle de la désorientation autour de l'axe de rotation R. Elle présente une symétrie en accord avec l'axe binaire de la désorientation, [110], ce qui réduit le champ d'investigation angulaire à $\theta \leq 90^\circ$, $90^\circ : \theta = \pi/n$, $n=2$ est l'ordre de la symétrie de l'axe de rotation R, figures A.1.1-A.1.5

Définition : un paramètre appelé « écart énergétique » et noté δE est défini comme l'intervalle entre les valeurs des énergies d'interaction maximale et minimale pour chaque désorientation.

- Pour le bicristal Pb-Al : quand la désorientation augmente, les énergies d'interaction extrêmes restent constantes, elles ne présentent aucune variation avec la désorientation. Donc l'écart énergétique δE est constant dans l'intervalle $[0^\circ, 90^\circ]$, figure 5.1.

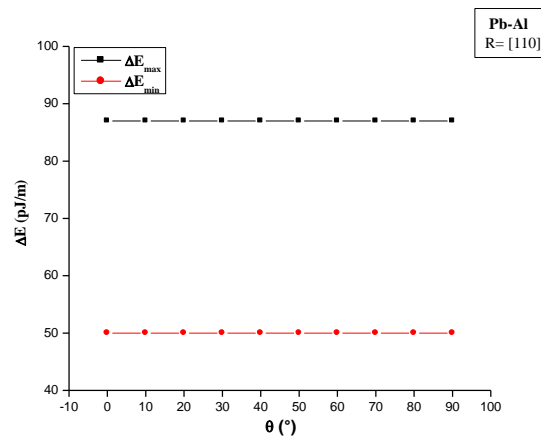


Figure 5.1 : Variation des énergies d'interaction élastique maximales et minimales en fonction de la désorientation pour le bicristal Pb-Al.

- Pour les bicristaux Pb-X, X : Au, Ag, Cu et Ni : quand la désorientation augmente, l'énergie d'interaction maximale diminue rapidement pour les faibles désorientations, $[0^\circ - 40^\circ]$, et plus lentement pour les désorientations les plus grandes $[40^\circ - 90^\circ]$, l'énergie minimale est constante quelque soit la désorientation, figures A.1.2-5. La variation d'énergie est très faible, de l'ordre de quelques dizaines de pico Joule par mètre. L'augmentation de la désorientation conduit à la diminution de l'écart énergétique δE , figure 5.2.

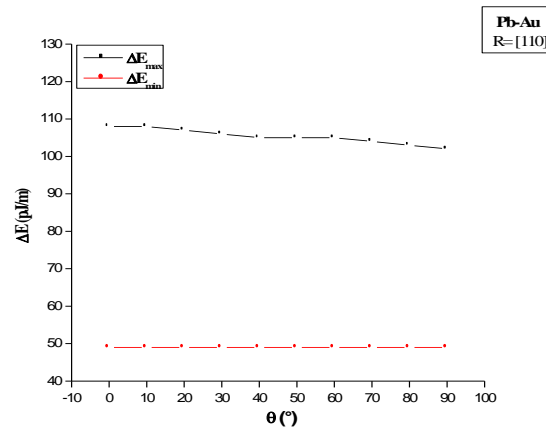


Figure 5.2 : Variation des énergies d'interaction élastique maximales et minimales en fonction de la désorientation pour le bicristal Pb-Au.

5.1.3 - Effet des modules de cisaillement

Nous étudions l'effet des modules de cisaillement des constituants du bicristal, sur les interactions élastiques entre les dislocations de matrice ayant un vecteur de Burgers $\vec{b} = a/2[110]$ et les joints interphase (R, θ) .

Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction dans l'intervalle des désorientations $[0^\circ, 90^\circ]$, et les écarts des modules de cisaillement $\Delta\mu$, $\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$, pour les bicristaux Pb-X, sont représentées dans le tableau 5.1.

Bicristal		$\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$ (10^{10} Pa)	ΔE_{\max} (pJ/m)	ΔE_{\min} (pJ/m)
Pb-X	Pb-Al	1.64	87	50
	Pb-Au	2.09	108	49
	Pb-Ag	2.37	107	51
	Pb-Cu	4.45	137	63
	Pb-Ni	8.46	162	74

Tableau 5.1 : Energies d'interaction élastique extrêmes, maximale et minimale entre les dislocations et les joints interphase dans les bicristaux Pb-X,

a) *Sens de l'interaction élastique* : les bicristaux à base de plomb, Pb-X, ont des écarts des modules de cisaillement, $\Delta\mu$, positifs et supérieurs à l'unité. Ces bicristaux ont un cristal 1 plus mou que le cristal 2. Les dislocations étudiées se trouvent dans le cristal 1, Pb, le plus mou.

Les énergies d'interaction entre les dislocations et les joints interphase sont positives pour toutes les configurations $[(t,b),(R,\theta)]$ étudiées. La force image est répulsive sur toutes les dislocations.

b) *Intensité de l'interaction élastique* : les énergies d'interaction extrêmes sont présentées dans l'ordre croissant des écarts des modules de cisaillement dans le tableau 5.1. Les énergies extrêmes les plus petites sont obtenues pour le bicristal Pb-Al, qui a l'écart le plus faible en $\Delta\mu$, $\Delta\mu=1.64 \cdot 10^{10}\text{Pa}$. Les valeurs les plus grandes sont obtenues pour le bicristal Pb-Ni, qui a l'écart le plus grand en $\Delta\mu$, $\Delta\mu=8.46 \cdot 10^{10}\text{Pa}$.

D'un bicristal à l'autre, les énergies d'interaction extrêmes augmentent avec l'écart des modules de cisaillement.

5.1.4 - Effet du caractère de la dislocation

Nous nous intéressons à l'effet du caractère de la dislocation sur l'interaction élastique dislocation-joint interphase. Les dislocations considérées sont la dislocation vis parfaite $[110]$ et les dislocations coins $[1-10]$ et $[1-11]$.

a) **Dislocation vis parfaite $[110]$** : pour chaque bicristal, l'énergie d'interaction élastique est positive et constante pour toutes les désorientations, son intensité dépend de l'écart des modules de cisaillement figure 5.3.

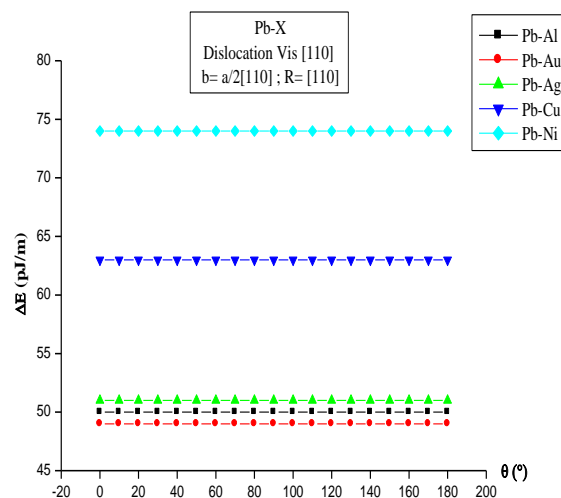


Figure 5.3 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation vis parfaite $[110]$ dans les bicristaux Pb-X.

Les énergies d'interaction dans les bicristaux Pb-X, X : Al, Au, Ag, sont très proches. Dans les bicristaux Pb-X, la dislocation vis parfaite est repoussée avec la même intensité de la force image quelque soit la désorientation

b) Dislocation coin [1-10] : pour chaque bicristal, l'énergie d'interaction est positive, elle diminue lentement pour les valeurs de θ inférieures à 40° , puis plus rapidement jusqu'à 90° , figure 5.4. L'énergie d'interaction maximale est obtenue pour la désorientation 0° , et l'énergie d'interaction minimale est obtenue pour la désorientation 90° .

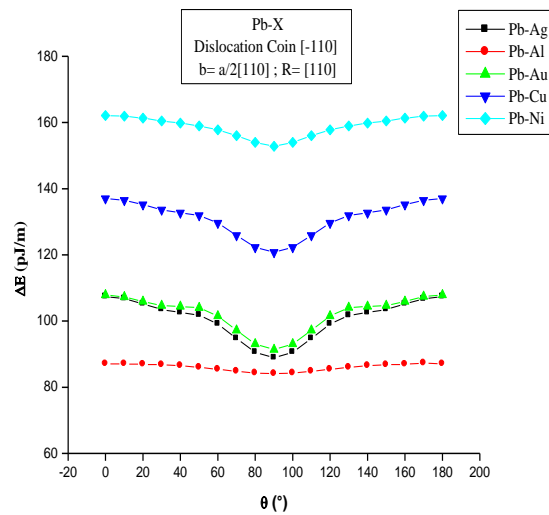


Figure 5.4 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin [1-10] dans les bicristaux Pb-X.

Les énergies d'interaction des bicristaux Pb-Au et Pb-Ag, sont très proches. Pour chaque bicristal Pb-X la dislocation coin [1-10] subit de fortes répulsions à 0° et de faibles répulsions à 90° .

c) Dislocation coin [1-11] : pour chaque bicristal l'énergie d'interaction est positive, elle augmente avec l'augmentation de la désorientation jusqu'à 30° , puis elle diminue jusqu'à 90° , figure 5.5. Les énergies d'interaction pour les bicristaux Pb-Au et Pb-Ag, sont très proches. L'énergie d'interaction maximale est obtenue pour la désorientation 30° et la minimale pour 0° et 90° , les énergies d'interaction pour les bicristaux Pb-Au et Pb-Ag, sont très proches.

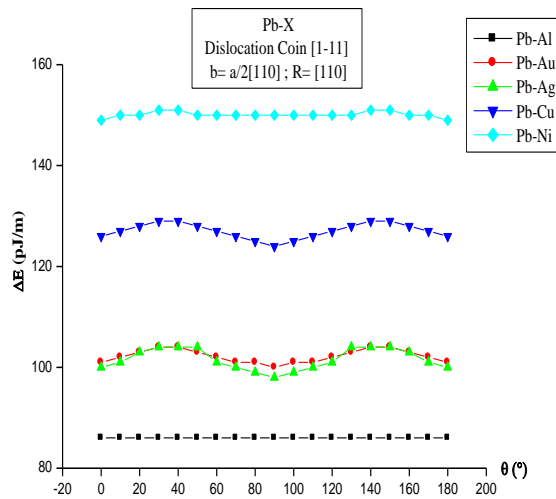


Figure 5.5 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin [1-11] dans les bicristaux Pb-X.

5.1.5 - Effet de la symétrie cristalline

Les énergies d'interaction pour les configurations étudiées sont présentées sous forme de cartes d'isoénergie, annexe 2. Les cartes représentent les distributions des énergies d'interaction selon les directions des dislocations pour un bicristal et une désorientation donnés. Les cartes sont les projections stéréographiques des directions des dislocations. Les couleurs correspondent aux différents intervalles d'intensité des énergies d'interaction. Les lignes d'isoénergie, ΔE constante, sont les frontières entre deux intervalles énergétiques adjacents, annexe 2.

Les cartes d'isoénergie, Carte A.2.1.a-e en annexe 2, montrent que :

- Les énergies d'interaction maximales sont obtenues pour les dislocations qui se trouvent dans le plan (110). C'est le plan du joint perpendiculaire à l'axe de rotation $R=[110]$ et au vecteur de Burgers $\vec{b} = a/2[110]$, qui contient les dislocations coin.

- Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour les dislocations qui se trouvent dans le plan (1-10). C'est le plan du joint qui contient l'axe de rotation $R=[110]$, le vecteurs de Burgers $\vec{b} = a/2[110]$, la dislocation vis [110] et la dislocation coin [001].

Les cartes d'isoénergie sont similaires, Carte A.2.1.a-e en annexe 2, elles présentent deux symétries binaires, une par rapport à la trace du plan (110) et l'autre par rapport à la trace du plan (1-10) pour les désorientations 0° et 90° , figure 5.6.

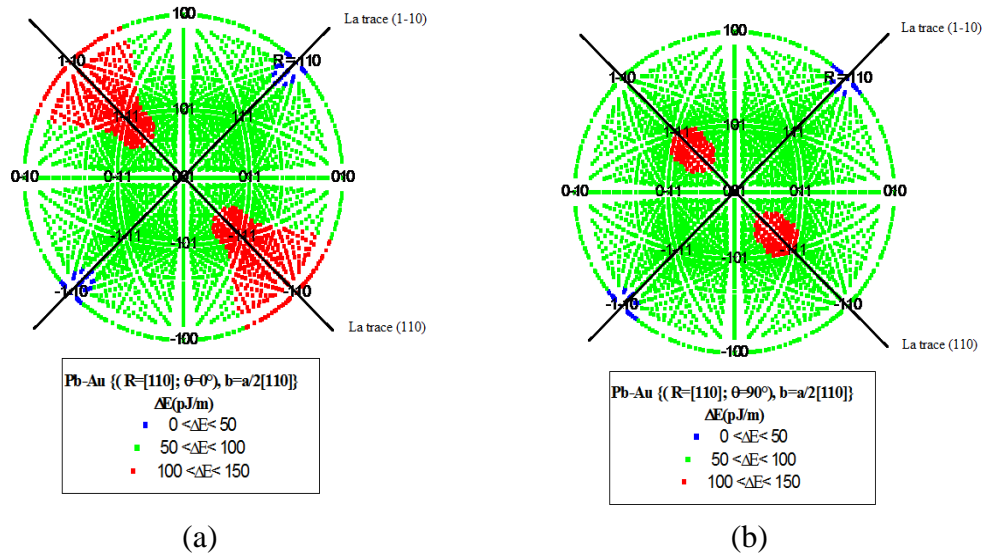


Figure 5.6 : Cartes d'isoénergie, avec deux symétries binaires, une par rapport à la trace du plan (110) et l'autre par rapport à la trace du plan (1-10) pour : (a) $\theta=0^\circ$ et (b) $\theta=90^\circ$ dans le bicristal Pb-Au.

Pour les désorientations comprises entre 10° et 80° , les cartes ne présentent qu'une seule symétrie binaire par rapport à la trace du plan (110), figure 5.7.

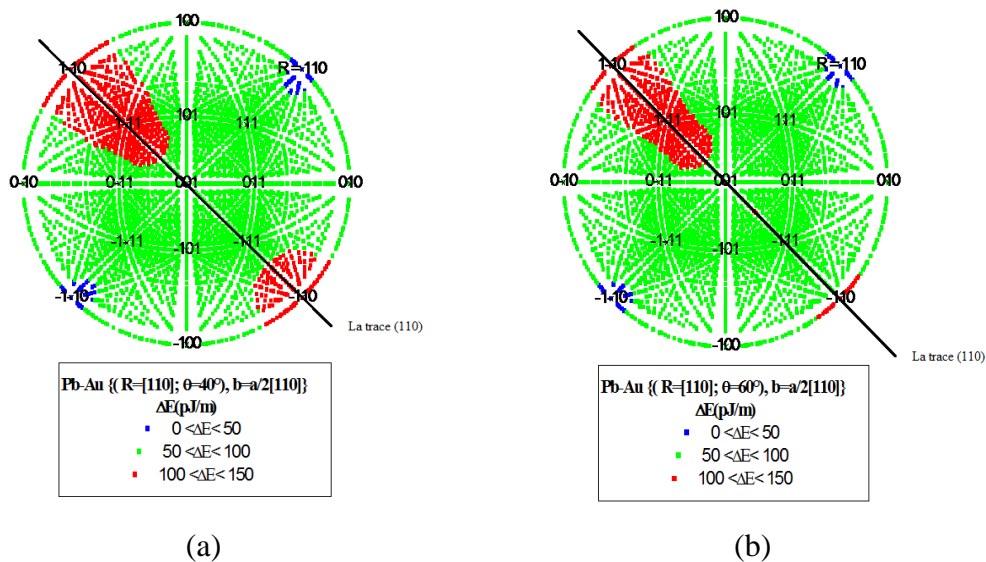


Figure 5.7 : Cartes d'isoénergie, une seule symétrie binaire par rapport à la trace du plan (110) pour : (a) $\theta=40^\circ$ et (b) $\theta=60^\circ$, pour le bicristal Pb-Au

5.1.6 - Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image

Rappelons qu'en l'absence de contraintes extérieures le mouvement d'une dislocation de matrice proche et parallèle d'un joint interphase, est contrôlé par le bilan des contraintes internes F_i et F_{PN} , la force image $F_i = \frac{|\Delta E|}{d}$, et la force de Peierls-Nabarro $F_{PN} = \sigma_{PN} \cdot b$.

La mise en mouvement d'une dislocation est effective quand l'intensité de la force image est supérieure à l'intensité de la force de Peierls-Nabarro. Une distance critique d_c d'efficacité de la force image est déterminée quand les intensités des deux forces deviennent égales.

$$F_{PN} = F_i \quad (5.1)$$

$$F_{PN} = \frac{|\Delta E|}{d_c} \quad (5.2)$$

$$d_c = \frac{|\Delta E|}{F_{PN}} \quad (5.3)$$

Cette distance critique est déterminée par l'intersection de la courbe de variation de la force image avec la droite de la force de Peierls-Nabarro, figure 5.8

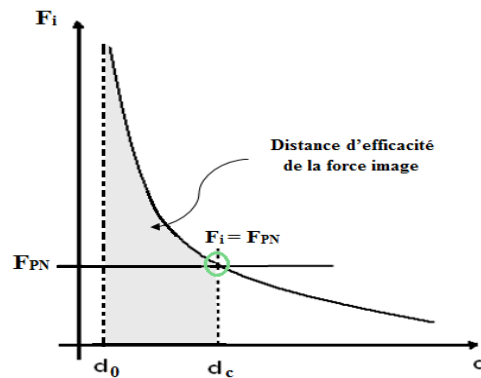


Figure 5.8: Distance d'efficacité de la force image.

Une dislocation située à une distance d , $d_0 < d \leq d_c$, du joint interphase est mise en mouvement sous l'effet de la force image. Si $d > d_c$ la force image n'a plus d'effet. Si $d \leq d_0$, $d_0 = 2-3b$, l'élasticité linéaire n'est plus valide.

Nous étudions la mobilité de la dislocation sous l'effet de la force image pour trois configurations :

- Une dislocation vis parfaite, $t = [110]$, $\vec{b}_p = \frac{a}{2} [110]$, $R = [110]$ et $\theta = 0^\circ$.
- Une dislocation partielle de Shockley, $t = [110]$, $\vec{b}_{sh1} = \frac{a}{6} [211]$, $R = [110]$ et $\theta = 0^\circ$.
- Une dislocation partielle de Shockley, $t = [110]$, $\vec{b}_{sh2} = \frac{a}{6} [2\bar{1}1]$, $R = [110]$ et $\theta = 0^\circ$.

a) Dislocation vis parfaite

Nous avons calculé la force image F_i (équation 3.46) et la force de friction F_{PN} (équation 3.48), exercées sur une dislocation vis parfaite, $t=[110]$ et $\vec{b}_p = \frac{a}{2} [110]$ pour une désorientation Cube sur Cube, $R = [110]$ et $\theta = 0^\circ$ dans les bicristaux Pb-X.

Les contraintes de Peierls-Nabarro et les forces de friction du réseau pour chaque matériau sont présentées dans les tableaux 5.2.

$t = [110], \vec{b} = \frac{a}{2} [110]$ et $R = [110], \theta = 0^\circ$						
Matériau	Pb	Al	Au	Ag	Cu	Ni
a (Å)	4.95	4.05	4.08	4.09	3.61	3.52
b_p (Å)	3.50	2.86	2.88	2.89	2.55	2.49
μ (10^{10} Pa)	1.01	2.65	3.10	3.38	5.46	9.74
ν	0.387	0.347	0.412	0.354	0.324	0.276
σ_{PN} (mN/m ²)	0.72	3.53	1.43	4.06	10.08	33.31
F_{PN} (mN/m)	0.25	1.01	0.41	1.17	2.57	8.29

Tableau 5.2 : Contraintes de Peierls-Nabarro σ_{PN} , Forces de friction du réseau F_{PN} ,

L'influence du réseau cristallin sur le mouvement de la dislocation vis parfaite est très faible dans le Plomb, Pb ($\mu_{Pb}=1.01 \cdot 10^{10}$ Pa, $\nu_{Pb}=0.387$), avec une force de friction $F_{PN}=0.25$ mN/m. Elle est très forte dans le Nickel, Ni ($\mu_{Ni}=9.4710^{10}$ Pa, $\nu_{Pb}=0.276$) avec une force de friction, $F_{PN}=8.29$ mN/m.

Les énergies d'interaction pour la dislocation vis parfaite et les distances critiques pour les bicristaux étudiés sont présentées dans le tableau 5.3,

$t = [110], \vec{b} = \frac{a}{2} [110]$ et $R = [110], \theta = 0^\circ$					
Bicristal	Pb-Al	Pb-Au	Pb-Ag	Pb-Cu	Pb-Ni
ΔE (pJ/m)	50	49	51	63	74
d_{c-p} (Å)	1988	195	2030	2506	2944
d_{c-p} (b_p)	568	557	580	716	841

Tableau 5.3 : Energies d'interaction élastique, ΔE , entre une dislocation vis parfaite et un joint interphase et les distances critiques, d_{c-p} , pour les bicristaux Pb-X.

La courbe de variation de la force image et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance d entre la dislocation et le joint interphase pour les bicristaux Pb-X, et présentées dans les figures A.3.1-A.3.5 en annexe 3. L'intersection des deux courbes indique la distance critique, d_{c-p} , en deçà de laquelle la dislocation vis parfaite est mise en mouvement sous l'effet de la force image.

La distance critique la plus grande est obtenue pour le bicristal Pb-Ni, $d_{c-p} = 841b_p$, dont l'énergie d'interaction est la plus forte $\Delta E = 74$ pJ/m. La distance critique la plus petite est obtenue pour le bicristal Pb-Au, $d_{c-p} = 557b_p$, dont l'énergie d'interaction, $\Delta E = 49$ pJ/m.

La distance d'efficacité de la force image augmente avec l'augmentation de l'énergie d'interaction élastique.

b) Dislocations partielles de Shockley

Nous calculons les forces image, F_{i-Sh1} et F_{i-Sh2} , et la force de friction, F_{PN} , exercées sur les deux dislocations partielles de Shockley, de direction $[110]$ et de vecteurs de Burgers $\vec{b}_{Sh1} = \frac{a}{6}[211]$ et $\vec{b}_{Sh2} = \frac{a}{6}[12-1]$, parallèles à un joint interphase et situées aux distances d_{Sh1} et d_{Sh2} avec, $d_{Sh2} = d_{Sh1} + d_{SF}$, d_{SF} étant la largeur du ruban de la faute d'empilement, tableau 1.4. Les contraintes de Peierls-Nabarro et les forces de friction du réseau pour chaque matériau sont présentées dans les tableaux 5.4.

$t = [110], \vec{b}_{Sh} = \frac{a}{6} \langle 211 \rangle$ et $R = [110], \theta = 0^\circ$						
Matériaux	Pb	Al	Au	Ag	Cu	Ni
a (Å)	4.95	4.05	4.08	4.09	3.61	3.52
b_{Sh} (Å)	2.02	1.65	1.66	1.67	1.47	1.44
μ (10^{10} Pa)	1.01	2.65	3.10	3.38	5.46	9.74
ν	0.387	0.347	0.412	0.354	0.324	0.276
σ_{PN} MPa	1.16	5.36	2.40	6.22	14.80	45.70
F_{PN} (mN/m)	0.24	0.88	0.40	1.04	2.18	6.57

Tableau 5.4 : Contraintes de Peierls-Nabarro σ_{PN} , Forces de friction du réseau F_{PN} , pour une dislocation partielle de Shockley dans les matériaux étudiés.

La force de friction du réseau la plus faible est obtenue dans le Plomb, Pb ($\mu_{Pb}=1.01 \cdot 10^{10}$ Pa, $\nu_{Pb}=0.387$), $F_{PN}=0.24\text{mN/m}$. La plus forte est obtenue dans le Nickel, Ni ($\mu_{Ni}=9.4710^{10}$ Pa, $\nu_{Ni}=0.276$) avec une force de friction, $F_{PN}=6.57\text{mN/m}$.

Les énergies d'interaction des dislocations partielles de Shockley et les distances critiques correspondantes pour les bicristaux étudiés sont présentés dans le tableau 5.5,

$$t = [110], \vec{b}_{Sh} = \frac{a}{6} \langle 211 \rangle, \text{ et } R = [110], \theta = 0^\circ$$

Bicristal	Pb-Al	Pb-Au	Pb-Ag	Pb-Cu	Pb-Ni
ΔE (pJ/m)	20	21	22	27	32
d_{c-Sh1} (Å)	854	893	935	1148	1362
d_{c-Sh1} (b_p)	244	255	267	328	389
d_{c-Sh2} (Å)	959	998	1040	1253	1467
d_{c-Sh2} (b_p)	274	285	297	358	419

Tableau 5.5 : Energies d'interaction élastique, ΔE , des dislocations partielles de Shockley, et distances critiques, d_{c-Sh1} et d_{c-Sh2} , pour les bicristaux Pb-X.

La force image exercée sur la dislocation de Shockley (1), F_{i-Sh1} , la plus proche de l'interface ou partielle de tête, est toujours plus intense que la force image, F_{i-Sh2} , exercée sur la dislocation de Shockley (2) ou partielle de queue qui est plus éloignée de l'interface de la la distance égale à la largeur du ruban de faute d'empilement entre les deux dislocations partielles.

Les courbes de variation de la force image sur les dislocations partielles et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance dislocation-joint interphase, d , et présentées dans les figures A.3.1-A.3.5 en annexe 3. Deux points d'intersection sont observés :

- Le premier entre la droite de la force de friction et la courbe de la force image, F_{i-Sh1} , agissant sur la première dislocation partielle de Shockley. Cette intersection indique la distance maximale, d_{c-Sh1} , d'efficacité de la force image pour la dislocation de tête.
- Le deuxième entre la droite de la force de friction et la courbe de la force image qui agit sur, F_{i-Sh2} , la deuxième dislocation partielle de Shockley. Il indique la distance critique, d_{c-Sh2} , d'efficacité de la force image sur la dislocation de queue.

Pour tous les bicristaux les distances d'efficacité de la force image sur les deux dislocations partielles sont plus faibles que celle sur la dislocation vis parfaite

Les distances critiques les plus grandes $d_{c-Sh1,2}$, sont obtenues pour le bicristal Pb-Ni, $d_{c-Sh1}=389b_p$, $d_{c-Sh2}=419b_p$, dont l'énergie d'interaction élastique est la plus forte, $\Delta E=32$ pJ/m. Les valeurs les plus petites sont obtenues pour Pb-Al, $d_{c-Sh1}=244b_p$, $d_{c-Sh2}=274b_p$, dont l'énergie d'interaction élastique est la plus faible, $\Delta E=20$ pJ/m.

Les distances d'efficacité de la force image augmentent avec l'augmentation de l'énergie d'interaction élastique.

c) Efficacité de la force image pour les dislocations dissociées

La réaction la plus importante impliquant des dislocations, parfaites ou partielles, est la dissociation d'une dislocation parfaite de vecteur de Burgers b_p en deux dislocations partielles de Shockley de vecteurs de Burgers b_{Sh1} et b_{Sh2} .

La mise en mouvement des dislocations dissociées sous l'effet de la force image dépend de la position de la dislocation parfaite d et des distances d'efficacité pour les dislocations partielles.

Afin d'étudier l'efficacité de la force image sur les dislocations dissociées nous avons regroupé la courbe de la force image, F_{i-p} , et la droite de la force de friction F_{PN-p} sur la dislocation vis parfaite, avec les courbes des forces images, F_{i-Sh1} et F_{i-Sh2} , et la droite de la force de friction F_{PN-Sh} sur les deux dislocations de Shockley, dans les figures A3.1-A3.5 en annexe 3.

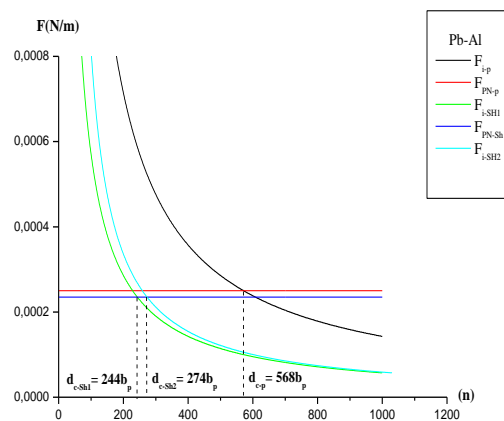


Figure 5.9 : Evolution des forces images et des forces de friction en fonction de la distance dislocation-joint interphase, pour les dislocation, vis parfaite et les deux dislocations partielles de Shockley, dans le bicristal Pb-Al.

Pour les bicristaux Pb-X, les distances d'efficacité de la force image sur les deux dislocations partielles de Shockley, d_{c-Sh1} et d_{c-Sh2} sont inférieures à la distance d'efficacité de la force image sur la dislocation vis parfaite d_{c-p} figure 5.9.

La dislocation vis parfaite est située à une distance d :

- Si $d_0 < d \leq d_{c-Sh1}$, les dislocations dissociées sont mises en mouvement sous l'effet de leurs forces image répulsives, avec $F_{i-Sh1} > F_{i-Sh2}$. Ceci conduit à la réduction de la distance entre les deux dislocations partielles et donc à la réduction de la largeur du ruban de faute d'empilement d_{SF} .
- Si $d_{c-Sh1} < d \leq d_{c-Sh2}$, la dislocation de Shockley (2) est mise en mouvement alors que la Shockley (1) reste immobile. Ce mouvement conduit à augmenter la distance entre les deux dislocations partielles et donc à un élargissement du ruban de faute d'empilement.
- Si $d_{c-Sh2} < d$, on n'observe aucun effet de la force image sur le complexe dislocations partielles – ruban de faute d'empilement.

5.2 - Bicristaux à base d'Aluminium Al-X

Nous considérons les bicristaux Al-X, X= Pb, Au, Ag, Cu et Ni. Les dislocations étudiées sont situées dans le cristal d'aluminium à une distance d du joint interphase

5.2.1 - Energies d'interaction extrêmes

Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction, ΔE_{\max} et ΔE_{\min} , et les lignes des dislocations correspondantes sont présentées dans les tableaux A.1.6-A.1.10, et les figures A.1.6-A.1.10 en annexe 1.

- **Bicristal Al-Pb**

L'énergie d'interaction maximale $\Delta E_{\max} = -106$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation mixte $[-1-11]$ et une désorientation 90° , et la minimale, $\Delta E_{\min} = -182$ pJ/m, obtenue pour une dislocation coin $[1-10]$ et une désorientation 90° tableau A.1.6.

Les énergies d'interaction maximales sont obtenues pour des dislocations mixtes $[120]$, $[211]$ et $[111]$. Les minimales sont obtenues pour des dislocations coin $[1-12]$, $[1-11]$ et $[1-10]$.

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est attractive sur toutes les dislocations. La dislocation coin $[1-10]$ subit la plus forte attraction et la dislocation mixte $[-1-11]$ subit la plus faible attraction.

- **Bicristal Al-Au**

L'énergie d'interaction maximale est positive, $\Delta E_{\max} = 47$ pJ/m, elle est obtenue pour une dislocation coin $[001]$ et une désorientation 90° . La minimale est négative, $\Delta E_{\min} = -10$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation mixte $[-210]$ et une désorientation 90° . Les énergies d'interaction extrêmes sont très faibles tableau A.1.7.

Les énergies d'interaction maximales, sont obtenues pour des dislocations coins $[1-10]$, $[2-21]$, $[1-12]$, $[1-13]$ et $[001]$. Les minimales sont obtenues pour la dislocation vis $[110]$ pour les désorientations 0° et 10° , et des dislocations mixtes dans l'intervalle $[20^\circ-90^\circ]$.

L'énergie d'interaction peut être positive, négative ou nulle, donc la force sur les dislocations peut être répulsive, attractive ou nulle, selon le caractère de la dislocation et la désorientation. La dislocation coin $[001]$ subit la plus forte répulsion et la dislocation mixte $[-210]$ subit la plus forte attraction.

- **Bicristal Al-Ag**

L'énergie d'interaction maximale est positive, $\Delta E_{\max} = 47$ pJ/m, elle est obtenue pour une dislocation coin [001] et une désorientation 90° . La minimale est négative, $\Delta E_{\min} = -5$ pJ/m, pour une dislocation mixte [100] et une désorientation 90° . Les énergies d'interaction extrêmes sont très faibles tableau A.1.8.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour des dislocations coin : [1-10], [2-21], [1-12] et [001]. Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour une dislocation coin [1-11] pour les désorientations 0° et 10° et pour des dislocations mixtes dans l'intervalle [20° - 90°].

L'énergie d'interaction peut être positive, négative ou nulle, donc la force image peut être répulsive, attractive ou nulle, selon le caractère de la dislocation et la désorientation. La dislocation coin [001] subit la plus forte répulsion et la dislocation mixte [001] subit la plus forte attraction.

- **Bicristal Al-Cu**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = 116$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation coin [001] et une désorientation 90° , la minimale, $\Delta E_{\min} = 49$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation mixte [120] et une désorientation 90° , tableau A.1.9.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour des dislocations coin [1-10], [1-12], [2-21] et [001]. Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour la dislocation vis [110] et les dislocations mixtes [120] et [211].

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, donc la force image est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [001] subit la plus forte répulsion et la dislocation mixte [120] la plus faible répulsion.

- **Bicristal Al-Ni**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = 186$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation coin [1-10] et une désorientation 0° , la minimale, $\Delta E_{\min} = 107$ pJ/m, est constante pour toutes les désorientations.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour des dislocations coins [1-10], [2-21], [1-11], [1-12], [1-13] et [001], et les minimales sont obtenues pour la dislocation vis [110].

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, la force image est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte répulsion et la dislocation vis [110] la plus faible répulsion.

5.2.2 - Effet de la désorientation

- Bicristaux, Al-X, X : Pb, Ag, Au et Cu : quand la désorientation augmente, l'énergie d'interaction maximale augmente, et l'énergie d'interaction minimale diminue. Les énergies d'interaction extrêmes sont constantes pour les faibles désorientations, [0°-30°], et varient lentement pour les désorientations les plus grandes [40°-90°], figures A.1.6-A.1.9 en annexe 1. La variation des énergies extrêmes est très faible, de l'ordre de quelques pico Joule par mètre. L'augmentation de la désorientation conduit à une augmentation de l'écart énergétique δE qui est défini comme la différence entre les deux énergies d'interaction extrêmes : $\delta E = \Delta E_{\max} - \Delta E_{\min}$, figure 5.10.

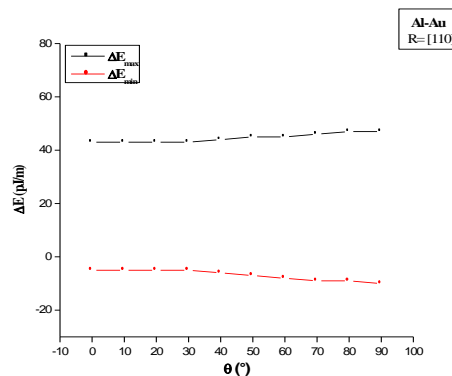


Figure 5.10 : Variation des énergies d'interaction élastique maximales et minimales en fonction de la désorientation pour le bicristal Al-Au.

- Pour le bicristal Al-Ni : quand la désorientation augmente l'énergie d'interaction maximale est presque nulle et la minimale est constante. L'écart énergétique δE en fonction de la désorientation est constant, figure A.1.10.

- Pour les bicristaux Al-Au et Al-Ag, avec des écarts des modules de cisaillement, $\Delta\mu = 0.45 \cdot 10^{10} \text{Pa}$ et $\Delta\mu = 0.73 \cdot 10^{10} \text{Pa}$, le cristal 1 est plus mou que le cristal 2, le nombre des dislocations attirées augmente avec l'augmentation de la désorientation.

5.2.3 - Effet des modules de cisaillement

Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction obtenues dans l'intervalle des désorientations $[0^\circ, 90^\circ]$, et l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$, pour les bicristaux Al-X, sont présentées dans le tableau 5.6.

Bicristal	$\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$ (10^{10} Pa)	ΔE_{\max} (pJ/m)	ΔE_{\min} (pJ/m)
Al-Pb	-1.64	-106	-182
Al-Au	0.45	47	-10
Al-X Al-Ag	0.73	47	-5
Al-Cu	2.81	116	49
Al-Ni	6.82	186	107

Tableau 5.6 : Energies d'interaction élastique extrêmes pour les bicristaux Al-X.

a) *Sens de l'interaction élastique* : les bicristaux à base d'aluminium ont des écarts des modules de cisaillement tels que :

- $\Delta\mu < -1$: cas du bicristal Al-Pb. Le cristal 1 est plus dur que le cristal 2. Les énergies d'interaction sont négatives pour toutes les désorientations. La force image est attractive sur toutes les dislocations.

- $-1 < \Delta\mu < 1$: cas des bicristaux Al-Au et Al-Ag. Les matériaux constituant ces bicristaux ont des paramètres structuraux et élastiques très proches. L'énergie d'interaction élastique peut être positive, négative ou nulle. La force image sur les dislocations peut être répulsive, attractive ou nulle.

- $\Delta\mu > 1$: cas des bicristaux Al-Cu et Al-Ni. Le cristal 1 est plus mou que le cristal 2. Les énergies d'interaction sont positives pour toutes les désorientations. La force image est répulsive sur toutes les dislocations.

b) *Intensité de l'interaction élastique* : Les énergies d'interaction extrêmes les plus petites sont obtenues pour le bicristal Al-Pb, qui présente l'écart le plus faible de $\Delta\mu$, $\Delta\mu = -1.64 \cdot 10^{10}$ Pa. Les valeurs les plus grandes sont obtenues pour le bicristal Al-Ni dont l'écart est le plus grand, $\Delta\mu = 6.82 \cdot 10^{10}$ Pa. Les énergies d'interaction sont presque nulles pour les bicristaux Al-Au et Al-Ag, qui ont un écart $|\Delta\mu|$ très faible, $\Delta\mu = 0.45 \cdot 10^{10}$ Pa et $\Delta\mu = 0.73 \cdot 10^{10}$ Pa, respectivement.

Les énergies d'interaction élastique extrêmes augmentent avec l'écart des modules de cisaillement.

5.2.4 - Effet du caractère de la dislocation

a) **Dislocation vis parfaite [110]** : l'énergie d'interaction est constante pour toutes les désorientations. Elle est négative pour le bicristal Al-Pb et positive pour Al-Cu et Al-Ni. Elle est presque nulle pour les bicristaux Al-Au et Al-Ag, figure 5.11.

Dans chaque bicristal Al-X, la dislocation vis parfaite est repoussée ou attirée avec la même intensité de la force image quelque soit la désorientation. Dans les bicristaux Al-Au ou Al-Ag la force image est presque nulle.

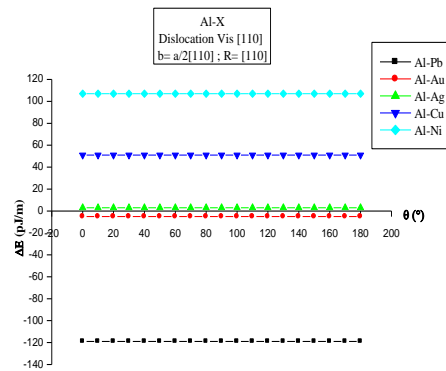


Figure 5.11 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation vis parfaite [110] dans les bicristaux Al-X.

b) **Dislocation coin [1-10]** : l'énergie d'interaction diminue lentement pour les désorientations inférieures à 40° puis plus rapidement jusqu'à 90° , figure 5.12.

Elle est positive ou négative et plus ou moins intense selon les valeurs de $\Delta\mu$.

- Si $\Delta\mu > 1$, les énergies d'interaction les plus grandes sont obtenues pour la désorientation 0° et les plus petites sont pour 90° .
- Si $\Delta\mu < -1$, les énergies d'interaction les plus grandes (en valeur absolue) sont obtenues pour la désorientation 90° et les plus petites (en valeur absolue) pour 0° .

Les énergies d'interaction pour les bicristaux Al-Au et Al-Ag sont identiques pour chaque désorientation, elles deviennent nulles à 90° .

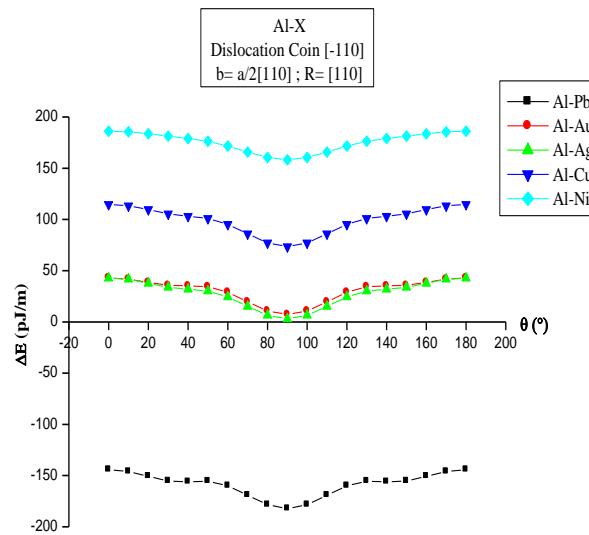


Figure 5.12 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin [1-10] dans les bicristaux Al-X

La force image sur la dislocation coin [1-10], peut être répulsive, attractive ou nulle et plus ou moins intense, selon la valeur de l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu$.

c) Dislocation coin [1-11] : pour chaque bicristal, l'énergie d'interaction élastique augmente avec la désorientation jusqu'à 35° puis elle diminue au delà jusqu'à 90° , figure 5.13.

Les énergies d'interaction sont positives ou négatives selon les valeurs de $\Delta\mu$.

- Si $\Delta\mu > 1$, les énergies d'interaction les plus grandes sont obtenues pour la désorientation 30° et les plus petites pour les désorientations 0° et 90° . La dislocation coin [1-11], subit une forte répulsion à 30° et des plus faibles à 0° et 90° .
- Si $\Delta\mu < -1$, l'énergie d'interaction élastique la plus grande (en valeur absolue) est obtenue pour les désorientations 0° et 90° , et la plus petite (en valeur absolue) est obtenue pour la désorientation 30° . La dislocation coin [1-11], subit une forte attraction à 0° et 90° est une faible attraction à 30° .

