



MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE « Abbés LAGHROUR » DE KHENCHELA
FACULTE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIE



Département des Sciences de la Matière

N° de série :.....

Mémoire de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme de Master (L.M.D)

Filière : Physique

Spécialité : Physique des Matériaux

Session : 2016/2017

Intitulé :

**Calcul de la force image pour des
matériaux de structure cubique**

Réalisé par :

- Dhif Lamia
- Redjil Dalal

Présenté le ;/juillet/2017

Membres de jury :

- Baaouague Khaled
- Aissani Linda

Dirigé par : Moulahem Shehrazed

Année 2016/2017

Remerciement

Nous remercions Allah le tout puissant, qui nous a donné la foi, la force et la patience pour aller jusqu'au bout de ce travail

*Nous tenons à remercier **Melle. Moulahem** pour avoir acceptée de diriger notre travail, pour son aide précieuse, ses encouragements et pour ses conseils tout le long de ce travail.*

Nous remercions également les membres du jury pour avoir accepté d'évaluer et de juger ce modeste travail.

Nous remercions également tous les membres du personnel de notre classe 2^{ème} années master.

Enfin, nous tenons à remercier tous les membres de notre famille pour leurs soutiens et leurs encouragements.

Dédicace

Aux deux êtres qui sont les plus chers pour moi, qui ont fait que je sois aujourd'hui là à présenter ce travailMa maman **Safia** et mon papa **Boularas**, merci pour tout l'amour, l'attention, le temps et l'effort que vous avez consacré pour moi, vous n'avez jamais arrêté de croire en moi, aucun mot ne peut exprimer la profonde gratitude que j'ai à votre égard.

A mon très chères frères **Ammer, Imade** et **Ali**.

A ma sœur Linda, et nos moments de bonheur de joie.

A toute ma famille : mes tantes, oncles et cousins pour leur affection a la mémoire de mes grandes –mères.

A tous mes amies et surtout mes intimes : **Wafaà, Dalal, Kenza, Walida, Hakima** et **Hassiba** qui étaient la à partager mes joies et mes peines et supporter mes humeurs

A mon promoteur Melle « **Moulahem Shehrazed** » que j'ai connu comme enseignante et encadreur et pour laquelle j'ai une grande admiration.

A tous mes camarades de la promotion **2016-2017** pour les quels je porte un grand respect.

DHIF LAMIA.

Dédicace

Je dédie cet humble travail aux êtres les plus chers à mon cœur,

A la mémoire de ma grand-mère « que la terre vous soit légère et que *ALLAH* vous accueille dans son paradis ».

*Ma très chère mère Ouannassa

*Mon très cher père Mohammed

*Mon très cher grand père

*Mes chers frères Dawed et Azddin

* Mes chères sœurs

A toute ma famille sans exception

A Mes amies et surtout mes intimes, Ibtissem, Lamia, wafaà, Walida, hassiba, Iman

A toutes mes connaissances sans exception.

R.DALAL

Table des matières

Tableau de figure

Introduction général.....	1
Chapitre I : Base cristallographique	
I.1 Dislocation.....	3
I.1.1 Définition de la dislocation	3
I.1.2 Principe de dislocation.....	3
I.1.3 Vecteur de Burgers.....	4
I.1.4 Les différents types de dislocation.....	5
I.1.5 Déformation plastique et systèmes de glissement.....	8
I.1.6 Dislocation intrinsèque ou structurales.....	10
I.1.7 Définition d'une dislocation extrinsèque.....	11
I.2 joint de grain.....	13
I.2.1 Définition du joint de grain.....	13
I.2.2 structure du joint de grain.....	14
2.2.1 Description géométrique: bi cristallographie.....	14
2.2.2 Le réseau de joints de grains.....	15
2.2.3 Description atomistique.....	17
2.2.4 Propriétés des joints de grains.....	19
I.3 Interaction entre dislocations et joints de grains.....	19
I.3.1 les descriptions du joint de grains	19
I.3.2 les forces exercées sur une dislocation située près d'un joint de grains...	19
I.3.3 Friction de réseau.....	20
Chapitre II.1 force image.....	21
II.1 théorie de l'élasticité linéaire anisotrope.....	21
II.1.1.1 dislocation dans le monocristal.....	21
II.1.2 Dislocation à l'interface.....	27
II.1.3 Concept de la force image.....	30

II.1.4 Force image dans les matériaux de structure cubique.....	32
Chapitre III : Cartes d'isoénergie.....	33
III.1 calcul de la force image.....	34
III.2 Fabrication des cartes d'isoénergie	35
III.3 Tableau des résultats.....	36
III.4 Cartes d'isoénergie.....	37
III.5 Discussion.....	41
Conclusions.....	45

Bibliographique

Tableau de figure

Figure	page
Figure I.1 : Représentation du réseau de dislocation	3
Figure I.2 : Détermination du vecteur de Burgers d'une dislocation coin (<i>a</i>) et d'une dislocation vis (<i>b</i>)	4
Figure I.3 : Dislocation de type « coin ».	5
Figure I.4 : Formation d'une dislocation coin (OP) dans le plan de glissement ABCD	6
Figure I.5 : Formation d'une dislocation vis (OP) dans le plan de glissement ABCD.	7
Figure I.6 : Exemple de dislocation mixte.	8
Figure I.7: définition des dislocations primaires grâce au réseau <<O>>	10
Figure I.8 :(a) Une dislocation extrinsèque D introduit une rupture de périodicité dans la structure d'un joint de grains décrite en termes de dislocations intrinsèques primaires (\perp) et secondaires (\perp) ou en termes d'unités structurales A et B, la dislocation D correspond à une unité B (ou A) en plus (ou moins); (b) une dislocation extrinsèque AB provoque un déplacement n et du réseau intrinsèque de dislocations primaires parallèles à $g = \langle 110 \rangle$ dans un joint de torsion $[001]$ de faible angle dans l'or; (c) structure atomique du joint de grains $\Sigma = 11 \{332\}$ du nickel : sa période est constituée de deux unités D du joint $\Sigma = 3 \{111\}$ et de deux unités E du joint $\Sigma = 9 \{221\}$. Le manque d'une unité D à deux endroits dans cette portion du joint (voir flèches) indique la présence d'une dislocation extrinsèque de vecteur de Burgers égal à un vecteur du réseau DSC du joint $\Sigma = 11$.	12
Figure I.9 : Représentation les joints de grain	13
Figure I.10 : Schéma montrant les différentes opérations pour former un joint de grains : rotation (a) translation rigide d'un réseau par rapport à l'autre (opération d'interface) (b) – Orientation et position d'un plan de joint (c) – Rejet des atomes de chaque cristal d'un côté et de l'autre de ce plan (d).	14
Figure I.11 : Maille de coïncidence d'un bicristal $\Sigma = 5$ ($\theta = 36^\circ$, $R(100)$ de structure cubique délimité par les nœuds bicolores (noir/blanc) et réseau DSC qui découpe les côtés de la maille de coïncidence en cinq; b_1 et b_2 sont les vecteurs élémentaires du réseau DSC	15
Figure I.12 : description des joints de grain en termes d'unités structurales	17

Figure I.13 : Schéma montrant la relation entre les descriptions d'un joint de grains en termes d'unités structurales e t en termes de dislocations intrinsèques. Le réseau de dislocations secondaires attachées aux unités B constitue un sous-joint dans le joint de grains favorisé d'unités A.	18
Figure I.14: Ensemble des forces s'appliquant sur une dislocation au voisinage d'un joint de grains. $\sim F_d$ est la force de Peach et Koehler.	20
Figure II.1 : référentiels pour le formalisme intégral et de STROH. La ligne de dislocation est parallèle à t.	25
Figure II.2: configuration géométrique utilisée pour le calcul de l'interaction entre une dislocation D rectiligne et ν interface L qui lui est parallèle. L'interface sépare les milieux (1) et (2).	27
Figure II.3 : Schéma définition les paramètres intervenant dans le calcul de l'énergie d'une dislocation inter faciale.	28
Figure III.1 :carte d'isoénergie pour l'Aluminium : $\Sigma=3$ $\vec{R} = [110], \theta = 70.5^\circ, \vec{b}=[110]$	37
Figure III.2 :carte d'isoénergie pour l'Aluminium : $\Sigma=9$, $\vec{R} = [110], \theta = 38^\circ, \vec{b}=[110]$	37
Figure III.3 :carte d'isoénergie pour l'Aluminium : $\Sigma=11$, $\vec{R} = [110], \theta = 130^\circ, \vec{b}=[110]$	38
Figure III.4 : Carte d'isoénergie pour Lithium : $\Sigma=3$, $\vec{R} = [110], \theta = 60^\circ, \vec{b} = [111]$	39
Figure III.5 : Carte d'isoénergie pour Lithium : $\Sigma=9$, $\vec{R} = [110], \theta = 38.94^\circ, \vec{b} = [111]$	39
Figure III.6 : Carte d'isoénergie pour Lithium : $\Sigma=11$, $\vec{R} = [110], \theta = 50^\circ, \vec{b}=[111]$	40
Figure III.7 : Variation de l'énergie en fonction de l'angle pour l'Aluminium	44

Introduction générale

Introduction générale

La technologie moderne utilise souvent des matériaux différents qui doivent être assemblés en une seule unité. Cela conduit à l'existence d'interfaces entre les phases constituant l'unité. L'interface devient, alors, un élément important qui influence considérablement sur les propriétés du matériau. Les interfaces sont souvent en interaction élastique avec les dislocations.

La prédiction du comportement global du polycristal est liée à l'interaction élastique et est associée à une information topologique sur la microstructure interne différente selon les matériaux et les forces motrices qui imposent le déplacement d'une dislocation proche d'une l'interface.

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

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

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

L'objectif de notre travail est l'étude de la mise en mouvement des dislocations, proches et parallèles à un joint de grain, sous l'effet de la force image.

Le manuscrit de mémoire est divisé en trois chapitres principaux.

Le premier chapitre : est destiné pour l'étude bibliographique, des dislocations, ainsi que des joints de grains.

Le deuxième chapitre : est un exposé sur la théorie de l'élasticité linéaire anisotrope.