Les énergies d'interaction élastique pour les bicristaux Al-Au et Al-Ag sont identiques pour toutes les désorientations.

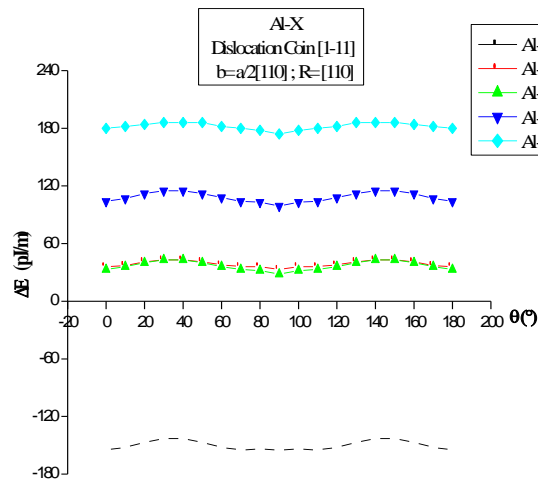


Figure 5.13 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin [1-11] dans les bicristaux Al-X.

5.2.5 - Effet de la symétrie cristalline

Les énergies d'interaction maximales sont obtenues pour les dislocations qui appartiennent du plan (110) qui contient les dislocations coin. Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour les dislocations qui appartiennent au plan (1-10) qui contient l'axe de rotation $R=[110]$, le vecteur de Burgers $\vec{b}=a/2[110]$, la dislocation vis [110] et la dislocation coin [001].

Les cartes d'isoénergie, Carte A.2.2.a-e en annexe 2, présentent deux symétries binaires, une par rapport au plan (110) et l'autre par rapport à (1-10) pour les désorientations 0° et 90° . Elles ne présentent qu'une seule symétrie binaire par rapport au plan (110) pour les désorientations comprises dans l'intervalle $[10^\circ, 80^\circ]$.

Pour les bicristaux Al-Au et Al-Ag, le nombre et le caractère des dislocations attirées ou repoussées dépend de la désorientation. Les dislocations pour lesquelles l'énergie d'interaction est nulle et par conséquent la force image aussi, sont celles qui se trouvent sur la ligne de contour zéro ($\Delta E = 0$), la frontière entre l'intervalle énergétique positif et l'intervalle énergétique négatif sur les cartes isoénergie, annexe 2. Le caractère de ces dislocations dépend de la nature des deux cristaux et de l'angle de la désorientation.

5.2.6 - Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image

a) Dislocation vis parfaite

La force de friction F_{PN} exercée sur une dislocation parfaite dans l'aluminium a été calculée et présentée dans le tableau 5.2.

Les énergies d'interaction de la dislocation vis parfaite, et les distances critiques, pour les bicristaux Al-X sont présentés dans le tableau 5.7.

$$t = [110], \vec{b} = \frac{a}{2} [110] \text{ et } R = [110], \theta=0^\circ$$

Bicristal	Al-Pb	Al-Au	Al-Ag	Al-Cu	Al-Ni
ΔE (pJ/m)	-119	-5	3	51	107
d_{c-p} (Å)	1159	48	28	496	1043
d_{c-p} (b_p)	411	17	10	176	370

Tableau 5.7 : Energies d'interaction élastique, ΔE , entre une dislocation vis parfaite et un joint interphase et les distances critiques, d_{c-p} , pour les bicristaux Al-X.

La courbe de variation de la force image et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance, d , et présentées dans les figures A.3.6-A.3.10 en annexe 3.

La distance critique la plus grande est obtenue pour le bicristal Al-Pb, $d_{c-p} = 411b_p$, dont l'énergie d'interaction est la plus forte $\Delta E = -119$ pJ/m. La distance critique la plus petite est obtenue pour les bicristaux Al-Ag, $d_{c-p} = 10b_p$, dont l'énergie d'interaction élastique, $\Delta E = 3$ pJ/m.

La distance d'efficacité de la force image augmente avec l'énergie d'interaction.

b) Dislocations partielles de Shockley

La force de friction, F_{PN} , exercée sur les deux dislocations partielles de Shockley dans l'aluminium a été présentée dans le tableau 5.4.

Les énergies d'interaction élastiques d'une dislocation partielle de Shockley, et les distances critiques, pour les bicristaux étudiés sont présentées le tableau 5.8,

Les courbes de variation de la force image des deux partielles et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance dislocation-joint interphase, d , et présentées dans les figures A.3.6-A.3.10 en annexe 3.

$$t = [110], \vec{b}_{sh} = \frac{a}{6} \langle 211 \rangle, \text{ et } R = [110], \theta = 0^\circ$$

Bicristal	Al-Pb	Al-Au	Al-Ag	Al-Cu	Al-Ni
ΔE (pJ/m)	-44	2	4	22	43
d_{c-sh1} (Å)	495	23	46	249	483
d_{c-sh1} (b_p)	173	8	16	87	169
d_{c-sh2} (Å)	555	83	106	309	543
d_{c-sh2} (b_p)	194	29	37	108	190

Tableau 5.8 : Energies d'interaction élastiques, ΔE , des dislocations partielles de Shockley, et les distances critiques, d_{c-sh1} et d_{c-sh2} , pour les bicristaux Al-X.

Les distances critiques les plus grandes $d_{c-sh1,2}$, sont obtenues pour le bicristal Al-Pb, $d_{c-sh1} = 173b_p$, $d_{c-sh2} = 194b_p$, dont l'énergie d'interaction est la plus forte, $\Delta E = -44$ pJ/m. Les valeurs les plus petites sont obtenues pour Al-Au, $d_{c-sh1} = 8b_p$, $d_{c-sh2} = 29b_p$, dont l'énergie d'interaction est la plus faible, $\Delta E = 2$ pJ/m.

Les distances d'efficacité de la force image augmentent avec l'augmentation de l'énergie d'interaction élastique.

c) Efficacité de la force image sur les dislocations dissociées

Pour les bicristaux Al-X, la courbe de la force image, F_{i-p} et la droite de la force de friction F_{PN-p} sur la dislocation vis parfaite, et les courbes des forces images, F_{i-sh1} et F_{i-sh2} , et la droite de la force de friction F_{PN-sh} sur les deux dislocations de Shockley, sont regroupées dans les figures A3.6-A3.10 en annexe 3.

- Pour les bicristaux Al-X, X : Pb, Cu et Ni, les distances d'efficacité de la force image sur les partielles, d_{c-sh1} et d_{c-sh2} , sont plus petites que la distance d'efficacité sur la parfaite, d_{c-p} , figures A3.6, 9, 10 en annexe 3.
- Pour le bicristal Al-Au $d_{c-sh1} < d_{c-p} < d_{c-sh2}$, figures 5.14.

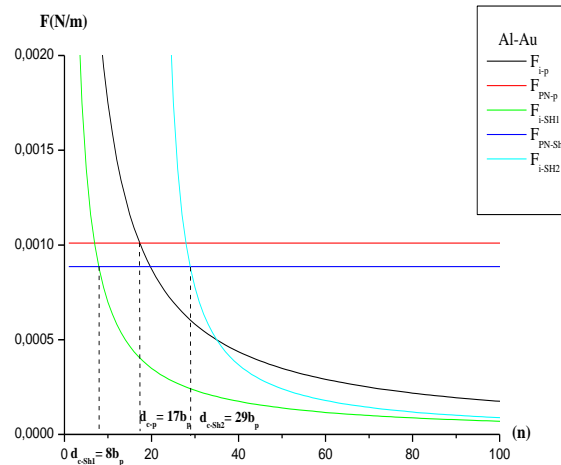


Figure 5.14 : Evolution des forces images et des forces de friction en fonction de la distance dislocation-joint interphase, pour les dislocation, vis parfaite et les deux dislocations partielles de Shockley, dans le bicristal Al-Au.

- Pour le bicristal Al-Ag et $d_{c-p} < (d_{c-sh1} \text{ et } d_{c-sh2})$, figure 5.15.

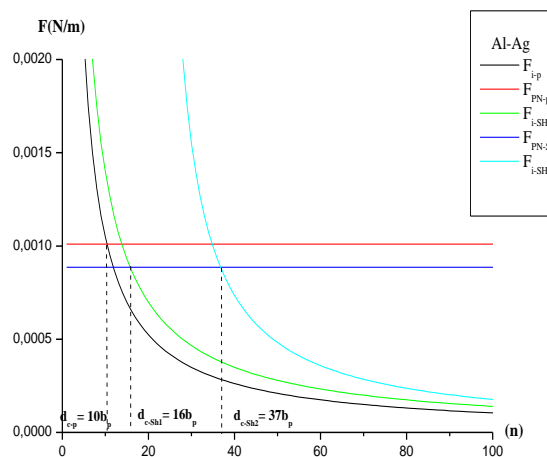


Figure 5.15 : Evolution des forces images et des forces de friction en fonction de la distance dislocation-joint interphase, pour les dislocation, vis parfaite et les deux dislocations partielles de Shockley, dans le bicristal Al-Ag.

Quand la dislocation vis parfaite est située à une distance d du joint interphase :

- Si $d_0 < d \leq d_{c-sh1}$, les dislocations partielles sont mises en mouvement sous l'effet de leurs forces image, avec $F_{i-sh1} > F_{i-sh2}$. Ceci conduit à un élargissement du ruban de faute d'empilement qui sépare les deux partielles quand les forces image sont attractives. Si les

forces image sont répulsives on observe le rétrécissement du ruban de faute d'empilement. Dans ce dernier cas la force image joue le rôle de force motrice pour la recombinaison des dislocations partielles ;

- Si $d_{c-sh1} < d \leq d_{c-sh2}$, la dislocation partielle de queue, Shockley 2, est mise en mouvement alors que la partielle de tête, Shockley 1, reste immobile. Quand la force image F_{i-sh2} est attractive, la distance, d_{SF} diminue, c'est le cas du bicristal Al-Pb. Quand la force image F_{i-sh2} est répulsive la distance d_{SF} augmente c'est le cas des bicristaux Al-X, X : Au, Ag, Cu, et Ni.

- Si $d_{c-sh2} < d$, il n'y a aucun effet de la force image sur les dislocations dissociées.

5.3 - Bicristaux à base d'Or : Au-X

Nous considérons les bicristaux Au-X, X : Pb, Al, Ag, Cu et Ni. Les dislocations étudiées sont situées dans le cristal 1, Au, à une distance d du joint interphase

5.3.1 - Energies d'interaction extrêmes

Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction, ΔE_{\max} et ΔE_{\min} , et les lignes des dislocations correspondantes, sont présentées dans les tableaux A.1.11-A.1.15, et les figures A.1.11-A.1.15 en annexe 1.

- **Bicristal Au-Pb**

L'énergie d'interaction maximale $\Delta E_{\max} = -104$ pJ/m, obtenue pour une dislocation mixte [221] et une désorientation 90° , et la minimale, $\Delta E_{\min} = -271$ pJ/m, obtenue pour une dislocation coin [1-10] pour la désorientation 90° tableau A.1.11.

Les énergies d'interaction maximales sont obtenues, pour la dislocation vis [110] et la dislocation mixte [221]. Les minimales sont obtenues pour des dislocations coin [1-12], [1-11], [3-31] et [1-10].

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours négatives quelque soit la désorientation, la force image est attractive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte attraction et la dislocation mixte [221] la plus faible attraction.

- **Bicristal Au-Al**

L'énergie d'interaction maximale est positive, $\Delta E_{\max} = 47$ pJ/m, elle est constante pour toutes les désorientations et obtenue pour la dislocation vis [110]. La minimale est négative, $\Delta E_{\min} = -59$ pJ/m, elle est obtenue pour une dislocation coin [1-10] et une désorientation 90° . Les énergies d'interaction extrêmes sont très faibles tableau A.1.12.

L'énergie d'interaction peut être positive, négative ou nulle, la force image sur les dislocations peut être répulsive, attractive ou nulle, selon le caractère de la dislocation et la désorientation. La dislocation la plus attirée et la dislocation coin [1-10], la plus repoussée est la dislocation vis [110].

- **Bicristal Au-Ag**

L'énergie d'interaction maximale est positive, $\Delta E_{\max} = 39$ pJ/m, pour la dislocation coin [001] et une désorientation 90° . La minimale est négative, $\Delta E_{\min} = -49$ pJ/m, pour la dislocation coin [1-10] et une désorientation 90° . Les énergies d'interaction extrêmes sont très faibles tableau A.1.13.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour des dislocations mixtes [120] et [12-1] pour les désorientations 0° et 10° et pour une dislocation coin [001]. Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour les dislocations coins [1-10], [1-12] et [1-11].

L'énergie d'interaction peut être positive, négative ou nulle, la force image sur les dislocations est répulsive, attractive ou nulle, selon le caractère de la dislocation et la désorientation. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte attraction et la dislocation coin [001] subit la plus forte répulsion.

- **Bicristal Au-Cu**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = 113$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation coin [001] et la désorientation 90°, la minimale, $\Delta E_{\min} = 23$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation mixte [100] et la désorientation 90°, tableau A.1.14.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour des dislocations coins [1-10], [001], [1-12] et [1-11]. Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour la dislocation vis [110] et les dislocations mixtes [12-1] et [100].

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, la force image est alors répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [001] subit la plus forte répulsion et la dislocation mixte [100] subit la plus faible répulsion.

- **Bicristal Au-Ni**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = 193$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation coin [1-10] et une désorientation 0°. La minimale, $\Delta E_{\min} = 107$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation vis [110]. Elle est constante pour toutes les désorientations, tableau A.1.15.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour des dislocations coins [1-10], [2-21], [1-11], [1-12], [1-13] et [001], et les minimales sont obtenues pour la dislocation vis [110].

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, donc la force image est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte répulsion et la dislocation vis [110] subit la plus faible répulsion.

5.3.2 - Effet de la désorientation

- **Bicristaux Au-X, X : Pb, Al, Ag et Cu** : quand la désorientation augmente, l'énergie d'interaction maximale augmente, et l'énergie d'interaction minimale diminue figures A.1.11-

A.1.14 en annexe1. La variation d'énergie est très faible, de l'ordre de quelques dizaines de pico Joule par mètre. L'augmentation de la désorientation conduit à la l'augmentation de l'écart énergétique δE , figure 5.16.

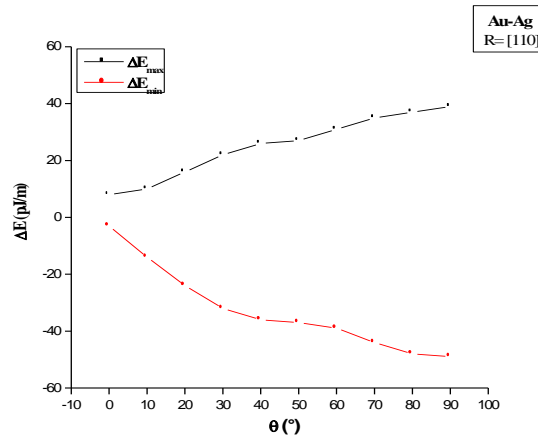


Figure 5.16 : Variation des énergies d'interaction élastique maximales et minimales en fonction de la désorientation pour le bicristal Au-Ag.

- Bicristal Au-Ni : l'énergie d'interaction maximale est constante dans l'intervalle des désorientations $[0^\circ, 60^\circ]$ puis elle diminue légèrement jusqu'à 90° . L'énergie d'interaction minimale est constante quelque soit la désorientation. L'écart énergétique δE diminue, figures A.1.15 en annexe1.

- Bicristaux Au-Al et Au-Ag: avec un cristal 1 plus dur que le cristal 2, $\Delta\mu = -0.45 \cdot 10^{10} \text{Pa}$, le nombre des dislocations attirées diminue avec l'augmentation de la désorientation. Alors que pour le bicristal Au-Ag, $\Delta\mu = 0.28 \cdot 10^{10} \text{Pa}$, avec un cristal 1 plus mou que le cristal 2, le nombre des dislocations attirées augmente avec l'augmentation de la désorientation

5.3.3 - Effet des modules de cisaillement

Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction dans l'intervalle des désorientations $[0^\circ, 90^\circ]$, et les écarts des modules de cisaillement $\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$, pour les bicristaux Au-X, sont présentées dans le tableau 5.9.

	Bicristal	$\Delta\mu=\mu_2-\mu_1$ (10^{10} Pa)	ΔE_{\max} (pJ/m)	ΔE_{\min} (pJ/m)
	Au-Pb	-2.09	-104	-271
	Au-Al	-0.45	5	-59
Au-X	Au-Ag	0.28	39	-49
	Au-Cu	2.36	113	23
	Au-Ni	6.37	193	107

Tableau 5.9 : Energies d'interaction élastique extrêmes pour les bicristaux Au-X,

a) *Sens de l'interaction élastique* : les bicristaux à base d'or, Au, ont des écarts des modules de cisaillement tels que:

- $\Delta\mu < -1$ pour le bicristal Au-Pb dont le cristal 1 est plus dur que le cristal 2. Les énergies d'interaction sont négatives pour toutes les désorientations. La force image est attractive sur toutes les dislocations.

- $-1 < \Delta\mu < 1$ pour les bicristaux Au-Al et Au-Ag. Les matériaux constituant ces bicristaux ont des paramètres structuraux et élastiques très proches, tableau 4.1. L'énergie d'interaction peut être positive, négative ou nulle et la force image est répulsive, attractive ou nulle.

- $\Delta\mu > 1$, pour les bicristaux Au-Cu et Au-Ni, le cristal 1 plus mou que le cristal 2. Les énergies d'interaction sont positives pour toutes les désorientations. La force image est répulsive sur toutes les dislocations.

b) *Intensité de l'interaction élastique* : Les énergies extrêmes les plus petites sont obtenues pour le bicristal Au-Pb, qui a l'écart le plus faible, $\Delta\mu = -2.09 \cdot 10^{10}$ Pa . Les plus grandes sont obtenues pour le bicristal Au-Ni, qui a l'écart le plus grand $\Delta\mu = 6.37 \cdot 10^{10}$ Pa .

L'énergie d'interaction est très faible pour Au-Al et Au-Ag, qui ont un écart des modules de cisaillement, $|\Delta\mu|$, inférieur à l'unité, $\Delta\mu = -0.45 \cdot 10^{10}$ Pa et $\Delta\mu = 0.28 \cdot 10^{10}$ Pa, respectivement.

Les énergies d'interaction élastiques extrêmes augmentent avec l'augmentation de l'écart des modules de cisaillement.

5.3.4- Effet du caractère de la dislocation

a) **Dislocation vis parfaite [110]** : l'énergie d'interaction est constante pour toutes les désorientations. Elle est négative pour les bicristaux avec $\Delta\mu < -1$, et positive pour les bicristaux avec $\Delta\mu > 1$. Elle est presque nulle pour les bicristaux Al-Au et Al-Ag, figure 5.17.

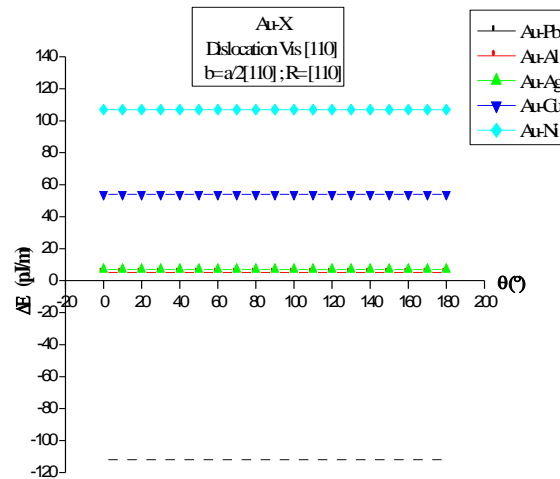


Figure 5.17 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation vis parfaite [110] dans les bicristaux Au-X.

Pour chaque bicristal Al-X, la dislocation vis parfaite est repoussée ou attirée avec la même intensité de la force image quelque soit la désorientation. Si cette dislocation se trouve dans les bicristaux Al-Au ou Al-Ag, la force image est presque nulle.

b) **Dislocation coin [1-10]** : l'énergie d'interaction élastique diminue lentement pour les valeurs de θ inférieures à 40° , puis plus rapidement jusqu'à 90° , figure 5.18. Elle est positive ou négative, plus ou moins intense, selon les valeurs de $\Delta\mu$.

- Si $\Delta\mu > 1$, les énergies d'interaction les plus grandes sont obtenues pour la désorientation 0° , et les plus petites pour la désorientation 90° . La dislocation coin [1-10] subit une forte répulsion à 0° et une faible répulsion à 90° .
- Si $\Delta\mu < -1$, les énergies d'interaction les plus grandes (en valeur absolue) sont obtenues pour la désorientation 90° , et les plus petites pour 0° . La dislocation coin [1-10] subit une forte attraction à 90° et une faible attraction à 0° .

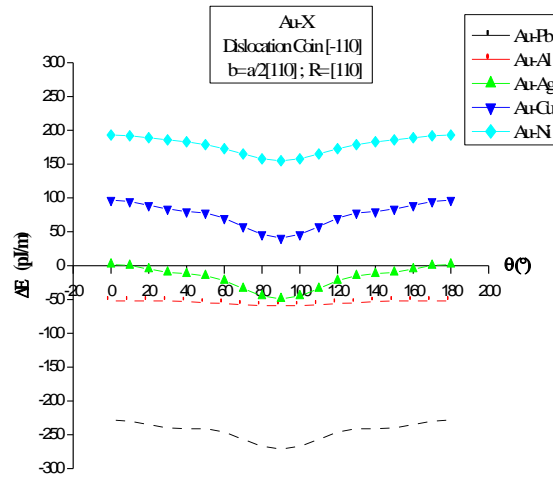


Figure 5.18 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin [1-10] dans les bicristaux Au-X.

- Pour le bicristal Au-Ag, l'énergie d'interaction est nulle pour les désorientations 0° et 10° .

c) Dislocation coin [1-11] : pour chaque bicristal, l'énergie d'interaction augmente avec la désorientation jusqu'à 30° , puis elle diminue jusqu'à 90° , figure 5.19. Les énergies d'interaction sont positives ou négatives, plus ou moins intenses selon les valeurs de $\Delta\mu$.

- Si $\Delta\mu > 1$, les valeurs les plus grandes sont obtenues pour la désorientation 30° et les plus petites sont obtenues pour 0° et 90° . La dislocation coin [1-11], subit une forte répulsion à 30° est une faible répulsion à 0° et à 90° .
- Si $\Delta\mu < -1$, les valeurs les plus grandes (en valeur absolue) sont obtenues pour les désorientations 0° et 90° et les plus petites sont obtenues pour 30° . La dislocation coin [1-11], subit une forte attraction à 0° et à 90° est une faible attraction à 30° .

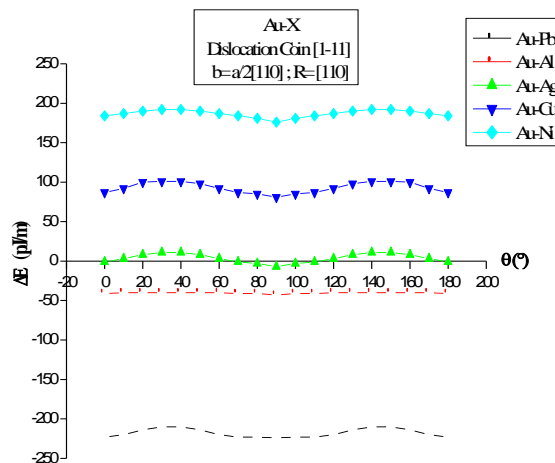


Figure 5.19 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin [1-11] dans les bicristaux Au-X.

- Pour le bicristal Au-Ag, l'énergie d'interaction élastique est nulle pour les désorientations 0° et 70° .

5.3.5 - Effet de la symétrie cristalline

Les énergies d'interaction maximales sont obtenues pour les dislocations qui appartiennent au plan (110) dont les dislocations coin.

Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour les dislocations qui appartiennent au plan (1-10) qui contient l'axe de rotation $R=[110]$, le vecteur de Burgers $\vec{b} = a/2[110]$, la dislocation vis $[110]$ et la dislocation coin $[001]$.

Les cartes d'isoénergie, Carte A.2.3.a-e en annexe 2, présentent deux symétries binaires, une par rapport à la trace du plan (110) et l'autre par rapport à la trace du plan (1-10) pour les désorientations 0° et 90° . Elles ne présentent qu'une seule symétrie binaire par rapport à la trace du plan (110) pour les désorientations comprises dans l'intervalle $[10^\circ, 80^\circ]$.

Pour les bicristaux Au-Al et Au-Ag, le nombre et le caractère des dislocations attirées ou repoussées dépend de la désorientation. Les dislocations pour lesquelles ΔE est nulle et par conséquent la force image aussi, sont celles qui se trouvent sur la ligne de contour zéro ($\Delta E = 0$), la frontière entre l'intervalle énergétique positif et l'intervalle énergétique négatif sur les cartes isoénergie, annexe 2. Le caractère de ces dislocations dépend de la nature des deux cristaux et de l'angle de la désorientation.

5.3.6 - Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image

a) Dislocation vis parfaite

La force de friction F_{PN} exercée sur une dislocation parfaite dans l'or a été calculée et présentée dans le tableau 5.2.

Les énergies interactions de la dislocation vis parfaite et les distances critiques pour les bicristaux Au-X sont présentés le tableau 5.10.

$$t = [110], \bar{b} = \frac{a}{2} [110] \text{ et } R = [110], \theta=0^\circ$$

Bicristal	Au-Pb	Au-Al	Au-Ag	Au-Cu	Au-Ni
ΔE (pJ/m)	-112	5	7	54	107
d_{c-p} (Å)	2719	121	170	1310	2598
d_{c-p} (b_p)	944	42	59	455	902

Tableau 5.10 : Energies d'interaction élastiques, ΔE , entre une dislocation vis parfaite et un joint interphase et les distances critiques, d_{c-p} , pour les bicristaux Au-X.

La courbe de variation de la force image et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance, d , et présentées dans les figures A.3.11-A.3.15 en annexe 3.

La distance critique la plus grande est obtenue pour le bicristal Au-Pb, $d_{c-p} = 944b_p$, dont l'énergie d'interaction élastique est la plus forte $\Delta E = -112$ pJ/m. La distance critique la plus petite est obtenue pour Au-Al, $d_{c-p} = 49b_p$, dont l'énergie d'interaction élastique, $\Delta E = 5$ pJ/m. La distance d'efficacité de la force image augmente avec l'augmentation de l'énergie d'interaction.

b) Dislocations partielles de Shockley

La force de friction, F_{PN} , exercée sur les deux dislocations partielles de Shockley dans l'or, a été calculée et présentée dans le tableau 5.4.

Les énergies d'interaction de la dislocation partielle de Shockley et les distances critiques pour les bicristaux étudiés sont présentées dans le tableau 5.11,

Les courbes de variation de la force image des deux partielles et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance dislocation-joint interphase, d , et présentées dans les figures A.3.11-A.3.15 en annexe 3.

$$t = [110], \vec{b}_{sh} = \frac{a}{6} \langle 211 \rangle, \text{ et } R = [110], \theta = 0^\circ$$

Bicristal	Au-Pb	Au-Al	Au-Ag	Au-Cu	Au-Ni
ΔE (pJ/m)	-48	-3	2	21	43
d_{c-sh1} (Å)	1198	75	49	524	1074
d_{c-sh1} (b_p)	416	26	17	182	373
d_{c-sh2} (Å)	1293	170	144	619	1169
d_{c-sh2} (b_p)	449	59	50	215	406

Tableau 5.11 : Energies d'interaction élastiques, ΔE , des dislocations partielles de Shockley, et les distances critiques, d_{c-sh1} et d_{c-sh2} , pour les bicristaux Au-X.

Les distances critiques les plus grandes $d_{c-sh1,2}$, sont obtenues pour le bicristal Au-Pb, $d_{c-sh1} = 416b_p$, $d_{c-sh2} = 449b_p$, dont l'énergie d'interaction élastique est la plus forte, $\Delta E = -48$ pJ/m. Les valeurs les plus petites sont obtenues pour Au-Ag, $d_{c-sh1} = 17b_p$, $d_{c-sh2} = 50b_p$, dont l'énergie d'interaction élastique est la plus faible, $\Delta E = 2$ pJ/m. Les distances d'efficacité de la force image augmentent avec l'augmentation de l'énergie d'interaction élastique.

c) Portée de la force image sur les dislocations dissociées

La courbe de la force image, F_{i-p} , et la droite de la force de friction de la F_{PN-p} sur la dislocation vis parfaite, avec les courbes des forces images, F_{i-sh1} et F_{i-sh2} , et la droite de la force de friction F_{PN-sh} sur les deux dislocations de Shockley, pour les bicristaux Au-X, sont regroupées dans les figures A.3.11-A.3.15 en annexe 3.

- Pour les bicristaux Au-X, X : Pb, Cu et Ni, les distances d'efficacité d_{c-sh1} et d_{c-sh2} sont plus petites que la distance d'efficacité d_{c-p} , figures A.3.11, 14, 15 en annexe 3.
- Pour les bicristaux Au-Al et Au-Ag $d_{c-sh1} < d_{c-p} < d_{c-sh2}$, figures A.3.12, 13 en annexe 3.

La dislocation vis parfaite est située à une distance d du joint interphase :

- Si $d_0 < d \leq d_{c-sh1}$, les dislocations dissociées sont mises en mouvement sous l'effet de leurs forces image. Pour les bicristaux Au-Pb et Au-Al, les forces image sont attractives, donc la distance d_{SF} augmente. Pour les bicristaux Au-X, X : Ag, Cu et Ni, les forces image sont attractives, donc la distance d_{SF} , diminue.

- Si $d_{c-Sh1} < d \leq d_{c-Sh2}$, la dislocation de Shockley 2 est mise en mouvement alors que la Shockley 1 reste immobile. Quand la force image F_{i-Sh2} est attractive, la distance, d_{SF} diminue. Quand la force image F_{i-Sh2} est répulsive la distance d_{SF} augmente.
- Si $d_{c-Sh2} < d$, il n'y a pas d'effet de la force image sur les dislocations dissociées.

5.4 - Bicristaux à base d'Argent Ag-X

Nous considérons les bicristaux Ag-X, X : Pb, Al, Au, Cu et Ni. Les dislocations étudiées sont situées dans le cristal 1, Ag, à une distance d du joint interphase

5.4.1 - Energies d'interaction extrêmes

Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction, ΔE_{\max} et ΔE_{\min} , et les lignes des dislocations correspondantes, sont présentées dans les tableaux A.1.16-A.1.20, et les figures A.1.16-A.1.20 en annexe 1.

- **Bicristal Ag-Pb**

L'énergie d'interaction maximale $\Delta E_{\max} = -114$ pJ/m est obtenue pour une dislocation mixte [22-1] et une désorientation 90° . La minimale, $\Delta E_{\min} = -276$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation coin [1-10] et une désorientation 90° tableau A.1.16.

Les énergies maximales sont obtenues, pour la vis [110] et les mixtes [22-1] et [221]. Les minimales sont obtenues, pour des coins [1-10], [2-21] et [1-12]. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte attraction et la mixte [22-1] subit la plus faible attraction. Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est attractive sur toutes les dislocations..

- **Bicristal Ag-Al**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = -1$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation mixte [221] et une désorientation 90° . La minimale, $\Delta E_{\min} = -62$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation coin [1-10] et une désorientation 90° , tableau A.1.17.

Les énergies maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour la vis [110] et les mixtes [221] et [22-1]. Les énergies minimales sont obtenues pour la dislocation coin [1-10]. Une forte attraction est obtenue pour la coin [1-10], et une faible attraction est obtenue pour la mixte [221].

Les énergies d'interaction sont très faibles et négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est attractive sur toutes les dislocations.

- **Bicristal Ag-Au**

L'énergie d'interaction maximale est positive, $\Delta E_{\max} = 41$ pJ/m, et obtenue pour une dislocation coin [001] et une désorientation 90° . La minimale est négative, $\Delta E_{\min} = -64$ pJ/m, pour une dislocation mixte [100] et une désorientation 90° . Les énergies extrêmes sont très faibles tableau A.1.18.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour des dislocations coin [1-12], [1-14], [1-13] et [001]. Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour les mixtes [210], [121], [311], [100] et [010].

L'énergie d'interaction peut être positive, négative ou nulle, donc la force image est répulsive, attractive ou nulle, selon le caractère de la dislocation et la désorientation. La dislocation coin [001] subit la plus forte répulsion, et la dislocation mixte [100] subit la plus forte attraction.

- **Bicristal Ag-Cu**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = 115$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation coin [001] et une désorientation 90° , la minimale, $\Delta E_{\min} = 13$ pJ/m, est obtenue pour une mixte [100] et 90° , tableau A.1.19.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour des dislocations coins [1-10], [001], [1-12] et [1-11]. Les minimales sont obtenues pour la dislocation vis [110] et les dislocations mixtes [121] et [100].

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, donc la force image est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [001] subit la plus forte répulsion et la dislocation mixte [100] subit la plus faible répulsion.

- **Bicristal Ag-Ni**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = 197$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation coin [1-10] et une désorientation 0° , la minimale, $\Delta E_{\min} = 110$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation vis [110]. Elle est constante pour toutes les désorientations, tableau A.1.19.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour des dislocations coins [1-10], [2-21], [1-12] et [1-14], et les minimales sont obtenues pour la dislocation vis [110].

Les énergies d'interaction élastiques extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, donc la force image est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte répulsion et la dislocation vis [110] subit la plus faible répulsion.

5.4.2 - Effet de la désorientation

- Pour les bictistaux, Ag-X, X : Pb, Al, Au et Cu, quand la désorientation augmente l'énergie d'interaction maximale augmente, et l'énergie d'interaction minimale diminue.

L'augmentation de la désorientation conduit à la l'augmentation de l'écart énergétique, figures A.1.16-A.1.19 en annexe1

- Pour le bicristal Ag-Ni : l'énergie d'interaction maximale diminue avec l'augmentation de la désorientation et la minimale reste constante, cette variation conduit à diminuer l'écart énergétique, figure A.1.16. La variation d'énergie est très faible, de l'ordre de quelques dizaines de pico Joule par mètre.
- Pour les bicristaux Ag-Al et Ag-Au, avec des écarts des modules de cisaillement négatifs $\Delta\mu = -0.73 \cdot 10^{10} \text{Pa}$ et $\Delta\mu = -0.28 \cdot 10^{10} \text{Pa}$, respectivement, le nombre des dislocations attirées diminue avec l'augmentation de la désorientation.

5.4.3 - Effet des modules de cisaillement

Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction obtenues dans l'intervalle des désorientations $[0^\circ, 90^\circ]$, et l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$, pour les bicristaux Ag-X, sont présentées dans le tableau 5.12.

	Bicristal	$\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$ (10^{10} Pa)	ΔE_{max} (pJ/m)	ΔE_{min} (pJ/m)
	Ag-Pb	-2.37	-114	-276
	Ag-Al	-0.73	-1	-62
Ag-X	Ag-Au	-0.28	41	-64
	Ag-Cu	2.08	115	13
	Ag-Ni	6.09	197	110

Tableau 5.12 : Energies d'interaction élastique extrêmes pour les bicristaux Ag-X,

a) *Sens de l'interaction élastique* : les bicristaux à base d'Argent ont des écarts des modules de cisaillement tels que:

- $\Delta\mu < -1$, le bicristal Ag-Pb a un cristal 1 plus dur que le cristal 2. Les énergies d'interaction entre les dislocations et les joints interphase sont négatives pour toutes les désorientations. La force image est répulsive sur toutes les dislocations.

- $-1 < \Delta\mu < 1$, les bicristaux Ag-Al et Ag-Au. Les matériaux constituant ces bicristaux ont des paramètres structuraux et élastiques très proches. L'énergie d'interaction peut être

positive, négative ou nulle. La force image sur les dislocations est répulsive, attractive ou nulle.

- $\Delta\mu > 1$, bicristaux Ag-Cu et Ag-Ni. Le cristal 1 est plus mou que le cristal 2. Les énergies d'interaction sont négatives pour toutes les désorientations. La force image est répulsive sur toutes les dislocations.

b) *Intensité de l'interaction élastique* : Les énergies extrêmes les plus petites sont obtenues pour le bicristal Ag-Pb, qui a l'écart le plus faible $\Delta\mu = -2.37 \cdot 10^{10} \text{Pa}$. Les valeurs les plus grandes sont obtenues pour le bicristal Ag-Ni, qui a l'écart le plus grand $\Delta\mu = 6.09 \cdot 10^{10} \text{Pa}$. L'énergie d'interaction élastique est très faible pour les bicristaux Ag-Al et Ag-Au, qui ont un écart $|\Delta\mu|$, inférieur à l'unité, $\Delta\mu = -0.73 \cdot 10^{10} \text{Pa}$ et $\Delta\mu = -0.28 \cdot 10^{10} \text{Pa}$, respectivement.

Les énergies d'interaction élastiques extrêmes augmentent avec l'augmentation de l'écart des modules de cisaillement.

5.4.4- Effet du caractère de la dislocation

a) **Dislocation vis parfaite [110]** : l'énergie d'interaction est constante pour toutes les désorientations. Elle est négative pour les bicristaux avec $\Delta\mu < -1$, et positive pour les bicristaux avec $\Delta\mu > 1$. Les énergies d'interaction pour les bicristaux Ag-Al et Ag-Au sont très proches et très faible, $\Delta E_{\text{Ag-Al}} = -3 \text{pJ/m}$ et $\Delta E_{\text{Ag-Au}} = -8 \text{pJ/m}$ figure 5.20.

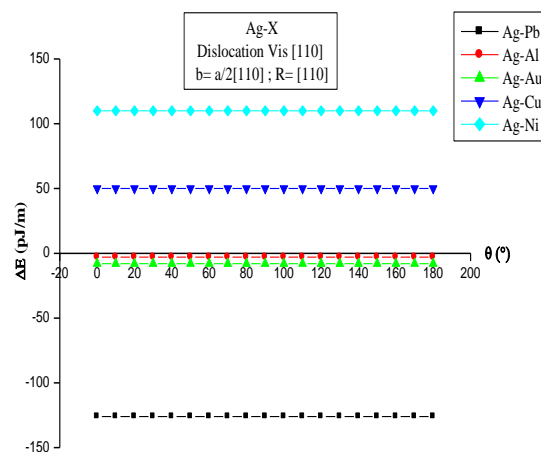


Figure 5.20 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation vis parfaite [110] dans les bicristaux Ag-X.

Dans chaque bicristal Ag-X, la dislocation vis parfaite est repoussée ou attirée avec la même intensité de la force image quelque soit la désorientation. Si cette dislocation se trouve dans les bicristaux Ag-Al ou Ag-Au, la force image est presque nulle.

b) Dislocation coin [1-10] : l'énergie d'interaction élastique diminue lentement pour les valeurs de θ inférieures à 40° , puis plus rapidement jusqu'à 90° . Elle est positive ou négative, plus ou moins intense, selon les valeurs de $\Delta\mu$, figure 5.21.

- Si $\Delta\mu > 1$, les énergies d'interaction les plus grandes sont obtenues pour la désorientation 0° , et les plus petites pour la désorientation 90° . La dislocation coin [1-10] subit une forte répulsion à 0° et une faible répulsion à 90° .
- Si $\Delta\mu < -1$, les énergies d'interaction les plus grandes (en valeur absolue) sont obtenues pour la désorientation 90° , et les plus petites pour la désorientation 0° . La dislocation coin [1-10] subit une forte attraction à 90° et une faible attraction à 0° .
- Pour le bicristal Ag-Au, l'énergie d'interaction élastique est nulle pour les désorientations 0° et 10° .

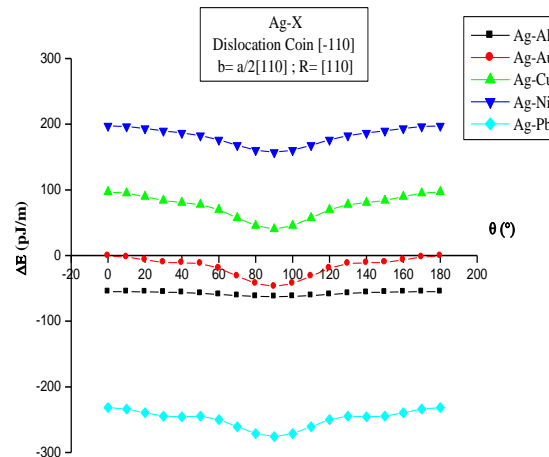


Figure 5.21 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin [1-10] dans les bicristaux Ag-X.

c) Dislocation coin [1-11] : pour chaque bicristal, l'énergie d'interaction augmente avec l'augmentation de θ jusqu'à 30° , puis elle diminue jusqu'à 90° , figure 5.22. Les énergies d'interaction sont positives ou négatives, plus ou moins intenses, selon les valeurs de $\Delta\mu$.

- Si $\Delta\mu > 1$, les valeurs les plus grandes sont obtenues pour la désorientation 30° et les plus petites sont obtenues pour les désorientations 0° et 90° . La dislocation coin $[1-11]$, subit une forte répulsion à 30° est une faible répulsion à 0° et à 90° .
- Si $\Delta\mu < -1$, les valeurs les plus grandes (en valeur absolue) sont obtenues pour les désorientations 0° et 90° et les plus petites sont obtenues pour la désorientation 30° . La dislocation coin $[1-11]$, subit une forte attraction à 0° et à 90° est une faible attraction à 30° .
- Pour le bicristal Ag-Au, l'énergie d'interaction élastique est nulle pour les désorientations, $\theta = 0^\circ$ et $\theta \in [70^\circ, 90^\circ]$.

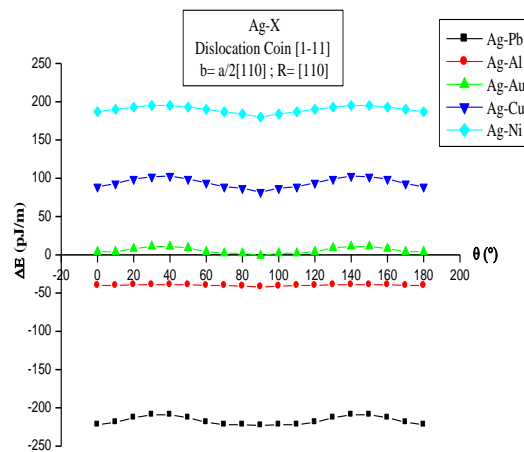


Figure 5.22 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin $[1-11]$ dans les bicristaux Ag-X.

5.4.5 - Effet de la symétrie cristalline

Les cartes d'isoénergie, Carte A.2.4.a-e en annexe 2, présentent deux symétries binaires, une par rapport au plan (110) et l'autre par rapport au plan $(1-10)$ pour les désorientations 0° et 90° . Elles ne présentent qu'une seule symétrie binaire par rapport au plan (110) pour les désorientations comprises dans l'intervalle $[10^\circ, 80^\circ]$.

Pour les bicristaux Ag-Al et Ag-Au, avec $-1 < \Delta\mu < 1$, le nombre et le caractère des dislocations attirées ou repoussées dépend de la désorientation. Les dislocations pour lesquelles ΔE est nulle et par conséquent la force image aussi, sont celles qui se trouvent sur la ligne de contour zéro ($\Delta E = 0$), la frontière entre l'intervalle énergétique positif et l'intervalle énergétique négatif sur les cartes isoénergie, annexe 2. Le caractère de ces dislocations dépend de la nature des deux cristaux et de la désorientation.

5.4.6 - Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image

a) Dislocation vis parfaite

La force de friction F_{PN} exercée sur une dislocation parfaite dans l'Argent a été calculée et présentée dans le tableau 5.2.

Les énergies d'interaction de la dislocation vis parfaite et les distances critiques pour les bicristaux Ag-X sont présentées dans le tableau 5.13.

$t = [110], \vec{b} = \frac{a}{2} [110]$ et $R = [110], \theta=0^\circ$					
Bicristal	Ag-Pb	Ag-Al	Ag-Au	Ag-Cu	Ag-Ni
ΔE (pJ/m)	-126	-3	-8	50	110
d_{c-p} (Å)	1072	26	69	425	936
d_{c-p} (b_p)	371	9	24	147	324

Tableau 5.13 : Energies d'interaction élastiques, ΔE , entre une dislocation vis parfaite et un joint interphase et les distances critiques, d_{c-p} , pour les bicristaux Ag-X.

La courbe de variation de la force image et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance, d , et présentées dans les figures A.3.16-A.3.20 en annexe 3.

La distance critique la plus grande est obtenue pour le bicristal Ag-Pb, $d_{c-p} = 371b_p$, dont l'énergie d'interaction élastique est la plus forte $\Delta E = -126$ pJ/m. La distance critique la plus petite est obtenue pour les bicristaux Ag-Al, $d_{c-p} = 9b_p$, dont l'énergie d'interaction est $\Delta E = -3$ pJ/m. La distance d'efficacité de la force image augmente avec l'augmentation de l'énergie d'interaction.

b) Dislocations partielles de Shockley

La force de friction, F_{PN} , exercée sur les deux dislocations partielles de Shockley dans l'argent, a été calculée et présentée dans le tableau 5.4.

Les énergies d'interaction de la dislocation partielle de Shockley, et les distances critiques, pour les bicristaux étudiés sont présentées dans le tableau 5.14,

$$t = [110], \bar{b}_{sh} = \frac{a}{6} \langle 211 \rangle, \text{ et } R = [110], \theta = 0^\circ$$

Bicristal	Ag-Pb	Ag-Al	Ag-Au	Ag-Cu	Ag-Ni
ΔE (pJ/m)	-52	-4	-2	21	44
d_{c-sh1} (Å)	500	38	20	202	422
d_{c-sh1} (b_p)	173	13	7	70	146
d_{c-sh2} (Å)	514	52	35	217	436
d_{c-sh2} (b_p)	178	18	12	75	151

Tableau 5.14 : Energies d'interaction élastiques, ΔE , des dislocations partielles de Shockley, et les distances critiques, d_{c-sh1} et d_{c-sh2} , pour les bicristaux Ag-X.

Les courbes de variation de la force image des deux partielles et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance dislocation-joint interphase, d , et présentées dans les figures A.3.16-A.3.20 en annexe 3.

Les distances critiques les plus grandes $d_{c-sh1,2}$, sont obtenues pour le bicristal Ag-Pb, $d_{c-sh1} = 173b_p$, $d_{c-sh2} = 178b_p$, dont l'énergie d'interaction est la plus forte, $\Delta E = -52$ pJ/m. Les valeurs les plus petites sont obtenues pour Ag-Au, $d_{c-sh1} = 7b_p$, $d_{c-sh2} = 12b_p$, dont l'énergie d'interaction est la plus faible, $\Delta E = -2$ pJ/m. Les distances d'efficacité de la force image augmentent avec l'augmentation de l'énergie d'interaction élastique.

c) Efficacité de la force image sur les dislocations dissociées

La courbe de la force image, F_{i-p} , et la droite de la force de friction de la force de friction F_{PN-p} sur la dislocation vis parfaite, avec les courbes des forces images, F_{i-sh1} et F_{i-sh2} , et la droite de la force de friction F_{PN-sh} sur les deux dislocations de Shockley, pour les bicristaux Ag-X, sont regroupées dans les figures A3.16-A3.20 en annexe 3.

- Pour les bicristaux Ag-X, X : Pb, Au, Cu et Ni, les distances d'efficacité d_{c-sh1} et d_{c-sh2} sont plus petites que la distance d'efficacité d_{c-p} , figures A3.16, 18-20 en annexe 3.
- Pour le bicristal Ag-Al, les distances d'efficacité d_{c-sh1} et d_{c-sh2} sont plus grandes que la distance d'efficacité d_{c-p} figure A3.17 en annexe 3.

La dislocation vis parfaite est située à une distance d du joint interphase :

• Si $d_0 < d \leq d_{c-Sh1}$, les dislocations dissociées se mettent en mouvement sous l'effet de leurs forces image, avec $F_{i-Sh1} > F_{i-Sh2}$. Pour les bicristaux Ag-Pb, Ag-Al et Ag Au, les forces image sont attractives, la distance d_{SF} augmente. Pour les bicristaux Ag-Cu et Ag-Ni, les forces image sont répulsives, la distance d_{SF} diminue.

• Si $d_{c-Sh1} < d \leq d_{c-Sh2}$, la dislocation de Shockley 2 est mise en mouvement alors que la Shockley 1 reste immobile. Quand la force image F_{i-Sh2} est attractive, la distance, d_{SF} diminue. Quand la force image F_{i-Sh2} est répulsive la distance d_{SF} augmente.

• Si $d_{c-Sh2} < d$, aucun effet de la force image sur les dislocations dissociées.

5.5 - Bicristaux à base de Cuivre Cu-X

Nous considérons les bicristaux Cu-X, X : Pb, Al, Au, Ag et Ni. Les dislocations étudiées sont situées dans le cristal 1, Cu, à une distance d du joint interphase

5.5.1 - Energies d'interaction extrêmes

Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction élastiques, ΔE_{\max} et ΔE_{\min} , et les lignes des dislocations correspondantes, sont présentées dans les tableaux A.1.21-A.1.25, et les figures A.1.21-A.1.25 en annexe 1.

- **Bicristal Cu-Pb**

L'énergie d'interaction maximale $\Delta E_{\max} = -183 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour une dislocation mixte [22-1] et une désorientation 90° , et la minimale, $\Delta E_{\min} = -397 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour une dislocation coin [1-10] et une désorientation 90° tableau A.1.21.

Les énergies d'interaction maximales sont obtenues, pour la dislocation vis [110] et les dislocations mixtes [22-1] et [331]. Les minimales sont obtenues, pour la coin [1-10].

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est attractive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte attraction et la dislocation mixte [22-1] subit la plus faible attraction.

- **Bicristal Cu-Al**

L'énergie d'interaction élastique maximale, $\Delta E_{\max} = -64 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour une dislocation mixte [22-1] et une désorientation 90° . La minimale, $\Delta E_{\min} = -186 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour une dislocation coin [1-10] et une désorientation 90° , tableau A.1.22.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour la dislocation vis [110] et les dislocations mixtes [22-1]. Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour la dislocation coin [1-10].

Les énergies d'interaction sont négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est attractive sur toutes les dislocations. La plus forte attraction est obtenue pour la dislocation coin [1-10], et la plus faible attraction est obtenue pour la dislocation mixte [22-1].

- **Bicristal Cu-Au**

L'énergie d'interaction élastique maximale, $\Delta E_{\max} = -39 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour la dislocation coin [001] et une désorientation 90° . La minimale, $\Delta E_{\min} = -172 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour la dislocation mixte [010] et une désorientation 90° , tableau A.1.23.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour la dislocation coin et [001] et les dislocations mixtes [22-1] et [11-1]. Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour les dislocations coins [1-10] et [1-12] et la dislocation mixte [010].

Les énergies d'interaction sont négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est attractive sur toutes les dislocations. La plus forte attraction est obtenue pour la dislocation mixte [010], et la plus faible attraction est obtenue pour la dislocation coin [001].

- **Bicristal Cu-Ag**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = -37$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation coin [001] et une désorientation 90° , la minimale, $\Delta E_{\min} = -175$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation coin [1-10] et une désorientation 90° , tableau A.1.24.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour les dislocations [110], [1-11], [001], [22-1] et [111]. Les énergies d'interaction élastiques minimales pour chaque désorientation sont obtenues pour les dislocations coins [1-10], [1-12], [1-13] et [-221].

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte attraction et la dislocation coin [001] subit la plus faible attraction.

- **Bicristal Cu-Ni**

L'énergie d'interaction élastique maximale, $\Delta E_{\max} = 151$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation coin [001] et une désorientation 90° , la minimale, $\Delta E_{\min} = 45$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation mixte [100] et une désorientation 90° .

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour les dislocations coins [1-10], [2-21], [1-12], [1-13], [001] et [1-11], et les minimales sont obtenues pour la dislocation vis [110] et les dislocations mixtes [210], [211], [100] et [010].

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours positives quelque soit la désorientation, donc la force image est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [001] subit la plus forte répulsion et la dislocation mixte [100] subit la plus faible répulsion.

5.5.2 - Effet de la désorientation

Quand la désorientation augmente, les énergies d'interaction extrêmes varient lentement jusqu'à 30° puis plus rapidement jusqu'à 90° . L'énergie d'interaction maximale

augmente, et la minimale diminue. L'augmentation de la désorientation conduit à la l'augmentation de l'écart énergétique, figures A.1.21-A.1.25 en annexe 1.

La variation d'énergie est très faible, elle est de l'ordre de quelques dizaines de pico Joule par mètre.

5.5.3 - Effet des modules de cisaillement

Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction obtenues dans l'intervalle des désorientations $[0^\circ, 90^\circ]$, et l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu=\mu_2-\mu_1$, pour les bicristaux Cu-X, sont représentées dans le tableau 5.15.

	Bicristal	$\Delta\mu=\mu_2-\mu_1$ (10^{10} Pa)	ΔE_{\max} (pJ/m)	ΔE_{\min} (pJ/m)
Cu-X	Cu-Pb	-4.45	-183	-397
	Cu-Al	-2.81	-64	-186
	Cu-Au	-2.36	-39	-172
	Cu-Ag	-2.08	-37	-175
	Cu-Ni	4.01	151	45

Tableau 5.15 : Energies d'interaction élastique extrêmes, maximale et minimale entre les dislocations et les joints interphase dans les bicristaux Cu-X,

a) *Sens de l'interaction élastique* : les bicristaux à base de Cuivre ont des écarts des modules de cisaillement tels que:

- $\Delta\mu.<-1$, les bicristaux Cu-X, X : Pb, Al, Au et Ag, caractérisés par un cristal 1 plus dur que le cristal 2. Les énergies d'interaction sont négatives pour toutes les désorientations. La force image est attractive sur toutes les dislocations.

- $\Delta\mu.>1$, le bicristal Cu-Ni, caractérisé par un cristal 1 plus mou que le cristal 2. Les énergies d'interaction sont positives pour toutes les désorientations. La force image est répulsive sur toutes les dislocations.

b) *Intensité de l'interaction élastique* : Les énergies extrêmes les plus petites sont obtenues pour le bicristal Cu-Pb, qui a l'écart le plus faible $\Delta\mu=-4.45 \cdot 10^{10}$ Pa. Les valeurs les plus grandes sont obtenues pour le bicristal Cu-Ni, qui a l'écart le plus grand en $\Delta\mu=4.01 \cdot 10^{10}$ Pa.

5.5.4 - Effet du caractère de la dislocation

a) **Dislocation vis parfaite [110]** : l'énergie d'interaction est constante pour toutes les désorientations. Elle est négative pour les bicristaux avec $\Delta\mu < -1$, et positive pour les bicristaux avec $\Delta\mu > 1$. Les énergies d'interaction pour les bicristaux, Cu-Al, Cu-Ag et Cu-Au sont très proches, figure 5.23.

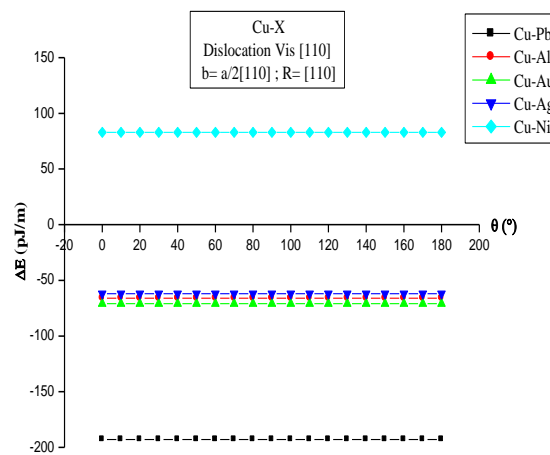


Figure 5.23 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation vis parfaite [110] dans les bicristaux Cu-X.

Pour chaque bicristal Cu-X, la dislocation vis parfaite est repoussée ou attirée avec la même intensité de la force image quelque soit la désorientation.

b) **Dislocation coin [1-10]** : l'énergie d'interaction diminue lentement pour les valeurs de θ inférieures à 40° , puis plus rapidement jusqu'à 90° , figure 5.24. Elle est positive ou négative selon les valeurs de $\Delta\mu$.

- Si $\Delta\mu > 1$, les énergies d'interaction les plus grandes sont obtenues pour la désorientation 0° , et les plus petites pour la désorientation 90° . La dislocation coin [1-10] subit une forte répulsion à 0° et une faible répulsion à 90° .
- Si $\Delta\mu < -1$, les énergies d'interaction les plus grandes (en valeur absolue) sont obtenues pour la désorientation 90° , et les plus petites pour la désorientation 0° . La dislocation coin [1-10] subit une forte attraction à 90° et une faible attraction à 0° .

Les énergies d'interaction pour les bicristaux Cu-Au et Cu-Ag sont égales pour chaque désorientation.

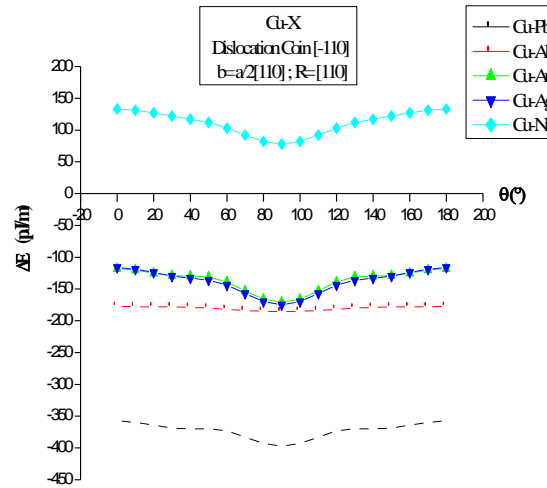


Figure 5.24 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin [1-10] dans les bicristaux Cu-X.

c) **Dislocation coin [1-11]** : pour chaque bicristal, l'énergie d'interaction élastique augmente avec l'augmentation de θ jusqu'à 30° , puis elle diminue jusqu'à 90° , figure 5.25.

Les énergies d'interaction élastiques sont positives ou négatives selon les valeurs de $\Delta\mu$.

- Si $\Delta\mu > 1$, les valeurs les plus grandes sont obtenues pour la désorientation 30° et les plus petites sont obtenues pour les désorientations 0° et 90° . La dislocation coin [1-11], subit une forte répulsion à 30° est une faible répulsion à 0° et à 90° .

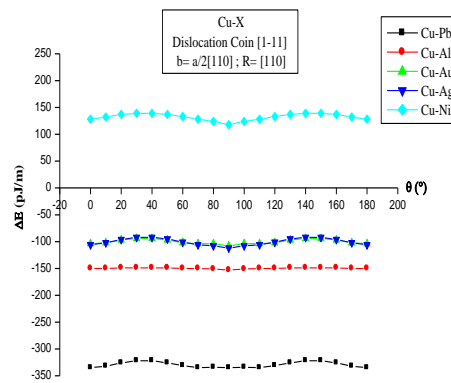


Figure 5.25 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin [1-11] dans les bicristaux Cu-X

- Si $\Delta\mu < -1$, les valeurs les plus grandes (en valeur absolue) sont obtenues pour les désorientations 0° et 90° et les plus petites sont obtenues pour la désorientation 30° . La dislocation coin $[1-11]$, subit une forte attraction à 0° et à 90° est une faible attraction à 30° . Pour les bicristaux Cu-Au et Cu-Ag, les énergies d'interaction sont identiques.

5.5.5- Effet de la symétrie cristalline

Les énergies d'interaction maximales sont obtenues pour les dislocations qui appartiennent au plan (110) lequel contient les dislocations coins.

Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour les dislocations qui appartiennent au plan (1-10) qui contient l'axe de rotation $R=[110]$, au vecteurs de Burgers $\vec{b} = a/2[110]$, la dislocation vis $[110]$ et la dislocation coin $[001]$.

Les cartes d'isoénergie, Carte A.2.5.a-e en annexe 2, présentent deux symétries binaires, une par rapport au plan (110) et l'autre par rapport à (1-10) pour les désorientations 0° et 90° . Elles ne présentent qu'une seule symétrie binaire par rapport à (110) pour les désorientations comprises dans l'intervalle $[10^\circ, 80^\circ]$.

5.5.6 - Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image

a) Dislocation vis parfaite

La force de friction F_{PN} exercée sur une dislocation parfaite dans le Cuivre a été calculée et présentée dans le tableau 5.2.

Les énergies d'interaction de la dislocation vis parfaite, et les distances critiques, pour les bicristaux Cu-X sont présentées dans le tableau 5.16.

$t = [110], \vec{b} = \frac{a}{2} [110] \text{ et } R = [110], \theta=0^\circ$					
Bicristal	Cu-Pb	Cu-Al	Cu-Au	Cu-Ag	Cu-Ni
ΔE (pJ/m)	-193	-66	-71	-62	83
d_{c-p} (Å)	750	255	275	240	321
d_{c-p} (b_p)	294	100	108	94	126

Tableau 5.16 : Energies d'interaction élastiques, ΔE , entre une dislocation vis parfaite et un joint interphase et les distances critiques, d_{c-p} , pour les bicristaux Cu-X.

La courbe de variation de la force image et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance, d , et présentées dans les figures A.3.21-A.3.25 en annexe 3.

La distance critique la plus grande est obtenue pour le bicristal Cu-Pb, $d_{c-p} = 294b_p$, dont l'énergie d'interaction est la plus forte $\Delta E = -193$ pJ/m. La distance critique la plus petite est obtenue pour les bicristaux Cu-Ag, $d_{c-p} = 94b_p$, dont l'énergie d'interaction est $\Delta E = -62$ pJ/m.

b) Dislocations partielles de Shockley

La force de friction, F_{PN} , exercée sur les deux dislocations partielles de Shockley dans le Cuivre, a été calculée et présentée dans le tableau tableau 5.4.

Les énergies d'interaction de la dislocation de partielle de Shockley, et les distances critiques, pour les bicristaux étudiés sont présentées dans le tableau 5.17,

Les courbes de variation de la force image des deux partielles et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance dislocation-joint interphase, d , et présentées dans les figures A.3.21-A.3.25 en annexe 3.

$$t = [110], \vec{b}_{sh} = \frac{a}{6} \langle 211 \rangle, \text{ et } R = [110], \theta = 0^\circ$$

Bicristal	Cu-Pb	Cu-Al	Cu-Au	Cu-Ag	Cu-Ni
ΔE (pJ/m)	-78	-30	-27	-25	32
d_{c-sh1} (Å)	357	138	125	115	148
d_{c-sh1} (b_p)	140	54	49	45	58
d_{c-sh2} (Å)	367	148	135	125	158
d_{c-sh2} (b_p)	144	58	53	49	62

Tableau 5.17 : Energies d'interaction élastiques, ΔE , des dislocations partielles de Shockley, et les distances critiques, d_{c-sh1} et d_{c-sh2} , pour les bicristaux Cu-X.

Les distances critiques les plus grandes $d_{c-sh1,2}$, sont obtenues pour le bicristal Cu-Pb, $d_{c-sh1} = 140b_p$, $d_{c-sh2} = 144b_p$, dont l'énergie d'interaction élastique est la plus forte, $\Delta E = -78$ pJ/m. Les valeurs les plus petites sont obtenues pour Cu-Ag, $d_{c-sh1} = 45b_p$, $d_{c-sh2} = 49b_p$, dont l'énergie d'interaction élastique est la plus faible, $\Delta E = -25$ pJ/m.

c) Effet de la force image sur les dislocations dissociées

La courbe de la force image, F_{i-p} , et la droite de la force de friction de la F_{PN-p} sur la dislocation vis parfaite, avec les courbes des forces images, F_{i-Sh1} et F_{i-Sh2} , et la droite de la force de friction F_{PN-Sh} sur les deux dislocations de Shockley, pour les bicristaux Ag-X, sont regroupées dans les figures A3.21-A3.25 en annexe 3.

Pour chaque bicristal, les distances d'efficacité d_{c-Sh1} et d_{c-Sh2} sont plus petites que la distance d'efficacité d_{c-p} , figures A3.21, A.3.25 en annexe 3.

La dislocation vis parfaite est située à une distance d du joint interphase :

- Si $d_0 < d \leq d_{c-Sh1}$, pour les bicristaux Cu-X, X : Pb, Al, Ag, Au, les forces image sont attractives, la distance d_{SF} augmente. Pour le bicristal Cu-Ni, la force image est répulsive, la distance d_{SF} diminue.

- Si $d_{c-Sh1} < d \leq d_{c-Sh2}$, quand la force image F_{i-Sh2} est attractive, la distance, d_{SF} diminue. Quand la force image F_{i-Sh2} est répulsive la distance d_{SF} augmente.

- Si $d_{c-Sh2} < d$, aucun effet de la force image sur les dislocations dissociées.

5.6 - Bicristaux à base de Nickel Ni-X

Nous considérons les bicristaux Ni-X, X : Pb, Al, Au, Ag et Cu. Les dislocations étudiées sont situées dans le cristal 1, Ni, à une distance d du joint interphase

5.6.1 - Energies d'interaction extrêmes

Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction, ΔE_{\max} et ΔE_{\min} , et les lignes des dislocations correspondantes, sont présentées dans les tableaux A.1.26-A.1.30, et les figures A.1.26-A.1.30 en annexe 1.

- **Bicristal Ni-Pb**

L'énergie d'interaction maximale $\Delta E_{\max} = -395 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour une dislocation mixte [22-1] et une désorientation 90° , et la minimale, $\Delta E_{\min} = -701 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour une dislocation coin [1-10] pour une désorientation 90° tableau A.1.26.

Les énergies d'interaction élastiques maximales sont obtenues, pour la dislocation vis [110] et les dislocations mixtes [221] et [22-1]. Les minimales sont obtenues, pour la dislocation coin [1-10].

Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est attractive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte attraction et la dislocation mixte [22-1] subit la plus faible attraction.

- **Bicristal Ni-Al**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = -244 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour la dislocation mixte [22-1] et une désorientation 90° . La minimale, $\Delta E_{\min} = -457 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour une dislocation coin [1-10] et une désorientation 90° , tableau A.1.27.

Les énergies d'interaction maximales sont obtenues, pour la dislocation vis [110] et les dislocations mixtes [221] et [22-1]. Les minimales sont obtenues, pour les coins [1-10].

Les énergies d'interaction sont négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est attractive sur toutes les dislocations. La plus forte attraction est obtenue pour la dislocation coin [1-10], et la plus faible attraction est obtenue pour la dislocation mixte [22-1].

- **Bicristal Ni-Au**

L'énergie d'interaction élastique maximale, $\Delta E_{\max} = -214 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour la dislocation mixte [-1-11] et une désorientation 90° . La minimale, $\Delta E_{\min} = -440 \text{ pJ/m}$, est obtenue pour la dislocation coin [1-10] et une désorientation 90° , tableau A.1.28.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour la dislocation vis [110] et les dislocations mixtes [-1-11] et [111]. Les énergies d'interaction minimales sont obtenues pour les dislocations coins [1-10] et [1-11] et la [2-21].

Les énergies d'interaction élastiques sont négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est attractive sur toutes les dislocations. La plus forte attraction est obtenue pour la dislocation coin [1-10], et la plus faible attraction est obtenue pour la dislocation mixte [-1-11].

- **Bicristal Ni-Ag**

L'énergie d'interaction élastique maximale, $\Delta E_{\max} = -206$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation mixte [-1-11] et une désorientation 90° , la minimale, $\Delta E_{\min} = -444$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation coin [1-10] et une désorientation 90° , tableau A.1.29.

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour les dislocations [110], [-1-11], [221] et [111]. Les énergies d'interaction élastiques minimales pour chaque désorientation sont obtenues pour les dislocations coins [1-10], [1-11] et [-221]. Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est répulsive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte répulsion et la dislocation mixte [-1-11] subit la plus faible répulsion.

- **Bicristal Ni- Cu**

L'énergie d'interaction maximale, $\Delta E_{\max} = -98$ pJ/m, est obtenue pour une dislocation coin [001] et une désorientation 90° , la minimale, $\Delta E_{\min} = -304$ pJ/m, est obtenue pour la dislocation coin [1-10] et une désorientation 90° .

Les énergies d'interaction maximales pour chaque désorientation, sont obtenues pour les dislocations [110], [-121], [111], [-1-11] et [001], et les minimales sont obtenues pour les dislocations coins [1-10], [2-21], [1-12], [331] et [1-11]. Les énergies d'interaction extrêmes sont toujours négatives quelque soit la désorientation, donc la force image est attractive sur toutes les dislocations. La dislocation coin [1-10] subit la plus forte attraction et la coin [001] subit la plus faible attraction.

5.6.2 - Effet de la désorientation

Quand la désorientation augmente, l'énergie d'interaction maximale augmente, et la minimale diminue. L'augmentation de la désorientation conduit à la l'augmentation de l'écart énergétique, figures A.1.26-A.1.30 en annexe1

Les énergies d'interaction extrêmes varient lentement pour des faibles désorientations $[0^\circ, 30^\circ]$, et plus rapidement pour les grandes désorientations $[40^\circ, 90^\circ]$.

La variation d'énergie est très faible, de l'ordre de quelques dizaines de pico Joule par mètre.

5.6.3 - Effet des modules de cisaillement

Les valeurs extrêmes des énergies d'interaction obtenues dans l'intervalle des désorientations $[0^\circ, 90^\circ]$, et l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$, pour les bicristaux Ni-X, sont représentées dans le tableau 5.18.

	Bicristal	$\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$ (10^{10} Pa)	ΔE_{\max} (pJ/m)	ΔE_{\min} (pJ/m)
	Ni-Pb	-8.46	-395	-701
	Ni-Al	-6.82	-244	-457
Ni-X	Ni-Au	-6.37	-214	-440
	Ni-Ag	-6.09	-206	-444
	Ni-Cu	-4.01	-98	-304

Tableau 5.18 : Energies d'interaction élastique extrêmes pour les bicristaux Ni-X,

a) *Sens de l'interaction élastique* : les bicristaux Ni-X, X : Pb, Al, Au, Ag et Cu ont des écarts des modules de cisaillement $\Delta\mu < -1$. Ces bicristaux ont un cristal 1 plus dur que le cristal 2. Les énergies d'interaction sont négatives pour toutes les désorientations. La force image est attractive sur toutes les dislocations.

b) *Intensité de l'interaction élastique* : Les énergies extrêmes les plus petites sont obtenues pour le bicristal Ni-Pb, qui a l'écart le plus faible $\Delta\mu = -8.46 \cdot 10^{10}$ Pa. Les valeurs les plus grandes sont obtenues pour le bicristal Ni-Cu, qui a l'écart le plus grand $\Delta\mu = -4.01 \cdot 10^{10}$ Pa.

c) Les énergies d'interaction élastiques extrêmes augmentent avec l'augmentation de l'écart des modules de cisaillement.

5.6.4 - Effet du caractère de la dislocation

a) **Dislocation vis parfaite [110]** : l'énergie d'interaction est négative et constante pour toutes les désorientations. Les énergies d'interaction pour les bicristaux, Ni-Al, Ni-Au et Ni-Ag sont très proches, figure 5.26.

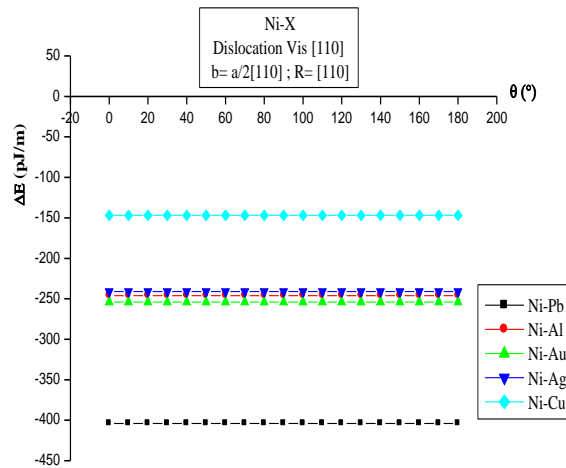


Figure 5.26 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation vis parfaite [110] dans les bicristaux Ni-X.

Pour chaque bicristal Ni-X, la dislocation vis parfaite est attirée avec la même intensité de la force image quelque soit la désorientation.

b) Dislocation coin [1-10] : l'énergie d'interaction est négative, elle diminue lentement pour les valeurs de θ inférieures à 40° , puis plus rapidement jusqu'à 90° , figure 5.27. Elle est négative.

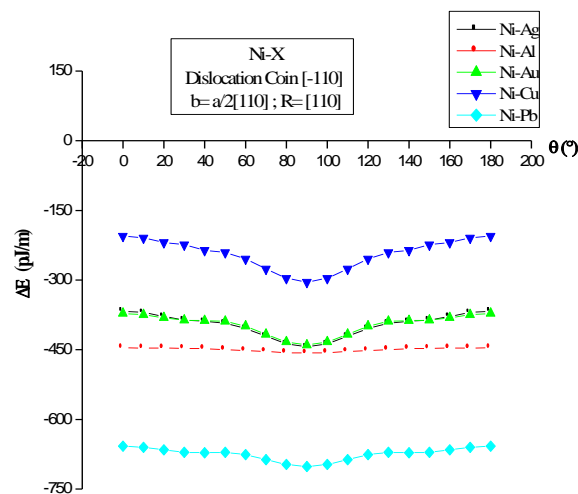


Figure 5.27 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin [1-10] dans les bicristaux Ni-X.

Les énergies d'interaction les plus grandes (en valeur absolue) sont obtenues pour la désorientation 90° , et les plus petites pour la désorientation 0° . La dislocation coin $[1-10]$ subit une forte attraction à 90° et une faible attraction à 0°

Les énergies d'interaction élastiques, pour les bicristaux Ni-Au et Ni-Ag, sont égales pour chaque désorientation.

c) Dislocation coin $[1-11]$: pour chaque bicristal, l'énergie d'interaction élastique est négative, elle augmente avec l'augmentation de θ jusqu'à 30° , puis elle diminue jusqu'à 90° , figure 5.28.

Les valeurs les plus grandes (en valeur absolue) sont obtenues pour les désorientations 0° et 90° et les plus petites sont obtenues pour la désorientation 30° . La dislocation coin $[1-11]$, subit une forte attraction à 0° et à 90° est une faible attraction à 30° .

Pour le bicristal Ni-Au et Ni-Ag, les énergies d'interaction sont identiques.

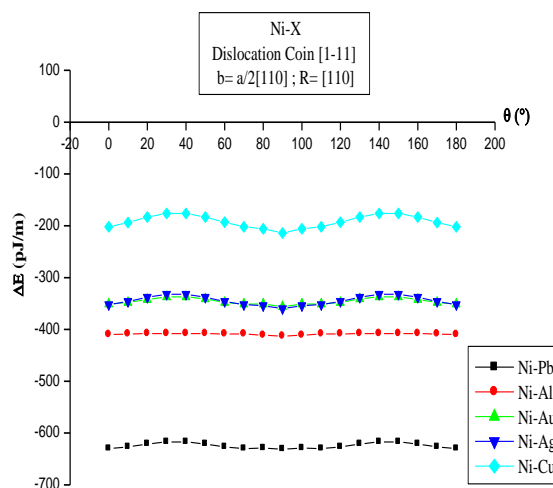


Figure 5.28 : Energie d'interaction élastique en fonction de la désorientation entre les deux cristaux pour une dislocation coin $[1-11]$ dans les bicristaux Ni-X.

5.6.5 - Effet de la symétrie cristalline

Les énergies d'interaction maximales sont obtenues pour les dislocations qui se trouvent sur la trace du plan (110) qui contient les dislocations coins. Les énergies minimales sont obtenues pour les dislocations qui appartiennent au plan $(1-10)$ qui contient l'axe de rotation $R=[110]$, le vecteurs de Burgers $\vec{b} = a/2[110]$, la dislocation vis $[110]$ et la dislocation coin $[001]$.

Les cartes d'isoénergie, Carte A.2.6.a-e en annexe 2, présentent deux symétries binaires, une par rapport au plan (110) et l'autre par rapport au plan (1-10) pour les désorientations 0° et 90° . Elles ne présentent qu'une seule symétrie binaire par rapport à (110) pour les désorientations comprises dans l'intervalle $[10^\circ, 80^\circ]$.

5.6.6- Mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image

a) Dislocation vis parfaite

La force de friction F_{PN} exercée sur une dislocation parfaite dans le Nickel, Ni, a été calculée et présentée dans le tableau 5.2.

Les énergies interactions élastiques de la dislocation vis parfaite, et les distances critiques, pour les bicristaux Ni-X sont présentées dans le tableau 5.19.

$t = [110], \vec{b} = \frac{a}{2} [110]$ et $R = [110], \theta=0^\circ$					
Bicristal	Ni-Pb	Ni-Al	Ni-Au	Ni-Ag	Ni-Cu
ΔE (pJ/m)	-404	-246	-254	-241	-147
d_{c-p} (Å)	488	296	306	291	177
d_{c-p} (b_p)	196	119	123	117	71

Tableau 5.19 : Energies d'interaction élastiques, ΔE , entre une dislocation vis parfaite et un joint interphase et les distances critiques, d_{c-p} , pour les bicristaux Ni-X.

La courbe de variation de la force image et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance, d , et présentées dans les figures A.3.26-A.3.30 en annexe 3.

La distance critique la plus grande est obtenue pour le bicristal Ni-Pb, $d_{c-p} = 196b_p$, dont l'énergie d'interaction est la plus forte $\Delta E = -404$ pJ/m. La distance critique la plus petite est obtenue pour les bicristaux Ni-Cu, $d_{c-p} = 71b_p$, dont l'énergie d'interaction, $\Delta E = -147$ pJ/m. La distance d'efficacité de la force image augmente avec l'augmentation de l'énergie d'interaction.

b) Dislocations partielles de Shockley

La force de friction, F_{PN} , exercée sur les deux dislocations partielles de shockley dans le Nickel, a été calculée et présentée dans le tableau tableau 5.4.

Les énergies interactions de la dislocation de partielle de Shockley, et les distances critiques, pour les bicristaux étudiés sont présentées dans le tableau 5.20,

$$t = [110], \vec{b}_{sh} = \frac{a}{6} \langle 211 \rangle, \text{ et } R = [110], \theta = 0^\circ$$

Bicristal	Ni-Pb	Ni-Al	Ni-Au	Ni-Ag	Ni-Cu
ΔE (pJ/m)	-157	-98	-95	-92	-55
d_{c-sh1} (Å)	239	149	144	139	85
d_{c-sh1} (b_p)	96	60	58	56	34
d_{c-sh2} (Å)	256	167	162	157	102
d_{c-sh2} (b_p)	103	67	65	63	41

Tableau 5.20 : Energies d'interaction élastiques, ΔE , des dislocations partielles de Shockley, et les distances critiques, d_{c-sh1} et d_{c-sh2} , pour les bicristaux Ni-X.

Les courbes de variation de la force image des deux partielles et la droite de la force de friction sont tracées en fonction de la distance dislocation-joint interphase, d , et présentées dans les figures A.3.26-A.3.30 en annexe 3.

Les distances critiques les plus grandes $d_{c-sh1,2}$, sont obtenues pour le bicristal Ni-Pb, $d_{c-sh1} = 96b_p$, $d_{c-sh2} = 103b_p$, dont l'énergie d'interaction est la plus forte, $\Delta E = -157$ pJ/m. Les valeurs les plus petites sont obtenues pour Ni-Cu, $d_{c-sh1} = 34b_p$, $d_{c-sh2} = 41b_p$, dont l'énergie d'interaction est la plus faible, $\Delta E = -55$ pJ/m. Les distances d'efficacité de la force image augmentent avec l'augmentation de l'énergie d'interaction.

c) Effet de la force image sur les dislocations dissociées

La courbe de la force image, F_{i-p} , et la droite de la force de friction de la F_{PN-p} sur la dislocation vis parfaite, avec les courbes des forces images, F_{i-sh1} et F_{i-sh2} , et la droite de la force de friction F_{PN-sh} sur les deux dislocations de Shockley, pour les bicristaux Ni-X, sont regroupées dans les figures A3.26-A3.30 en annexe 3.

Pour chaque bicristal, les distances d'efficacité d_{c-sh1} et d_{c-sh2} sont plus petites que la distance d'efficacité d_{c-p} .

La dislocation vis parfaite est située à une distance d du joint interphase :

- Si $d_0 < d \leq d_{c-sh1}$, pour les bicristaux Ni-X, les forces image attractives conduisent à une augmentation de la distance d_{SF} entre les deux dislocations partielles.

- Si $d_{c-Sh1} < d \leq d_{c-Sh2}$, la force image F_{i-Sh2} attractive conduit à une diminution de la distance d_{SF} entre les deux dislocations partielles.

- Si $d_{c-Sh2} < d$, il n'y a aucun effet de la force image sur les dislocations dissociées.

5.7 - Influence du désaccord sur l'interaction dislocation-joint interphase

Quand une interface entre deux phases de paramètres de réseau différents se relaxe, le désaccord est localisé aux dislocations de désaccord qui apparaissent à une distance réticulaire à côté de l'interface dans le cristal qui a le plus petit paramètre structural [106-109].

Nous étudions l'effet du désaccord sur l'interaction dislocation-joint entre les deux cristaux constituant le bicristal, pour une configuration cube sur cube avec une désorientation nulle.

5.7.1 - Joint cohérent

Ce type de joint est présent dans les bicristaux Al-Au, Al-Ag, Au-Ag, Cu-Ni, caractérisés par leurs paramètres structuraux, a , qui diffèrent de 1 à 2%, tableau 5.21

Bicristal	a_1 (Å)	a_2 (Å)	a' (Å)	δ	δ (%)	Cohérence	D_δ (Å)	$D_\delta(a_1)$	$D_\delta(a_2)$
Al-Au	4,05	4,08	4,06	-0,007	-0,7	Cohérent	-551	-136,0	-135,06
Al-Ag		4,09	4,07	-0,01	-1	Cohérent	-414	-102,2	-101,26
Au-Al	4,08	4,05	4,06	0,007	0,7	Cohérent	551	135,0	136,0
Au-Ag		4,09	4,08	-0,002	-0,2	Cohérent	-1669	-409,0	-408,0
Ag-Al	4,09	4,05	4,07	0,01	1	Cohérent	414	101,2	102,2
Ag-Au		4,08	4,08	0,002	0,2	Cohérent	1669	408,0	409,0
Cu-Ni	3,61	3,52	3,56	0,02	2	Cohérent	141	39,1	40,1
Ni-Cu	3,52	3,61	3,56	-0,02	-2	Cohérent	-141	-40,1	-39,1

Tableau 5.21 : Paramètres de réseau a_1 et a_2 , paramètre de réseau de référence a' , désaccord δ et distance entre les dislocations de désaccord D_δ , pour la configuration « cube sur cube » avec $\theta = 0^\circ$, pour les joints cohérents

Les interfaces dans les bicristaux Al-Au, Al-Ag, Au-Ag et leurs inverses sont parfaitement cohérents, ils ont un désaccord, δ , inférieur à 1%. Le plus faible désaccord est obtenu pour les bicristaux Au-Ag et Ag-Au il est égal à 0.2%, ce joint a la plus faible énergie interfaciale. Quand on passe des bicristaux Al-Au et Au-Al aux bicristaux Al-Ag et Ag-Al le désaccord augmente de 0.7% à 1% et l'énergie du joint augmente.

Les bicristaux Cu-Ni et Ni-Cu ont un désaccord égal à 2%, dans ce cas la cohérence peut être maintenue grâce à des distorsions (compression du côté de Cu et dilatation du côté de Ni) au voisinage de l'interface par des contraintes dites de cohérence. Ces contraintes de cohérence induisent une augmentation de l'énergie de l'interface.

5.7.2 - joint semi-cohérent

C'est le cas majeur, les bicristaux ont un désaccord supérieur à 2% et inférieur à 25%. Dans ce type de joints, des dislocations de désaccord apparaissent à une distance réticulaire ou plus (elle peut aller jusqu'à quatre distances réticulaires) depuis l'interface dans le cristal qui à le plus petit paramètre structural, on peut alors classer ces bicristaux en deux groupes, tableau 5.22.