Le troisième chapitre : présente Les résultats et la discussion an concernant le calcul de la force image, l'influence des paramètres cristallographiques et élastiques sur l'interaction entre dislocation et joint de grain.

Chapitre I : Base cristallographique

I.1 Dislocation

I.1.1 Définition de la dislocation

Les défauts linéaires sont appelés « dislocations ». Ce sont des défauts de dimension 1, c'est-à-dire que la largeur des défauts est très petite devant les dimensions du cristal.

Ces défauts permettent la déformation élastique.

Les dislocations sont obtenues par le glissement \vec{b} d'une partie du cristal le long d'un plan. La ligne de dislocation proprement dite correspond à la ligne du plan de glissement séparant la partie du cristal qui a glissé de celle qui est restée immobile. Le vecteur de glissement \vec{b} est appelé vecteur de Burgers de la dislocation.

I.1.2 Principe de dislocation

Pour illustrer cette construction considérons un réseau cubique simple non déformé. Coupons ce réseau suivant un plan en s'appuyant sur la ligne AA (figure1) et déplaçons les atomes situés d'un côté du plan de coupe parallèlement à ce plan d'une distance égale à un intervalle atomique. Puis relient les atomes de part et d'autre de la coupure. Le nouveau réseau obtenu est déformé seulement au voisinage de la ligne AA qui est la ligne de dislocation, le volume cylindrique qui entoure le voisinage de la ligne de dislocation est le cœur de la dislocation. Selon l'orientation du déplacement par rapport à la ligne de dislocation, on crée une dislocation coin, vis ou mixte

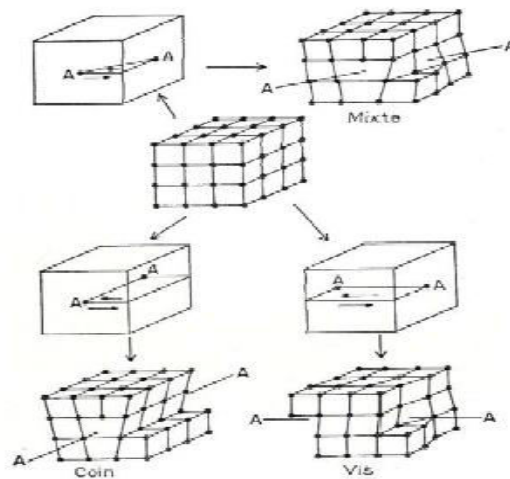


Figure I.1 : Représentation du réseau de dislocation

I.1.3 Vecteur de Burgers

Le vecteur de Burgers d'une dislocation correspond au vecteur de glissement \vec{b} appliqué pour former celle-ci.

Il est possible de déterminer le vecteur de Burgers d'une dislocation en comparant les circuits de Burgers construits autour de la dislocation et dans la partie du cristal exempte de défauts.

La méthode est la suivante (Figure I. 2) :

- Choix d'une orientation de la ligne de dislocation \vec{L} .
- Construction d'un circuit fermé autour de la dislocation, orienté suivant la règle du tire bouchon. Le circuit commençant au nœud D (pour « départ ») et finit au nœud F (pour « fin »). Les nœuds D et F sont confondus.
- Le vecteur de Burgers correspond au défaut de fermeture du circuit (DF) dans le cristal parfait : $\vec{b} = FD$.

Remarque : L'orientation choisie pour la dislocation \vec{L} est arbitraire, mais conditionne le sens du vecteur de Burgers.

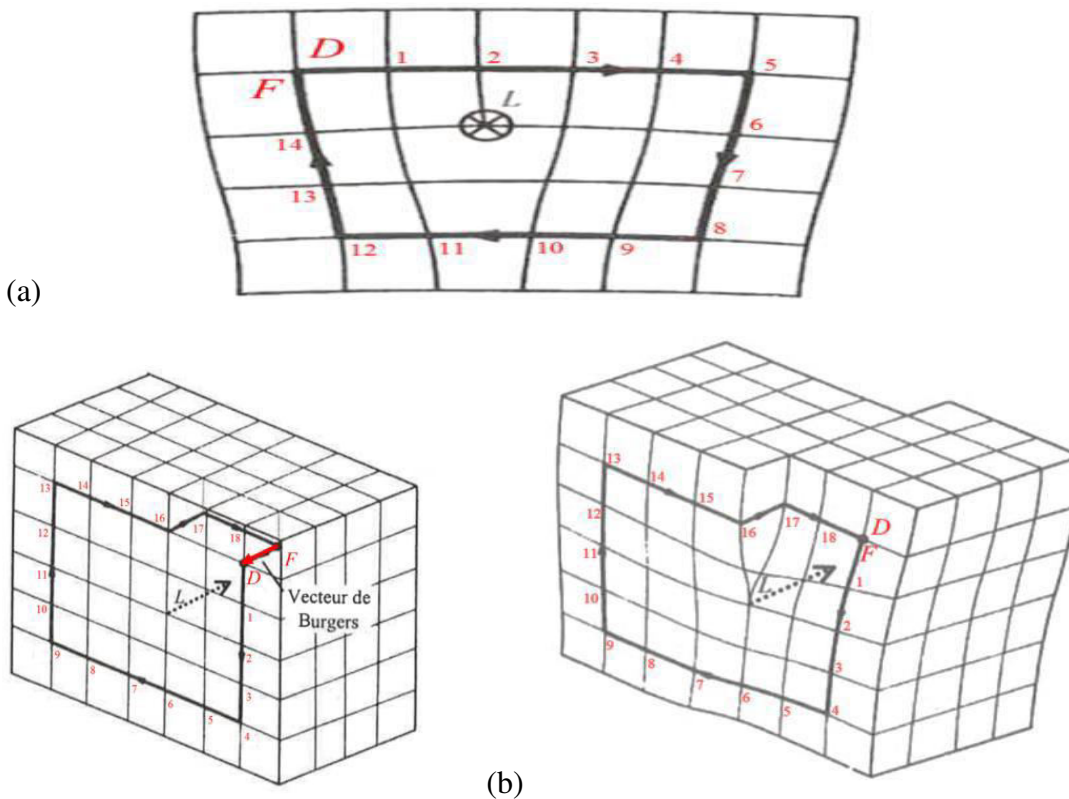


Figure I.2 : Détermination du vecteur de Burgers d'une dislocation coin (a) et d'une dislocation vis (b).

I.1.4 Les différents types de dislocation

On distingue les dislocations coin, pour lesquelles \vec{b} est perpendiculaire à la ligne de dislocation, et les dislocations vis, pour lesquelles \vec{b} est parallèle à la ligne de dislocation.

Les autres dislocations sont dites mixtes.

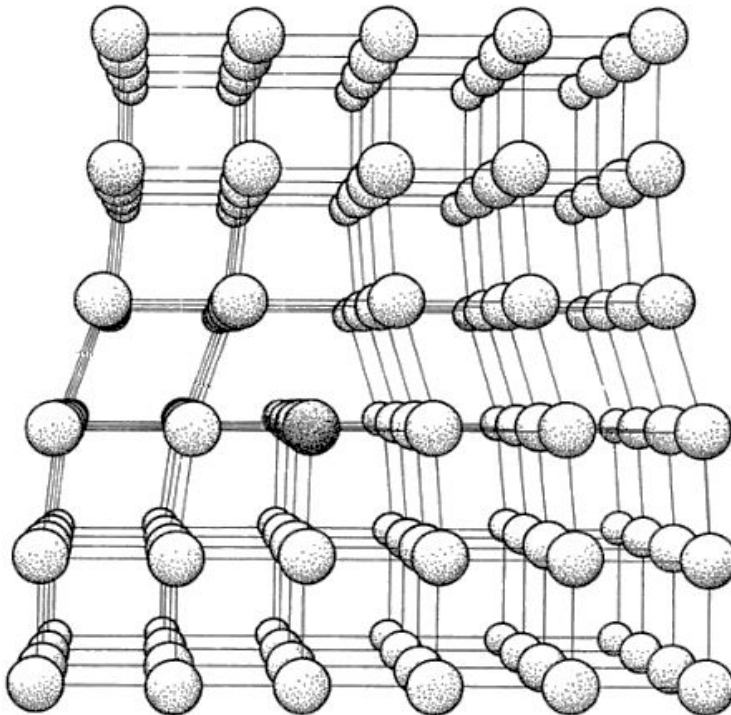


Figure I.3 : Dislocation de type « coin ». La moitié inférieure du cristal comporte un demi-plan atomique supplémentaire. Le bord supérieur de ce demi-plan constitue la ligne de dislocation. Les atomes situés sur cette ligne n'ont pas le même nombre d'atomes premiers voisins que les autres atomes au sein du cristal. La dislocation induit par ailleurs un important champ de déplacement des atomes dans son environnement proche.

a-Formation d'une dislocation de type « coin »

La Figure I.4 montre la formation d'une dislocation de type coin par le glissement \vec{b} d'une partie d'un cristal cubique simple le long d'un plan (ABCD).

La ligne de dislocation coin (PO) s'étend à l'infini dans le plan de glissement, dans une direction perpendiculaire à la direction de glissement \vec{b}

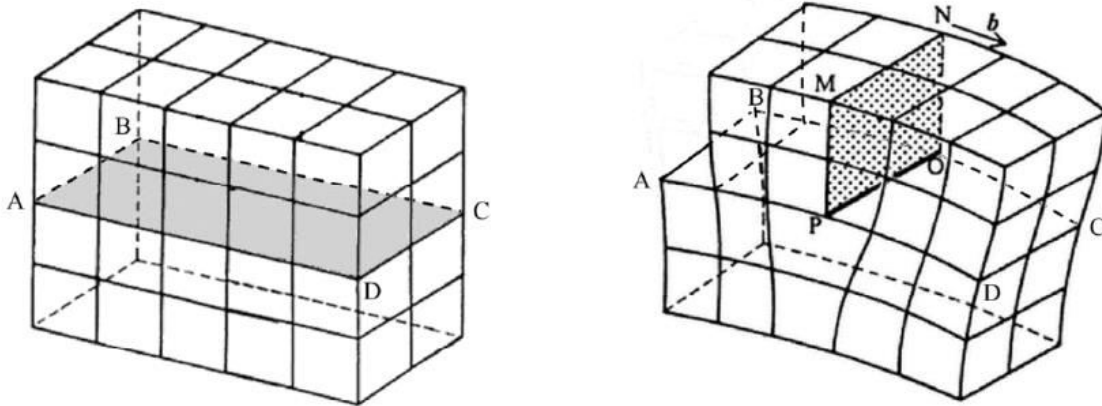


Figure I.4 : Formation d'une dislocation coin (OP) dans le plan de glissement ABCD. La portion de cristal située au-dessus du plan de glissement et à gauche de la ligne de dislocation (OP) subit un glissement b par rapport au cristal situé en-dessous. Une dislocation est dite « coin » lorsque le vecteur de glissement b impliqué dans sa formation lui est perpendiculaire.

La dislocation coin peut également être décrite comme faisant suite à l'insertion d'un demi-plan supplémentaire après écartement de deux plans atomiques adjacents. La ligne de dislocation coïncide avec l'extrémité de ce demi-plan supplémentaire.

Les atomes situés sur une ligne de dislocation coin n'ont pas le nombre de voisins attendu dans une structure sans défauts. Dans les régions très proches de la ligne de dislocation, les atomes ont un environnement similaire à celui d'un cristal parfait, mais ils sont déplacés par rapport à leurs positions d'équilibre. Du côté du demi-plan supplémentaire par rapport au plan de glissement, les distances interatomiques observées entre les atomes sont plus petites que la distance attendue à l'équilibre : la zone correspondante est dite en compression. Du côté opposé au demi-plan supplémentaire, les distances interatomiques sont à l'inverse plus grandes que la distance attendue à l'équilibre : la zone est alors dite en traction. La présence d'une dislocation augmente donc l'énergie interne du cristal, d'une quantité qui dépend de la nature des liaisons chimiques.

b-Formation d'une dislocation de type « vis »

La Figure I.5 montre la formation d'une dislocation de type vis par le glissement \vec{b} d'une partie d'un cristal cubique simple le long d'un plan (ABCD). La ligne de dislocation vis (PO) marque la limite entre la région du cristal qui a glissé et celle qui n'a pas glissé. Celle-ci s'étend à l'infini dans le plan de glissement, dans une direction parallèle à la direction de

glissement \vec{b} .

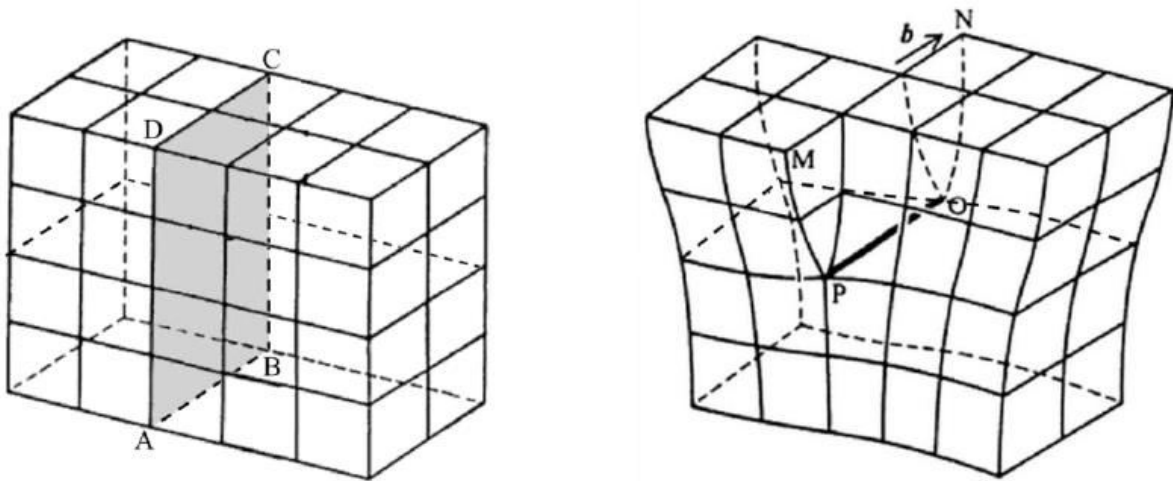


Figure I.5 : Formation d'une dislocation vis (OP) dans le plan de glissement ABCD. La portion de cristal située à droite du plan de glissement et au-dessus de la ligne de dislocation (OP) subit un glissement b par rapport au cristal situé en-dessous.

On peut également représenter une dislocation vis en imaginant que l'on fait une coupure plane à travers le cristal, et que l'on fait glisser l'un des bords obtenus par rapport à l'autre d'une distance interatomique. La ligne de dislocation vis correspond alors au fond de la coupure. Une dislocation vis transforme les plans successifs d'atomes en surfaces hélicoïdales, d'où son nom.

c- Formation d'une dislocation mixte

Une dislocation n'est en général pas rectiligne. La Figure I.6 présente une ligne de dislocation courbe (VC) séparant les parties d'un cristal restées immobiles et celles qui ont subi le glissement \vec{b} sur le plan défini par les points V, M et C.

La portion de l'arc (VC) perpendiculaire à \vec{b} autour du point C, a un caractère de dislocation coin. La portion de la dislocation parallèle à \vec{b} , autour du point V, est de type vis. La portion restante de l'arc (VC) constitue une portion de dislocation de type mixte.

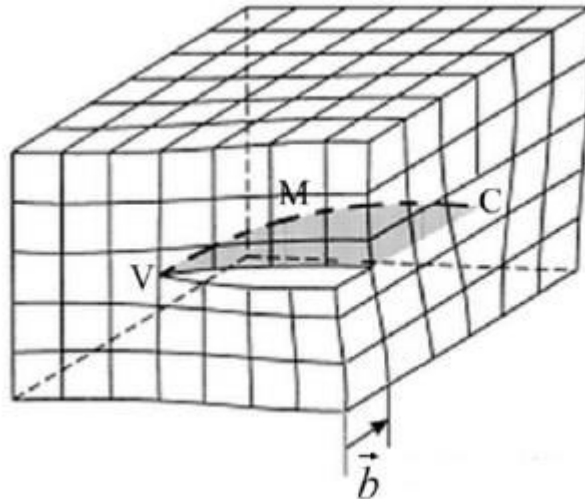


Figure I.6 : Exemple de dislocation mixte.

I.1.5 Déformation plastique et systèmes de glissement [1]

Le glissement des dislocations est en général caractérisé par un plan $\{hkl\}$ et une direction $\langle uvw \rangle$ contenue dans ce plan donnant la direction du vecteur de Burgers (c'est-à-dire la plus petite période du réseau). Plusieurs systèmes de glissement sont généralement observés. Les systèmes activés traduisent la plupart du temps un glissement dans les plans cristallographiques simples pour lesquels le frottement du réseau est faible (ce qui correspond généralement aux plans de plus grande compacité) et dans les directions également simples (directions denses) (tableau I.1).

Plus le nombre de plans et directions de glissement d'un métal est grand, plus son aptitude à la déformation plastique est élevée. Les métaux à réseau cubique sont très plastiques, le glissement dans ces métaux pouvant s'effectuer suivant plusieurs directions.

Chapitre I : base cristallographique

Structure	Vecteur de Burgers	Plan de glissement	Nombre de système
CFC	$\langle 110 \rangle$	$\{111\}$	12
Cc	$\langle 111 \rangle$	$\{110\}$	12
		$\{112\}$	12
		$\{123\}$	24
HC	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$\{0001\}$ B	3
	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$\{10\bar{1}0\}$ PR	3
	$\langle 112\bar{0} \rangle$	$\{10\bar{1}1\}$ PY1	6
	$\langle 11\bar{2}3 \rangle$	$\{1122\}$ PY2	6

Tableau I.1 : Systèmes de glissement des différentes structures Pour les hexagonaux

B:basal

PR :prismatique

PY :pyramid

I.1.6 Dislocation intrinsèque ou structurales [2]

Le terme *intrinsèque*, qui provient du latin *intrinsecus* signifiant « de l'intérieur », indique que ces dislocations sont inhérentes à la structure du joint. Ce dernier n'existe pas en leur absence, ce sont bien des dislocations « structurales ». On a deux types de dislocation intrinsèque :

a) Dislocation intrinsèque primaire

Dans le cas des joints à faible désorientation, il est relativement aisé de concevoir que le plan de joint passe autant que possible par les sites du réseau $\ll O \gg$; les zones de mauvais raccordement des deux cristaux A et B situées entre les sites $\ll O \gg$ constituent les cœurs d'un réseau de dislocations primaires qui rendent compte totalement de la désorientation entre les grains.

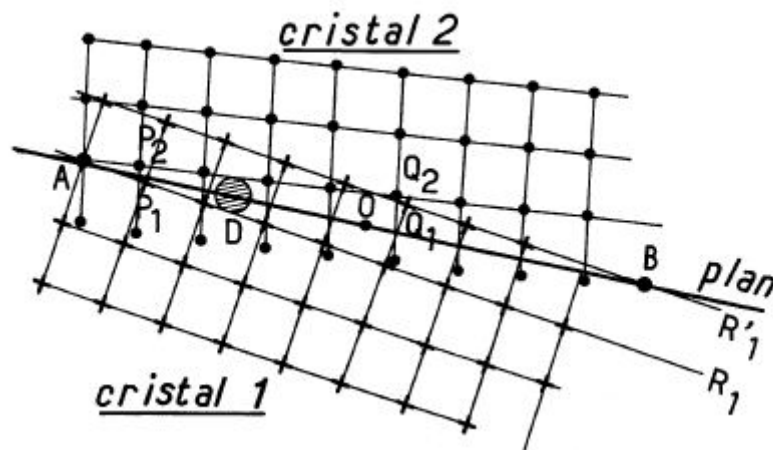


Figure I.7: définition des dislocations primaires grâce au réseau $\ll O \gg$

A, B, O : sites du réseau O

Q1, Q2, P1, P2 : ponts homologues assimilée à un seul site

D : zone de mauvais accord

b) Dislocation secondaire

Lorsque les deux cristaux A et B sont fortement désorientés de nombreux auteurs ont souligné le fait que le joint tend à préserver autant que possible la structure correspondant au réseau de coïncidence le plus proche. L'écart angulaire $\Delta\theta$ entre la position réelle et la position de coïncidence est alors compensé par un réseau de dislocations secondaires dont les vecteurs de Burgers sont ceux du réseau D.S.C et dont l'espacement, dans le cas d'un joint de torsion [001] par exemple, est :

$$d = \frac{|b|_{D.S.C}}{2 \sin \Delta\theta / 2} \quad (I.1)$$

Du latin extrinsecus signifiant «de l'extérieur», ce terme appliqué à une dislocation intergranulaire peut être interprété de deux manières:

- Soit l'accent est mis sur l'origine de la dislocation : il signifie que la dislocation provient de l'extérieur du joint, le plus souvent d'un des cristaux avoisinants, le joint jouant un rôle de puits pour les dislocations de matrice. Dans certains matériaux où la contrainte de Peierls en matrice est élevée (par exemple l'alumine), des sources intergranulaires peuvent être activées directement
- Soit l'accent est mis sur la structure fautée du joint : extrinsèque signifie alors en dehors de la structure d'équilibre du joint de grains, quelle que soit l'origine de la dislocation.