Bicristal	a_1 (Å)	a_2 (Å)	a' (Å)	δ	δ (%)	Cohérence	D_δ (Å)	$D_\delta(a_1)$	$D_\delta(a_2)$
Pb-Al		4,05	4,50	0,2	20	Semi-Cohérent	22,5	4,5	5,6
Pb-Au	4,95	4,08	4,51	0,19	19	Semi-Cohérent	23,5	4,7	5,76
Pb-Ag		4,09	4,52	0,19	19	Semi-Cohérent	24	4,8	5,86
Al-Pb		4,95	4,50	-0,20	-20	Semi-Cohérent	-22,5	-5,6	-4,56
Al-Cu	4,05	3,61	3,83	0,11	11	Semi-Cohérent	33	8,2	9,2
Al-Ni		3,52	3,79	0,14	14	Semi-Cohérent	27	6,7	7,7
Au-Pb		4,95	4,51	-0,19	-19	Semi-Cohérent	-23,5	-5,7	-4,7
Au-Cu	4,08	3,61	3,84	0,12	12	Semi-Cohérent	31	7,7	8,7
Au-Ni		3,52	3,80	0,15	15	Semi-Cohérent	26	6,3	7,3
Ag-Pb		4,95	4,52	-0,19	-19	Semi-Cohérent	-24	-5,8	-4,8
Ag-Cu	4,09	3,61	3,85	0,12	12	Semi-Cohérent	31	7,5	8,5
Ag-Ni		3,52	3,80	0,15	15	Semi-Cohérent	25	6,2	7,2
Cu-Al		4,05	3,83	-0,11	-11	Semi-Cohérent	-33	-9,2	-8,2
Cu-Au	3,61	4,08	3,84	-0,12	-12	Semi-Cohérent	-31	-8,7	-7,7
Cu-Ag		4,09	3,85	-0,12	-12	Semi-Cohérent	-31	-8,5	-7,5
Ni-Al		4,05	3,79	-0,14	-14	Semi-Cohérent	-27	-7,7	-6,7
Ni-Au	3,52	4,08	3,80	-0,15	-15	Semi-Cohérent	-26	-7,3	-6,3
Ni-Ag		4,09	3,80	-0,15	-15	Semi-Cohérent	-25	-7,2	-6,2

Tableau 5.22 : Paramètres de réseau a_1 et a_2 , paramètre de réseau de référence a' , désaccord δ et distance entre les dislocations de désaccord D_δ , pour la configuration « cube sur cube » avec $\theta = 0^\circ$, pour les joints semi-cohérents

1^{er} groupe : bicristaux ayant un cristal 1 avec un paramètre structural plus grand que celui du cristal 2. Ces bicristaux sont Pb-Al, Pb-Au, Pb-Ag, Al-Cu, Al-Ni, Au-Cu, Au-Ni, Ag-Cu et Ag-Ni. Pour ce cas les dislocations de désaccord apparaissent dans le cristal 2. Donc elles n'ont pas d'influence sur la dislocation de matrice étudiée qui est située dans le cristal 1. C'est-à-dire les dislocations de désaccord n'ont aucune influence sur l'interaction élastique entre la dislocation de matrice, placée dans le cristal 1 à une distance d de l'interface et le joint interphase.

2^{ème} groupe : Bicristaux ayant un cristal 1 avec un paramètre structural plus petit que celui du cristal 2. Ce sont les inverses des bicristaux du groupe précédent. Dans ce cas les dislocations de désaccord apparaissent dans le cristal 1 à une distance de l'interface de l'ordre de 1 à 4 distances réticulaires.

Ces dislocations de désaccord introduisent des termes supplémentaires dans le bilan des forces exercées sur une dislocation de matrice en interaction avec l'interface. Donc il faut tenir compte de :

- L'interaction entre les dislocations de désaccord et le joint interphase.
- L'interaction entre la dislocation de matrice et les dislocations de désaccord.

5.7.3 - Joint incohérent

Ce type de joints se manifeste dans les bicristaux Pb-Cu, Pb-Ni et leurs inverses. Les deux cristaux constituant le bicristal ont des paramètres structuraux qui diffèrent de 14%. Ces bicristaux ont un désaccord, δ , très élevé de l'ordre de 30%, qui est accompagné d'une énergie très élevée du joint interface, tableau 5.23.

Bicristal	a_1 (Å)	a_2 (Å)	a' (Å)	δ	δ (%)	Cohérence	D_δ (Å)	$D_\delta(a_1)$	$D_\delta(a_2)$
Pb-Cu	4,95	3,61	4,28	0,31	31	Incohérent	14	2,8	3,8
Pb-Ni		3,52	4,24	0,34	34	Incohérent	12,5	2,5	3,6
Cu-Pb	3,61	4,95	4,28	-0,31	-31	Incohérent	-14	-3,8	-2,8
Ni-Pb	3,52	4,95	4,24	-0,34	-34	Incohérent	-12,5	-3,6	-2,5

Tableau 5.23 : Paramètres des cristaux a_1 et a_2 , paramètre de réseau de référence a' , désaccord δ et distance entre les dislocations de désaccord D_δ , pour la configuration « cube sur cube » avec $\theta = 0^\circ$, pour les joints incohérents

5.8 - Discussion

● Effet de la désorientation

La variation des énergies d'interaction, en fonction de la désorientation est très faible, elle est différente d'un bicristal à l'autre.

Pour chaque bicristal, l'augmentation de l'angle de la désorientation conduit à :

- Une diminution de l'écart énergétique parce que les énergies d'interaction extrêmes sont obtenues pour une désorientation 0° .
- Une augmentation de l'écart énergétique parce que les énergies d'interaction extrêmes sont obtenues pour une désorientation 90° .
- Un écart énergétique constant parce que les énergies d'interaction extrêmes sont constantes pour toutes les désorientations 0° - 90°

● Effet des modules de cisaillement

La variation de l'énergie d'interaction, ΔE , avec l'écart des modules de cisaillement, $\Delta\mu$, a été analysée pour toutes les configurations étudiées. Les résultats conduisent à identifier trois groupes de bicristaux.

▪ Groupe 1 : Bicristaux avec un écart $\Delta\mu > 1$

Ces bicristaux ont un cristal 1 plus mou que le cristal 2. On y trouve toute la famille Pb-X et les bicristaux Al-Cu, Al-Ni, Au-Cu, Au-Ni, Ag-Cu, Ag-Ni et Cu-Ni.

Pour une famille de bicristaux ayant le même cristal 1, l'énergie d'interaction d'une dislocation située dans le cristal 1, le plus mou, est positive ce qui est dû aux valeurs positives de $\Delta\mu$, alors la force image est répulsive. Toute dislocation située dans le cristal le plus mou est repoussée loin du joint interphase sous l'effet d'une force image.

L'énergie d'interaction extrême la plus grande est obtenue pour le bicristal qui possède le plus grand écart en modules de cisaillement. La plus faible est obtenue pour le bicristal qui a le plus faible écart en modules de cisaillement. L'énergie d'interaction augmente avec l'écart des modules de cisaillement.

▪ **Groupe 2 : Bicristaux avec un écart $\Delta\mu < -1$**

Ces bicristaux ont un cristal 1 plus dur que le cristal 2. On y trouve toute la famille Ni-X et les bicristaux Al-Pb, Au-Pb, Ag-Pb, Cu-Pb, Cu-Al, Cu-Au et Cu-Ag.

Pour une famille de bicristaux, l'énergie d'interaction d'une dislocation située dans le cristal 1, le plus dur, est négative à cause des valeurs négatives de $\Delta\mu$, donc la force image est attractive. Toute dislocation située dans le cristal le plus dur est attirée vers le joint interphase sous l'effet de la force image.

Pour une famille de bicristaux, l'énergie d'interaction extrême $|\Delta E|$ la plus grande est obtenue pour le bicristal qui possède le plus grand écart des modules de cisaillement $|\Delta\mu|$. La plus faible est obtenue pour le bicristal qui a le plus faible écart des modules de cisaillement. L'énergie d'interaction élastique augmente avec l'écart des modules de cisaillement.

Pour les deux groupes de bicristaux avec $\Delta\mu > 1$ ou $\Delta\mu < -1$, et pour chaque famille de bicristaux constituées du même cristal 1, l'intensité de l'interaction est reliée à l'écart des modules de cisaillement en signe et en intensité.

▪ **Groupe 3 : Bicristaux avec un écart $\Delta\mu$ dans l'intervalle $]-1,1[$.**

Les bicristaux constituant ce groupe sont : Al-Ag, Al-Au, Au-Al, Au-Ag, Ag-Al et Ag-Au, formés par les paires des matériaux Al, Au et Ag.

L'énergie d'interaction élastique est très faible, à cause des paramètres élastiques et cristallographiques très proches des deux matériaux constituant le bicristal considéré, un écart des modules de cisaillement $-1 < \Delta\mu < 1$ et un écart des paramètres de réseau, $\Delta a = a_2 - a_1 \leq 0.04 \text{ \AA}$.

L'énergie peut être positive, négative ou nulle, elle dépend seulement du caractère de la dislocation et de l'angle de la désorientation entre les deux cristaux. La force image est alors répulsive, attractive ou nulle. Une dislocation située dans le cristal 1 peut être repoussée, attirée ou ne subir aucune force image.

L'énergie d'interaction élastique suit l'écart des modules de cisaillement en intensité mais pas en signe.

Nombre des dislocations attirées : Le nombre des dislocations attirées ou repoussées et relié à la configuration étudiée figure 5.29.

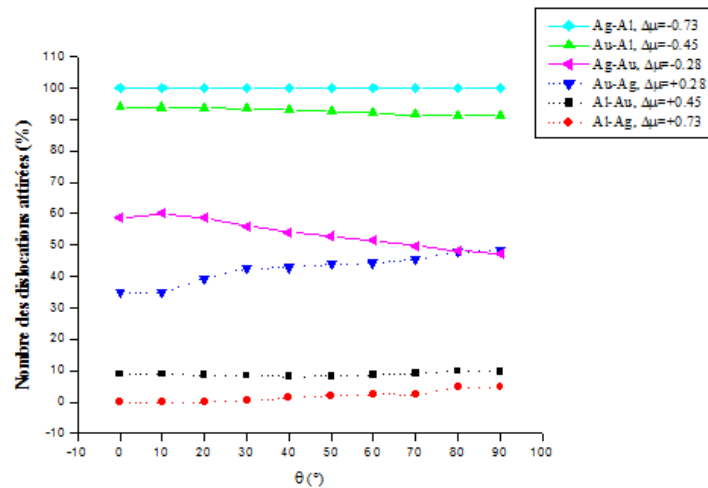


Figure 5.29 : Proportion des dislocations attirées en fonction de la désorientation θ .

Pour les bicristaux Ag-Al, Au-Al et Ag-Au, caractérisés par un cristal 1 plus dur que le cristal 2, $-1 < \Delta\mu < 0$, la majorité des dislocations sont attirées, leur proportion diminue avec l'augmentation de la désorientation, et augmente avec $|\Delta\mu|$.

Pour une désorientation 0° : la proportion des dislocations attirées est de, 100% pour Ag-Al ($\Delta\mu = -0.73 \cdot 10^{10} \text{Pa}$), 94% pour Au-Ag ($\Delta\mu = -0.45 \cdot 10^{10} \text{Pa}$) et 60% pour Ag-Au ($\Delta\mu = -0.25 \cdot 10^{10} \text{Pa}$). La proportion maximale est obtenue pour une désorientation 0° et la minimale est obtenue pour 90° . Le bicristal Ag-Al constitue un cas particulier avec 100% de dislocations attirées, pour toutes les désorientations.

Pour les bicristaux inverses Au-Ag, Al-Au et Al-Ag, ayant un cristal 1 plus mou que le cristal 2, $0 < \Delta\mu < 1$, la proportion des dislocations attirées est inférieure à 50%. Elle augmente avec la désorientation et diminue à l'inverse de $\Delta\mu$.

Pour la désorientation 0° : la proportion des dislocations attirées est : 35% pour Au-Ag ($\Delta\mu = 0.25 \cdot 10^{10} \text{Pa}$), 9% pour Al-Au ($\Delta\mu = 0.45 \cdot 10^{10} \text{Pa}$) et 0% pour Al-Ag ($\Delta\mu = 0.73 \cdot 10^{10} \text{Pa}$). La proportion maximale est obtenue pour une désorientation 90° et la minimale est obtenue pour 0° .

On en déduit que la proportion des dislocations attirées dépend du signe et de l'intensité de l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu$, et de la désorientation des deux cristaux.

Pour cette étude, le paramètre $\Delta\mu$, apparaît comme le facteur discriminant pour l'énergie d'interaction élastique.

Du fait de la similitude élastique et structurale, les bicristaux de ce groupe se comportent comme des bicristaux monophasés, et les joints interphase séparant les deux cristaux agissent sur les dislocations de la même façon que les joints de grains homophase dans la structure CFC [95].

● Effet de la symétrie cristalline

Les énergies d'interaction élastiques les plus intenses sont obtenues pour les dislocations qui appartiennent au plan (110). C'est le plan normal à l'axe de rotation $R=[110]$ et au vecteur de Burgers $\vec{b}=a/2[110]$ et qui contient les dislocation coins.

Pour chaque bicristal, les dislocations coin subissent les plus fortes attractions ou les plus fortes répulsions selon les valeurs de l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu$.

Les énergies d'interaction élastiques les moins intenses sont obtenues pour les dislocations qui se trouvent dans le plan (1-10). C'est le plan qui contient l'axe de rotation $R=[110]$, le vecteurs de Burgers $\vec{b}=a/2[110]$, la dislocation vis $[110]$ et la dislocation coin $[001]$.

Ces dislocations subissent les plus faibles attractions ou les plus faibles répulsions selon les valeurs de l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu$.

▪ Cas particuliers :

Les bicristaux, Al-Cu, Au-Cu, Ag-Au, Ag-Cu et Ni-Cu, pour une désorientation 90° , les énergies d'interaction élastiques les plus intenses sont obtenues pour la dislocation coin $[001]$ qui se trouve au centre de la projection et ses proches voisines, alors que les énergies les moins intenses sont obtenues pour les dislocations qui se trouvent sur le cercle extérieur de la projection, la trace du plan (001). Ce plan contient les dislocations perpendiculaires à $[001]$

Toutes les cartes d'isoénergie, annexe 2, présentent deux symétries binaires, une par rapport au plan (110) et l'autre par rapport à (1-10) pour les désorientations 0° et 90° . Elles ne présentent qu'une seule symétrie binaire par rapport au plan (110) pour les désorientations comprises dans l'intervalle $[10^\circ, 80^\circ]$.

Cette propriété est dérivée de la symétrie du groupe d'espace du cristal, l'énergie d'interaction dépend uniquement de la direction de la ligne de dislocation quand b est parallèle à l'axe de rotation R . Le plan (110) qui contient l'axe de rotation R , et le vecteur de Burgers b est un plan miroir dans l'espace des énergies. En conséquence, deux pôles symétriques par rapport à ce plan, correspondent à deux lignes de dislocations avec la même désorientation par rapport à R et b qui ont la même valeur de l'énergie d'interaction élastique dislocation-joint interphase.

Pour les bicristaux avec un écart des modules $-1 < \Delta\mu < 1$, le nombre et le caractère des dislocations attirées ou repoussées dépend de la désorientation. Les dislocations pour lesquelles ΔE est nulle et par conséquent la force image aussi, sont celle qui se trouvent sur la ligne de contour zéro ($\Delta E = 0$), la frontière entre l'intervalle énergétique positif et l'intervalle énergétique négatif sur les cartes isoénergie, annexe 2.

● Influence du caractère de la dislocation

Les résultats des interactions élastiques des dislocations, vis [110] et coins [1-10] et [1-11] avec le joint interphase, en fonction de la désorientation, montrent que l'énergie d'interaction élastique dépend du caractère de la dislocation.

Pour une dislocation vis parfaite, l'énergie d'interaction élastique ne change pas avec la désorientation. Cette dislocation est attirée ($\Delta\mu < -1$), ou repoussée ($\Delta\mu > 1$) avec la même intensité quelque soit la désorientation entre les deux cristaux. La force image est presque nulle pour les bicristaux avec un écart, $-1 > \Delta\mu > 1$.

Pour la dislocation coin [1-10], l'énergie d'interaction élastique diminue lentement pour les désorientations inférieurs à 40° puis plus rapidement jusqu'à 90° . Cette dislocation est attirée ou repoussée avec une force image plus ou moins intense selon les valeurs de $\Delta\mu$ et de θ . dans les bicristaux avec un écart des modules de cisaillement $-1 > \Delta\mu > 1$, la force image est nulle pour les désorientations 0° et 10° .

Pour la dislocation coin [1-11], l'énergie d'interaction élastique augmente pour les désorientations inférieurs à 30° puis plus rapidement jusqu'à 90° . Cette dislocation est attirée ou repoussée avec une force image plus ou moins intense selon les valeurs de $\Delta\mu$ et de θ . Dans les bicristaux avec un écart des modules de cisaillement $-1 > \Delta\mu > 1$, la force image est nulle pour les désorientations 0° et 70° - 10°

● Mobilité de la dislocation sous l'effet de la force image.

En l'absence de contraintes extérieures, la mise en mouvement d'une dislocation sous l'effet de la force image est conditionnée par sa position par rapport au joint interphase.

La dislocation est mise en mouvement si elle est située à une distance d , $d \leq d_c$, inférieure à la distance d'efficacité de la force image.

La distance d'efficacité de la force image, d_c , dépend de la force de Peierls-Nabarro et de l'énergie d'interaction élastique.

Pour une dislocation donnée, la force de friction est constante dans chaque matériau, elle dépend du module de cisaillement μ , du coefficient de Poisson ν , du vecteur de Burgers b et du caractère de la dislocation. Pour les bicristaux ayant le même cristal 1, la distance d'efficacité la force image ne dépend que de l'intensité de l'énergie d'interaction élastique entre la dislocation et le joint interphase et de l'écart des modules de cisaillement du bicristal.

La distance d'efficacité est très importante pour les bicristaux qui possèdent un écart des modules de cisaillement supérieur à l'unité, $|\Delta\mu| > 1$,

- Pour la dislocation vis parfaite, $70b_p < d_{c-p} < 1000b_p$.
- Pour les dislocations partielles de Shockley, $60b_p < d_{c-Sh} < 500b_p$

Elle est très faible pour les bicristaux qui ont un écart des modules de cisaillement inférieur à l'unité, $0 < |\Delta\mu| < 1$:

- Pour la dislocation vis parfaite, $9b_p < d_{c-p} < 60b_p$.
- Pour les dislocations partielles de Shockley, $7b_p < d_{c-p} < 60b_p$.

Pour chaque famille de bicristaux, la distance d'efficacité de la force image augmente avec l'augmentation de $|\Delta\mu|$.

● Force image sur les dislocations dissociées

Les dislocations partielles de Shockley subissent des forces image dans le même sens, avec deux intensités différentes. La force image, F_{i-Sh1} , sur la première dislocation de Shockley est plus intense que celle sur la deuxième dislocation de Shockley F_{i-Sh2} , à cause de leurs positions par rapport au ruban de faute d'empilement qui les sépare.

La mise en mouvement des deux dislocations partielles est contrôlée par la position de la dislocation parfaite, d , et les distances d'efficacité d_{c-Sh1} et d_{c-Sh2} .

- $d < d_0$:

La dislocation est située à une distance où la théorie de l'élasticité linéaire est invalide. La force image peut être déterminée par la théorie du gradient de l'élasticité linéaire [48-49].

- $d_0 < d < d_{c-Sh1}$:

Les dislocations dissociées se mettent en mouvement sous l'effet de leurs forces image F_{i-Sh1} et F_{i-Sh2} . La force image F_{i-Sh1} est plus intense que la force image F_{i-Sh2} . Ce mouvement conduit à une réduction du ruban de faute d'empilement, si les deux forces image sont répulsives, et à un élargissement du ruban de faute d'empilement, si les deux forces sont attractives.

- $d_{c-Sh1} < d < d_{c-Sh2}$:

La première dislocation de Shockley est immobile et la deuxième dislocation est en mouvement sous l'effet de sa force image F_{i-Sh2} . Théoriquement les deux dislocations ne peuvent s'écartier indéfiniment à cause du ruban de faute d'empilement. Alors ce mouvement conduit à une réduction du ruban de faute d'empilement, si la force image F_{i-Sh2} est attractive, et à un élargissement du ruban de faute d'empilement, si F_{i-Sh2} est répulsive.

- $d_{c-Sh2} < d$:

Les deux dislocations partielles de Shockley ne sont plus mobiles sous l'effet de leurs forces image F_{i-Sh1} et F_{i-Sh2} .

- **Effet de la taille de grain sur la mobilité de la dislocation**

Pour une même famille des bicristaux, la distance d'efficacité de la force image augmente avec la valeur absolue de la différence des modules de cisaillement. Cette distance est très importante dans les bicristaux Pb-X et X-Pb. Une valeur maximale est obtenue pour Au-Pb, $d_{c-p} = 944b_p \approx 0.3\mu\text{m}$.

Diamètre moyen (μm)	500	360	250	180	125	90	65	45	32	22	16	11	8.0	5.6	4.0	2.8	2.0
Appréciation générale	Très grossier		Grossier			Moyen			Fin			Très fin			Ultra fin		

Tableau 5.24 : Définition théorique de la taille de grain [110]

Vu le tableau 5.24, des diamètres de grains, il s'avère que même pour des microstructures à diamètre de grains de l'ordre du micron « micro structure ultra fine », il existe dans le grain des zones où la force image n'a pas d'effet. Il faut considérer des structures nanométriques pour que la force image agisse dans toute l'étendue du grain.

● Effet du désaccord sur l'interaction dislocation-joint interphase

La différence des paramètres structuraux des deux cristaux constituant le bicristal, fait apparaître trois types de joint interphase.

- **Joint cohérent** : les bicristaux avec un faible désaccord δ , entre 0.2% et 2%, forment des joints interphase cohérents avec des énergies interfaciales faibles. Cette énergie interfaciale augmente quand le désaccord augmente.

- **Joint incohérent** : les bicristaux qui ont un désaccord, δ , très élevé de l'ordre de 30%, forment des joints interphase incohérents avec des énergies interfaciales très élevées.

Ces deux types de joints, n'apportent aucun changement sur le bilan des forces exercées sur la dislocation de matrice.

- **Joint semi-cohérent** : les bicristaux avec un désaccord, δ , entre 2% et 25%, forment des joints interphase semi-cohérents. Le désaccord entre les cristaux est accommodé par des dislocations de désaccord qui apparaissent à une distance réticulaire ou plus (elle peut aller jusqu'à quatre distances réticulaires) depuis l'interface dans le cristal qui a le plus petit paramètre structural, donc on peut classer ces bicristaux en deux groupes.

a) - Les bicristaux qui ont un cristal 1 avec un paramètre structural plus grand que celui du cristal 2. Les dislocations de désaccord apparaissent dans le cristal 2. Les dislocations de désaccord n'ont aucune influence sur l'interaction élastique entre la dislocation de matrice, placée dans le cristal 1 à une distance d de l'interface, et le joint interphase.

b) - Les bicristaux qui ont un cristal 1 avec un paramètre structural plus petit que celui du cristal 2. Les dislocations de désaccord apparaissent dans le cristal 1 à une distance de l'interface de l'ordre de 1 à 4 distances réticulaires.

L'existence de ces dislocations de désaccord introduit des termes supplémentaires dans le bilan des forces exercées sur une dislocation de matrice en interaction avec l'interface.

Donc il faut tenir compte de :

- **L'interaction entre les dislocations de désaccord et le joint interphase** : ces dislocations sont très proches du joint interphase, elles existent dans le domaine où l'élasticité linéaire ne peut plus être utilisée. Il faut passer au modèle atomistique ou bien à la théorie de gradient de l'élasticité linéaire. Pour cela on ne peut pas prendre en compte cet effet dans la présente étude.
- **L'interaction entre la dislocation de matrice et les dislocations de désaccord** sans oublier l'effet de la distance qui sépare les dislocations de désaccord : cette interaction joue un rôle très important pour l'explication des résultats obtenus. C'est l'un des paramètres qui permet d'expliquer l'anisotropie de l'énergie d'interaction élastique par rapport à l'inversion des deux cristaux constituant le bicristal.

En se basant sur le modèle de Frank et Van der Merwe [111], où les dislocations de désaccord sont localisées directement à l'interface, dans cette étude on ne peut prendre en compte les dislocations de désaccord qui existent juste pour accommoder la différence des deux paramètres de maille des deux cristaux constituant le bicristal, et qui n'ont pas d'effet à longue distance

L'effet du désaccord des paramètres sera utilisé dans les perspectives pour plusieurs désorientations significatives dans la structure CFC.

Conclusion générale

Conclusion générale

Dans cette étude, nous avons examiné l'interaction élastique entre une dislocation de matrice et un joint interphase dans des bicristaux biphasés constitués de paires de métaux de natures différentes mais de même structure cristallographique Cubique à Faces Centrées : Pb, Al, Au, Ag, Cu et Ni. Nous avons cherché à déterminer les différents paramètres élastiques et cristallographiques qui influencent la mise en mouvement des dislocations de matrice sous l'effet de la force image. Les dislocations considérées ont un vecteur de Burgers $b = a/2 [110]$, elles sont parallèles au plan des joints interphase et sont situées à une distance d de l'interface. Pour les besoins de l'étude nous considérons toutes les directions de l'espace, qu'elles correspondent à des lignes de dislocations réelles de la structure cristallographique ou non. Le joint interphase est caractérisé par sa désorientation d'angle θ autour d'un axe $[uvw]$ et son plan (hkl) . Dans cette étude l'axe de la désorientation est $R=[110]$ et l'angle $\theta \in [0^\circ, 90^\circ)$.

L'interaction dislocation-joint interphase est caractérisée par une énergie d'interaction élastique calculée sur la base de l'élasticité linéaire anisotrope et du théorème de Barnett et Lothe. Les dislocations subissent une force appelée force image due à la présence du joint interphase. Cette force image F_i , par son signe et son intensité, permet de prédire sa capacité à réduire ou à renforcer la mobilité d'une dislocation en interaction élastique avec le joint interphase.

L'énergie d'interaction élastique et la force image qui en dérive sont fortement corrélées à l'écart des modules de cisaillement, $\Delta\mu$, des deux matériaux constituant le bicristal.

Nos résultats montrent que l'écart des modules de cisaillement permet de classer les bicristaux en trois groupes.

Pour chaque famille de bicristaux, soient Pb-X, Al-X, Au-X, Ag-X, Cu-X et Ni-X ;

- Si $\Delta\mu > 1$: l'énergie d'interaction élastique, ΔE , est positive pour toutes les lignes des dislocations situées dans le cristal 1, qui est le cristal le plus mou, quelque soit leurs caractères et leurs désorientations. Les dislocations sont toutes repoussées loin de l'interface avec une force image, F_i , plus ou moins intense selon la valeur de $\Delta\mu$. Les répulsions

maximales sont obtenues pour les dislocations coin [-110] et leurs plus proches voisines, les répulsions minimales sont obtenues pour la dislocation vis [110] et leurs plus proches voisines.

- Si $\Delta\mu < -1$: l'énergie d'interaction élastique, ΔE , est négative pour toutes les lignes des dislocations situées dans le cristal 1 qui est le plus dur quelque soit leurs caractères et leurs désorientations. Ces dislocations sont attirées vers l'interface avec une force image répulsive plus ou moins intense selon la valeur de l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu$. Les attractions maximales sont obtenues pour les dislocations coins [1-10]. Les attractions minimales sont obtenues pour la dislocation vis [110] et leurs proches voisines.

- Si $-1 < \Delta\mu < 1$, l'énergie d'interaction élastique dans les bicristaux formés par des paires des matériaux Al, Au et Ag, qui sont très proches au niveau cristallographique et élastique, est très faible, due à la valeur très faible de l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu$. Elle peut être positive, négative ou nulle. La force image sur les dislocations est alors répulsive, attractive ou nulle. Pour ces bicristaux, le caractère de la dislocation est le facteur discriminant pour le sens de la force image.

- Le nombre et le caractère des dislocations qui ne subissent aucune force image, est lié à la nature et à la désorientation des deux cristaux.
- La proportion des dislocations attirées dépend de l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu$ du bicristal en signe et en intensité. Elle est supérieure à 50% quand $-1 > \Delta\mu > 0$ c.à.d. quand le cristal 1 est plus dur que le cristal 2, et inférieure à 50% quand $0 > \Delta\mu > -1$, c.à.d. quand le cristal 1 est plus mou que le cristal 2

Du fait de leur similitude élastique et structurale, ces bicristaux se comportent comme des bicristaux monophasés, et les joints interphase séparant les deux cristaux agissent sur les dislocations de la même façon que les joints de grains dans la structure CFC.

L'effet de l'angle de la désorientation, θ , sur l'interaction élastique entre les dislocations de matrice et les joints interphase reste très faible.

L'énergie d'interaction élastique dépend du caractère de la dislocation. Elle est constante quelque soit la désorientation pour la dislocation vis, alors quelle varie différemment avec la désorientation pour les dislocations coin.

Les cartes d'isoénergie qui permettent d'avoir une vue globale sur le comportement des dislocations sous l'effet de la force image pour chaque bicristal présentent deux symétries binaires, une par rapport à la trace du plan (110) et l'autre par rapport à la trace du plan (1-10) pour les désorientations 0° et 90° . Pour les désorientations intermédiaires les cartes ne présentent qu'une seule symétrie binaire par rapport à la trace du plan (110).

En général, les cartes d'isoénergies montrent que les interactions élastiques les plus intenses sont obtenues pour les dislocations qui appartiennent au plan (110). Ce plan de joint normal à l'axe de rotation $R=[110]$ et au vecteur de Burgers $\vec{b}=a/2[110]$ contient les dislocation coin. Les énergies d'interaction élastiques les moins intenses sont obtenues pour les dislocations qui appartiennent au plan (1-10). Ce plan de joint contient l'axe de rotation $R=[110]$, le vecteurs de Burgers $\vec{b}=a/2[110]$, la dislocation vis $[110]$ et la dislocation coin $[001]$.

Pour une famille de bicristaux, la distance d'efficacité de la force image est liée à la valeur absolue de la différence des modules de cisaillement. Cette distance est très importante dans les bicristaux Pb-X et X-Pb de l'ordre de $1000b_p \approx 0.3\mu\text{m}$, dans le bicristal Au-Pb. Elle est très faible dans les bicristaux formés par les paires des matériaux Al, Au, Ag de l'ordre de $7b_p$ dans le bicristal Ag-Al. Cela indique que la force image est efficace même dans les structures nanométriques.

L'effet de la force image sur les dislocations dissociées en deux dislocations partielles de Shockley dépend de la distance entre la dislocation parfaite d'origine, d , les distances d'efficacité d_{c-Sh1} et d_{c-Sh2} et de sens des forces images sur les partielles F_{i-Sh1} et F_{i-Sh2} .

- $d_0 < d < d_{c-Sh1}$, les forces images sur les dislocations dissociées conduisent à une réduction de la largeur du ruban de faute d'empilement entre les deux dislocations partielles si elles sont répulsives et donc la recombinaison est favorisée. Si elles sont

attractives, elles conduisent à un élargissement du ruban du faute d'empilement et donc la recombinaison n'est plus favorisée.

- $d_{c-Sh1} < d < d_{c-Sh2}$: les forces images sur les dislocations dissociées conduisent à une réduction du ruban de faute d'empilement, si F_{i-Sh2} est attractive, donc la recombinaison est favorisée, et à un élargissement du ruban du faute d'empilement, si F_{i-Sh2} est répulsive donc la recombinaison n'est pas favorisée.

- $d_{c-Sh2} < d$: Les deux dislocations partielles de Shockley ne sont plus mobiles sous l'effet de leurs forces image F_{i-Sh1} et F_{i-Sh2} .

L'effet du désaccord des paramètres structuraux pour une configuration cube sur cube ($R=[110]$, $\theta=0^\circ$), montre que :

- Les joints cohérents et les joints incohérents, n'apportent aucun terme supplémentaire dans le bilan des forces exercées sur une dislocation de matrice en interaction avec le joint.
- Les joints semi-cohérents, par la présence des dislocations de désaccord introduisent des termes supplémentaires dans le bilan des forces. Ces termes sont liés aux interactions entre les dislocations de désaccord et le joint interphase et entre la dislocation de matrice et les dislocations de désaccord.

Enfin, en l'absence de contraintes externes, la mise en mouvement des dislocations de matrice situées à une distance d inférieure à la distance critique d_c est contrôlée par le bilan des deux forces, la force image et de la force de Peierls-Nabarro. La force image est comparable à la force de friction de réseau, elle doit être prise en compte quand il s'agit du mouvement des dislocations.

Ce travail de thèse permet de dégager des perspectives pour la poursuite de l'étude ;

- L'application de la théorie du gradient de l'élasticité linéaire pour étudier l'effet de la force image sur des dislocations situées à des distances à l'interface inférieures à $3b$.

Références bibliographiques

Références bibliographiques

- [1] - A.K. Head, Phil.Mag., 44, **1953a**, 92-94.
- [2] - D.M. Barnett And J. Lothe, J. Phys. F: metal physics, 4, **1974** ,1618-1635.
- [3] - J. Ayache, "Microstructure des defaults cristallins", Société française des microscopies, Paris, **2001**, 3.
- [4] - J. Weertman, J.R. Weertman, "Théorie élémentaire des dislocations", Masson et Cie, Paris, 6^e édition, **1970**, Chapitre [1-2,4].
- [5] - Y. Adda, J. M. Dupuy, J. Philibert, Y. Quéré, "Eléments de métallurgie physique", "Alliages et défauts", tome 3, CEN, Paris, **1977**, 726, 728,737.
- [6] - J. L. Martin, et J. Wagner, "Dislocations et plasticité des cristaux", PPUR EPFL press, Lausanne, **2000**.
- [7] - D. Hull and D.J. Bacon, "Introduction to Dislocations", Butterworth-Heinemann, Oxford, **2001**.
- [8] - J. Benard, A. Michel, J. Talbot, "Métallurgie Générale", Masson et Cie, Paris, **1999**, 9, 121, 122, 124.
- [9] - J. Friedel, "Dislocations", Pergamon Press, Oxford, 1967) in "dislocation et dynamique des dislocations", CNRS France, GDR Mecano, B. Devincere, Ecole Mécanique des Nano-objets Autrans-France, **2010**.
- [10] - M. Ashby, D. Jones, "Matériaux - Propriétés et applications", Dunod, Paris, **1998**.
- [11] - T. Mura, "Micromechanics of Defects in Solids" , Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (The Netherlands), **1991**.
- [12] - C.N. Reid, "Deformation Geometry for Materials Scientists", Pergamon Press, Oxford UK, **1973**.
- [13] - J.M. Haudin, F. Montheillet, "Notions fondamentales sur les matériaux - Déformation plastique et essais mécaniques", SNPMD Editeur, Paris, **1989**.
- [14] - Y. Quéré, "Physique des Matériaux", Edition marketing, Paris, **1988**.
- [15] - P. Hirel, Thèse de Doctorat, Poitiers, **2008**.
- [16] - X. M. Wei, J. M. Zhang, K.W. Xu, Applied Surface Science, 254, **2007**, 1489-1492
- [17] - G. Fontaine, Journal de Physique, 27, **1966**, 201.
- [18] - http://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/def_en/kap_5/backbone/r5_4_1.html
- [19] - F.R.N. Nabarro, Dislocation in solids, North-Holland publishing company, **1979**.

- [20] - L. Priester, "les joints de grains de la théorie à l'ingénierie", EDP Sciences, France, **2006**, p. 233-236, Partie II.
- [21] - J.M. Howe, "Interfaces in Materials", J. Wiley New York, **1997**, Chapitre 14.
- [22] - L.E. Murr, interfacial phenomena in metals and alloys. Addison-Wesley Publishing company, Reading, MA, **1975**, 76, 143, 149, 193-196.
- [23] - R. Becker, Ann. Phys., 32, **1938**, 128.
- [24] - I. W. Cahn et I. E. Hilliard, L. Chem. Phys., 28, 2, **1958**, 258-267.
- [25] - Y. W Lee et H. I. Aaronson, Acta Metall., 28, **1980**, 539-548.
- [26] - P. Wynblatt et R.C. Ku, Surf Sci., 65, **1977**, 511-531
- [27] - D. Turnbull, in Impurities and Imperfections, American Society for Metals, Metals Park, Ohio, **1955**, 121.
- [28] - F. C. Frank et J. H. Van der Merwe, Proc. Roy. Soc. Lond., 198A, **1949**, 205-216.
- [29] - J.H. Van der Merwe, Proc. Phys. Soc., A 63, **1950**, 616.
- [30] - J. H. Van der Merwe, J. Appl., Phys., 34, **1963**, 117-123.
- [31] - U. Dahmen, Acta Metall., 30, **1982**, 63-73.
- [32] - W.T. Read and W. Shockley, Phys. Rev., 78, **1950**, 275-289.
- [33] - J. M. Howe, Int. Mater. Rev., 38, 5, **1993**, 233-256
- [34] - J. H. Van der Merwe, Philos. Mag. A, 45, **1982**, 127, 145, 159.
- [35] - Z. Nishiyama, Sci. Rep. Tohoku Univ., 23, **1934**, 638.
- [36] - G. Kurdjumov et G. Sachs, J. Phys., 64, **1930**, 325.
- [37] - W. G. Burgers, Physica, 1, **1959**, 561.
- [38] - G. Wasserman , Arch. Eisenhutt Wes., 16, **1933**, 647.
- [39] - W Pitsch et A. Schrader, Arch. Eisenhutt Wes., 29, **1958**, 715.
- [40] - J. Dundurs, 'Elastic Interaction of Dislocations with Inhomogeneities', Toshio Mura (ed.), The American Society Of Mechanical Engineers, **1969**.
- [41] - A.K. Head, Phil. Mag. Soc., V. B66, **1953b**, 793-801.
- [42] - J. Dundurs and T. Mura, J. Mesh. Pphys. Solids, 12, **1964**, 177-189.
- [43] - J. Dundurs, and G. P. Sendeckyj, J. Appl. Phys. 36, **1965**, 3353-3354,
- [44] - T. C. T. Ting, and D. M. Barnett, Int. J. Solids Structures, 30, 3, **1993**, 313-323,
- [45] - M. Benlahsen, J. Lépinoux and J. Grilhé, Mat. Sci. Eng., A164, **1993**, 428-432.
- [46] - D. M. Barnett and J. Lothe, Int. J. Solids Structures, 32, 3/4, **1995**, 291-301.
- [47] - J. R. Rice, Conserved integrals and energetic forces. In Fundamentals of Deformation and Fracture: Eshelby Memorial Symposium (edited by B. A. Bilby, K. J. Miller and J. R. Willis) Cambridge University Press, Cambridge, U.K, **1985**, 33-56.

- [48] - M. Yu. Gutkin and E. C. Aifantist, *scripta materialia*, 35, 11, **1996**, 1353-1358.
- [49] - C. Q. Ru and E. C. Aifantis, *Acta Mech.* 101, 1, **1993**, 59-68.
- [50] - M. Yu. Gutkin, K. N. Mikaelyan, and E. C. Aifantis, *Physics of the Solid State*, 42, 9, **2000**, 1652-1658.
- [51] - G. Lasko, D. Saraev, S. Schmauder, P. Kizler, *Computational Materials Science* 32, **2005**, 418-425
- [52] - Z.M. Xiao, B.J. Chen, *Mechanics of Materials*, 32, **2000**, 485-494
- [53] - H. Feng, Q. H. Fang, Y. W. Liu and B. Jin, *Acta Mech.* 220, **2011**, 315-329.
- [54] - Y.W. Liu, C.P. Jiang, Y.K. Cheung, *International Journal of Engineering Science* 41, **2003**, 1883-1898
- [55] - L.J. Sudak, *Mechanics Research Communications*, 30, **2003**, 53-59.
- [56] - Q.H. Fang, Y.W. Liu, *Acta Materialia* 54, **2006**, 4213-4220
- [57] - Z.Y. Ou, S.D. Pang, *Materials Science and Engineering A*, 528, **2011**, 2762-2775
- [58] - K.M. Davoudi, M.Yu. Gutkin and H.M. Shodja, *Scripta Materialia*, 61, **2009**, 355-358.
- [59] - H. Ahmadzadeh-Bakhshayesh, M.Yu. Gutkin and H.M. Shodja, *International Journal of Solids and Structures*, 49, **2012**, 1665-1675
- [60] - S. N. G. Chu, *J. Appl. Phys.*, 53, **1982**, 3019-3023.
- [61] - S.V. Kamat, J.P. Hirth and B. Carnahan, *Scripta Metallurgica*, 21, **1987**, 1587-1592.
- [62] - H.Y. Wang, M.S. Wu and H. Fan, *International Journal of Solids and Structures*, 44, **2007**, 1563-1581
- [63] - E. Honein, H. Rai and M.I. Najjar, *International Journal of Solids and Structures*, 43, **2006**, 2422-2440.
- [64] - K. Zhou, H. J. Hoh, X. Wang, L. M. Keer, J. H. L. Pang, B. Song and Q. J. Wang, *Mechanics of Materials*, 60, **2013**, 144-158.
- [65] - S. Dong, J. Zhou, D. Hui, X. Pang, Q. Wang, S. Zhang and L. Wang, *International Journal of Solids and Structures*, V. 51, **2014**, 1149-1163
- [66] - W.Wu, S. Xu, C. Lv, R. Xia and J. Zhang, *J. Appl. Mech.*, 83, 4, **2016**, 041005 (10).
- [67] - C. Becquart et M.Perez, *Techniques de l'ingénieur*, Ref. 136, **2010**, 1-9.
- [68] - L. Verlet, *Phys. Rev.*, 159, 1, **1967**, 98-103.
- [69] - L. Verlet, *Phys. Rev.*, 165, 1, **1968**, 201-214.
- [70] - R.W.Hockney, *Methods Comput. Phys.*, 9, **1970**, 136-211.
- [71] - W. C. Swope, H. C. Andersen, P. H. Berens et K.R. Wilson, *J. Chem. Phys.*, 76, 1, **1982**, 637-649.