En termes élastiques, une dislocation extrinsèque détruit la périodicité de l'arrangement des dislocations intrinsèques (Figure I.8 a, b) et induit un champ de contraintes élastiques à longue distance.

En termes de cœur, une dislocation extrinsèque correspond à une rupture de périodicité de l'arrangement des unités structurales, provoquée par un manque ou un surplus d'une (ou plusieurs) de ces unités. La (Figure I.8 a) précise le lien étroit entre la description d'une dislocation extrinsèque par référence au réseau de dislocations intrinsèques et sa description en termes d'unités structurales; un exemple en est donné pour le joint $\Sigma = 11 \{332\}$ du nickel (Figure I.8 c).

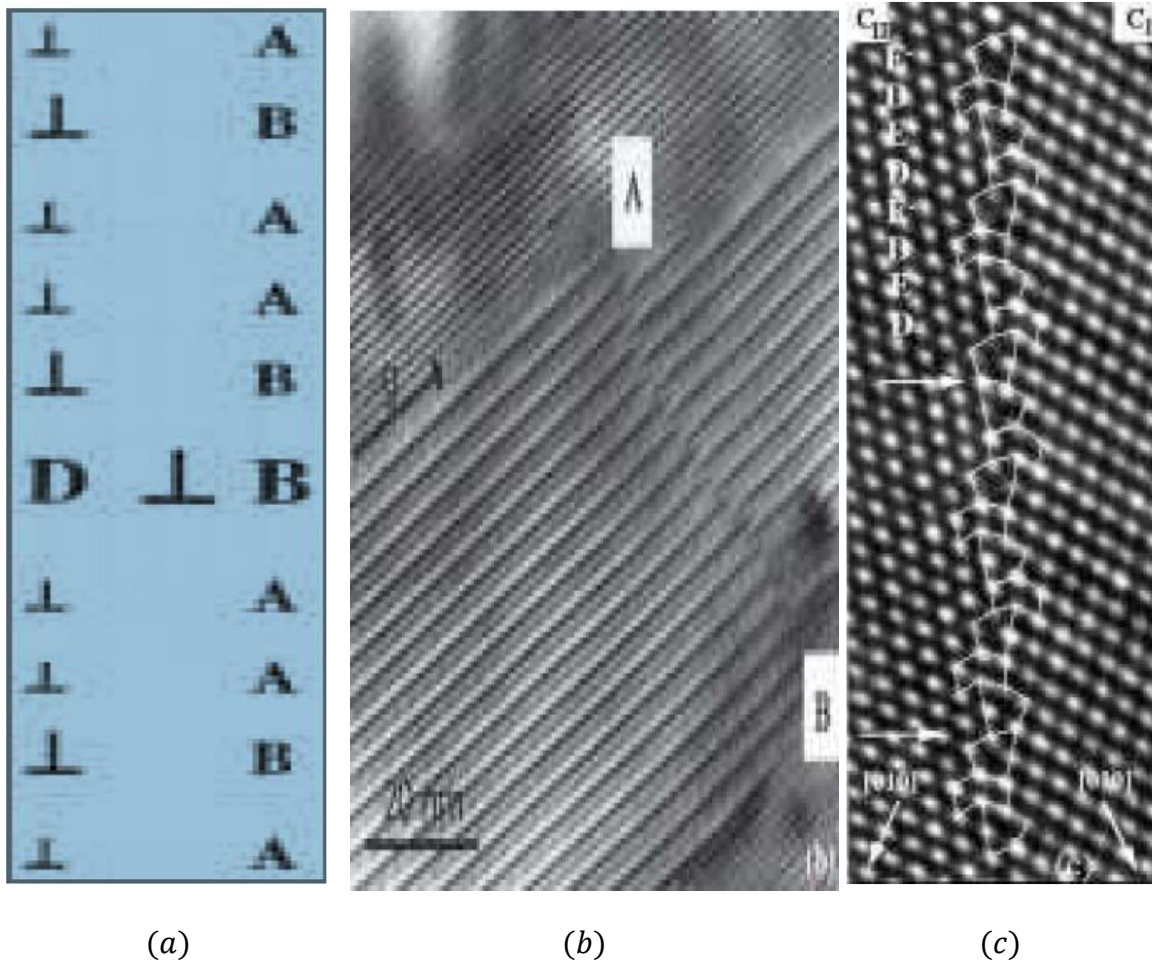


Figure I.8 :(a) Une dislocation extrinsèque D introduit une rupture de périodicité dans la structure d'un joint de grains décrite en termes de dislocations intrinsèques primaires (\perp) et secondaires (\perp) ou en termes d'unités structurales A et B, la dislocation D correspond à une unité B (ou A) en plus (ou moins); (b) une dislocation extrinsèque AB provoque un déplacement n et du réseau intrinsèque de dislocations primaires parallèles à $g = \langle 110 \rangle$ dans un joint de torsion $[001]$ de faible angle dans l'or; (c) structure atomique du joint de grains $\Sigma = 11 \{332\}$ du nickel : sa période est constituée de deux unités D du joint $\Sigma = 3 \{111\}$ et de deux unités E du joint $\Sigma = 9 \{221\}$. Le manque d'une unité D à deux endroits dans cette portion du joint (voir flèches) indique la présence d'une dislocation extrinsèque de vecteur de Burgers égal à un vecteur du réseau DSC du joint $\Sigma = 11$.

I.2 joint de grain

I.2.1 Définition du joint de grain

Un joint de grain peut être défini comme étant l'interface entre deux cristaux de même nature et d'orientation cristallographique différente. En fonction de la position de l'axe de rotation par rapport au plan de l'interface

Un joint de grain est caractérisé par :

- L'axe de rotation
- La translation R
- Le plan d'interface

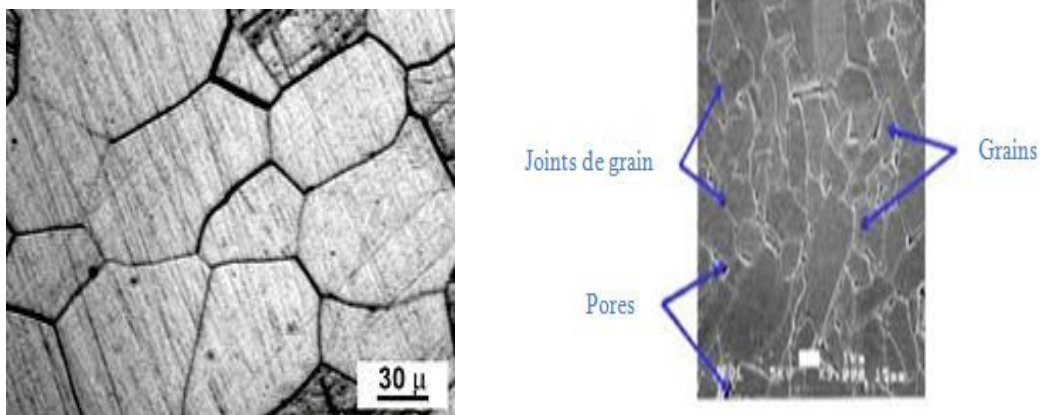


Figure I.9 : Représentation les joints de grain.

I.2.2 structure du joint de grain [4]

2.2.1 Description géométrique : bi cristallographie

Deux cristaux de même nature reliés l'un à l'autre par une opération d'interface (rotation, déformation ou opération plus complexe) forment un bicristal. Un joint de grains est obtenu en introduisant un plan dans le bicristal et en rejetant les atomes de chacun des cristaux de part et d'autre de ce plan (Figure I. 10).

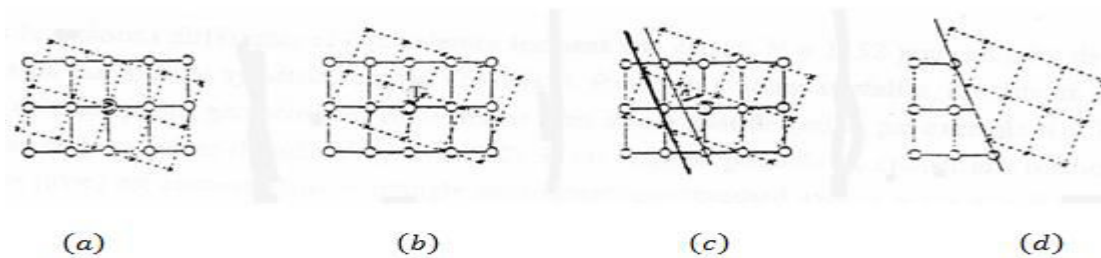


Figure I.10 : Schéma montrant les différentes opérations pour former un joint de grains : rotation (a) translation rigide d'un réseau par rapport à l'autre (opération d'interface) (b) – Orientation et position d'un plan de joint (c) – Rejet des atomes de chaque cristal d'un côté et de l'autre de ce plan (d).

Les paramètres géométriques ou degrés de liberté décrivant une interface peuvent être classés en deux catégories:

- 6 paramètres précisent l'opération d'interface : 3 pour la transformation, par exemple 1 angle et deux cosinus directeurs pour l'axe de la rotation \mathbf{R} , et 3 pour le vecteur de translation rigide \mathbf{t}
- 3 paramètres définissent le plan de l'interface : 2 pour son orientation, donnée par la normale \mathbf{n} au plan, et 1 pour sa position précisée par un vecteur \mathbf{d} sur la normale.

Une terminologie particulière s'applique aux joints de grains définis par une rotation $[uvw]$ et par un plan $\{h\ k\ l\}$ de normale \mathbf{n} selon leurs caractéristiques:

$\mathbf{n} \perp [uvw] \rightarrow$ joint de flexion

$\mathbf{n} // [uvw] \rightarrow$ joint de torsion

\mathbf{n} incliné/ $[uvw] \rightarrow$ joint mixte

$\{kkl\}_1 \equiv \{kkl\}_2 \rightarrow$ joint symétrique

$\{kkl\}_1 = \{kkl\}_2 \rightarrow$ Joint asymétrique

n varie le long du joint → Joint à facettes

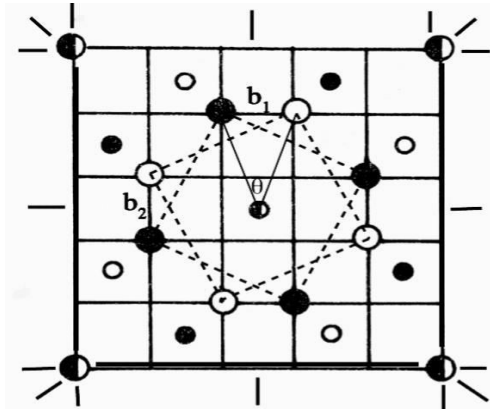


Figure I.11 : Maille de coïncidence d'un bicristal $\Sigma = 5$ ($\theta = 36^\circ$, R(100) de structure cubique délimité par les nœuds bicolores (noir/blanc) et réseau DSC qui découpe les côtés de la maille de coïncidence en cinq; b_1 et b_2 sont les vecteurs élémentaires du réseau DSC.

2.2.2 Le réseau de joints de grains [5]

La cristallographie d'un joint de grain est décrite par la «désorientation» entre les réseaux cristallins des deux grains qu'il sépare. La théorie des réseaux de coïncidence (CLS : Coïncidence site lattice) permet d'attribuer un indice de coïncidence Σ , à un joint de grain connaissant sa désorientation.

*Réseau CSL

Le réseau de coïncidence est défini comme le plus petit réseau inclus dans les réseaux de deux grains. Un réseau CSL est caractérisé par un indice de coïncidence Σ défini par :

$$\Sigma = \frac{\text{volume de la maille de coïncidence}}{\text{volume de la maille primaire du cristal}}$$

Dans un poly cristal, il est rare qu'un joint de grains ait une désorientation correspondant exactement à un réseau de coïncidence. Pour déterminer quelle est la déviation de l'angle de coïncidence minimum admis, le critère le plus utilisé est celui de Bardon. Il donne la valeur maximale de déviation angulaire $\Delta\theta_{\max} = 15^\circ \Sigma^{-1/2}$

Le critère de Brandon donne pour $\Sigma=1$ une tolérance de 15° , valeur en dessous de laquelle les joints de grains sont considérés comme de « faible angle ». Il s'agit par exemple des sous-joints de grains. Par opposition, les joints de « grand angle » sont les joints dont l'angle de désorientation est supérieur à 15° . Parmi les joints de « grand angle », on distingue les joints de coïncidence (ou de proche de coïncidence) et les joints de grains dits « généraux » qui s'éloignent de toute relation de coïncidence d'indice Σ Relativement faible (souvent $\Sigma < 29$). Les joints de grains de coïncidence

Chapitre I : base cristallographique

sont souvent qualifiés de «spéciaux» du fait de leurs propriétés se démarquant de celle des joints de grains généraux.

*Réseau DSC

(Displacement Shift Complete) ce réseau définit tous les vecteurs de déplacement pour passer du cristal (1) au cristal (2) en conservant la structure du motif cristallin .sa maille construite à partir des vecteurs reliant les nœuds des deux réseaux en position de coïncidence. Elle est déterminée par des méthodes analytiques. Notons que l'intensité de ces vecteurs diminue lorsque Σ augmente et tend vers zéro. Cependant, si une coïncidence à une dimension est maintenue, un des vecteurs peut conserver une grandeur non négligeable même si Σ tend vers l'infini.

* Réseau O [4]

Le réseau O est le lieu de tous les points en bon accord entre le cristal 1 et le cristal 2 séparés par des régions de mauvais accord. Il rend donc compte de l'invariant par rapport au monocristal. Les sites du réseau O , contrairement à ceux du réseau CSL, peuvent avoir des coordonnées internes aux mailles des cristaux. En conséquence, le réseau O varie continûment avec la désorientationq autour d'un axe de rotation donné. Un point appartient au réseau 0 s'il reste invariant dans la transformation qui relie le cristal 1 au cristal 2. Dans l'approximation de Bollmann (translation rigide nulle), l'équation fondamentale du réseau O est :

$$(I-R^{-1})x_0 = B_m = \sum b_m \quad (I.2)$$

I est la matrice Identité, R est la matrice de rotation et x_0 est un vecteur qui repère un point 0 dans le plan du joint. B_m est un vecteur de translation du réseau et peut donc toujours être considéré comme la somme de vecteurs de Burgers de la matrice b_m .

2.2.3 Description atomistique [4]

Tout d'abord prédit par des considérations géométriques, l'arrangement des atomes en unités structurales dans le joint a été déduit des simulations numériques et confirmé par les observations, en microscopie électronique à haute résolution. Les simulations ont précisé la largeur du joint, environ deux distances inter planaires, son énergie minimale et la configuration atomique la plus stable associée.

* Principe du modèle des unités structurales et limites de la description

Tout joint est constitué d'un nombre limité d'unités structurales (polyèdres d'atomes) disposés périodiquement.

Ces polyèdres s ont équivalents aux mailles des cristaux mais avec des formes plus complexes que le cube, l'hexagone. . . On distingue :

- Les joints favorisés constitués d'un seul type d'unités, représentés par exemple par "AAAAA. . .".

Parmi les joints coïncidents, seuls ceux de plus faible énergie sont favorisés ($\Sigma 3 \{111\}$) et ($\Sigma 11 \{113\}$)

- Les joints coïncidents non favorisés formé par une séquence simple de deux unités structurales, par exemple "ABABAB. . ."

- Les joints généraux intermédiaires présentant une séquence complexe d'unités structurales.

Principe de construction d'un joint :

Tout joint de grains de longue période et de désorientation $q [u \ v \ w]$ peut être décrit par un arrangement séquentiel d'unités structurales associées à deux joints délimitant q_1 et q_2 de courte période possédant le même axe de rotation et le même plan médian (Figure. I.12).

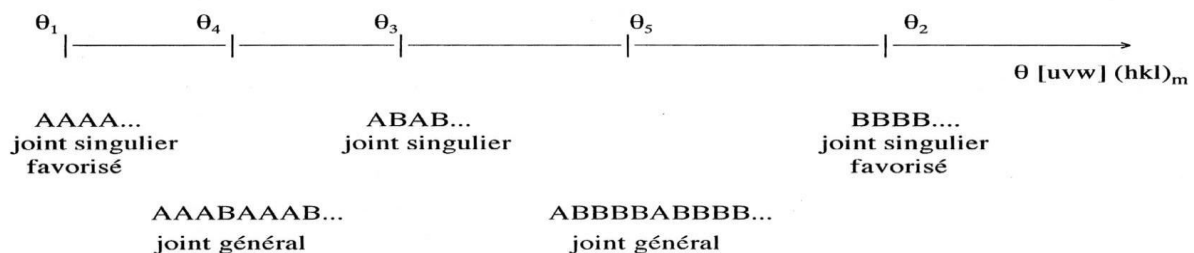


Figure I.12 : description des joints de grain en termes d'unités structurales

***modèle Unités Structurales/ (SU/GBD) [3]**

Pour des raisons de clarté, nous avons fait choix de présenter à part le modèle appelé « SU/GBD » pour *Structural Unit/Grain Boundary Dislocation* qui fait le lien entre les unités structurales et les dislocations intrinsèques. Cependant, dès 1959, Hornstra associe une dislocation à une unité structurale. Ce lien est également présent dans l'article original de Sutton et Vitek. Dans un joint de longue période tel AAAAB. . . Chaque unité minoritaire B est le cœur d'une dislocation intrinsèque secondaire dont le vecteur de Burgers appartient au réseau DSC du joint délimitant composé des unités majoritaires A.



Figure I.13 : Schéma montrant la relation entre les descriptions d'un joint de grains en termes d'unités structurales et en termes de dislocations intrinsèques. Le réseau de dislocations secondaires attachées aux unités B constitue un sous-joint dans le joint de grains favorisé d'unités A.

Une méthode algébrique a été développée pour attribuer un vecteur de Burgers à chaque unité structurale. Un couple de vecteurs S_I et S_{II} est attaché à chaque unité, ce couple ne dépende pas du joint de grains dans lequel se situe l'unité.

2.2.4 Propriétés des joints de grains

- Les joints de grains constituent des obstacles sur lesquels butent les dislocations.
- L'empilement de dislocation engendre une concentration de tension sur le joint d'autant plus importante que l'empilement est grand.
- Une augmentation de tension, d'autant plus faible que la concentration de contrainte est grande permet à une source de fonctionner dans le cristal voisin et de poursuivre la déformation.

I.3 Interaction entre dislocations et joints de grains [6]

I.3.1 les descriptions du joint de grains

La compréhension des modèles descriptifs des joints de grains nécessite de distinguer deux catégories de joints. La première concerne les joints ne générant pas de contrainte à longue portée dans le cristal en l'absence de l'application d'une contrainte externe. Ce type de joint correspond au cas de deux monocristaux collés l'un à l'autre, en l'absence de contrainte extérieure appliquée. La seconde catégorie est associée à un champ de contrainte à longue portée. Ce type d'interface, qui se retrouve dans certains cas particuliers, telle l'interface entre une couche d'épitaxie et un film mince (Sutton and Balluffi (1995)), ne correspond pas aux joints de notre étude et ne sera donc pas considérée.