- [72] - C.W. Gear, Numerical initial value problems in ordinary differential equations. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, **1971**.
- [73] - M. Parrinello et A. Rahman, Phys. Rev. Lett., 45, 14, **1980**, 1196-1199.
- [74] - M. Parrinello et A. Rrahman, J. App. Phys., 52, 12, **1981**, 7182-7190.
- [75] - B. Monasse, « matériaux pour l'ingénieur », chapitre XXVIII : « modélisation moléculaire des matériaux ».
- [76] - M.S. Daw et M.I. Baskes, Phys. Rev. Lett., 50, **1983**, 1285.
- [77] - M.W. Finnis et J.E. Sinclair, Phil. Mag. A, 50, 1, **1984**, 45-55.
- [78] - F. Ducastelle et F. Cyrot-lackmann, J. Phys. Chem. Solids, 32, 1, **1971**, 285-301.
- [79] - V. Rosato, M. Guillopé et B. Legrand, Phil. Mag. A, 59, **1989**, 321-336.
- [80] - M. Parrinello et A. Rahman, Phys. Rev. Lett., 45, 14, **1980**, 1196-1199,.
- [81] - M. Parrinello et A. Rahman, J. Appl. Phys. 52, **1981**, 7182-7190.
- [82] - J.K. Norskov, Rep. Prog. Phys., 53, **1990**, 1253-1295.
- [83] - F. Ercolessi, E. Tosatti et M. Parinello, Phys. Rev. Lett., 57, **1986**, 719 ().
- [84] - H. Van Swygenhoven, D. Farkas et A. Caro, Phys. Rev. B, 62, 2, **2000**, 831-838.
- [85] - H. Van Swygenhoven, P. M. Derlet, and A. Hasnaoui, Phys. Rev B 66, **2002**, 024101(8).
- [86] - O. Khalfallah, Thèse de Doctorat d'état, Orsay, **1988**.
- [87] - J. P. Hirth, J. Lothe, "Theory of dislocations", Second Edition, Reprint Edition, Krieger, Malabar Florida, 82, **1992**, 278-279, 354-357, 468,473.
- [88] - A.Y. Belov, V.A Chamrov, V.L. Indenbom et J. Lothe, Phys. Stat. Sol. b,119, 2, **1983**, 565-578.
- [89] - Y. T. Chou, Phys. Stat. Sol., 15, **1966**, 123-227.
- [90] - M. O. Tucker, Phil.Mag., 19, **1969**, 1141-1159.
- [91] - J. Gemperlova et J. Saxl, J. Czech., J. Phys., B18, **1968**, 1085.
- [92] - J. Gemperlova, Phys. Stat. sol., 30, 1, **1968**, 261-274.
- [93] - O. Khalfallah, M. Condat, L. Priester et H.O.K. Kirchner, Phil. Mag.,A61, 2, **1990**, 291-304.
- [94] - O. Khalfallah, M. Condat et L. Priester, Phil. Mag., A67-1, **1993**, 231-250.
- [95] - L. Priester et O. Khalfallah, Phil. Mag., A6, 3, **1994**, 471-484.
- [96] - S. Poulat, B. Décamps et L. Priester, Phil. Mag., A77, **1998**, 1381-1397.
- [97] - M. Polcarova, J. Gemperlova, J. Bradler, A. Jacques, A. George et L. Priester, Phil. Mag., A78, **1998**, 105-130.
- [98] - L. Priester, "les joints de grains de la théorie à l'ingénierie", EDP Sciences, Les Ulis France, 260, **2006**.

- [99] - J. Lothe, Institute of Physics, University of Oslo, Report 83-21, **1983**.
- [100] - K.T. Kashyap, A. Bhat, P.G. Koppad, K.B. Puneeth, Computational Materials Science, 56, **2012**, 172–173
- [101] - A. Ayadi, A. Ouchtati, O. Khalfallah, Materials Science and Engineering, 13, **2010**.
- [102] - A. Ouchtati, O.khalfallah, Sciences est Technologie A, 30, **2009**, 09-12.
- [103] - A. Ouchtati, O.khalfallah, Sciences est Technologie A, 41, **2015**, 93-98.
- [104] - A. Ouchtati, O.khalfallah, International Journal of Applied Engineering Research, 11, 4, **2016**, 2723-2728.
- [105] - C. Kittel, "physique de l'état solide ", Dunod, Paris,**1998**, 23.
- [106] - Référence française: Norme NF EN ISO 643, Référence USA : ASTM
- [107] - W. Mader, D. Knauss, Acta metall. Mater., 40, **1992**, S207-S215.
- [108] - U. Wolf, S.M. Foiles and H.F. Fischmeister, Acta metal. Mater., 39, **1991**, 373-382.
- [109] - P. Pant, K.W. Schwarz, S.P. Baker, Acta mater., 5, **2003**, 3243-3258.
- [110] - Y. long, N.X. Chen, Scien. Direct, 602, **2008**, 1122-1130.
- [111] - F. C. Frank and J. H. Van der Merwe, Proc. R. Soc. A, 198, **1949**, 205.

Annexe 1

Energies d'interaction élastique extrêmes

Annexe 1

Energies d'interaction élastique extrêmes

Dans cette annexe nous présentons une analyse détaillée de la variation de l'énergie d'interaction extrême avec la désorientation pour les bicristaux étudiés. Les résultats sont représentés sous forme de tableaux (A.1.1 à A.1.30) et de figures (A.1.1 à A.1.30)

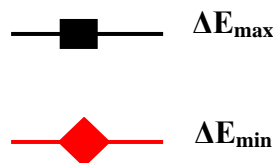
Tableaux A.1.1-A.1.30 :

Valeurs extrêmes des énergies d'interaction élastique entre une dislocation avec un vecteurs de Burgers $b=a/2[110]$, et un joint intephase dans des bicristaux de structure CFC pour les désorientations entre 0° et 90° .

- R : axe de rotation $[110]$.
- θ : angle de rotation.
- ΔE_{\max} : énergie d'interaction élastique maximale.
- ΔE_{\min} : énergie d'interaction élastique minimale.
- $\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$: écart des modules de cisaillement des deux cristaux (1) et (2).

Figure A.1.1- A.1.30:

Energies d'interaction élastique extrêmes, maximale et minimale, entre une dislocation avec un vecteurs de Burgers $b=a/2[110]$, et un joint intephase dans des bicristaux de structure CFC pour les désorientations entre 0° et 90° .



Bicristaux Pb-X

Pb-Al, $\Delta\mu = 1.64 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	87	1-10	50	110
10	87	1-10	50	110
20	87	1-10	50	110
30	87	1-12	50	110
40	87	1-12	50	110
50	87	1-12	50	110
60	87	1-12	50	110
70	87	1-12	50	110
80	87	1-12	50	110
90	87	1-12	50	110

Tableau A.1.1

Pb-Au, $\Delta\mu = 2.09 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	108	1-10	49	110
10	108	1-10	49	110
20	107	1-10	49	110
30	106	2-21	49	110
40	105	1-12	49	110
50	105	1-12	49	110
60	105	1-12	49	110
70	104	1-12	49	110
80	103	1-12	49	110
90	102	1-12	49	110

Tableau A.1.2

Pb-Ag, $\Delta\mu = 2.37 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	107	1-10	51	110
10	107	1-10	51	110
20	106	2-21	51	110
30	105	1-12	51	110
40	104	1-12	51	110
50	105	1-12	51	110
60	105	1-12	51	110
70	104	1-12	51	110
80	102	1-12	51	110
90	101	1-12	51	110

Tableau A.1.3

Pb-Cu, $\Delta\mu = 4.45 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	137	1-10	63	110
10	137	1-10	63	110
20	136	1-10	63	110
30	134	1-10	63	110
40	133	1-10	63	110
50	132	1-10	63	110
60	130	1-10	63	110
70	130	1-10	63	110
80	128	1-10	63	110
90	127	1-12	63	110

Tableau A.1.4

Pb-Ni, $\Delta\mu = 8.46 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	162	1-10	74	110
10	162	1-10	74	110
20	161	1-10	74	110
30	161	1-10	74	110
40	160	1-10	74	110
50	159	1-10	74	110
60	158	1-10	74	110
70	156	1-10	74	110
80	154	1-10	74	110
90	153	1-10	74	110

Tableau A.1.5

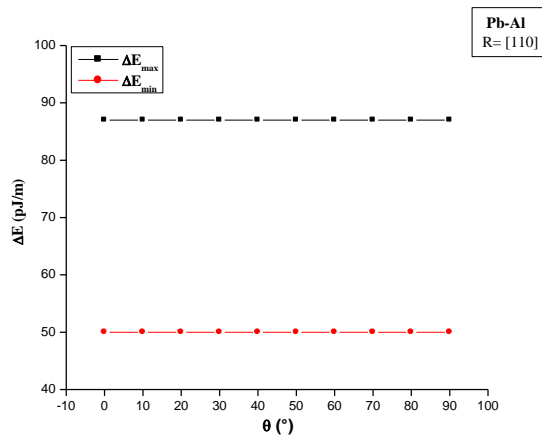


Figure A.1.1

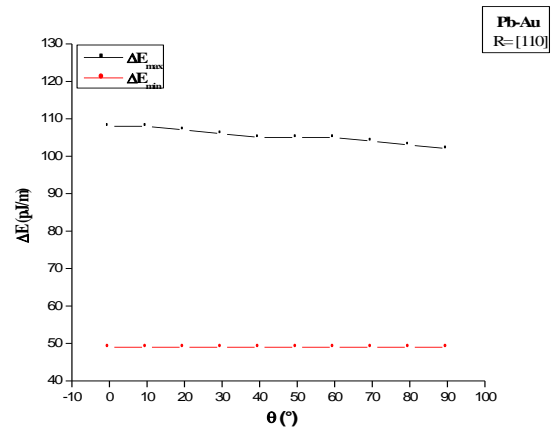


Figure A.1.2

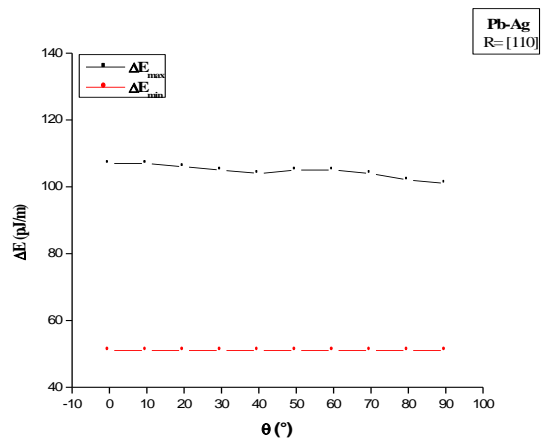


Figure A.1.3

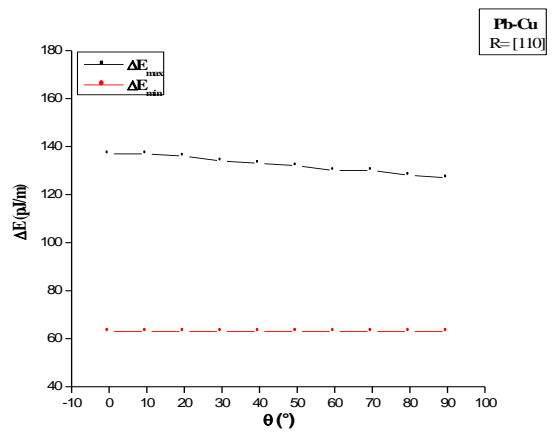


Figure A.1.4

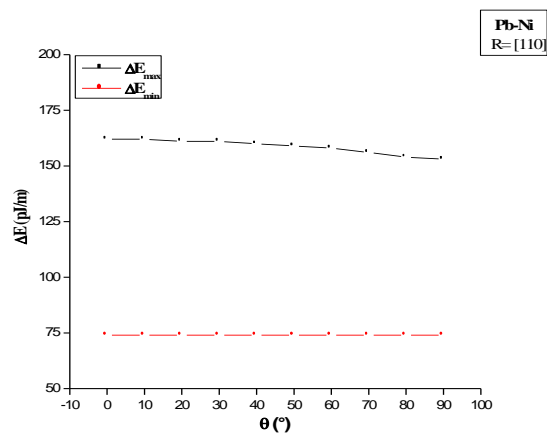


Figure A.1.5

Bicristaux Al-X

Al-Pb, $\Delta\mu = -1.64 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	-111	120	-172	1-12
10	-111	210	-173	-112
20	-111	120	-175	-112
30	-110	210	-177	-112
40	-109	-1-21	-179	-111
50	-108	-1-21	-180	-111
60	-107	211	-181	010
70	-107	111	-182	010
80	-106	111	-182	1-10
90	-106	-1-11	-182	1-10

Tableau A.1.6

Al-Au, $\Delta\mu = 0.45 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	43	1-10	-5	110
10	43	1-10	-5	110
20	43	2-21	-5	221
30	43	1-11	-5	-2-21
40	44	1-11	-6	221
50	45	1-12	-7	121
60	45	1-13	-8	-2-11
70	46	001	-9	131
80	47	001	-9	120
90	47	001	-10	-210

Tableau A.1.7

Al-Ag, $\Delta\mu = 0.73 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	43	1-10	1.3	-1-11
10	43	1-10	1.2	-1-11
20	43	2-21	0.6	-2-11
30	43	1-11	-0.2	-2-11
40	43	1-12	-1.3	-2-11
50	44	1-12	-2.5	-131
60	45	1-12	-4	-100
70	46	001	-5	-100
80	47	001	-5	010
90	47	001	-5	100

Tableau A.1.8

Al-Cu, $\Delta\mu = 2.81 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	115	1-10	51	110
10	115	1-10	51	110
20	115	2-21	51	110
30	115	1-11	51	110
40	115	1-11	50	110
50	115	1-12	50	120
60	115	1-12	50	-210
70	116	001	49	120
80	116	001	49	-2-11
90	116	001	49	120

Tableau A.1.9

Al-Ni, $\Delta\mu = 6.82 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	186	1-10	107	110
10	186	1-10	107	110
20	186	2-21	107	110
30	186	1-11	107	110
40	186	1-11	107	110
50	185	1-11	107	110
60	185	1-12	107	110
70	184	1-13	107	110
80	184	001	107	110
90	184	001	107	110

Tableau A.1.10

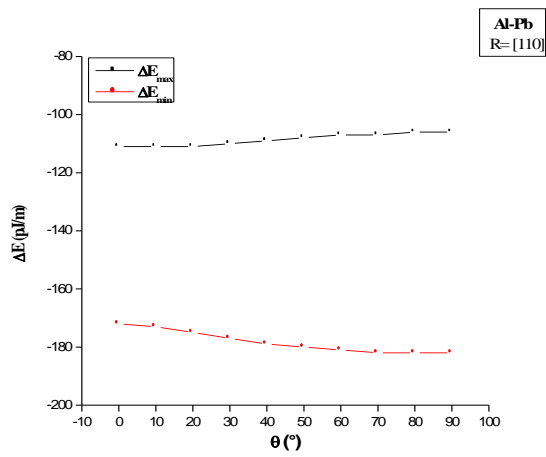


Figure A.1.6

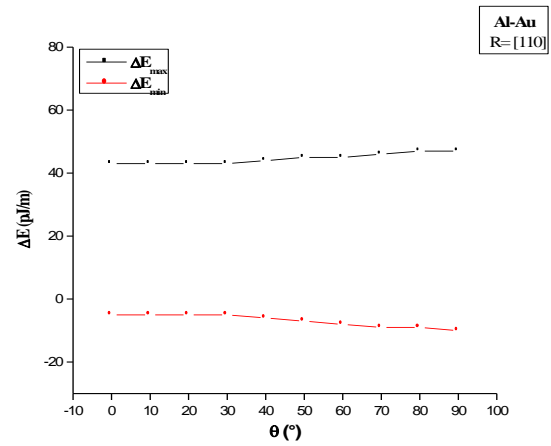


Figure A.1.7

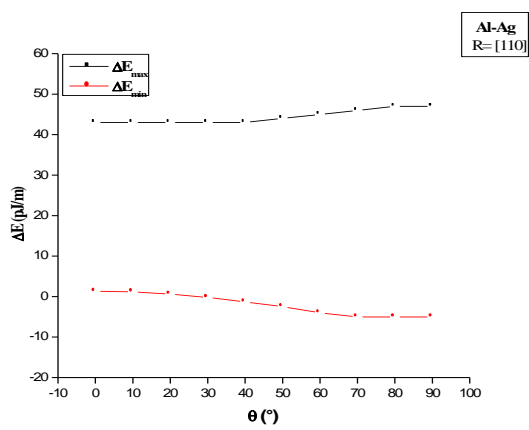


Figure A.1.8

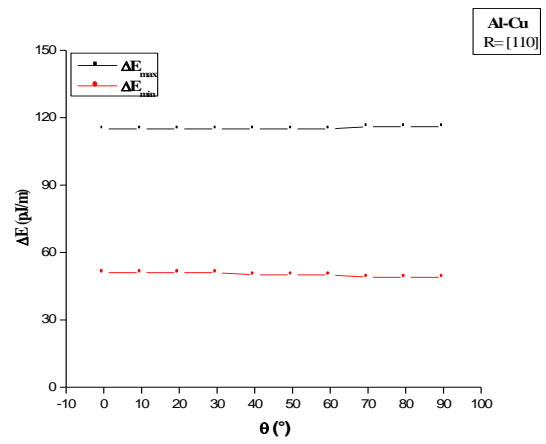


Figure A.1.9

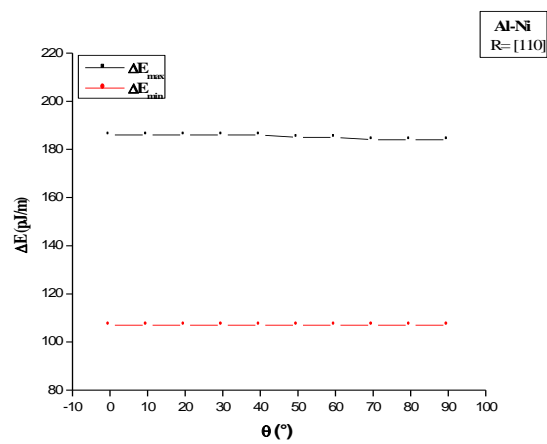


Figure A.1.10

Bicristaux Au-X

Au-Pb, $\Delta\mu = -2.09 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	-112	110	-228	1-10
10	-112	110	-232	-221
20	-112	110	-238	1-10
30	-111	110	-246	-112
40	-110	221	-252	-112
50	-108	-2-21	-253	-111
60	-107	-2-21	-256	-221
70	-106	221	-264	-331
80	-105	-2-21	-269	1-10
90	-104	221	-271	1-10

Tableau A.1.11

Au-Al, $\Delta\mu = -0.45 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	5	110	-52	1-10
10	5	110	-52	1-10
20	5	110	-52	1-10
30	5	110	-52	1-10
40	5	110	-53	1-10
50	5	110	-55	1-10
60	5	110	-56	1-10
70	5	110	-58	1-10
80	5	110	-59	1-10
90	5	110	-59	1-10

Tableau A.1.12

Au-Ag, $\Delta\mu = 0.28 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	8	120	-3	1-12
10	10	-1-21	-14	-112
20	16	001	-24	-112
30	22	001	-32	-112
40	26	001	-36	-111
50	27	001	-37	-111
60	31	001	-39	010
70	35	001	-44	010
80	37	001	-48	1-10
90	39	001	-49	1-10

Tableau A.1.13

Au-Cu, $\Delta\mu = 2.36 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	97	1-10	54	110
10	98	1-10	54	110
20	100	1-11	53	-2-11
30	101	1-11	49	121
40	102	1-11	44	121
50	104	1-12	38	100
60	108	001	32	100
70	111	001	27	100
80	112	001	24	100
90	113	001	23	100

Tableau A.1.14

Au-Ni, $\Delta\mu = 6.37 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	193	1-10	107	110
10	193	1-10	107	110
20	193	2-21	107	110
30	192	1-11	107	110
40	192	1-11	107	110
50	193	1-12	107	110
60	193	1-12	107	110
70	192	1-12	107	110
80	190	1-12	107	110
90	187	001	107	110

Tableau A.1.15

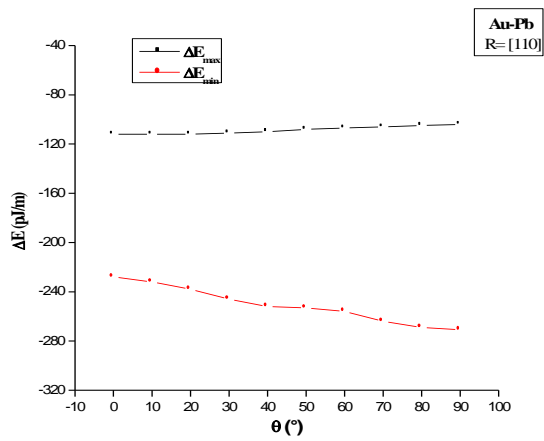


Figure A.1.11

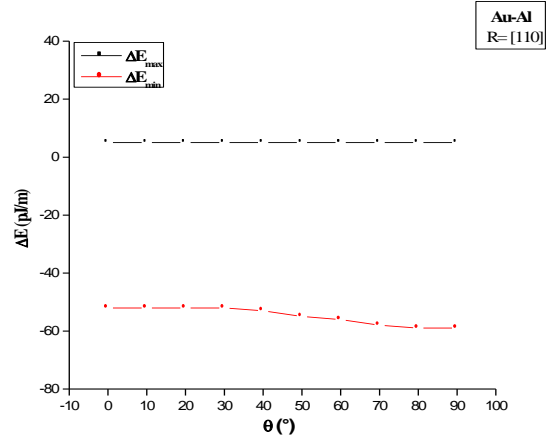


Figure A.1.12

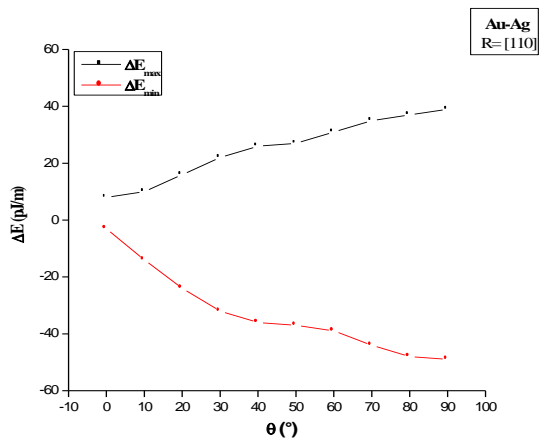


Figure A.1.13

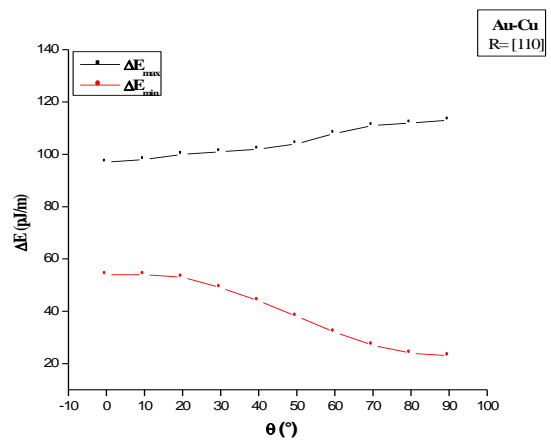


Figure A.1.14

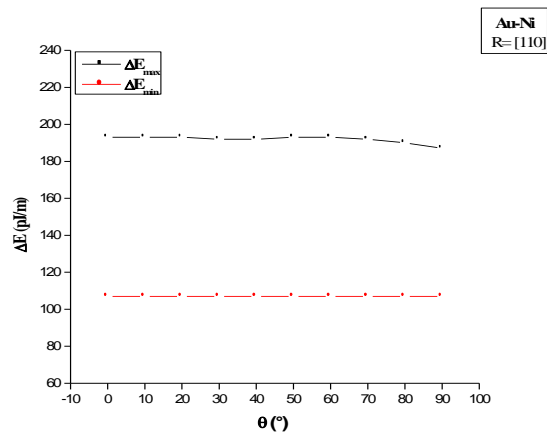


Figure A.1.15

Bicristaux Ag-X

Ag-Pb, $\Delta\mu = -2.37 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	-126	110	-232	1-10
10	-126	110	-236	1-10
20	-126	110	-242	1-10
30	-124	221	-245	1-10
40	-121	221	-247	-112
50	-119	-2-21	-251	-111
60	-117	221	-259	-2-21
70	-115	221	-268	-221
80	-115	221	-273	-221
90	-114	-2-21	-276	1-10

Tableau A.1.16

Ag-Al, $\Delta\mu = -0.73 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	-2.9	[110]	-55.0	[1-10]
10	-2.9	[110]	-55.1	[1-10]
20	-2.9	[110]	-55.3	[1-10]
30	-2.8	[-2-21]	-55.7	[1-10]
40	-2.4	[221]	-56.5	[1-10]
50	-2.1	[-2-21]	-57.8	[1-10]
60	-1.6	[-2-21]	-59.5	[1-10]
70	-1.3	[-2-21]	-61.1	[1-10]
80	-1.1	[221]	-62.1	[1-10]
90	1.0	[221]	-62.6	[1-10]

Tableau A.1.17

Ag-Au, $\Delta\mu = -0.28 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	4	[1-12]	-8	[210]
10	14	[1-14]	-13	[121]
20	23	[1-13]	-20	[311]
30	29	[001]	-29	[-3-11]
40	32	[001]	-38	[100]
50	32	[001]	-46	[100]
60	34	[001]	-54	[100]
70	37	[001]	-60	[100]
80	39	[001]	-63	[010]
90	41	[001]	-64	[100]

Tableau A.1.18

Ag-Cu, $\Delta\mu = 2.08 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	97	[1-10]	50	[110]
10	98	[2-21]	50	[110]
20	101	[2-21]	49	[121]
30	103	[1-11]	45	[-2-11]
40	104	[1-11]	38	[010]
50	106	[1-12]	31	[-211]
60	110	[001]	24	[100]
70	113	[001]	18	[100]
80	114	[001]	14	[100]
90	115	[001]	13	[100]

Tableau A.1.19

Ag-Ni, $\Delta\mu = 6.09 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	197	[1-10]	110	[110]
10	197	[1-10]	110	[110]
20	197	[2-21]	110	[110]
30	196	[2-21]	110	[110]
40	195	[1-11]	110	[110]
50	195	[1-12]	110	[110]
60	195	[1-12]	110	[110]
70	194	[1-12]	110	[110]
80	192	[1-12]	110	[110]
90	190	[-114]	110	[110]

Tableau A.1.20

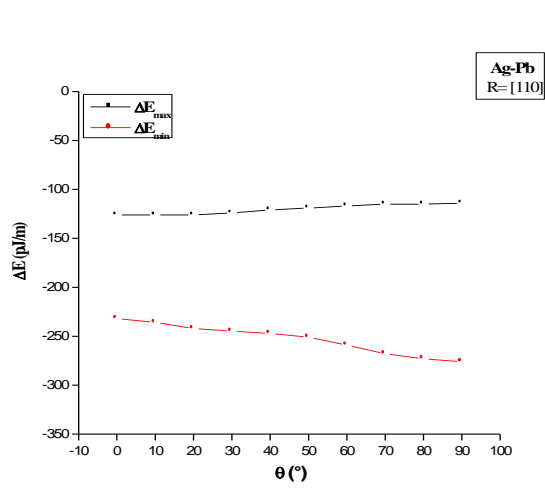


Figure A.1.16

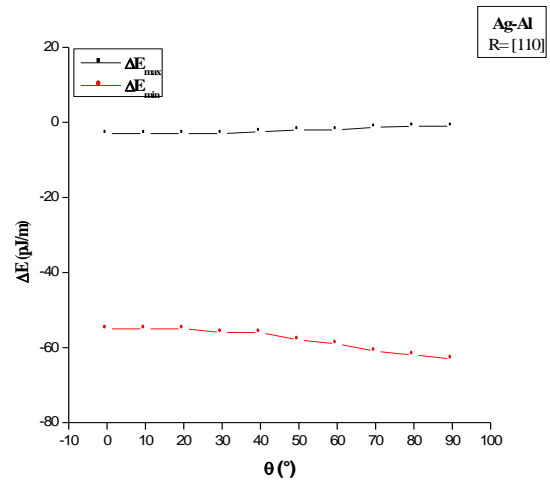


Figure A.1.17

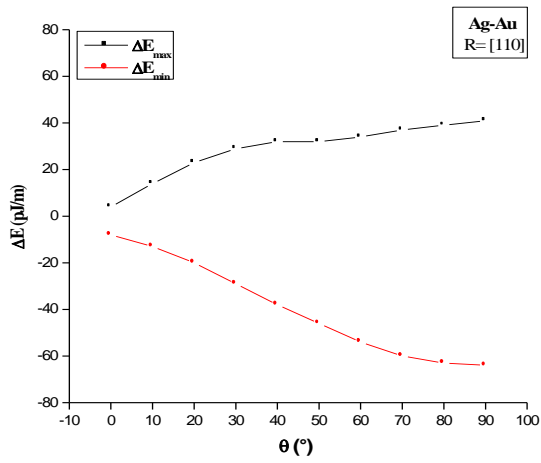


Figure A.1.18

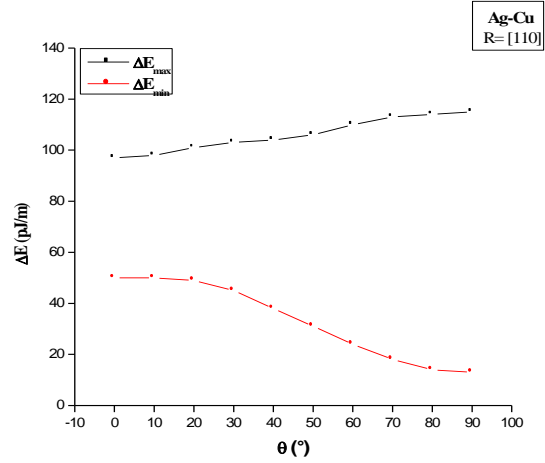


Figure A.1.19

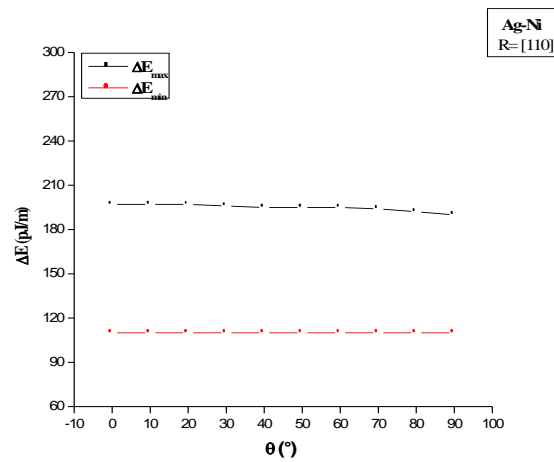


Figure A.1.20

Bicristaux Cu-X

Cu-Pb, $\Delta\mu = -4.45 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{max}	dislocation	E_{min}	dislocation
0	-193	110	-357	1-10
10	-193	110	-360	1-10
20	-193	110	-365	1-10
30	-193	331	-369	1-10
40	-191	-2-21	-370	1-10
50	-188	-2-21	-370	1-10
60	-186	-2-21	-379	1-10
70	-185	-2-21	-388	1-10
80	-184	-2-21	-395	1-10
90	-183	-2-21	-397	1-10

Tableau A.1.21

Cu-Al, $\Delta\mu = -2.81 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{max}	dislocation	E_{min}	dislocation
0	-66	110	-177	1-10
10	-66	110	-178	1-10
20	-66	110	-178	1-10
30	-66	110	-178	1-10
40	-65	221	-179	1-10
50	-65	-2-21	-180	1-10
60	-65	-2-21	-182	1-10
70	-65	221	-184	1-10
80	-64	-2-21	-185	1-10
90	-64	-2-21	-186	1-10

Tableau A.1.22

Cu-Au, $\Delta\mu = -2.36 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{max}	dislocation	E_{min}	dislocation
0	-71	-2-21	-118	1-10
10	-68	-1-11	-122	1-10
20	-62	001	-127	1-10
30	-53	001	-131	-112
40	-49	001	-139	010
50	-48	001	-149	010
60	-46	-1-11	-158	010
70	-44	001	-165	010
80	-40	001	-169	010
90	-39	001	-172	010

Tableau A.1.23

Cu-Ag, $\Delta\mu = -2.08 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{max}	dislocation	E_{min}	dislocation
0	-62	110	-116	1-10
10	-62	-2-21	-121	-110
20	-57	-1-11	-127	-112
30	-52	111	-135	-112
40	-48	-1-11	-141	-113
50	-44	-1-11	-146	010
60	-42	111	-156	-221
70	-41	111	-166	1-10
80	-39	001	-173	1-10
90	-37	001	-175	1-10

Tableau A.1.24

Cu-Ni, $\Delta\mu = 4.01 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{max}	dislocation	E_{min}	dislocation
0	133	1-10	83	110
10	135	2-21	83	110
20	137	2-21	83	210
30	139	1-11	79	211
40	141	1-12	72	010
50	145	1-13	64	100
60	148	1-13	56	100
70	150	001	50	010
80	151	001	47	010
90	151	001	45	100

Tableau A.1.25

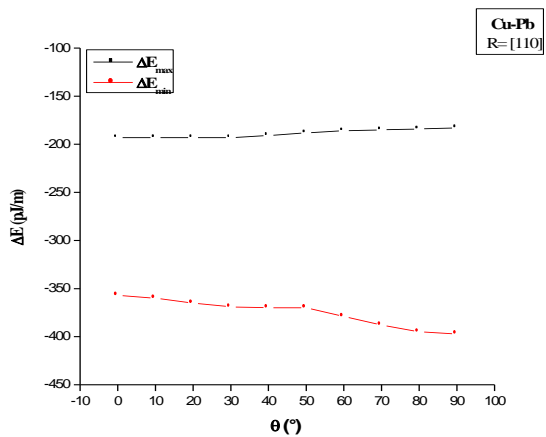


Figure A.1.21

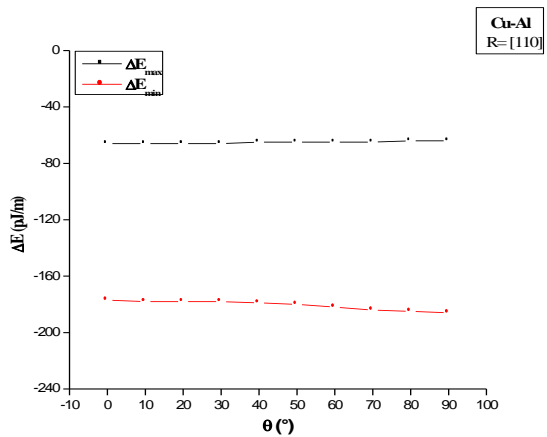


Figure A.1.22

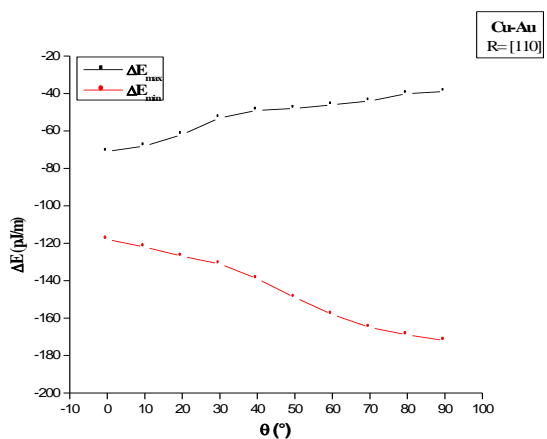


Figure A.1.23

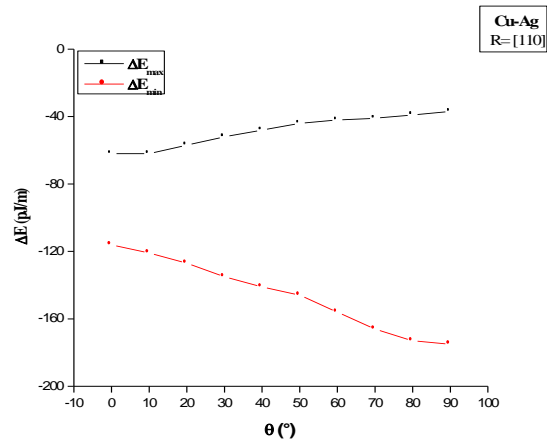


Figure A.1.24

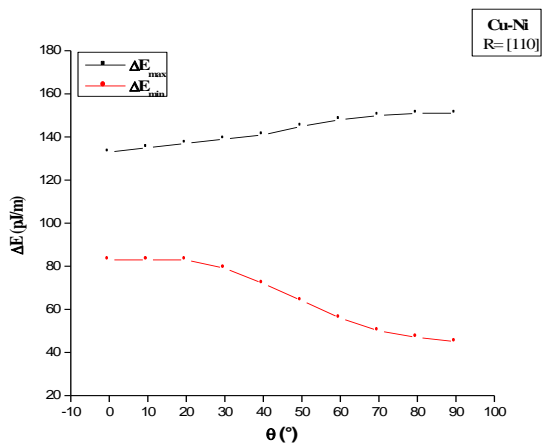


Figure A.1.25

Bicristaux Ni-X

Ni-Pb, $\Delta\mu = -8.46 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	-404	110	-658	1-10
10	-404	110	-661	1-10
20	-404	110	-667	1-10
30	-404	110	-671	1-10
40	-403	221	-672	1-10
50	-401	221	-671	1-10
60	-398	221	-682	1-10
70	-397	-2-21	-692	1-10
80	-395	221	-699	1-10
90	-395	-2-21	-701	1-10

Tableau A.1.26

Ni-Al, $\Delta\mu = -6.82 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	-246	110	-446	1-10
10	-246	110	-446	1-10
20	-246	110	-446	1-10
30	-246	110	-447	-110
40	-246	110	-448	-111
50	-245	110	-450	-111
60	-245	-2-21	-452	-221
70	-245	221	-454	-221
80	-244	-221	-456	1-10
90	-244	-2-21	-457	1-10

Tableau A.1.27

Ni-Au, $\Delta\mu = -6.37 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	-254	110	-372	1-10
10	-252	221	-377	1-10
20	-245	-1-11	-383	1-10
30	-237	-1-11	-387	1-10
40	-230	-1-11	-390	-111
50	-224	111	-403	-111
60	-220	111	-417	-221
70	-217	111	-429	-221
80	-215	-1-11	-437	1-10
90	-214	-1-11	-440	1-10

Tableau A.1.28

Ni-Ag, $\Delta\mu = -6.09 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	-241	110	-367	1-10
10	-241	110	-374	-221
20	-236	221	-381	1-10
30	-228	-1-21	-387	1-10
40	-218	-1-11	-394	-111
50	-216	111	-407	-111
60	-211	111	-421	-221
70	-208	111	-433	1-10
80	-206	-1-11	-441	1-10
90	-206	-1-11	-444	1-10

Tableau A.1.29

Ni-Cu, $\Delta\mu = -4.01 (10^{10}\text{Pa})$				
R=[110]	Interaction maximale		Interaction minimale	
θ (°)	E_{\max}	dislocation	E_{\min}	dislocation
0	-147	110	-205	-221
10	-143	-121	-217	-221
20	-132	111	-228	-112
30	-114	-1-11	-258	-111
40	-114	-1-11	-258	-111
50	-108	111	-269	-111
60	-104	111	-282	-221
70	-101	-1-11	-294	-331
80	-99	111	-302	1-10
90	-98	001	-304	1-10

Tableau A.1.30

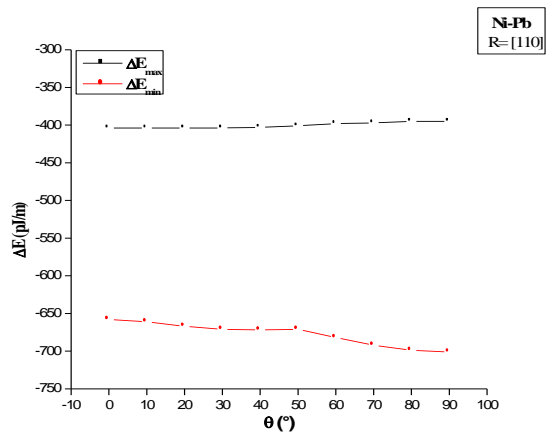


Figure A.1.26

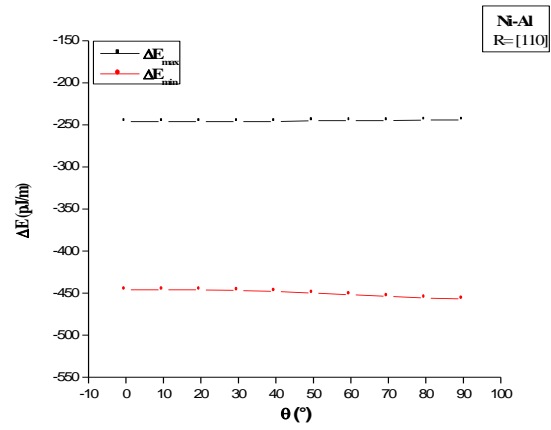


Figure A.1.27

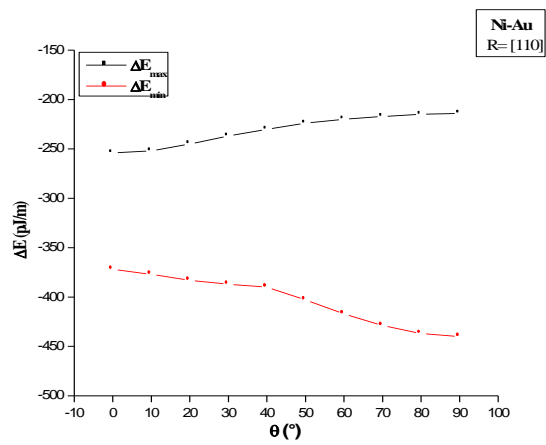


Figure A.1.28

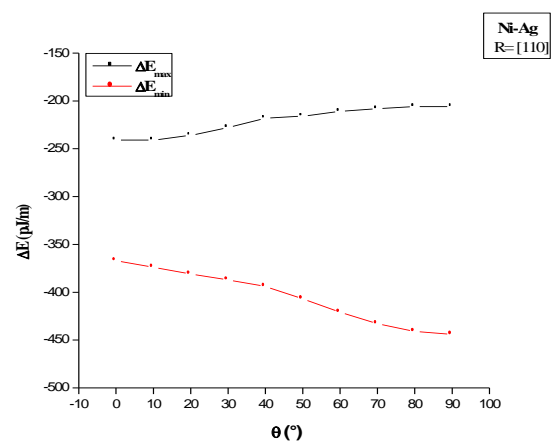


Figure A.1.29

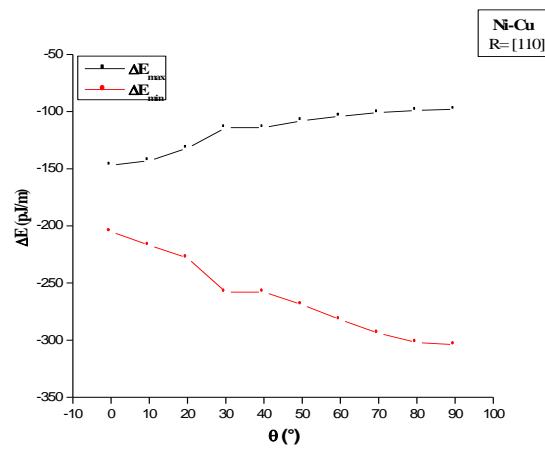


Figure A.1.30

Annexe 2

Cartes d'isoénergies

Annexe 2

Cartes d'isoénergie

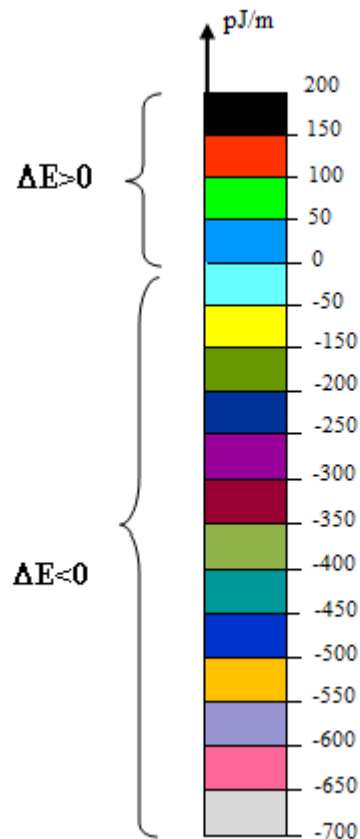
Dans cette annexe les énergies d'interaction, sont représentées sous forme de cartes d'isoénergie.