Un joint de grains ne produisant pas de champ de contrainte à longue portée peut être décrit par deux approches théoriques : une approche continue par le biais de la théorie de Franck-Bilby, et une approche discrète par l'introduction d'ensembles de dislocations.

I.3.2 les forces exercées sur une dislocation située près d'un joint de grains

Une dislocation à proximité d'un joint de grain subit deux types de contraintes :

- contrainte élastique
- friction de réseau

I.3.3 Friction de réseau [6]

Toute dislocation du cristal subit des contraintes de friction dues à l'interaction du cœur de la dislocation avec le réseau cristallin, qui traduira par une force \vec{F}_f exercée sur la dislocation.

Une dislocation située à moins d'une périodicité atomique d'un joint de grains subira de même une force \vec{F}_c due aux contraintes d'interaction avec le cœur de ce joint. (Voir figure 14)

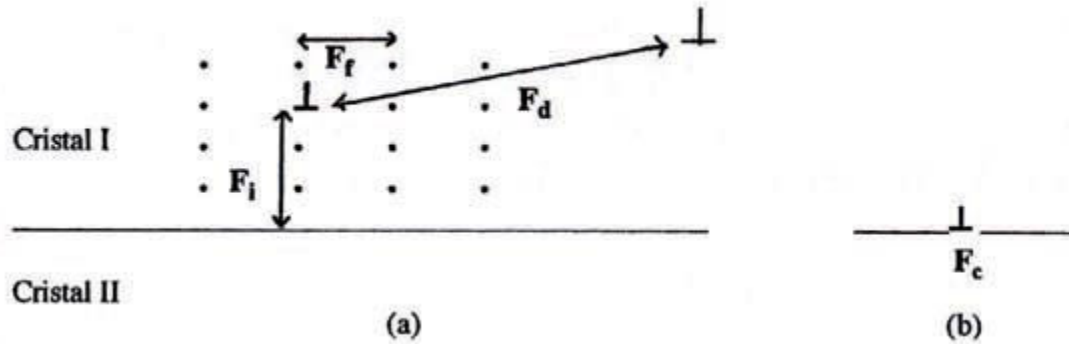


Figure I.14: Ensemble des forces s'appliquant sur une dislocation au voisinage d'un joint de grains. $\sim F_d$ est la force de Peach et Koehler.

Chapitre II : Force image

II.1 force image

II.1 théorie de l'élasticité linéaire anisotrope

II.1.1.1 dislocation dans le monocristal [7]

Soit une dislocation parallèle à l'axe Ox3 d'un repère orthonormé (Ox1, Ox2, Ox3) dans un milieu élastique anisotrope.

Les contraintes σ sont liées aux déformations ε par :

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \cdot \varepsilon_{kl} = \sigma_{ji} \quad (\text{II.1})$$

Et les déformations aux déplacements U par :

$$\varepsilon_{kl} = \mathbf{1/2} \left(\frac{\partial U_k}{\partial x_l} + \frac{\partial U_l}{\partial x_k} \right) = \varepsilon_{lk} \quad (\text{II.2})$$

En déformation plane, σ et ε_{lk} ne dépendent que de x_3 , à l'équilibre, en l'absence de forces:

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad \text{pour } i, j = 1, 2, 3 \quad (\text{II.3})$$

$$\sigma_{i\alpha} = c_{i\alpha k\beta} \cdot \frac{\partial U_k}{\partial x_\beta} \quad i, k = 1, 2, 3 \quad (\text{II.4})$$

$$\alpha, \beta = 1, 2$$

En remplaçant $\sigma_{i\alpha}$ dans (II.3) par son expression dans (II.4) :

$$c_{i\alpha k\beta} \cdot \frac{\partial^2 U_k}{\partial x_\alpha \partial x_\beta} = 0 \quad i = 1, 2, 3 \quad (\text{II.5})$$

L'expression (II.5) est un système de trois équations aux dérivées aux partielles en U dont la solution est de la forme :

$$U_k = A_k f(\eta) \quad (\text{II.6})$$

$$\eta = x_1 + p x_2$$

Ou p et A_K sont des constantes et $f(\eta)$ une fonction analytique.

En substituant dans (II.5) U par son expression (II.6) :

$$[c_{ijkl} + (c_{ilk2} + c_{i2kl})p + c_{i2k2} \cdot p^2] \cdot A_K \frac{\partial^2 f}{\partial \eta^2} = 0 \quad (\text{II.7})$$

Et sous forme contractée après simplification :

$$a_{ik} \cdot A_k = 0 \quad (\text{II.8})$$

Le système d'équations linéaires (II.8) n'a de solution non nulle que si le déterminant de la matrice $\{a_{ik}\}$ est nul :

$$|\{a_{ik}\}| = 0 \quad (\text{II.9})$$

L'expression (II.9) est une équation du sixième degré en p .

Pour chaque racine p_n , $n=1, \dots, 6$, il existe un ensemble de constantes $A_k(n)$ satisfaisant à l'équation (II.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 .

$$A_k(4) = A_k(1)^* \eta_4 = \eta_1^*$$

$$A_k(5) = A_k(2)^* \eta_5 = \eta_2^*$$

$$A_k(6) = A_k(3)^* \eta_6 = \eta_3^*$$

Choisissant $A_3(n) = 1$

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

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

$$A_3(n) = 1$$

Comme les déplacements U sont réels :

$$U_k = \text{Re} \sum_{n=1}^3 A_k(n) \cdot f_n(\eta_n) \quad (\text{II.10})$$

La fonction analytique f est de forme :

$$f_n(\eta_n) = \frac{D(n)}{2\pi i} \text{Ln} \eta_n \quad (\text{II.11})$$

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

Avec :

$$\Delta U_K = b_k \quad (\text{II.12})$$

b_k Composante du vecteur de burgers de la dislocation on obtient alors

$$\text{Re} [\sum_{n=1}^3 \pm A_k(n) \cdot D(n)] = b_k \quad (\text{II.13})$$

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

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

$$\text{Re} [\sum_{n=1}^3 \pm B_{i2k} A_k(n) \cdot D(n)] = 0 \quad (\text{II.14})$$

$$B_{IJK}(n) = c_{ijkl} + c_{ijk2} \cdot p_n \quad (\text{II.15})$$

Les déplacements sont alors :

$$U_k = \text{Re} \left[- \frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^3 A_k(n) \cdot D(n) \cdot \text{Ln} \eta(n) \right] \quad (\text{II.16})$$

Et les contraintes :

$$\sigma_{ij} = \text{Re} \left[- \frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^3 B_{ijk}(n) A_k(n) \cdot D(n) \cdot \eta^{-1}(n) \right] \quad (\text{II.17})$$

L'énergie de ligne est :

$$\frac{W}{L} = \frac{Kb^2}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} \quad (\text{II.18})$$

$$Kb^2 = b_i \cdot \text{Im} \left[\sum_{n=1}^3 B_{i2k}(n) A_k(n) \cdot D(n) \right] \quad (\text{II.19})$$

Quand la ligne de dislocation n'est pas une direction de haute symétrie, il n'y pas d'expression

Analytique simple du champ élastique, il est alors nécessaire de reformuler les solutions en vue de leur traitement numérique. ces formulations sont toutes basées sur le formalisme par STROH [8].

a- Formalisme de STROH

Soit un trièdre direct (m, n, t) et une ligne de dislocation parallèle à t (fig. II.1).

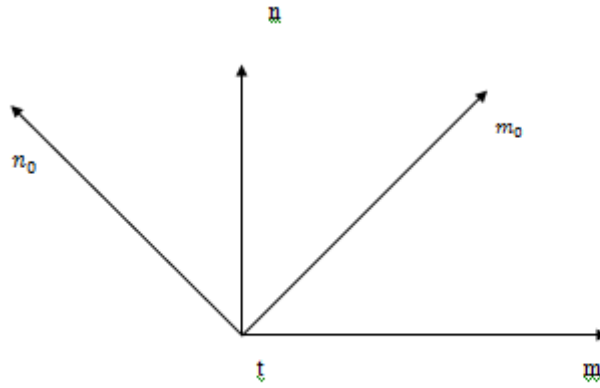
Les déplacements \mathbf{U} Sont décrits par :

$$\mathbf{U} = \frac{D}{2\pi i} \cdot \mathbf{A} \cdot \ln \eta \quad (\text{II.20})$$

$$\eta = \mathbf{m} \cdot \mathbf{x} + p \mathbf{n} \cdot \mathbf{X} \quad (\text{II.21})$$

Par substitution de \mathbf{u} dans l'équation (II.5) et en multipliant par η^2 on obtient :

$$\{ (\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}) + [(\mathbf{m} \cdot \mathbf{n} + \mathbf{n} \cdot \mathbf{m})] p + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}) p^2 \} \mathbf{A} = 0 \quad (\text{II.22})$$



$$\mathbf{m} \wedge \mathbf{n} = \mathbf{t}$$

$$m_0 \wedge n_0 = t$$

Figure II.1 : référentiels pour le formalisme intégral et de STROH.

La ligne de dislocation est parallèle à \mathbf{t} .

Ou les termes du type (mm) sont des matrices 3×3 .

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

$$\mathbf{L} = -[(n \ m) + P(n \ n)] \mathbf{A} \quad (\text{II.23})$$

\mathbf{L} et \mathbf{A} sont combinés pour former un vecteur \mathbf{r} à six dimensions :

$\mathbf{r} = (A_1, A_2, A_3, L_1, L_2, L_3)$ à partir de cette définition l'équation (II.22) devient une équation aux valeurs propres en p :

$$\mathbf{N} \cdot \mathbf{r} = p \cdot \mathbf{r} \quad (\text{II.24})$$

Ou \mathbf{N} est une matrice 6×6 constituée de quatre blocs 3×3 .