Ces cartes sont des projections stéréographiques des directions des dislocations où les couleurs correspondent aux différents intervalles d'intensité des énergies d'interaction.

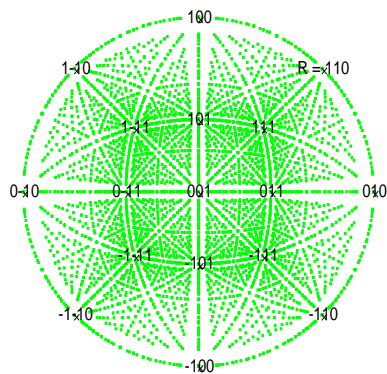
Les cartes représentent les distributions des énergies d'interaction selon les directions des dislocations pour chaque configuration étudiée bicristal-désorientation.

Pour chaque famille des bicristaux (bicristaux avec le même cristal 1), nous présentons les cartes dans l'ordre croissant des écarts des modules de cisaillement $\Delta\mu = \mu_2 - \mu_1$.

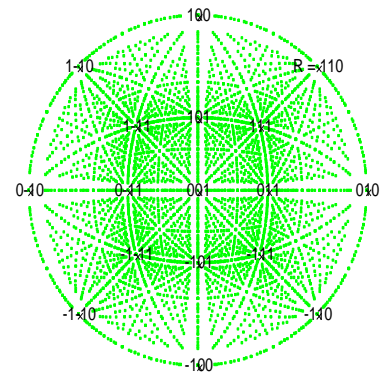
L'échelle des couleurs des niveaux d'énergie est :



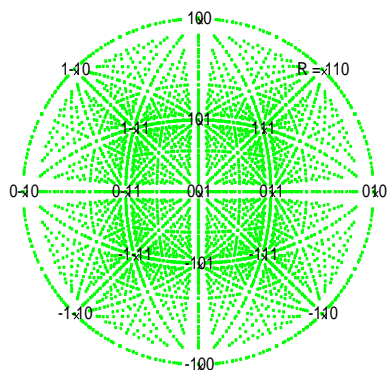
1. Bicristaux Pb-X

A.2.1.a Bicristal Pb-Al ; $\Delta\mu = 1.64$ 

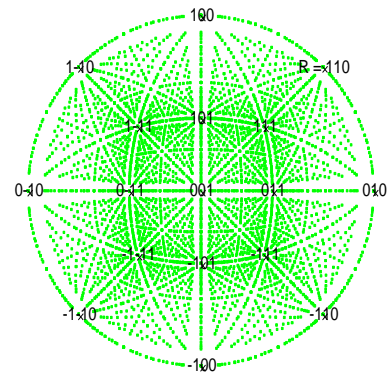
Pb-Al {(R=[110]; $\theta=0^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $50 < \Delta E < 100$



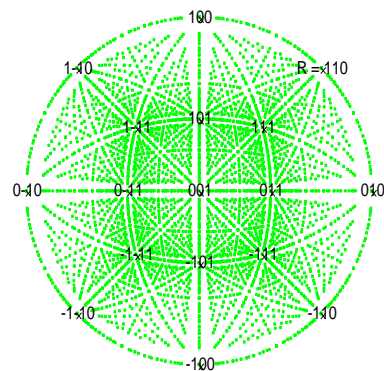
Pb-Al {(R=[110]; $\theta=20^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $50 < \Delta E < 100$



Pb-Al {(R=[110]; $\theta=40^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $50 < \Delta E < 100$

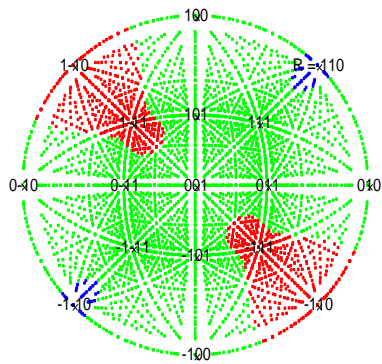


Pb-Al {(R=[110]; $\theta=60^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $50 < \Delta E < 100$

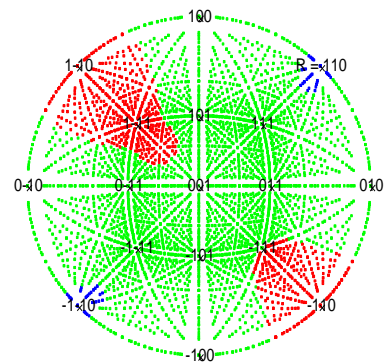


Pb-Al {(R=[110]; $\theta=90^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $50 < \Delta E < 100$

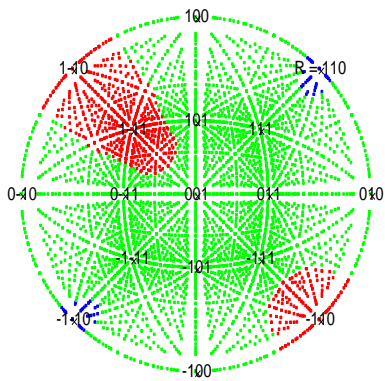
A.2.1.b Bicristal Pb-Au ; $\Delta\mu = 2.09$



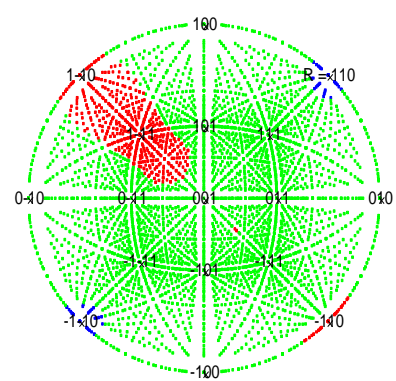
Pb-Au ((R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ 0 < ΔE < 50
 ■ 50 < ΔE < 100
 ■ 100 < ΔE < 150



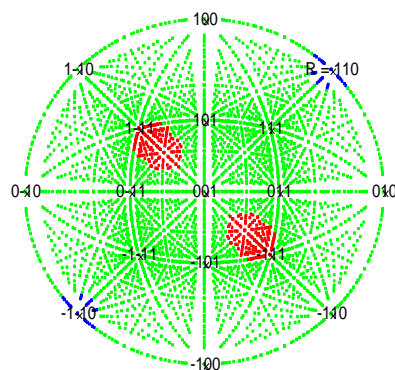
Pb-Au ((R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ 0 < ΔE < 50
 ■ 50 < ΔE < 100
 ■ 100 < ΔE < 150



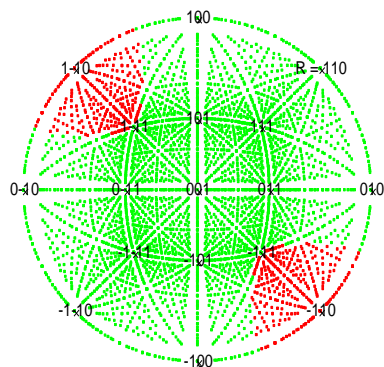
Pb-Au ((R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ 0 < ΔE < 50
 ■ 50 < ΔE < 100
 ■ 100 < ΔE < 150



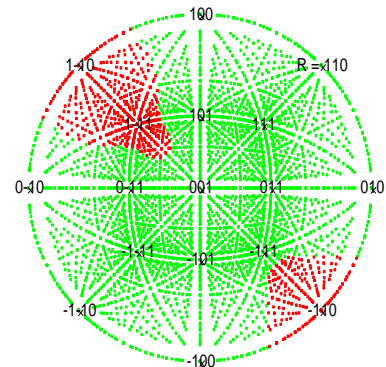
Pb-Au ((R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ 0 < ΔE < 50
 ■ 50 < ΔE < 100
 ■ 100 < ΔE < 150



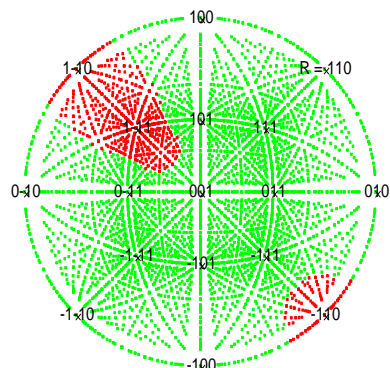
Pb-Au ((R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ 0 < ΔE < 50
 ■ 50 < ΔE < 100
 ■ 100 < ΔE < 150

A.2.1.c Bicristal Pb-Ag ; $\Delta\mu = 2.37$ 

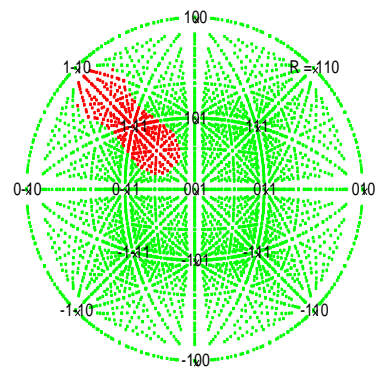
Pb-Ag ((R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • 50 < ΔE < 100
 • 100 < ΔE < 150



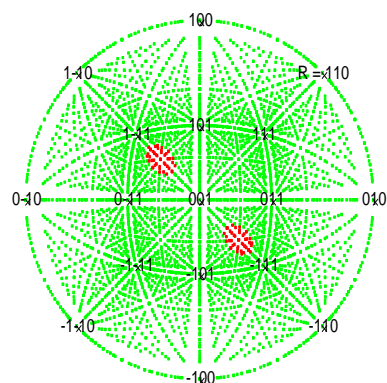
Pb-Ag ((R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • 50 < ΔE < 100
 • 100 < ΔE < 150



Pb-Ag ((R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • 50 < ΔE < 100
 • 100 < ΔE < 150

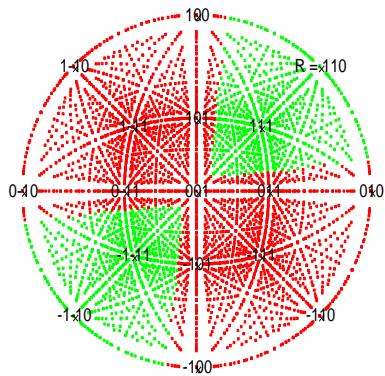


Pb-Ag ((R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • 50 < ΔE < 100
 • 100 < ΔE < 150

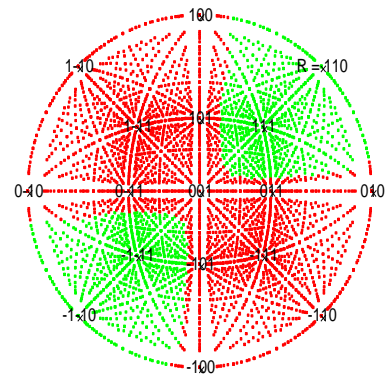


Pb-Ag ((R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • 50 < ΔE < 100
 • 100 < ΔE < 150

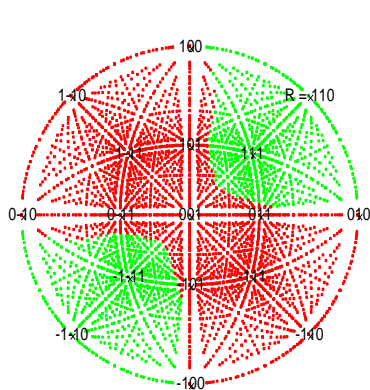
A.2.1.d Bicristal Pb-Cu ; $\Delta\mu = 4.45$



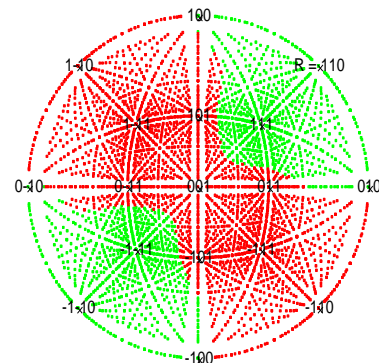
Pb-Cu $\{ (R=[110]; \theta=0^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



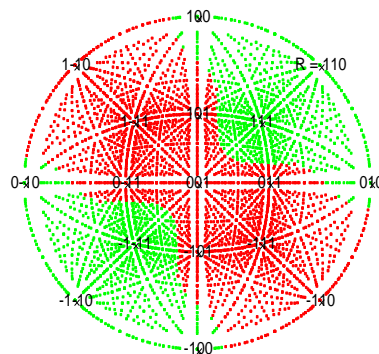
Pb-Cu $\{ (R=[110]; \theta=20^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



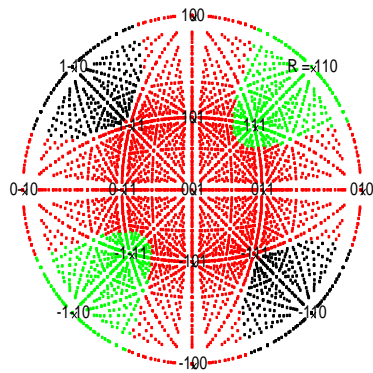
Pb-Cu $\{ (R=[110]; \theta=40^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



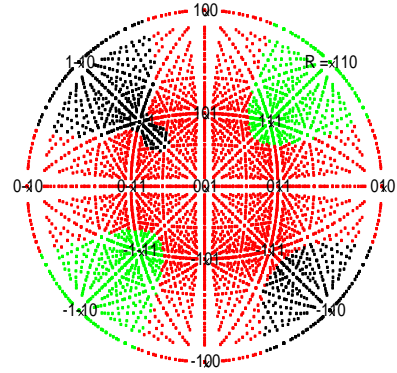
Pb-Cu $\{ (R=[110]; \theta=60^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



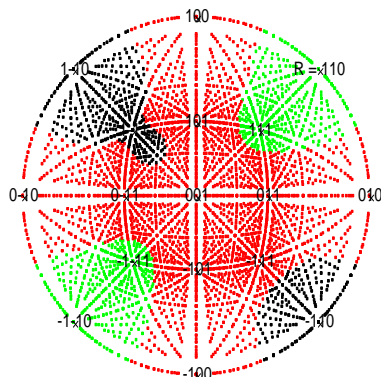
Pb-Cu $\{ (R=[110]; \theta=90^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$

A.2.1.e Bicristal Pb-Ni ; $\Delta\mu = 8.46$ 

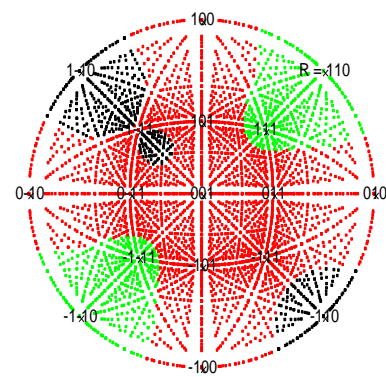
Pb-Ni $\{ (R=[110]; \theta=0^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



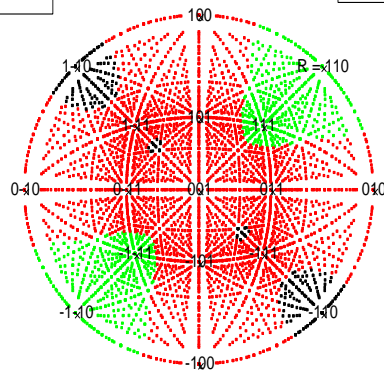
Pb-Ni $\{ (R=[110]; \theta=20^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



Pb-Ni $\{ (R=[110]; \theta=40^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



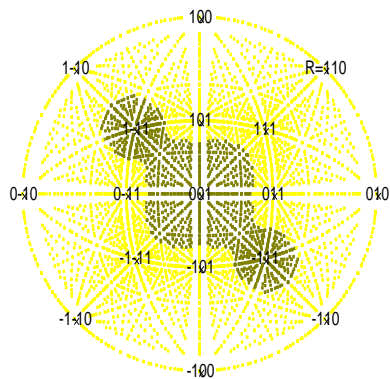
Pb-Ni $\{ (R=[110]; \theta=60^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



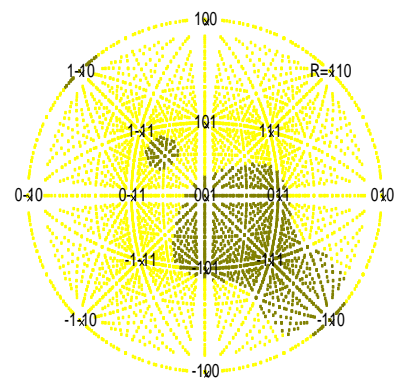
Pb-Ni $\{ (R=[110]; \theta=90^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$

2. bicristaux Al-X

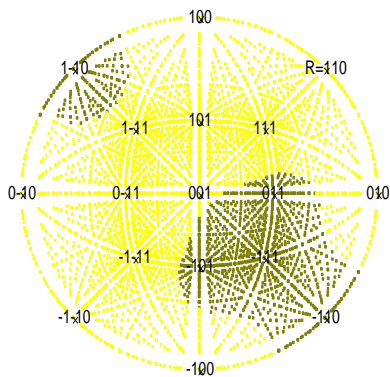
A.2.2.a Bicristal Al-Pb ; $\Delta\mu = -1.64$



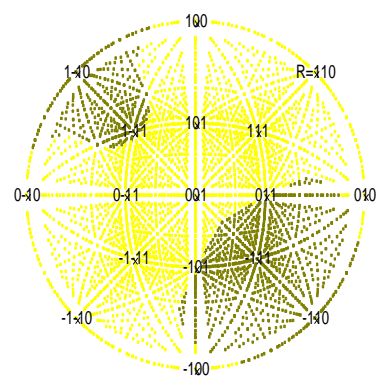
Al-Pb {(R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 ■ $-200 < \Delta E < -150$
 ■ $-150 < \Delta E < -100$



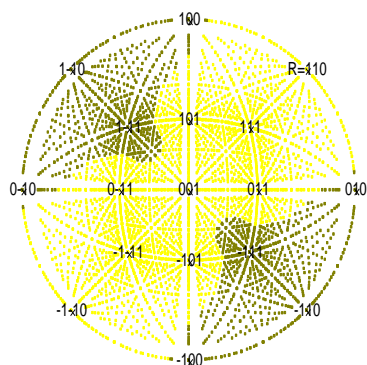
Al-Pb {(R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 ■ $-200 < \Delta E < -150$
 ■ $-150 < \Delta E < -100$



Al-Pb {(R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 ■ $-200 < \Delta E < -150$
 ■ $-150 < \Delta E < -100$

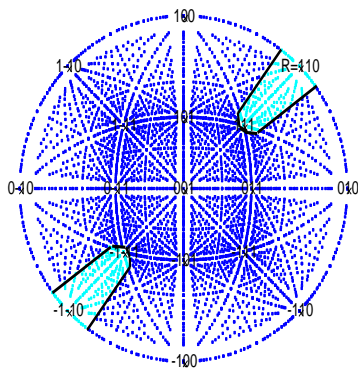


Al-Pb {(R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 ■ $-200 < \Delta E < -150$
 ■ $-150 < \Delta E < -100$

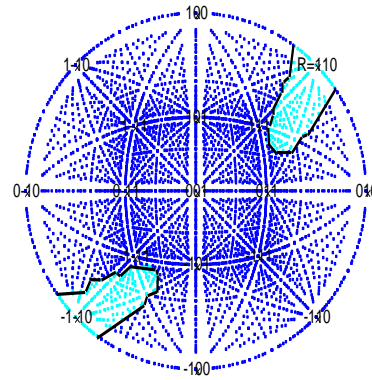


Al-Pb {(R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 ■ $-200 < \Delta E < -150$
 ■ $-150 < \Delta E < -100$

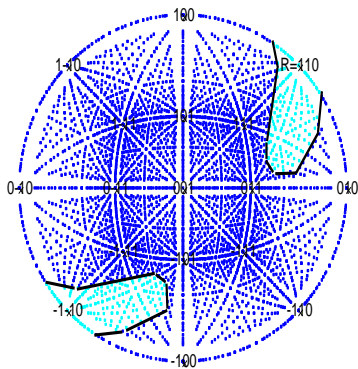
A.2.2.b Bicristal Al-Au ; $\Delta\mu = 0.45$



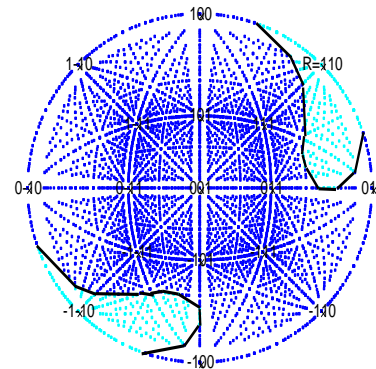
Al-Au ((R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$



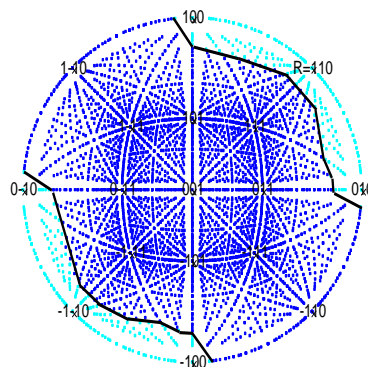
Al-Au ((R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$



Al-Au ((R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$

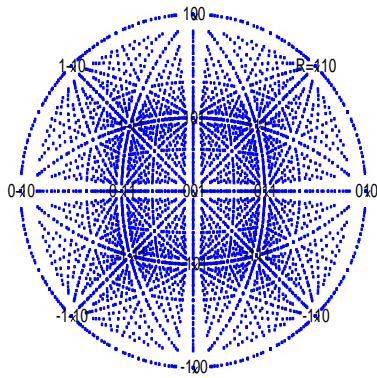


Al-Au ((R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$

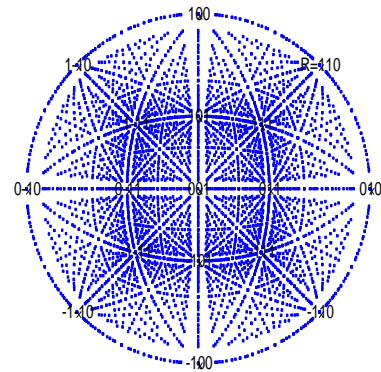


Al-Au ((R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$

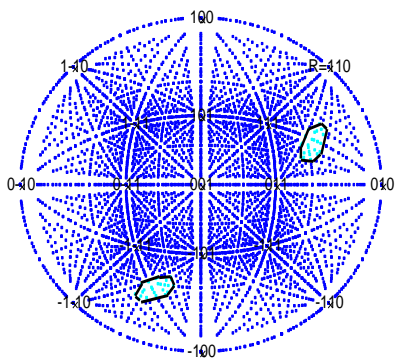
A.2.2.c Bicristal Al-Ag ; $\Delta\mu = 0.73$



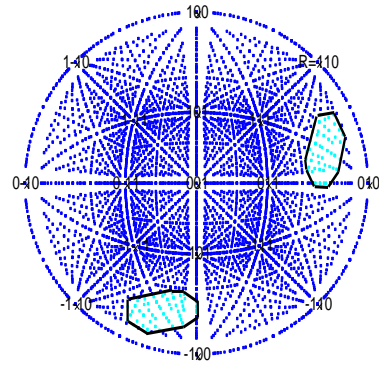
Al-Ag ((R=[110]; $\theta=0^\circ$, $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $0 < \Delta E < 50$



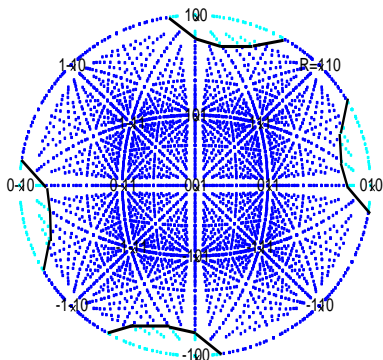
Al-Ag ((R=[110]; $\theta=20^\circ$, $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $0 < \Delta E < 50$



Al-Ag ((R=[110]; $\theta=40^\circ$, $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$

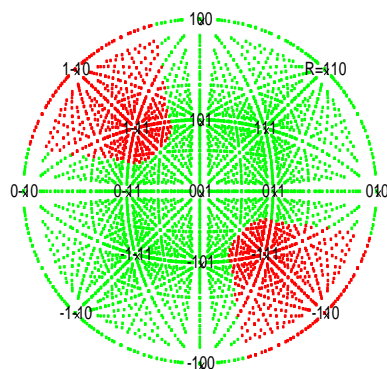


Al-Ag ((R=[110]; $\theta=60^\circ$, $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$

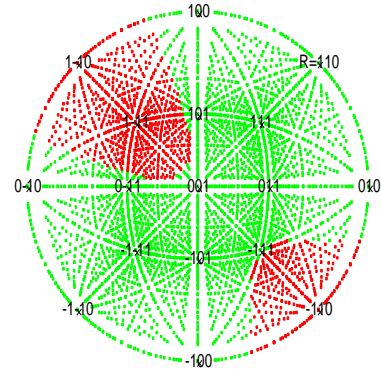


Al-Ag ((R=[110]; $\theta=90^\circ$, $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$

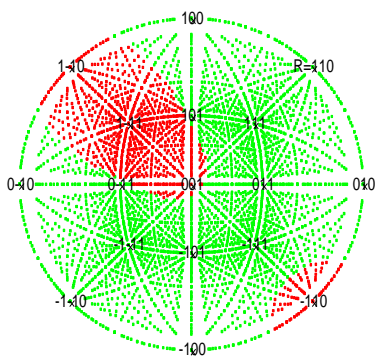
A.2.2.d Bicristal Al-Cu ; $\Delta\mu = 2.81$



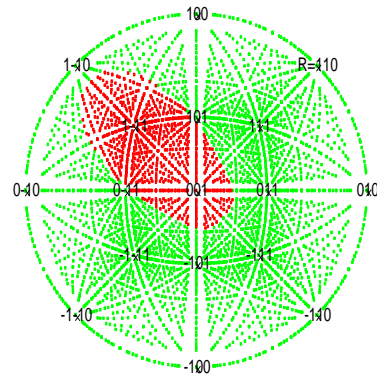
Al-Cu ((R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



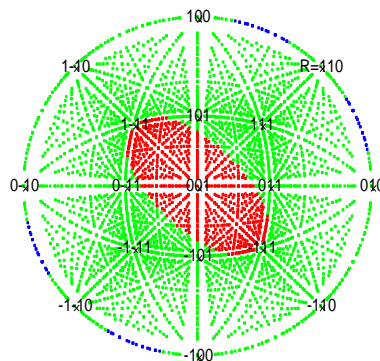
Al-Cu ((R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



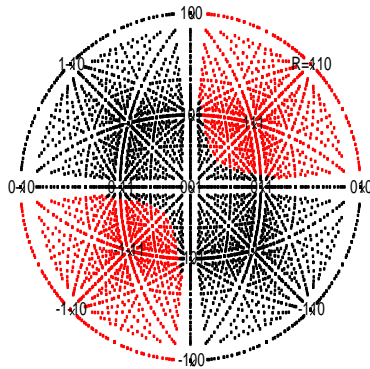
Al-Cu ((R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



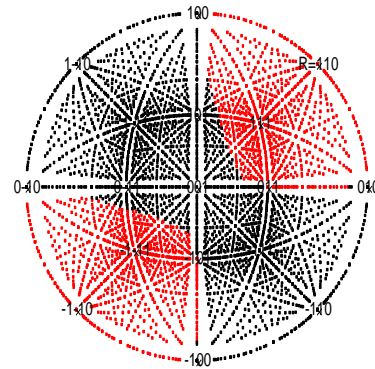
Al-Cu ((R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



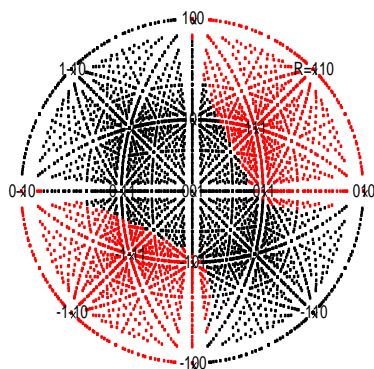
Al-Cu ((R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $0 < \Delta E < 50$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$

A.2.2.e Bicristal Al-Ni ; $\Delta\mu = 6.82$ 

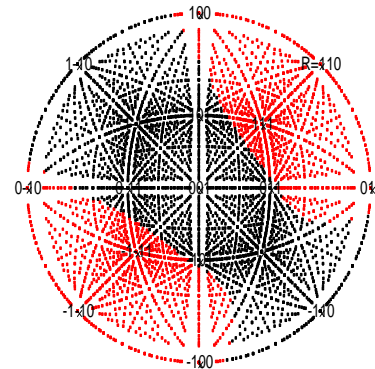
Al-Ni ($R=[110]$; $\theta=0^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



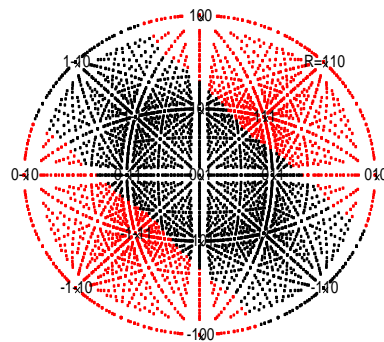
Al-Ni ($R=[110]$; $\theta=20^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



Al-Ni ($R=[110]$; $\theta=40^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



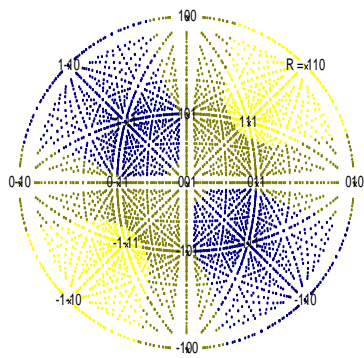
Al-Ni ($R=[110]$; $\theta=60^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



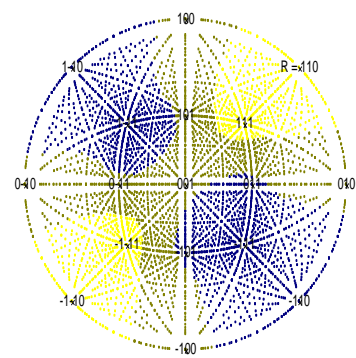
Al-Ni ($R=[110]$; $\theta=90^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$

3. Bicristaux Au-X

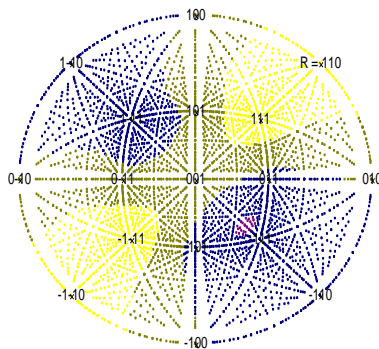
A.2.3.a Bicristal Au-Pb ; $\Delta\mu = -2.09$



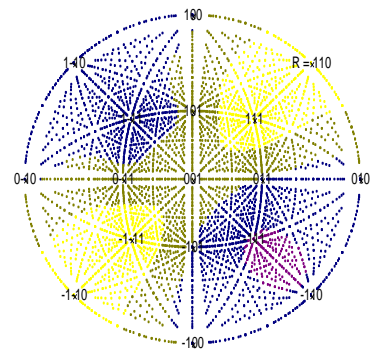
Au-Pb ($R=[110]$; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$
 ΔE (pJ/m)
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150
 • -150 < ΔE < -100



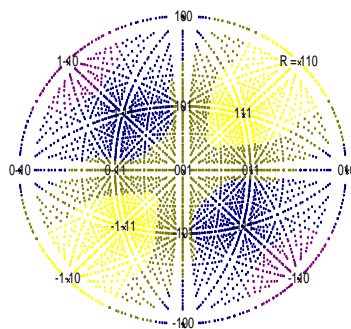
Au-Pb ($R=[110]$; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$
 ΔE (pJ/m)
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150
 • -150 < ΔE < -100



Au-Pb ($R=[110]$; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$
 ΔE (pJ/m)
 • -300 < ΔE < -2500
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150
 • -150 < ΔE < -100

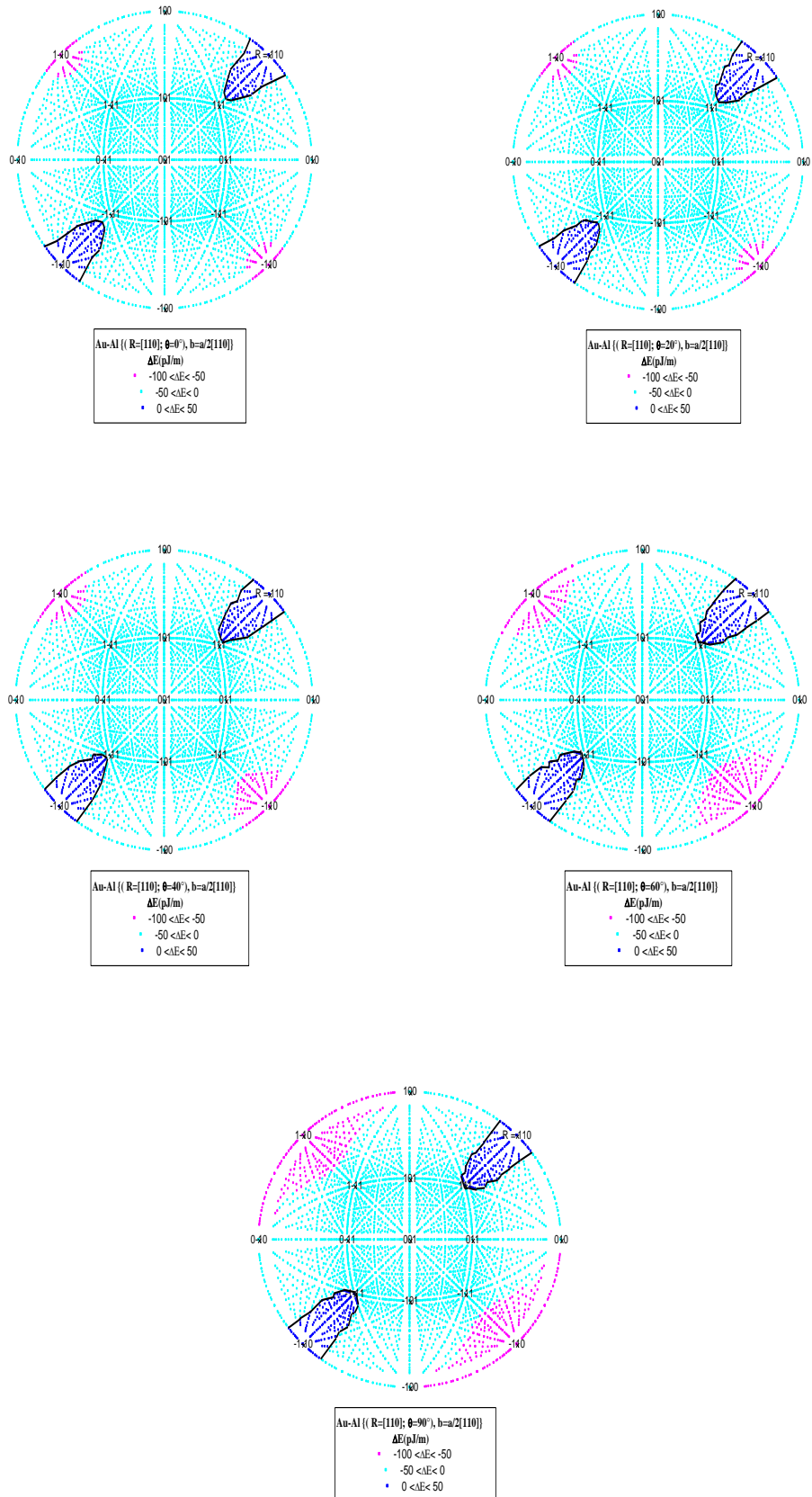


Au-Pb ($R=[110]$; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$
 ΔE (pJ/m)
 • -300 < ΔE < -2500
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150
 • -150 < ΔE < -100

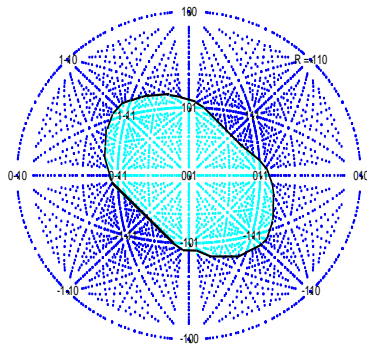


Au-Pb ($R=[110]$; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$
 ΔE (pJ/m)
 • -300 < ΔE < -2500
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150
 • -150 < ΔE < -100

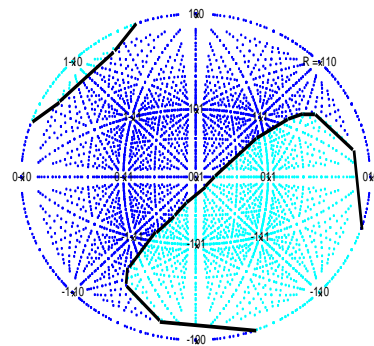
A.2.3.b Bicristal Au-Al ; $\Delta\mu = -0.45$



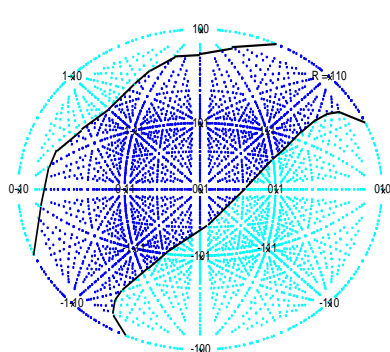
A.2.3.c Bicristal Au-Ag ; $\Delta\mu = 0.28$



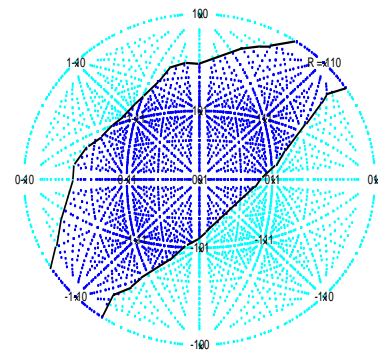
Au-Ag ((R=[110]; $\theta=0^\circ$), b=a/2[110])
 ΔE (pJ/m)
 • -50 < ΔE < 0
 • 0 < ΔE < 50



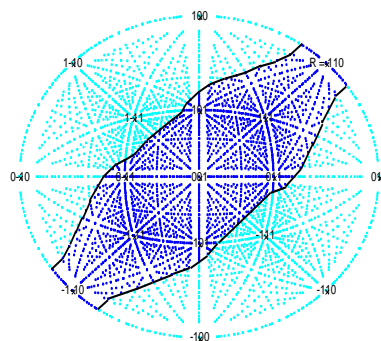
Au-Ag ((R=[110]; $\theta=20^\circ$), b=a/2[110])
 ΔE (pJ/m)
 • -50 < ΔE < 0
 • 0 < ΔE < 50



Au-Ag ((R=[110]; $\theta=40^\circ$), b=a/2[110])
 ΔE (pJ/m)
 • -50 < ΔE < 0
 • 0 < ΔE < 50

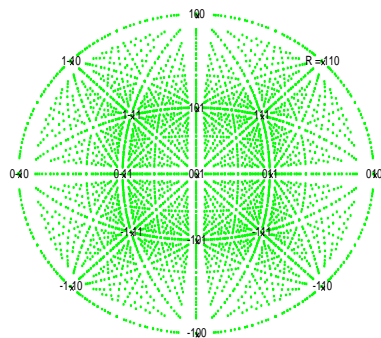


Au-Ag ((R=[110]; $\theta=60^\circ$), b=a/2[110])
 ΔE (pJ/m)
 • -50 < ΔE < 0
 • 0 < ΔE < 50

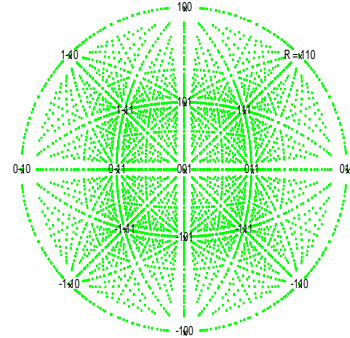


Au-Ag ((R=[110]; $\theta=90^\circ$), b=a/2[110])
 ΔE (pJ/m)
 • -50 < ΔE < 0
 • 0 < ΔE < 50

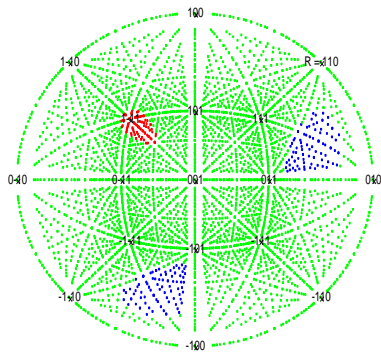
A.2.3.d Bicristal Au-Cu : $\Delta\mu = 2.36$



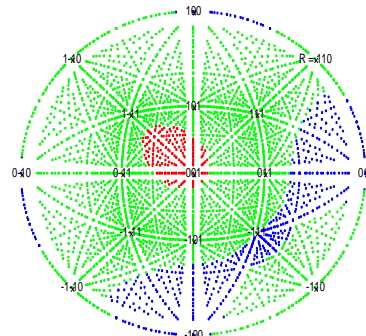
Au-Cu ($R=[110]; \theta=0^\circ, b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$



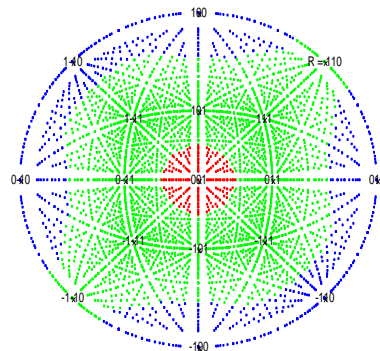
Au-Cu ($R=[110]; \theta=20^\circ, b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$



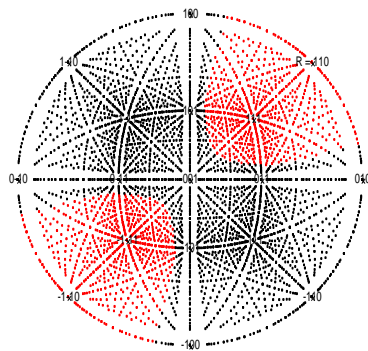
Au-Cu ($R=[110]; \theta=40^\circ, b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $0 < \Delta E < 50$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



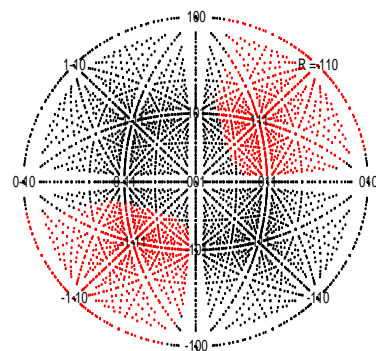
Au-Cu ($R=[110]; \theta=60^\circ, b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $0 < \Delta E < 50$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



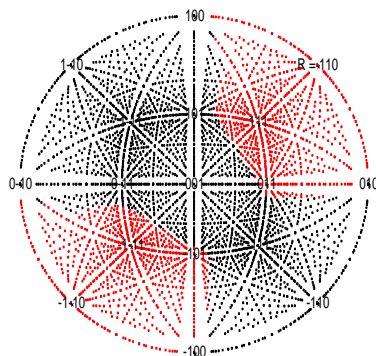
Au-Cu ($R=[110]; \theta=90^\circ, b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $0 < \Delta E < 50$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$

A.2.3.e Bicristal Au-Ni ; $\Delta\mu = 6.37$ 

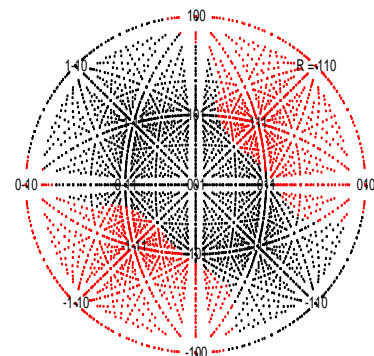
Au-Ni ($R=[110]$; $\theta=0^\circ$, $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\mu\text{J/m})$
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



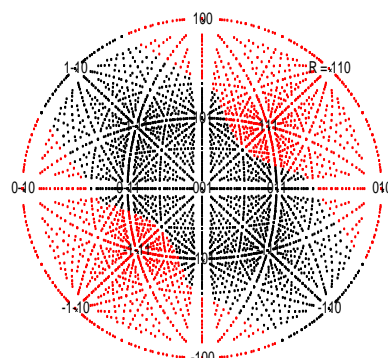
Au-Ni ($R=[110]$; $\theta=20^\circ$, $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\mu\text{J/m})$
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



Au-Ni ($R=[110]$; $\theta=40^\circ$, $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\mu\text{J/m})$
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



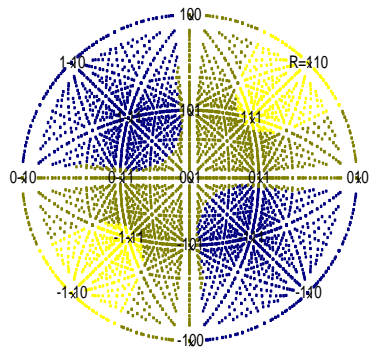
Au-Ni ($R=[110]$; $\theta=60^\circ$, $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\mu\text{J/m})$
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



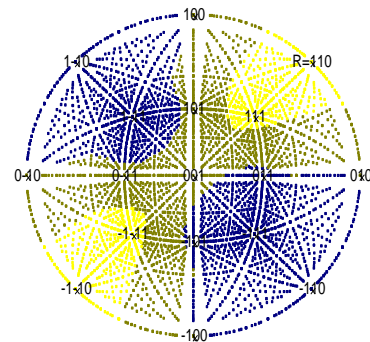
Au-Ni ($R=[110]$; $\theta=90^\circ$, $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\mu\text{J/m})$
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$

4. Bicristaux Ag-X

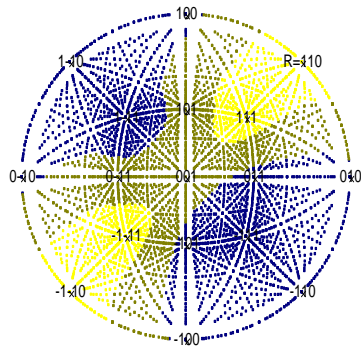
A.2.4.a Bicristal Ag-Pb ; $\Delta\mu = -2.37$



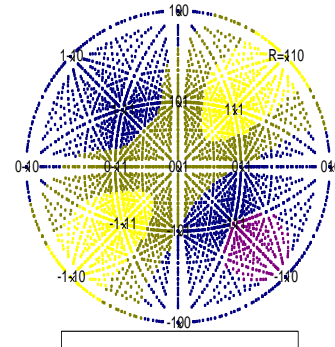
Ag-Pb ((R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -250 ΔE < -200
 ■ -200 ΔE < -150
 ■ -150 ΔE < -100



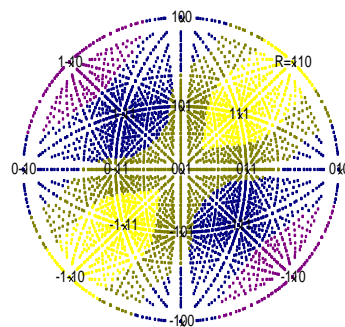
Ag-Pb ((R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -250 ΔE < -200
 ■ -200 ΔE < -150
 ■ -150 ΔE < -100



Ag-Pb ((R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -250 ΔE < -200
 ■ -200 ΔE < -150
 ■ -150 ΔE < -100

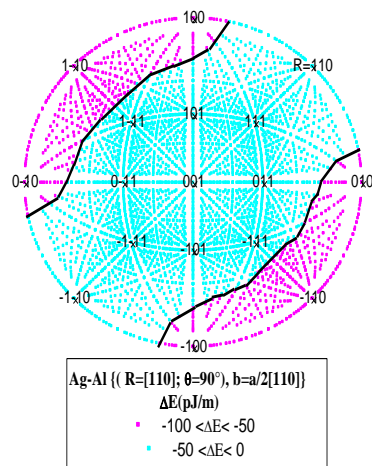
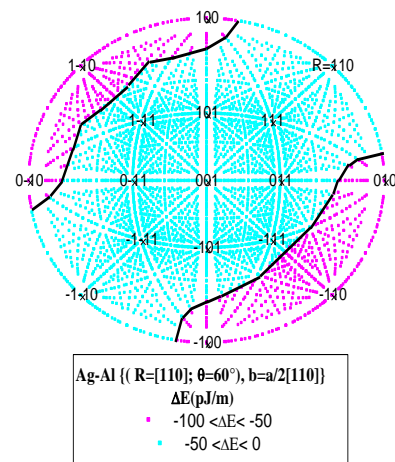
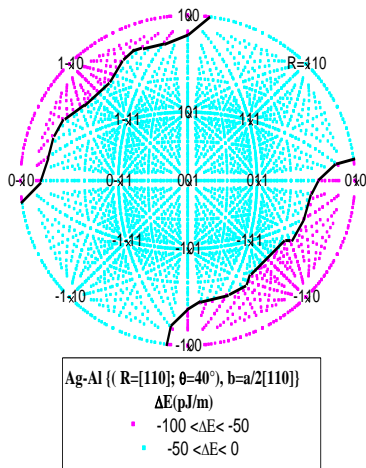
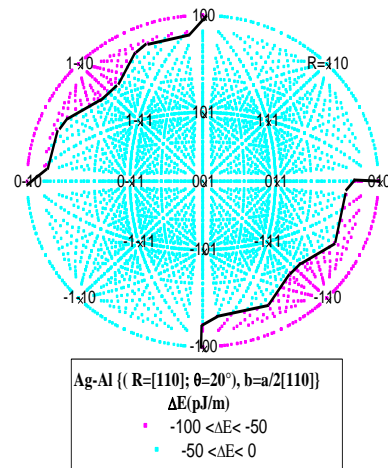
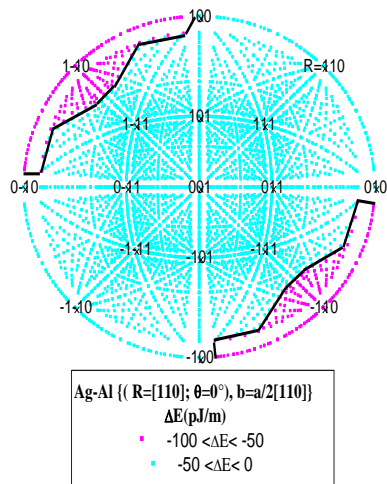


Ag-Pb ((R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ -300 ΔE < -250
 ■ -250 ΔE < -200
 ■ -200 ΔE < -150
 ■ -150 ΔE < -100

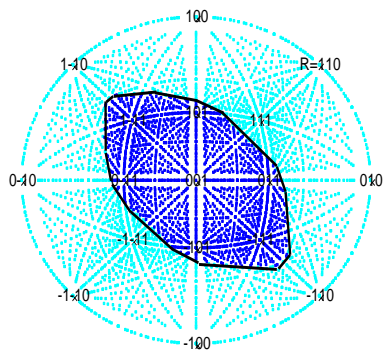


Ag-Pb ((R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ -300 ΔE < -250
 ■ -250 ΔE < -200
 ■ -200 ΔE < -150
 ■ -150 ΔE < -100

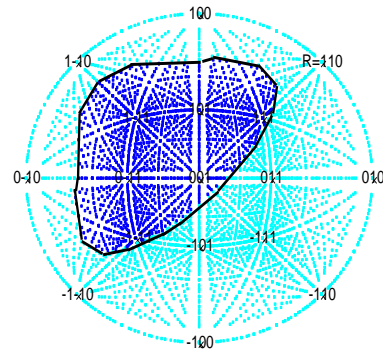
A.2.4.b Bicristal Ag-Al ; $\Delta\mu = -0.73$



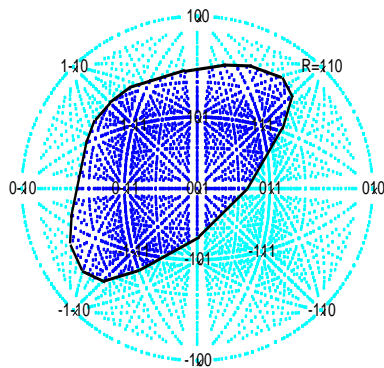
A.2.4.c Bicristal Ag-Au ; $\Delta\mu = -0.28$



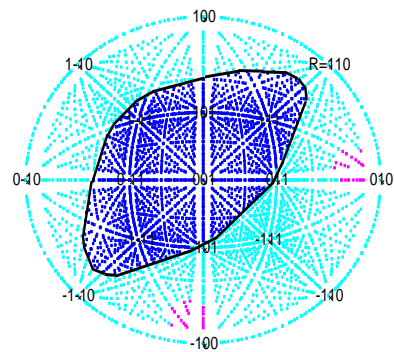
Ag-Au ((R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$



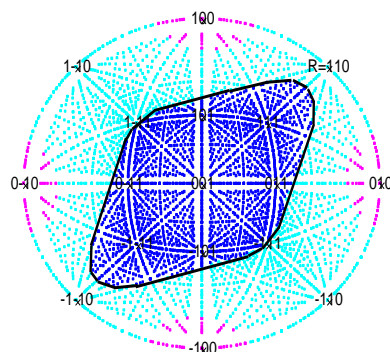
Ag-Au ((R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$



Ag-Au ((R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$

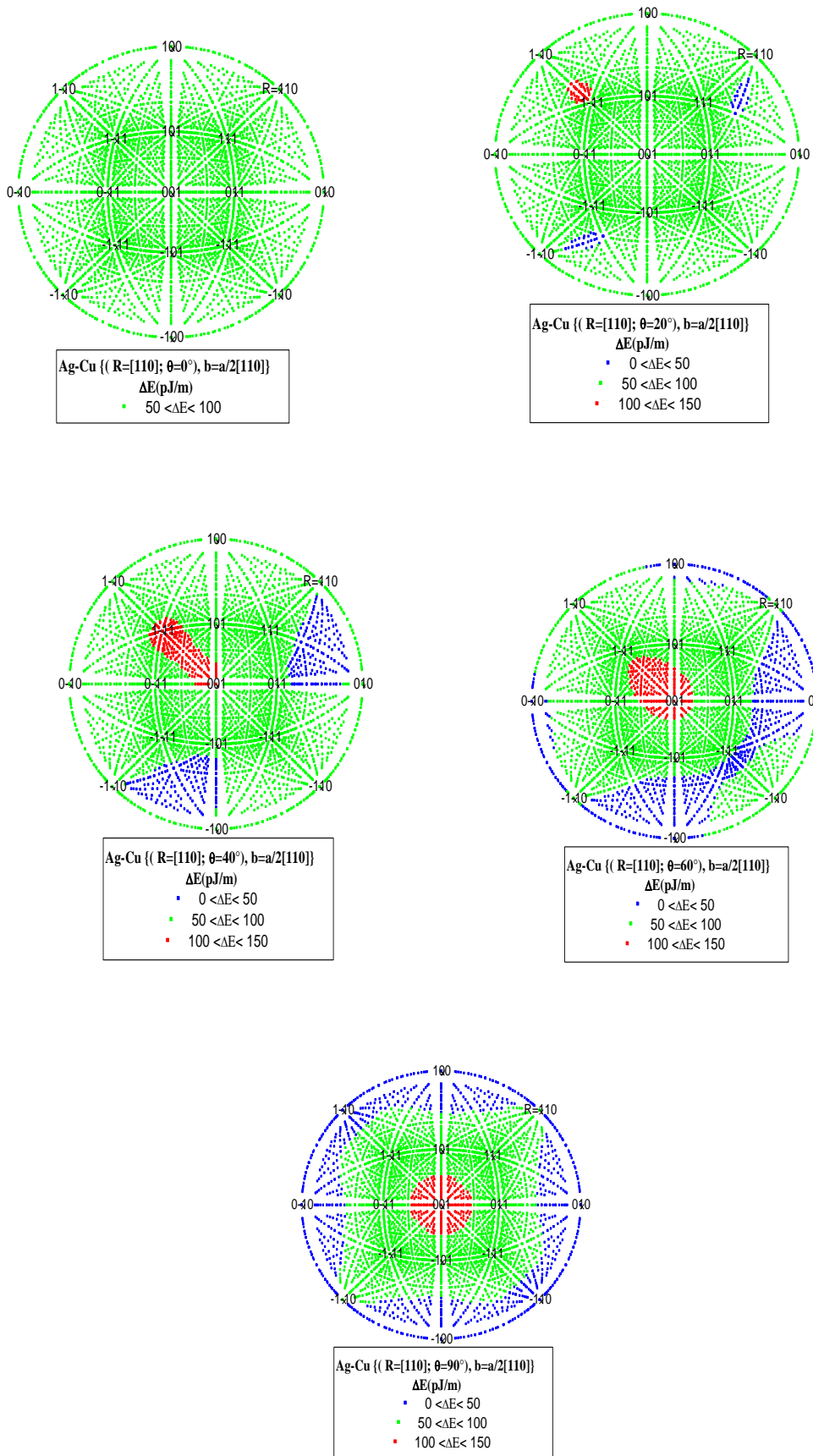


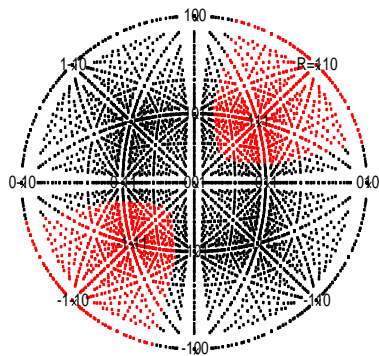
Ag-Au ((R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-100 < \Delta E < -50$
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$



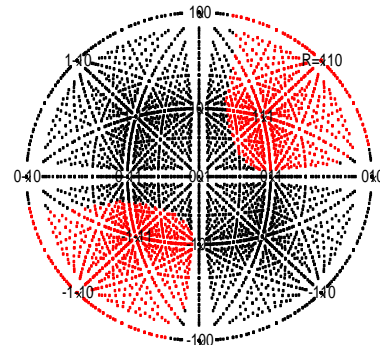
Ag-Au ((R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$)
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-100 < \Delta E < -50$
 • $-50 < \Delta E < 0$
 • $0 < \Delta E < 50$

A.2.4.d Bicristal Ag-Cu ; $\Delta\mu = 2.08$

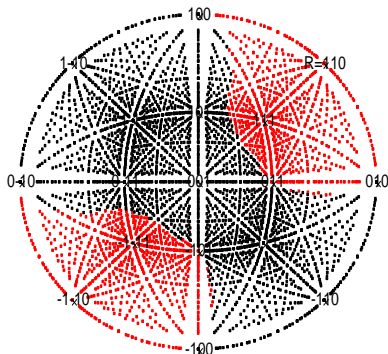


A.2.4.e Bicristal Ag-Ni ; $\Delta\mu = 6.09$ 

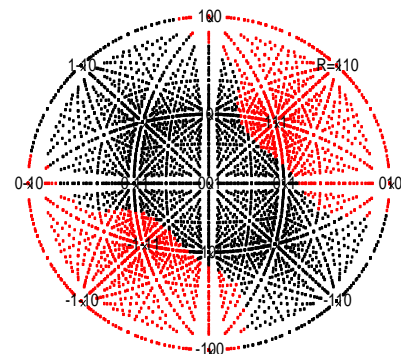
Ag-Ni ((R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



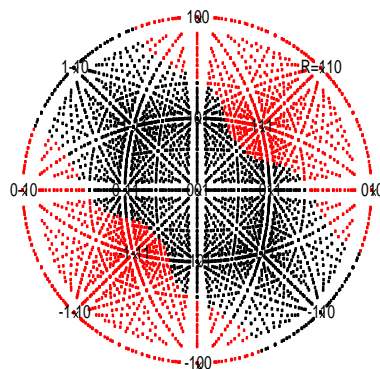
Ag-Ni ((R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



Ag-Ni ((R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



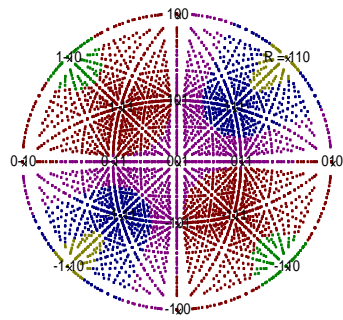
Ag-Ni ((R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$



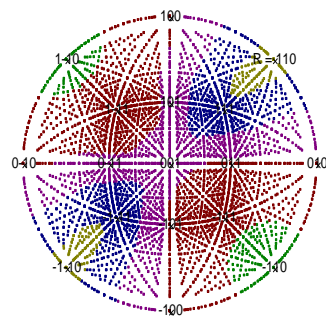
Ag-Ni ((R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$

5. Bicristaux Cu-X

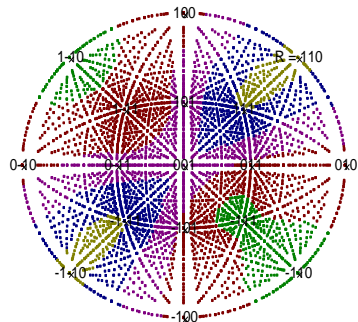
A.2.5.a Bicristal Cu-Pb ; $\Delta\mu = -4.45$



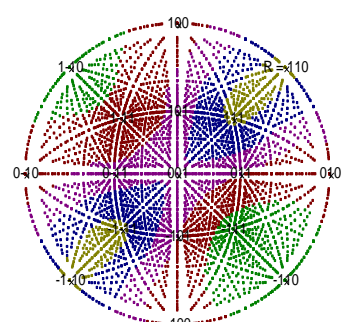
Cu-Pb ((R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150



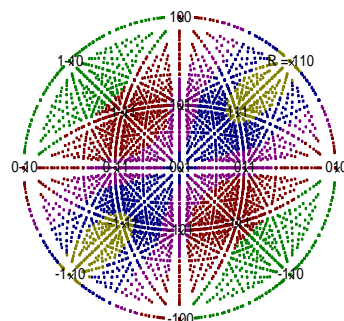
Cu-Pb ((R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150



Cu-Pb ((R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150

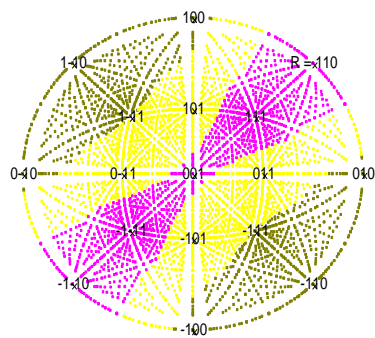


Cu-Pb ((R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150

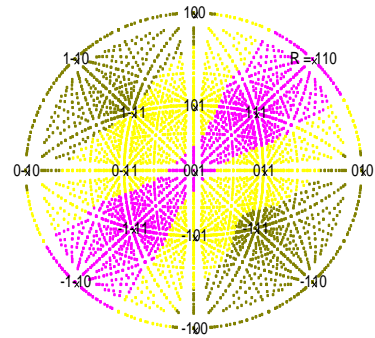


Cu-Pb ((R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150

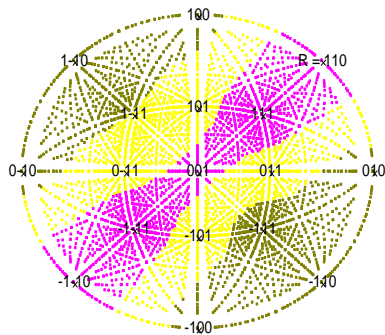
A.2.5.b Bicristal Cu-Al ; $\Delta\mu = -2.81$



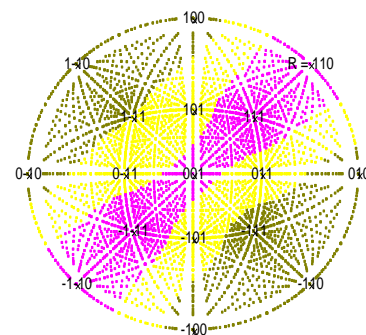
Cu-Al ((R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ -200 <math>\Delta E < -150</math>
 ■ -150 <math>\Delta E < -100</math>
 ■ -100 <math>\Delta E < -50</math>



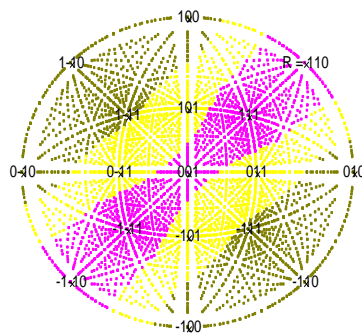
Cu-Al ((R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ -200 <math>\Delta E < -150</math>
 ■ -150 <math>\Delta E < -100</math>
 ■ -100 <math>\Delta E < -50</math>



Cu-Al ((R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ -200 <math>\Delta E < -150</math>
 ■ -150 <math>\Delta E < -100</math>
 ■ -100 <math>\Delta E < -50</math>

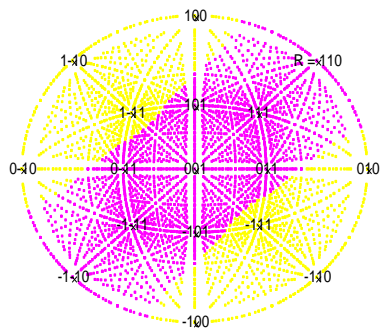


Cu-Al ((R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ -200 <math>\Delta E < -150</math>
 ■ -150 <math>\Delta E < -100</math>
 ■ -100 <math>\Delta E < -50</math>

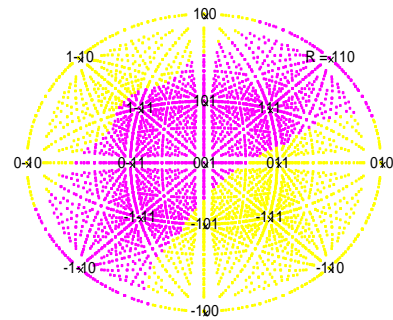


Cu-Al ((R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 ■ -200 <math>\Delta E < -150</math>
 ■ -150 <math>\Delta E < -100</math>
 ■ -100 <math>\Delta E < -50</math>

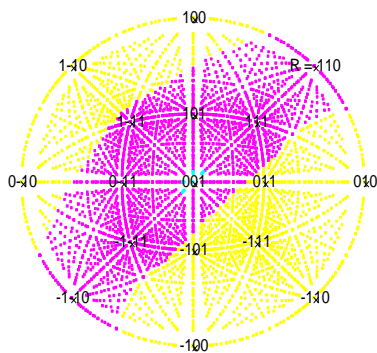
A.2.5.c Bicristal Cu-Au ; $\Delta\mu = -2.36$



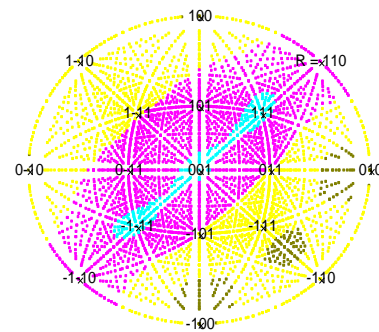
Cu-Au { (R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -150 <math>\Delta E < -100</math>
 • -100 <math>\Delta E < -50</math>



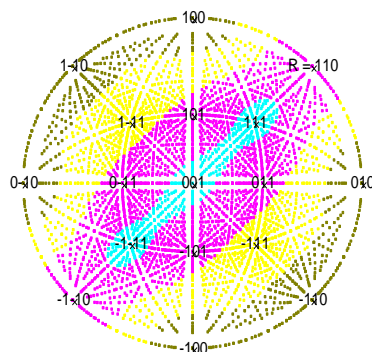
Cu-Au { (R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -150 <math>\Delta E < -100</math>
 • -100 <math>\Delta E < -50</math>



Cu-Au { (R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -150 <math>\Delta E < -100</math>
 • -100 <math>\Delta E < -50</math>
 • -50 <math>\Delta E < 0</math>

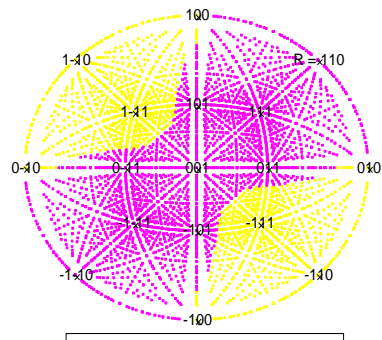


Cu-Au { (R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -200 <math>\Delta E < -150</math>
 • -150 <math>\Delta E < -100</math>
 • -100 <math>\Delta E < -50</math>
 • -50 <math>\Delta E < 0</math>

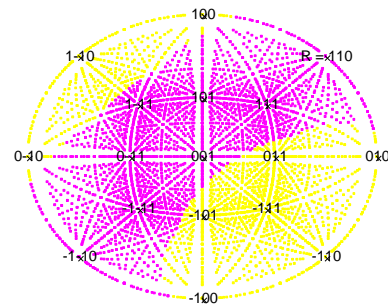


Cu-Au { (R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -200 <math>\Delta E < -150</math>
 • -150 <math>\Delta E < -100</math>
 • -100 <math>\Delta E < -50</math>
 • -50 <math>\Delta E < 0</math>

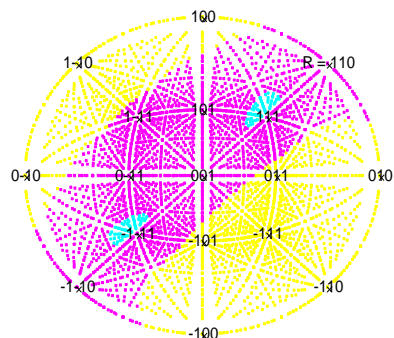
A.2.5.d Bicristal Cu-Ag ; $\Delta\mu = -2.08$



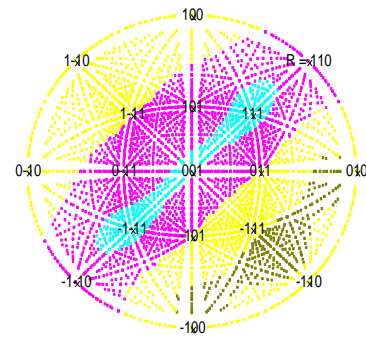
Cu-Ag { (R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -150 <math>\Delta E < -100</math>
 • -100 <math>\Delta E < -50</math>



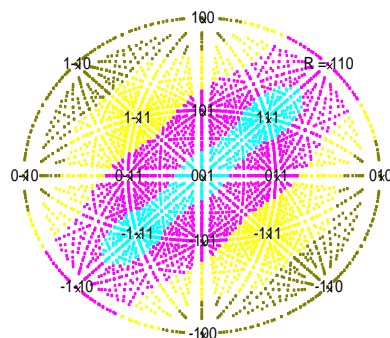
Cu-Ag { (R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -150 <math>\Delta E < -100</math>
 • -100 <math>\Delta E < -50</math>



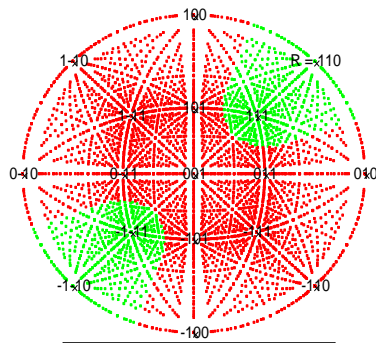
Cu-Ag { (R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -150 <math>\Delta E < -100</math>
 • -100 <math>\Delta E < -50</math>
 • -50 <math>\Delta E < 0</math>



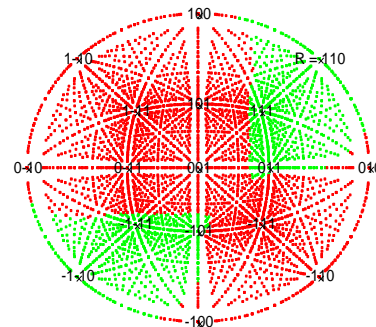
Cu-Ag { (R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -200 <math>\Delta E < -150</math>
 • -150 <math>\Delta E < -100</math>
 • -100 <math>\Delta E < -50</math>
 • -50 <math>\Delta E < 0</math>



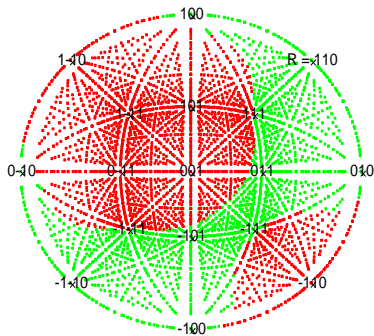
Cu-Ag { (R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -200 <math>\Delta E < -150</math>
 • -150 <math>\Delta E < -100</math>
 • -100 <math>\Delta E < -50</math>
 • -50 <math>\Delta E < 0</math>

A.2.5.d Bicristal Cu-Ni ; $\Delta\mu = 4.01$ 

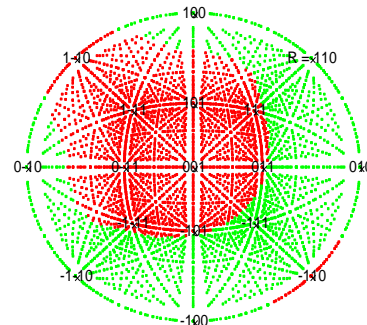
Cu-Ni $\{ (R=[110]; \theta=0^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



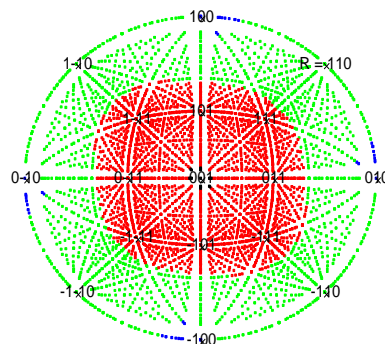
Cu-Ni $\{ (R=[110]; \theta=20^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



Cu-Ni $\{ (R=[110]; \theta=40^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



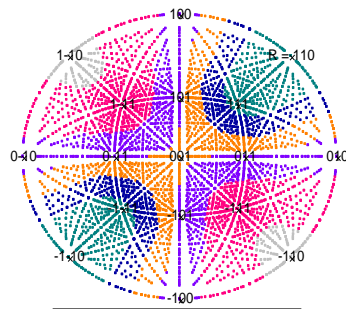
Cu-Ni $\{ (R=[110]; \theta=60^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$



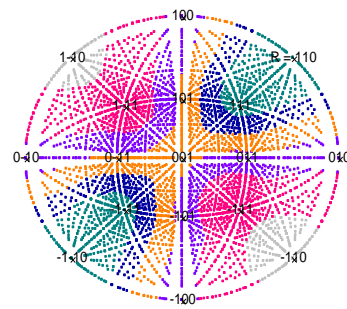
Cu-Ni $\{ (R=[110]; \theta=90^\circ), b=a/2[110] \}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $0 < \Delta E < 50$
 • $50 < \Delta E < 100$
 • $100 < \Delta E < 150$
 • $150 < \Delta E < 200$

6. Bicristaux Ni-X

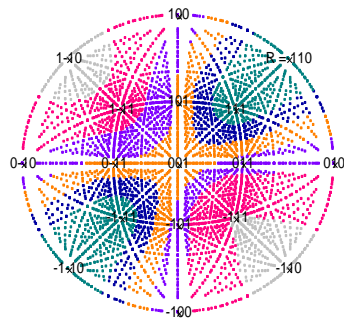
A.2.6.a Bicristal Ni-Pb ; $\Delta\mu = -8.46$



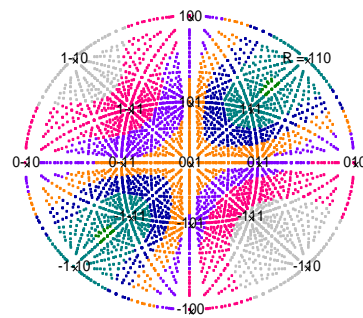
Ni-Pb ((R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -700 < ΔE < -650
 • -650 < ΔE < -600
 • -600 < ΔE < -550
 • -550 < ΔE < -500
 • -500 < ΔE < -450
 • -450 < ΔE < -400



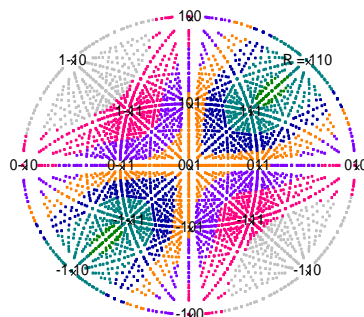
Ni-Pb ((R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -700 < ΔE < -650
 • -650 < ΔE < -600
 • -600 < ΔE < -550
 • -550 < ΔE < -500
 • -500 < ΔE < -450
 • -450 < ΔE < -400



Ni-Pb ((R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -700 < ΔE < -650
 • -650 < ΔE < -600
 • -600 < ΔE < -550
 • -550 < ΔE < -500
 • -500 < ΔE < -450
 • -450 < ΔE < -400

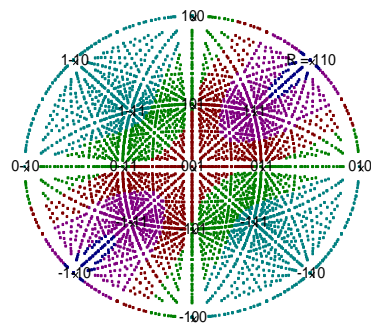


Ni-Pb ((R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -700 < ΔE < -650
 • -650 < ΔE < -600
 • -600 < ΔE < -550
 • -550 < ΔE < -500
 • -500 < ΔE < -450
 • -450 < ΔE < -400

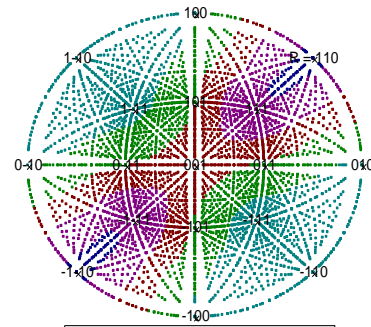


Ni-Pb ((R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -700 < ΔE < -650
 • -650 < ΔE < -600
 • -600 < ΔE < -550
 • -550 < ΔE < -500
 • -500 < ΔE < -450
 • -450 < ΔE < -400

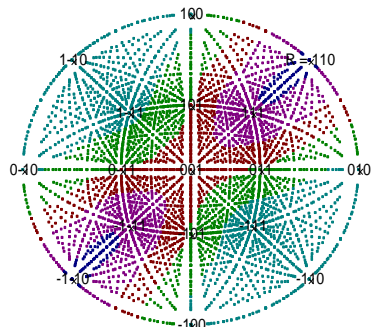
A.2.6.b Bicristal Ni-Al ; $\Delta\mu = -6.82$



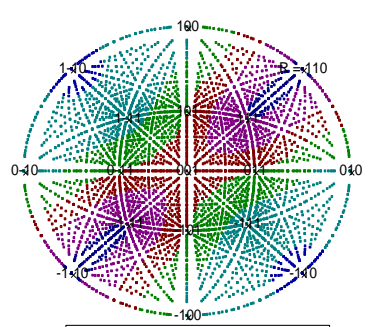
Ni-Al { (R=[110]; $\theta=0^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -450 < ΔE < -400
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200



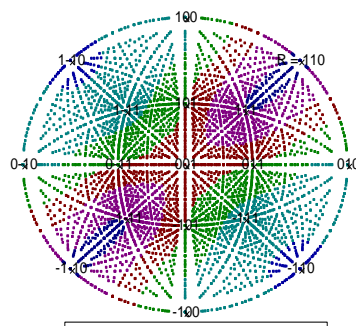
Ni-Al { (R=[110]; $\theta=20^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -450 < ΔE < -400
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200



Ni-Al { (R=[110]; $\theta=40^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -450 < ΔE < -400
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200

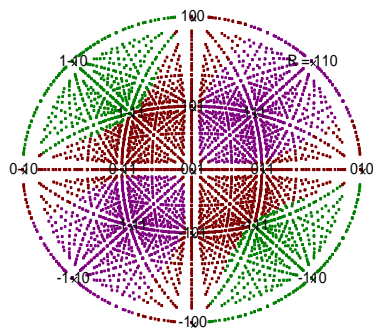


Ni-Al { (R=[110]; $\theta=60^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -500 < ΔE < -450
 • -450 < ΔE < -400
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200

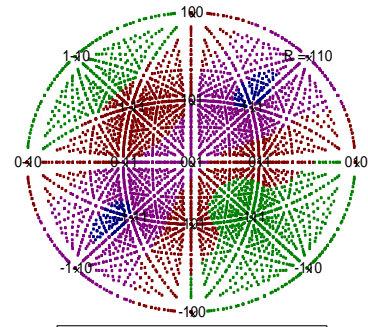


Ni-Al { (R=[110]; $\theta=90^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -500 < ΔE < -450
 • -450 < ΔE < -400
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200

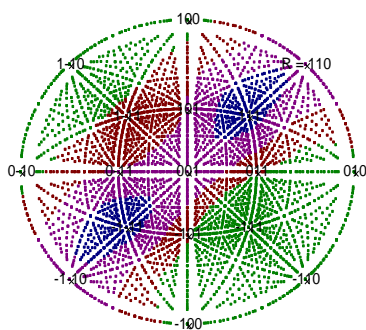
A.2.6.c Bicristal Ni-Au ; $\Delta\mu = -6.37$



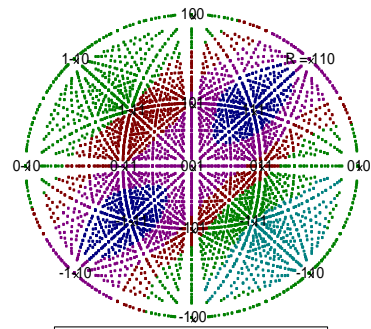
Ni-Au $\{(R=[110]; \theta=0^\circ), b=a/2[110]\}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-400 < \Delta E < -350$
 • $-350 < \Delta E < -300$
 • $-300 < \Delta E < -250$



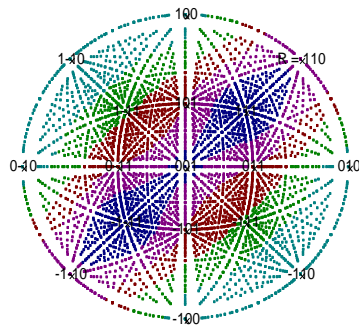
Ni-Au $\{(R=[110]; \theta=20^\circ), b=a/2[110]\}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-400 < \Delta E < -350$
 • $-350 < \Delta E < -300$
 • $-300 < \Delta E < -250$
 • $-250 < \Delta E < -200$