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} -(n \ n)^{-1} \cdot (n \ m) & -(n \ n)^{-1} \\ -[(m \ n)(n \ n)^{-1} \cdot (n \ m) - (m \ m)] & -(m \ n)(n \ n)^{-1} \end{bmatrix} \quad (\text{II.25})$$

L'équivalence avec l'équation (II.22) peut être vérifiée directement en substituant l'équation (II.23) dans (II.24) et en utilisant la propriété $(n \ n)^{-1} (n \ n) = 1$

Les expressions des déplacements, contraintes et énergie sont alors :

$$U = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\alpha=1}^6 \pm \mathbf{A}_{\alpha} [\mathbf{L}_{\alpha} \cdot \mathbf{b}] \ln \eta_{\alpha} \quad (\text{II.26})$$

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2\pi i} \sum_{\alpha=1}^6 \pm C_{ijk1} [m_1 + p_{\alpha} n_1] \mathbf{A}_{\alpha K} [\mathbf{L}_{\alpha} \cdot \mathbf{b}] \frac{1}{\eta_{\alpha}} \quad (\text{II.27})$$

$$\frac{w}{L} = - \frac{1}{4\pi i} (L n \frac{R}{r_0}) \sum_{\alpha}^6 \pm [\mathbf{b} \cdot \mathbf{L}_{\alpha}] \cdot [\mathbf{L}_{\alpha} \cdot \mathbf{b}] \quad (\text{II.28})$$

b- formation intégral [9]

On considère deux trièdres directs (m, n, t) et (m_0, n_0, t) tournés l'un par rapport à l'autre d'un angle ϕ . La ligne de dislocation est parallèle à t (fig. II.1).

L'équation aux valeurs propres (II.24) devient:

$$\mathbf{N}(\phi) \cdot \mathbf{r}(\phi) = \mathbf{p}_{\alpha}(\phi) \cdot r_{\alpha}(\phi) \quad (\text{II.29})$$

Et la valeur moyenne de l'opérateur $\mathbf{N}(\phi)$ est :

$$\langle \mathbf{N} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathbf{N}(\phi) \cdot d\phi \quad (\text{II.30})$$

Et peut être écrite sous la forme :

$$\langle \mathbf{N} \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathbf{N}(\phi) \cdot d\phi = \begin{bmatrix} S & Q \\ B & S^T \end{bmatrix} \quad (\text{II.31})$$

Avec :

$$S = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (n n)^{-1} \cdot (n m) \cdot d\phi \quad (\text{II.32})$$

$$Q = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (n n)^{-1} \cdot d\phi \quad (\text{II.33})$$

$$B = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} [(n m) \cdot (n n)^{-1} \cdot (n m) \cdot (m m)] d\phi \quad (\text{II.34})$$

$$S^T = - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} (n m) \cdot (n n)^{-1} \cdot d\phi \quad (\text{II.35})$$

Les matrices réelles S, Q, b, S^T sont des d'ordre 3 et ne dépendent que la direction de la dislocation.

II.1.2 Dislocation à l'interface [7]

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 et à une distance " l " de celle-ci (fig. II.2).

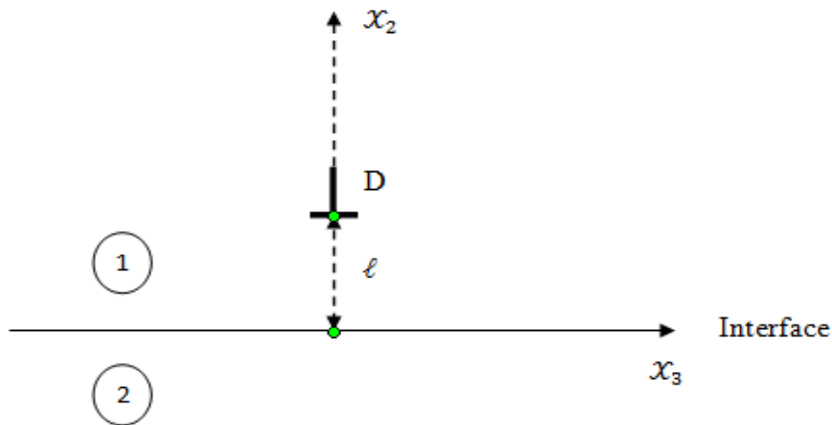


Figure II.2: configuration géométrique utilisée pour le calcul de l'interaction entre une dislocation D rectiligne et une interface L qui lui est parallèle. L'interface sépare les milieux (1) et (2).

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 (fig. II.3).

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

$$\delta u = (l/R) \cdot \delta l \tag{II.36}$$

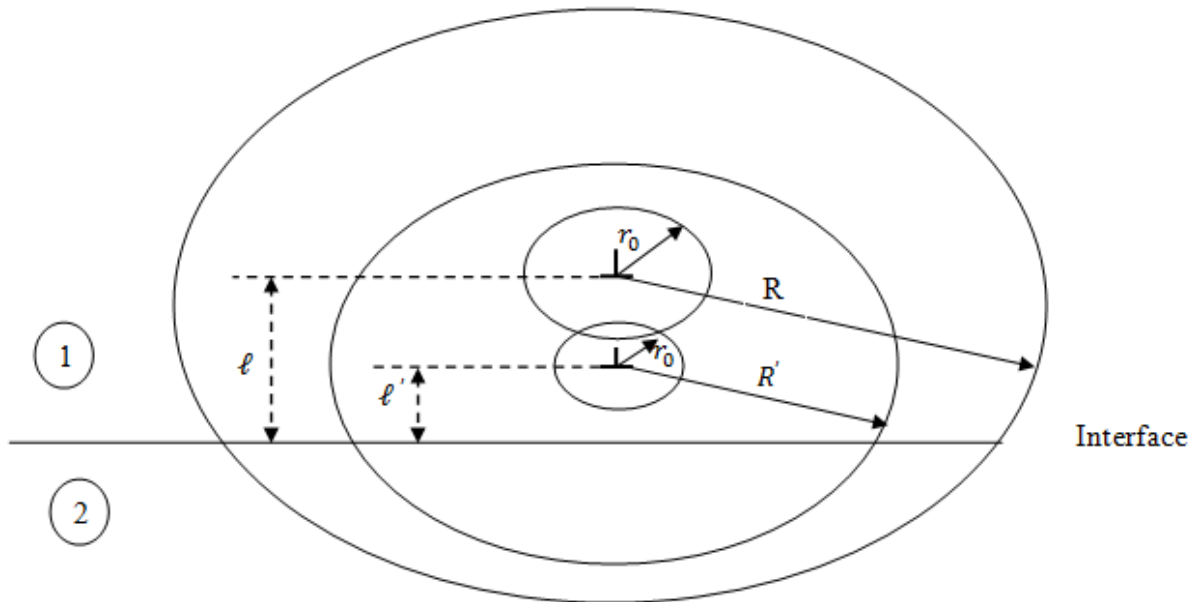


Figure II.3 : Schéma définissant les paramètres intervenant dans le calcul de l'énergie d'une dislocation inter faciale.

Activ

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

$$(l/R^2) \cdot \delta l \cdot 2\pi R \quad (\text{II.37})$$

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 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 , R suffisamment grand. Supposons que la dislocation se rapproche de l'interface à une distance l' telle que $l' < l$.

Et si le rayons de cœur r_0 est changé en r_0' tel que:

$$r_0' = (l'/l) r_0 \quad (\text{II.38})$$

Et si celui du cylindre R est changé en R'

$$R' = (l'/l) R \quad (\text{II.39})$$

Alors l'énergie dans la couronne cylindrique de R' et R est inchangée par invariance d'échelle. En revanche, si r_0 et R sont gardés constants, l'énergie dans la couronne varie de :

$$\Delta W = E^{(1)} \cdot \text{Ln} (r_0/r_0') - Q \quad (\text{II.40})$$

Avec :

$E^{(1)}$: Facteur pré logarithmique d'énergie pour une dislocation dans le milieu (1) infini.

Q : énergie élastique dans le bicristal entre les deux cylindres de rayon R et R' .

Comme R est très grand devant I , 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 inter faciale :

$$Q = E^{(1/2)} \cdot \text{Ln} (R/R') \quad (\text{II.41})$$

Où $E^{(1/2)}$ est le facteur pré logarithmique d'énergie pour une dislocation inter faciale.

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 nulles sur la dislocation.

Selon le formalisme de STROH, son expression est :

$$E^{(1/2)} = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\alpha=1}^6 D^{(1)}_{\alpha} \cdot L^{(1)}_{\alpha} \cdot b \quad (\text{II.42})$$

b : vecteur de burgers de la dislocation.

Par le formalisme intégral, on obtient :

$$E^{(1/2)} = \frac{1}{4\pi} \cdot b \cdot B^{(1/2)} \cdot b \quad (\text{II.43})$$

Avec :

$$[B^{(1/2)}]^{-1} = \frac{1}{2}(B^{-1}_{(1)} + B^{-1}_{(2)}) + \frac{1}{2} \cdot (B^{-1}_{(1)} \cdot S^T_{(1)} + S_{(2)} \cdot B^{-1}_{(2)}) \cdot B_{(2)} \cdot (B_{(1)} + B_{(2)})^{-1} \cdot B_{(1)} \cdot (B^{-1}_{(1)} \cdot S^T_{(1)} + B^{-1}_{(2)}) \quad (\text{II.44})$$

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

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

II.1.3 Concept de la force image

Dans un bicristal de matrice anisotrope, le bilan des forces s'exerçant sur une dislocation de matrice comprend un terme supplémentaire lié à la présence de l'interface et qualifié de « force image » par analogie avec la « charge image » en électronique.

Cette force image est due au champ de contrainte d'une dislocation virtuelle symétrique de la première par rapport au plan du joint.

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

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

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

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

$$(b_{image}/b) = (E^{(2)} - E^{(1)}) / (E^{(2)} + E^{(1)}) \quad (\text{II.45})$$

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

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

Dans le fer la dislocation vis a / 2 < 111 > est repoussée quelle que soit l'orientation relative des cristaux. La répulsion est maximale pour la condition $[111]_1 // [100]_2$.

Dans le cuivre la dislocation vis a / 2 < 110 > subit une force image dont le signe varie 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 [10] 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 situations moins particulières d'une part par Tucker [11] et d'autre part par Gemperlova et Saxal [12].

Gemperlova [13] étudie de manière plus détaillée les forces images pour différentes configurations « joint de grains - dislocations » 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 < 100 > soit < 111 > .