Ni-Au $\{(R=[110]; \theta=40^\circ), b=a/2[110]\}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-400 < \Delta E < -350$
 • $-350 < \Delta E < -300$
 • $-300 < \Delta E < -250$
 • $-250 < \Delta E < -200$

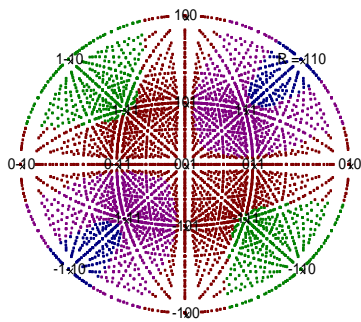


Ni-Au $\{(R=[110]; \theta=60^\circ), b=a/2[110]\}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-450 < \Delta E < -400$
 • $-400 < \Delta E < -350$
 • $-350 < \Delta E < -300$
 • $-300 < \Delta E < -250$
 • $-250 < \Delta E < -200$

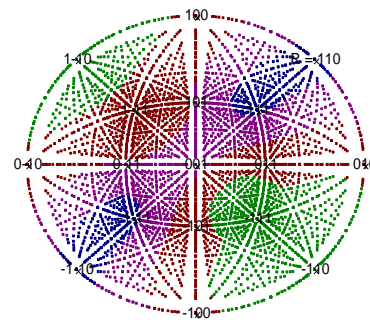


Ni-Au $\{(R=[110]; \theta=90^\circ), b=a/2[110]\}$
 $\Delta E(\text{pJ/m})$
 • $-450 < \Delta E < -400$
 • $-400 < \Delta E < -350$
 • $-350 < \Delta E < -300$
 • $-300 < \Delta E < -250$
 • $-250 < \Delta E < -200$

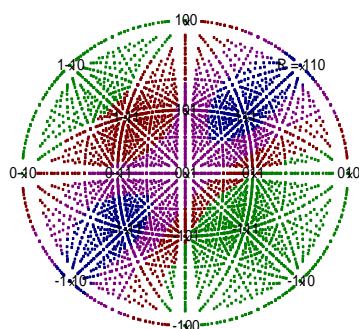
--

A.2.6.d Bicristal Ni-Ag ; $\Delta\mu = -6.09$ 

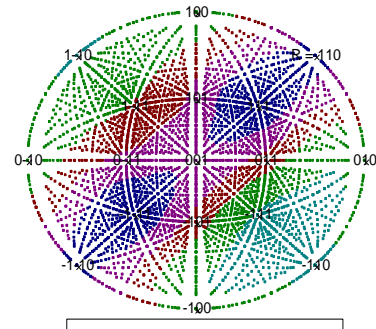
Ni-Ag { (R=[110]; $\theta=0^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200



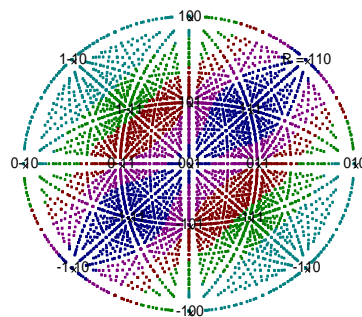
Ni-Ag { (R=[110]; $\theta=20^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200



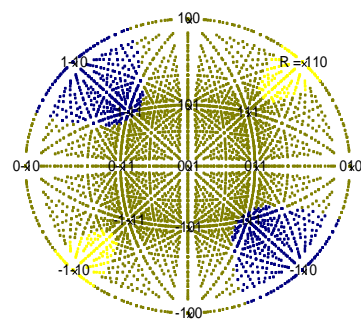
Ni-Ag { (R=[110]; $\theta=40^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200



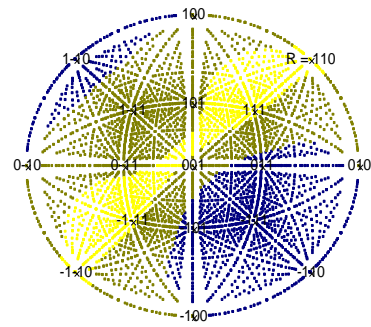
Ni-Ag { (R=[110]; $\theta=60^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -450 < ΔE < -400
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200



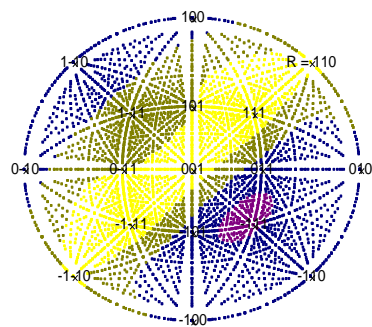
Ni-Ag { (R=[110]; $\theta=90^\circ$), $b=a/2[110]$ }
 ΔE (pJ/m)
 • -450 < ΔE < -400
 • -400 < ΔE < -350
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200

A.2.6.e Bicristal Ni-Cu ; $\Delta\mu = -4.01$ 

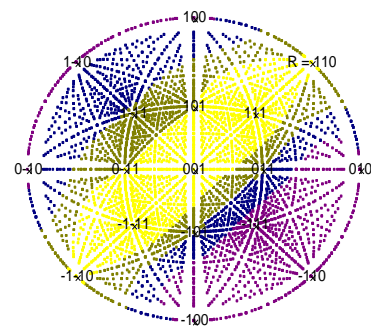
Ni-Cu { (R=[110]; $\theta=0^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150
 • -150 < ΔE < -100



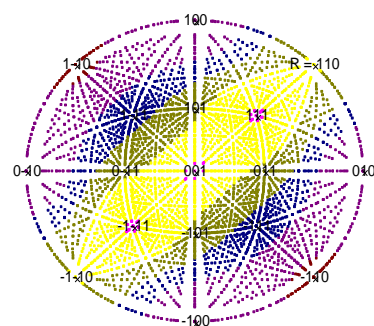
Ni-Cu { (R=[110]; $\theta=20^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150
 • -150 < ΔE < -100



Ni-Cu { (R=[110]; $\theta=40^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150
 • -150 < ΔE < -100



Ni-Cu { (R=[110]; $\theta=60^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150
 • -150 < ΔE < -100



Ni-Cu { (R=[110]; $\theta=90^\circ$, $b=a/2[110]$)
 ΔE (pJ/m)
 • -350 < ΔE < -300
 • -300 < ΔE < -250
 • -250 < ΔE < -200
 • -200 < ΔE < -150
 • -150 < ΔE < -100

Annexe 3

Distance d'efficacité de la force image

Annexe 2

Distance d'efficacité de la force image

Dans cette annexe nous présentons l'évolution de la force image et de la force de friction en fonction de la distance dislocation-joint interphase, pour une configuration cube sur cube, $\theta=0^\circ$.

- Pour une dislocation parfaite de ligne t [110], de vecteur de Burgers $\vec{b}_p = \frac{a}{2} [110]$.
- Pour les deux dislocations de type Shockley, de ligne t [110] et de vecteurs de Burgers

$$\vec{b}_{Sh1} = \frac{a}{6} [211] \text{ et } \vec{b}_{Sh2} = \frac{a}{6} [12-1].$$

Figures A.4.1 à A.4.30 : Evolution des forces images et des forces de friction en fonction la distance dislocation-joint interphase, pour les dislocations, vis parfaite et les deux partielles de Shockley, dans les bicristaux étudiés

- d_{c-p} , Distance maximale d'efficacité de la force image sur une dislocation vis parfaite.
- d_{c-Sh1} , Distance maximale d'efficacité de la force image sur une dislocation Shockley (1).
- d_{c-Sh2} , Distance maximale d'efficacité de la force image sur une dislocation Shockley (2).

- F_{i-p} , Force image sur une dislocation parfaite [110]
- F_{PN-p} , Force de friction sur une dislocation parfaite [110]
- F_{i-Sh1} , Force image sur une dislocation partielle de Shokley [211]
- F_{PN-Sh} , Force de friction sur une dislocation partielle de Shokley [211]
- F_{i-Sh2} , Force image sur une dislocation partielle de Shokley [12-1]

Pb-X

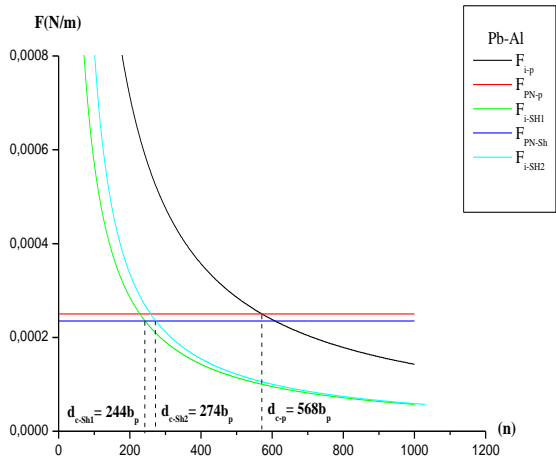


Figure A.3.1

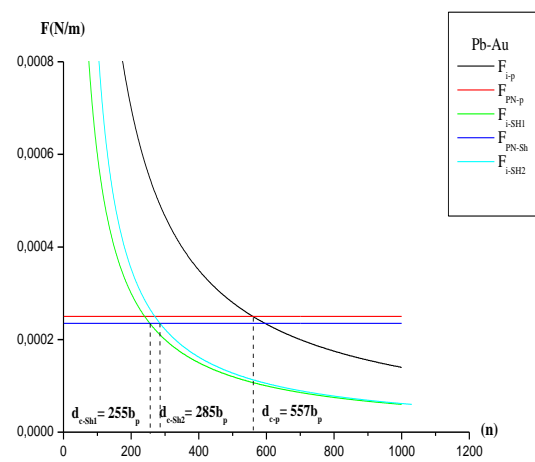


Figure A.3.2

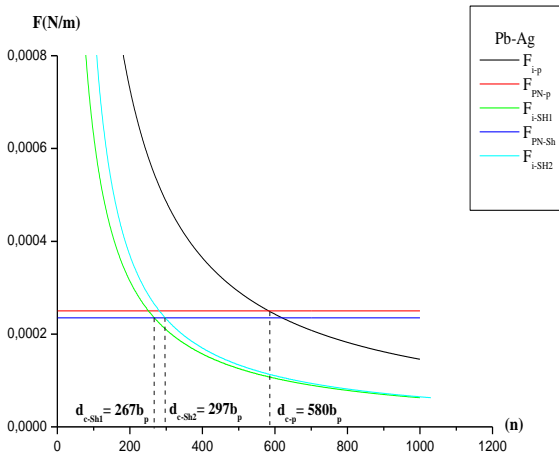


Figure A.3.3

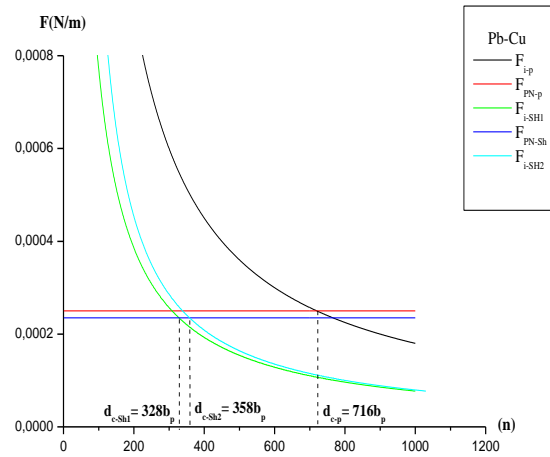


Figure A.3.4

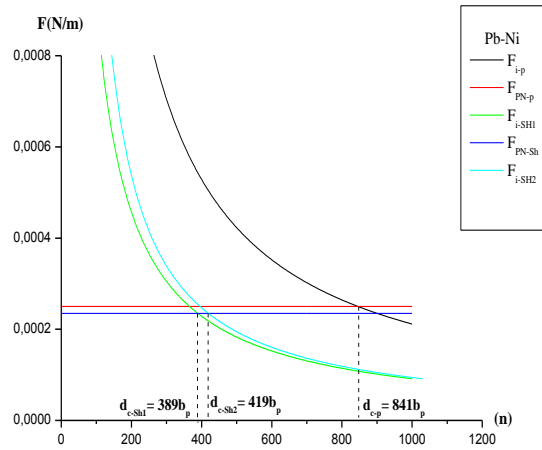


Figure A.3.5

Al-X

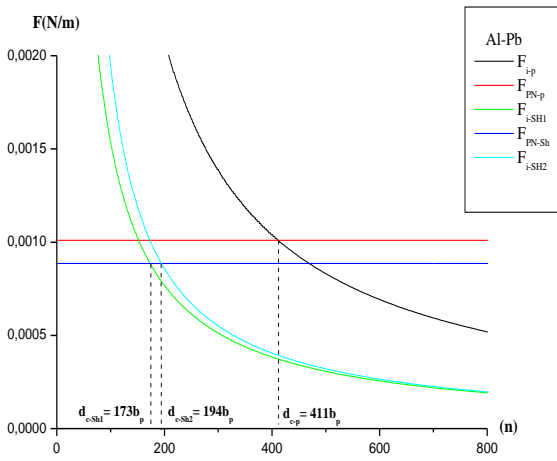


Figure A.3.6

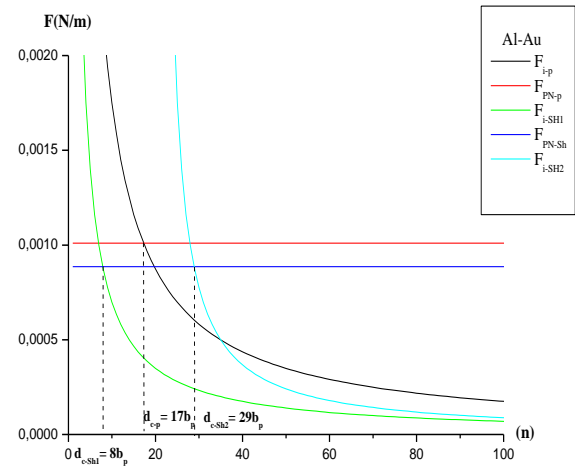


Figure A.3.7

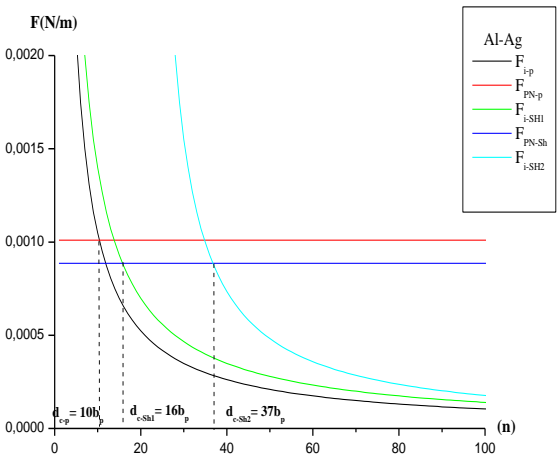


Figure A.3.8

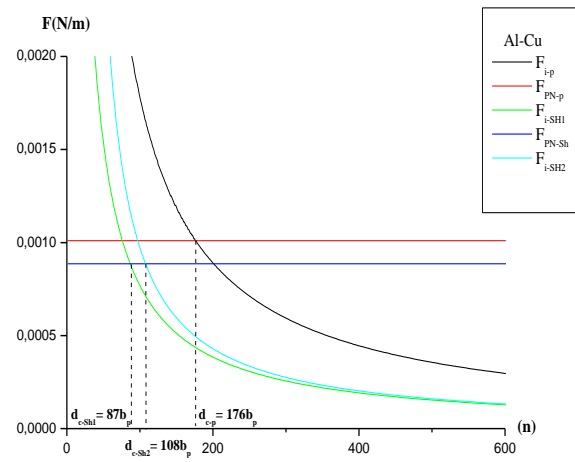


Figure A.3.9

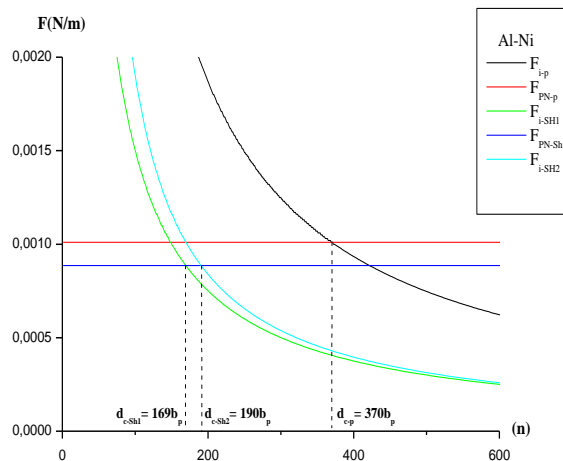


Figure A.3.10

Au-X

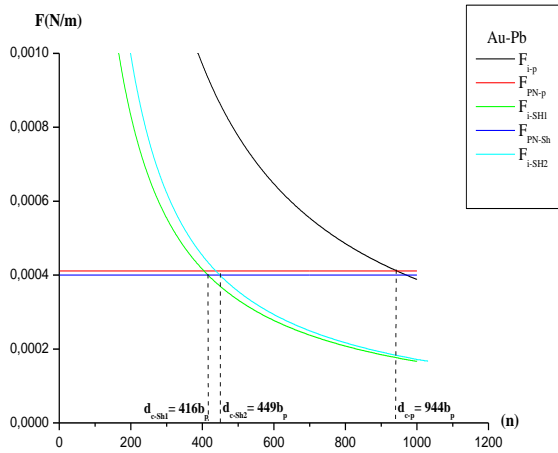


Figure A.3.11

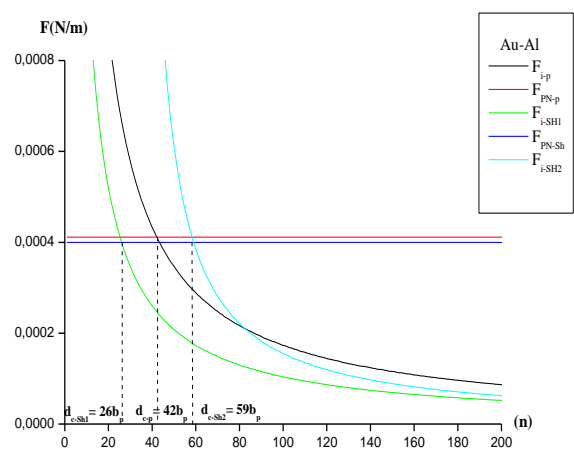


Figure A.3.12

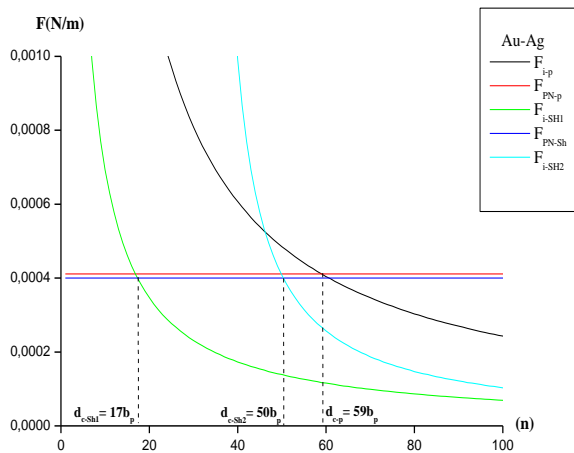


Figure A.3.13

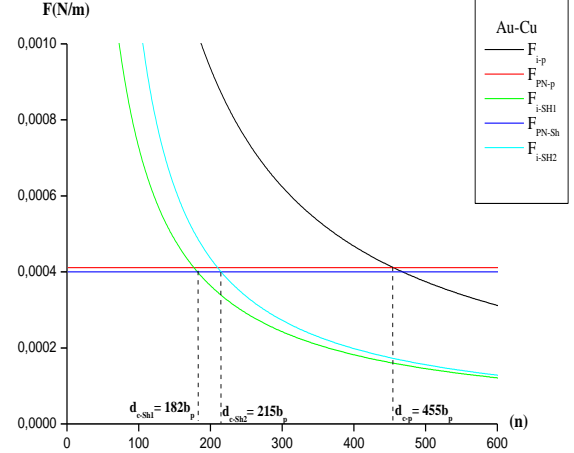


Figure A.3.14

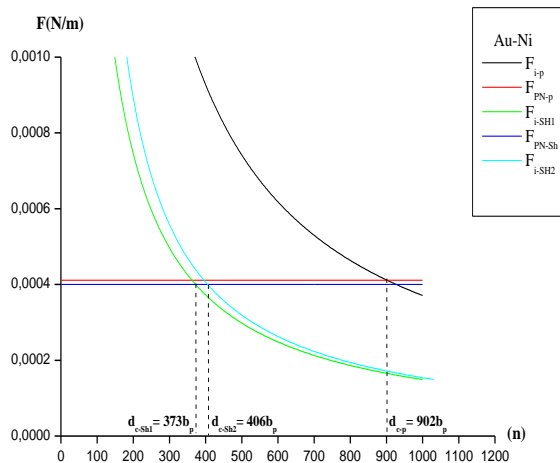


Figure A.3.15

Ag-X

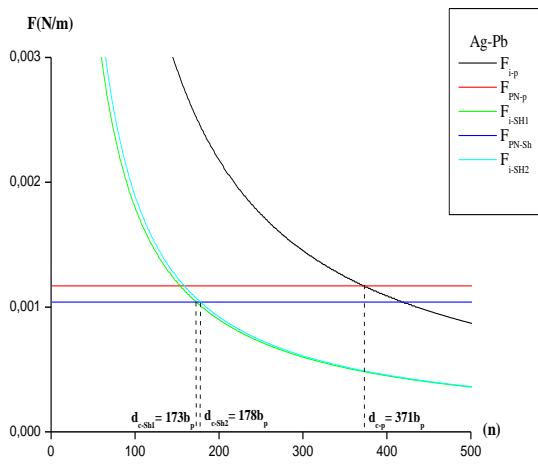


Figure A.3.16

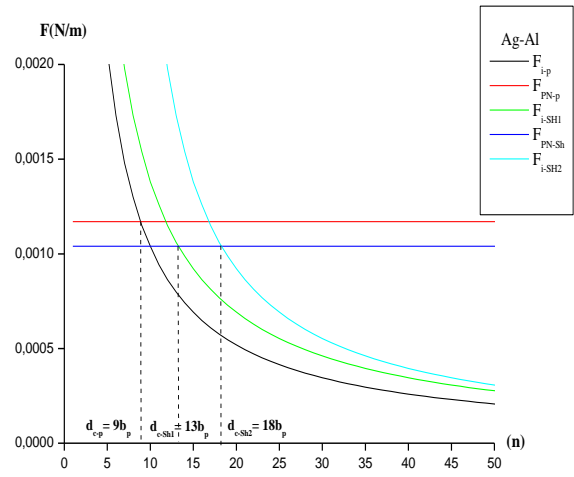


Figure A.3.17

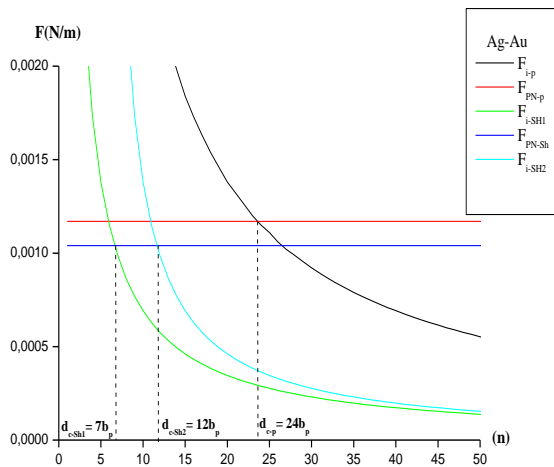


Figure A.3.18

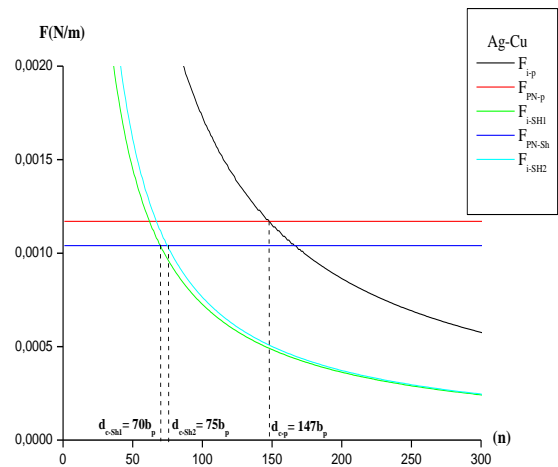


Figure A.3.19

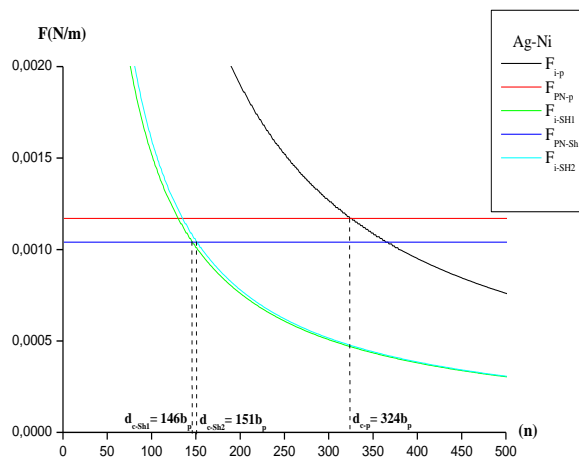


Figure A.3.20

Cu-X

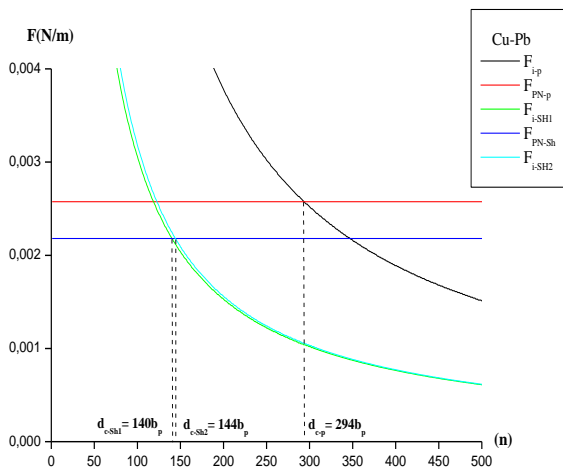


Figure A.3.21

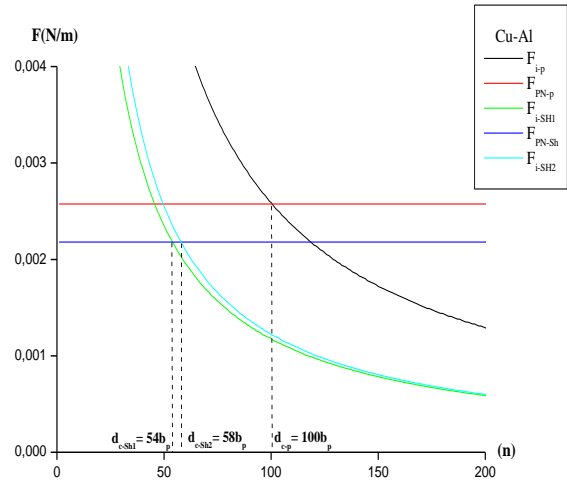


Figure A.3.22

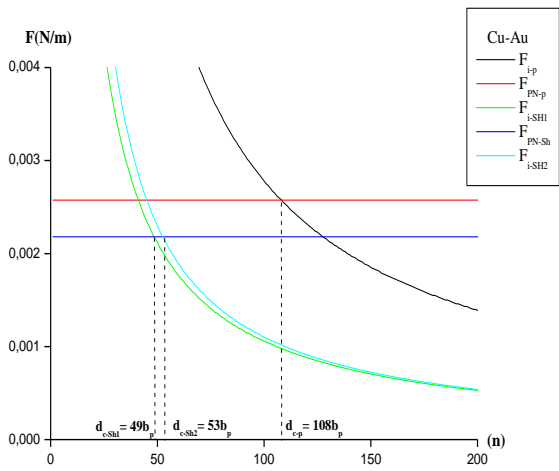


Figure A.3.23

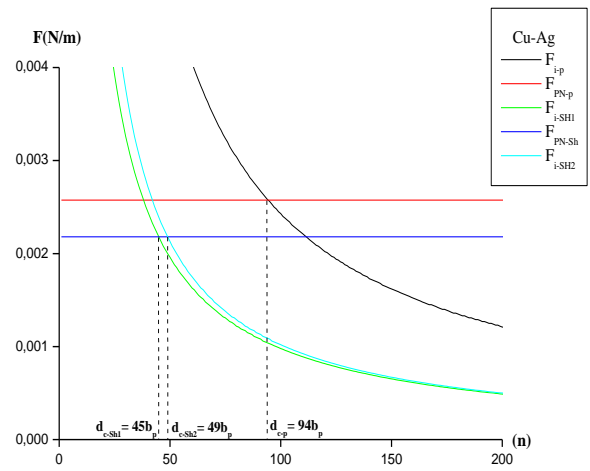


Figure A.3.24

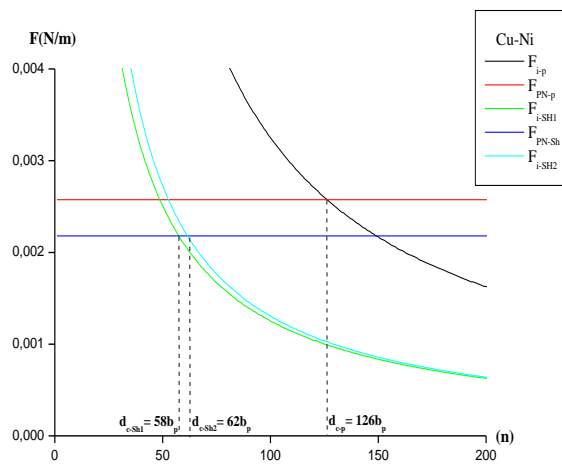


Figure A.3.25

Ni-X

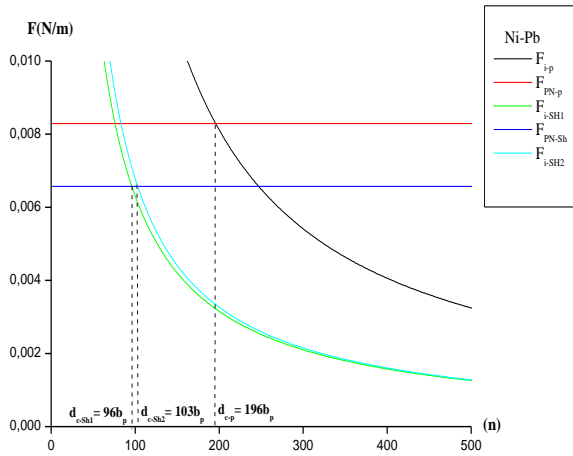


Figure A.3.26

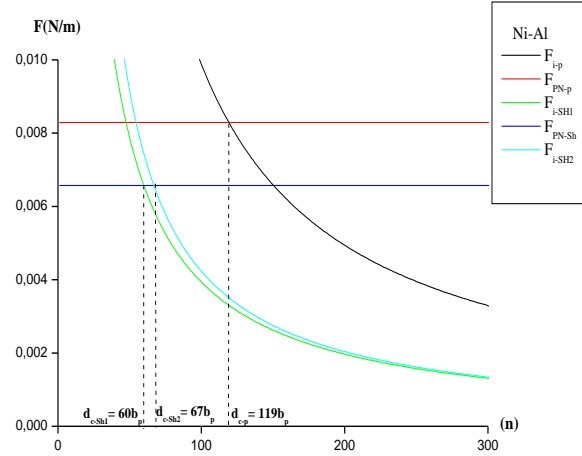


Figure A.3.27

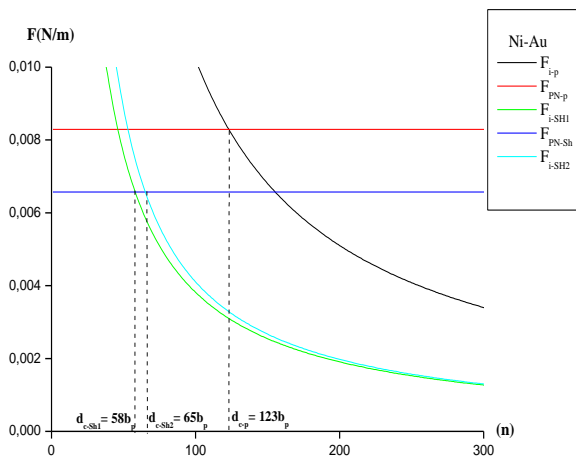


Figure A.3.28

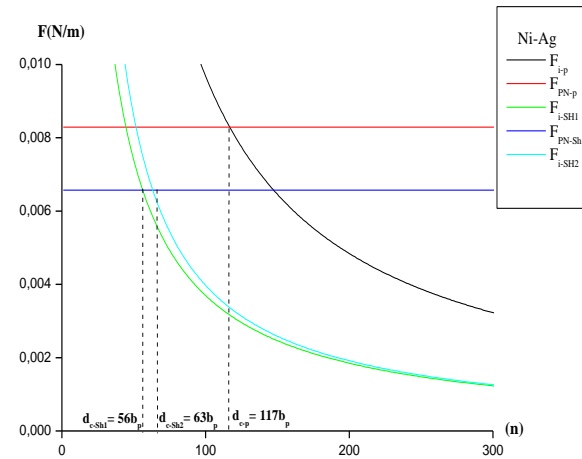


Figure A.3.29

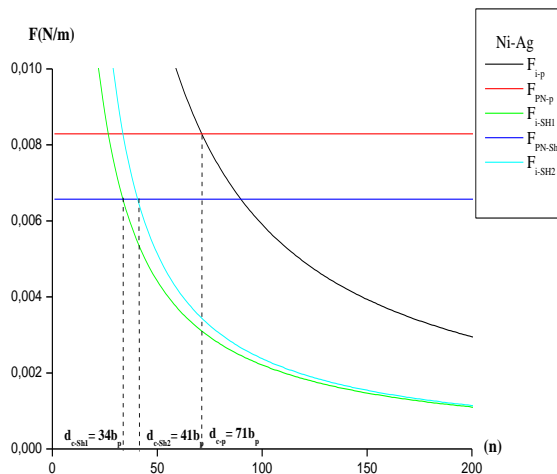


Figure A.3.30

Elastic Interaction Dislocation-Interphase Boundaries in Materials of Face Centred Cubic Structure

Abstract :

The majority of materials mechanical properties are due to the crystalline defects interactions, in particular the interaction between dislocations and interfaces. The interaction energy between a dislocation and an interphase boundary is calculated on the basis of the anisotropic linear elasticity. Dislocations in elastic interaction with the interphase boundary are submitted to a force called the image force, F_i , which is derived from the elastic interaction energy. The image force by its sign and intensity can predict the dislocation behavior.

The elastic interaction energies are calculated for biphasic bicrystals CFC materials, Pb, Al, Au, Ag, Cu and Ni, between matrix dislocations having Burgers vector $b = a/2[110]$, and interphase boundaries (R, θ) , with $R = [110]$ and θ is in the range $[0^\circ, 90^\circ]$ varying by steps of 10° . Dislocations are located in the crystal 1 at a distance d from the boundary plane, they are parallel to the boundary plane.

The main results are:

- For each bicrystals family, the intensity of the image force F_i increases with shear moduli difference $\Delta\mu$. It may be null for some dislocations, in bicrystals having elastic and crystallographic parameters very close.
- The dislocation motion under image force effect depends on the value of $\Delta\mu$, if:
 - $\Delta\mu > 1$, all dislocations in the softest crystal are repelled far from the interface.
 - $\Delta\mu < -1$, all dislocations in the harder crystal, are attracted to the interface.
 - $-1 < \Delta\mu < 1$, the located dislocation in the crystal 1 can be attracted, repulsed or don't suffers no image force. The number and the character of dislocations with, $F_i = 0$, is related to the two crystals nature and disorientation.
- The image force F_i is constant for a screw dislocation parallel to the rotation axis $[110]$.
- The isoenergy cards have different symmetries according to the bicrystal disorientation.
- For each bicrystal family, image force distance effectiveness is related to absolute value of shear moduli difference.
- The position of the dislocation and the image forces sense F_{i-Sh1} et F_{i-Sh2} favoured recombination of partial dislocations or dissociation of the perfect screw dislocation.

Keywords: Interphase Boundary, Dislocation, Elastic Interaction, Image Force, CFC Structure.

التفاعل المرن بين الإنخلاع و الحد ثنائي الطور في المواد ذات البنية المكعبة ممرضة الوجوه

ملخص

معظم الخواص الميكانيكية للمعادن تنجم عن التفاعلات بين العيوب البلورية، لا سيما التفاعلات بين الإنخلاعات و الحدود البلورية. أن حساب طاقة التفاعل بين الإنخلاع و الحد ثنائي الطور يتم على أساس المرونة الخطية اللامتماثلة المناحي. تتعرض الإنخلاعات المتفاعلة مرونيا مع الحد ثنائي الطور الى قوة تعرف بالقوة الصورة و هي مشتقة طاقة التفاعل. إن شدة و إشارة القوة الصورة تسمح لنا بمعرفة سلوك الإنخلاعات.

دُرست طاقات التفاعل المرن للثنائيات البلورية ثنائي الطور بالنسبة للمواد ذات البنية المكعبة ممرضة الوجوه CFC، Al،Pb، Au Ag، Ni، Cu، على الإنخلاعات الأصلية و الحدود ثنائية الطور من أجل زوايا محصورة بين 0° و 90° بخطوة 10°. الإنخلاعات الأصلية المدروسة قريبة و موازية للحد ثنائي الطور.

التحليل المفصل للنتائج تبين أن :

- في كل عائلة من الثنائيات البلورية، شدة قوة صورة تتزايد مع زيادة الفرق بين معاملات القص للعنصرين. قد تتعدم بالنسبة لعدد من الإنخلاعات عندما تكون المعاملات المرونية و البلورية لثنائيات البلورية جد متقاربة.
- حركة الإنخلاعات تحت تأثير القوة الصورة تتعلق بقيمة $\Delta\mu$ ، حيث إذا كان :
 - $1 < \Delta\mu$ ، فإن كل إنخلاع متواجد داخل البلورة الأكثر مرونة، يُدفع بعيدا عن الحد ثنائي الطور.
 - $1 > \Delta\mu$ ، كل إنخلاع يتواجد داخل البلورة الأكثر صلابة، يجذب نحو الحد ثنائي الطور.
 - $-1 < \Delta\mu < 1$ ، الإنخلاع يمكن أن يُدفع، يجذب أو يبقى دون حراك. عدد و طبيعة الإنخلاعات التي لا تخضع لأي قوة صورة، يتعلق بطبيعة العنصرين و زاوية الدوران بينهما.
- الإنخلاع اللولبي الموازي لمحور الدوران [110] له قوة صورة ثابتة الشدة.
- إن تأثير زوايا الدوران على التفاعل المرن ضعيف جدا.
- أظهرت منحنيات تساوي الطاقة تناظرات مختلفة باختلاف زاوية الدوران.
- في كل عائلة من الثنائيات البلورية، ترتبط مسافة فعالية القوة الصورة بالقيمة المطلقة للفرق بين معاملات القص للعنصرين.
- موضع الإنخلاع واتجاه قوى الصورة F_{i-Sh1} و F_{i-Sh2} يحفزان على تفكك الإنخلاع اللولبي المثالي او تراكب إلى الإنخلاعين الجزئية.

الكلمات الدليلية: إنخلاعات، حد ثنائي البلورة، تفاعل مرن، قوة صورة، بنية مكعبة ممرضة السطوح.

Résumé

La majorité des propriétés mécaniques des métaux sont dues aux interactions entre les défauts cristallins, notamment les interactions entre les dislocations et les interfaces. L'énergie d'interaction entre une dislocation et un joint interphase est calculée sur la base de l'élasticité linéaire anisotrope. Les dislocations en interaction élastique avec le joint interphase sont soumises à une force appelée la force image qui est dérivée de l'énergie d'interaction. La force image F_i , par son signe et son intensité, permet de prédire la mise en mouvement ou non de la dislocation.

Les énergies d'interaction élastique, ΔE , entre des dislocations et des interfaces sont calculées pour des bicristaux de paires de métaux de structure CFC, Pb, Al, Au, Ag, Cu et Ni. Les dislocations de matrice ont un vecteur de Burgers $\vec{b} = a/2[110]$, et les joints interphase sont caractérisés par une relation d'orientation qui est une rotation (R, θ) , avec $R = [110]$ et θ est compris dans l'intervalle $[0^\circ, 90^\circ]$ variant par pas de 10° . Les dislocations sont situées dans le cristal 1 à une distance d du plan du joint et sont parallèles au plan du joint.

Les principaux résultats obtenus sont résumés comme suit :

- Pour chaque famille de bicristaux, l'intensité de la force image F_i croît avec l'écart des modules de cisaillement $\Delta\mu$. Elle peut être nulle pour certaines dislocations dans le cas des bicristaux ayant des paramètres élastiques et cristallographiques très proches.
- La mise en mouvement des dislocations sous l'effet de la force image dépend de la valeur de $\Delta\mu$, si :
 - $\Delta\mu > +1$, toute dislocation située dans le cristal le plus mou, est repoussée loin de l'interface.
 - $\Delta\mu < -1$, toute dislocation située dans le cristal le plus dur, est attirée vers l'interface.
 - $-1 < \Delta\mu < +1$, la dislocation peut être attirée, repoussée ou ne subit aucune force image. Le nombre et le caractère des dislocations avec une force image nulle est lié à la nature et à la désorientation des deux cristaux.
- La force image F_i est constante pour une dislocation vis parallèle à l'axe de rotation $[110]$.
- Les cartes d'isoénergie présentent différentes symétries selon la désorientation.
- Pour une famille de bicristaux, la distance d'efficacité de la force image est liée à la valeur absolue de l'écart des modules de cisaillement du bicristal.
- Quand on envisage le cas d'une dislocation dissociée en deux dislocations partielles de Shockley, le sens et l'intensité des forces images F_{i-Sh1} et F_{i-Sh2} sur les partielles peuvent favoriser la recombinaison ou au contraire la dissociation de la dislocation vis parfaite.

Mots clés Dislocation, Joint interphase, Interaction élastique, Force image, Structure CFC.