- les dislocations coin ou mixte sont attirées ou repoussées 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 (II.2) à été obtenue par Barnett et Lothe [14]

$$F = - [E^{(1/2)} - E^{(1)}] / l \quad (\text{II.46})$$

Pour un vecteur de Burgers et un bicristal donné, 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 $E^{(1/2)}$

Si $E^{(1)} > E^{(1/2)}$: la dislocation est attirée vers l'interface.

Si $E^{(1)} < E^{(1/2)}$: la dislocation est repoussée de l'interface.

Si $E^{(1)} = E^{(2)}$: la force image est nulle.

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

II.1.4 Force image dans les matériaux de structure cubique

La force image subie par une dislocation proche et parallèle au joint de grains est étudiée en fonction de la désorientation du joint de grains dans le fer de structure C.C, en se basant sur la théorie de l'élasticité anisotrope, par Khalfallh et al [15].

Cette étude a montré que la force image agissant sur la dislocation est négligeable pour des situations de haute symétrie ou le vecteur de burgers de la dislocation est parallèle à l'axe de rotation $\langle 100 \rangle$ ou $\langle 111 \rangle$. Ceci est vrai quel que soit la ligne de dislocation et l'angle de rotation. D'un autre côté quand l'axe de rotation n'est pas un axe de haute symétrie et ne possède pas une relation simple avec le vecteur de Burgers la force image devient comparable aux contraintes internes.

Les travaux ont été étendus à d'autres matériaux de structure C.C par Khalfallh et al [16]. Les plus importants résultats de cette étude sont :

- Dans le cas d'une interface hétéro phase entre deux cristaux (1) et (2), la force image une dislocation est toujours soit attractive soit répulsive selon la valeur moyenne des constantes élastique.
- L'interaction entre le joint de grains et la dislocation ne peut être prédite dans le détail par la seule considération de la valeur du coefficient d'anisotropie A et le facteur d'anisotropie H.
- Dans le cas des matériaux avec, (A facteur d'anisotropie) la dislocation vis est repoussée du joint de grains dans le poly cristal.

L'extension de l'étude aux matériaux de structure CFC par et al [17] a montré que :

- La force image peut avoir des valeurs très importantes et différentes négatives ou positive
- La dislocation vis dans la majorité des cas est repoussée du joint de grains
- Les effets de la force image dépendent de la magnitude du facteur d'anisotropie H, mais peuvent aussi différer avec la nature des matériaux (conducteur ou semi conducteur).

L'intensité de la force image est d'un ordre de grandeur comparable à celle des autres forces élastiques et doit être prise en compte dans l'analyse de l'interaction entre le joint de grains et la dislocation

Chapitre III : Carte d'isoénergie

Chapitre III : Carte d'isoénergie

Nous nous proposons d'étudier les variations de l'énergie d'interaction, ΔE entre dislocations et joints de grains en fonction des paramètres cristallographiques dans des matériaux de structure cubique élastiquement anisotrope. Les résultats seront présentés sous forme de cartes d'isoénergie permettant ainsi de lire directement la variation de la force image.

Les paramètres qui interviennent dans le calcul de l'énergie d'interaction sont :

a- Les matériaux : nous avons retenu l'Aluminium, Lithium il est caractérisé par les coefficients d'élasticité C_{ij} .

b- Les vecteurs de Burgers des dislocations sont :

$\langle 110 \rangle$ dans Aluminium et $\langle 111 \rangle$ dans Lithium, représentant les vecteurs de Burgers parfaits et les plus probables pour le CFC et le CC respectivement.

c- Les joints de grains : ce sont des joints de coïncidence caractérisés par l'axe et l'angle de rotation (\vec{R} , θ) et l'indice de coïncidence (Σ).

L'Aluminium		
Σ	θ	\vec{R}
3	70.5°	1 1 0
9	38°	1 1 0
11	130°	1 1 0

Lithium		
Σ	θ	\vec{R}
3	60°	1 1 1
9	38.94°	1 1 0
11	50°	1 1 0

Tableau III.1 : L'axe de rotation R, l'angle de rotation

θ, Σ

III.1 calcul de la force image

Rappelons que dans un bicristal de matériaux anisotrope une dislocation parallèle à l'interaction subit une force image dont l'expression est :

$$F = -(\Delta E/d) \quad \text{avec} \quad \Delta E = (E^{(1/2)} - E^{(1)}) .$$

Où d est la distance de la dislocation au joint de grains et ΔE la différence des coefficients prélogarithmiques entre l'énergie de la dislocation à l'interface et celle de la même dislocation située dans le cristal (1) infini . cette force est attractive ou répulsive selon le signe de ΔE .

Les facteurs prélogarithmiques , $E^{(1/2)}$ et $E^{(1)}$, n'ont pas d'expressions analytiques simple. Il est nécessaire de calculer ΔE numériquement, pour chaque configuration dislocation joint de grains, à partir du formalisme intégral de la théorie de l'élasticité anisotrope les valeurs numériques des facteurs prélogarithmiques deviennent exploitables en les reportant sur des cartes d'isoénergie.

Les coefficients $E^{(1/2)}$ et $E^{(1)}$ sont obtenus dans le cadre du formalisme intégral comme suit :

$$E^{(1)} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{B}^{(1)} \cdot \mathbf{b}$$

Où \mathbf{b} est le vecteur de Burgers de la dislocation objet \mathbf{B} est le bloc sud est de matrice \mathbf{N} (6×6) :

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} S & Q \\ B & S^T \end{bmatrix}$$

$\mathbf{N}^{(1)}$ est évaluée dans le référentiel (I) lié aux axes du cube du cristal (1).

Pour le calcul de $E^{(1/2)}$ il est nécessaire de déterminer la matrice $\mathbf{N}^{(2)}$ relative à la dislocation image, elle est calculée dans le référentiel (II) lié aux axes du cube du cristal(2) .Elle est ensuite exprimée dans le référentiel (I) par :

$$\mathbf{N}^{(2)}_{(I)} = \begin{bmatrix} R & 0 \\ 0 & R \end{bmatrix} \mathbf{N}^{(2)}_{(II)} \begin{bmatrix} R^T & 0 \\ 0 & R^T \end{bmatrix}$$

Où R est la matrice de rotation entre les deux cristaux.

Ayant $\mathbf{N}^{(2)}_{(I)}$, on détermine $\mathbf{N}^{(1/2)}$:

$$\mathbf{N}^{(1/2)} = -2 [\mathbf{N}^{(1)} + \mathbf{N}^{(2)}]^{-1}$$

Et

Chapitre III : Carte d'isoénergie

$$E^{(1/2)} = b \cdot B^{(1/2)} \cdot B$$

Les valeurs numériques des facteurs prélogarithmiques deviennent exploitables en les reportant sur des cartes d'isoénergie.

III.2 Fabrication des cartes d'isoénergie

L'influence du caractère de la dislocation sur l'énergie d'interaction dislocation-joint de grains est étudiée en calculant ΔE , pour un joint de grains donnée et un vecteur de Burgers donné, en autorisant la ligne de dislocation à prendre toutes les directions de l'espace cristallins.

Pour chaque configuration $(\vec{R}, \theta, \vec{b})$, les résultats sont reportés sous forme de courbe d'isoénergie sur une projection stéréographique de directions des lignes des dislocations. Le champ de la variation de ΔE est découpé en deux intervalles (énergie positive et énergie négative). Les courbes d'isoénergie correspondent aux limites entre deux intervalles contigus. L'ensemble de ces lignes pour une configuration donnée constitue une carte d'isoénergie. Pour le tracer des cartes d'isoénergie, dans le cas d'Aluminium les axes de la projections choisis sont [0 10], [010], [001]; Par contre dans le cas de Lithium c'est les axes [0 1 0], [0 0 -1], [1 0 0], cette configuration permet de faire apparaître la demi sphère sud dans laquelle la force image existe

D'un point de vue traitement informatique, la procédure est la suivante :

- Construction du fichier des 720 directions des lignes de dislocation en indice de Miller

<ui vj t wk> avec i,j,k des entiers tel que :

$-5 \leq i \leq 5, \quad -5 \leq j \leq 5, \quad -5 \leq k \leq 5$. Programme LIN.for.

- Normalisation des directions des dislocations des vecteurs du Burgers, et des axes de rotation \vec{R} . programme ORTHO.for

- Calcul des coordonnées cartésiennes des poles des directions des dislocations et construction de la projection stéréographique pour chaque configuration. programme PROJHEX.for

- Calcul de l'énergie d'interaction dislocation-joint de grains pour chaque ligne de dislocation. programme CPH41 et HEX4.

- Partition les valeurs de l'énergie d'interaction en deux intervalles, un pour l'énergie négative et l'autre pour l'énergie positive. Programme TRI.for et NEGTRI.for

- Tracé les cartes d'isoénergie en utilisant Origin61.

III.3 Tableau des résultats

Les joints de grains retenus ainsi que des énergies d'interaction maximales et minimales sont récapitulées pour L'Aluminium et Lithium dans les deux tableaux suivant :

Matériau Aluminium					
\vec{b}	\vec{R}	θ°	Σ	E_M (PJ/m)	E_m (PJ/m)
<1 1 0>	[1 1 0]	70.5°	3	4244	-4742
		38°	9	2842	-3081
		130°	11	3491	-381

Tableau III.2 : valeurs extrêmes de l'énergie d'interaction dislocation –joints de grains dans L'Aluminium. \vec{b} Vecteur de Burgers, \vec{R} axe de rotation, θ l'angale de rotation, Σ indice de coïncidence, E_m énergie d'interaction minimale, E_M énergie d'interaction maximale.

Matériau Lithium					
\vec{b}	\vec{R}	θ°	Σ	E_M (PJ/m)	E_m (PJ/m)
<1 1 1>	[1 1 1]	60°	3	-932	-5456
	[1 1 0]	38.94°	9	2558	-16215
		50°	11	-961	-15664

Tableau III.3 : valeurs extrêmes de l'énergie d'interaction dislocation –joints de grains dans Lithium. \vec{b} Vecteur de Burgers, \vec{R} axe de rotation, θ l'angale de rotation, Σ indice de coïncidence, E_m énergie d'interaction minimale, E_M énergie d'interaction maximale.

III.4 Cartes d'isoénergie

Pour l'Aluminium

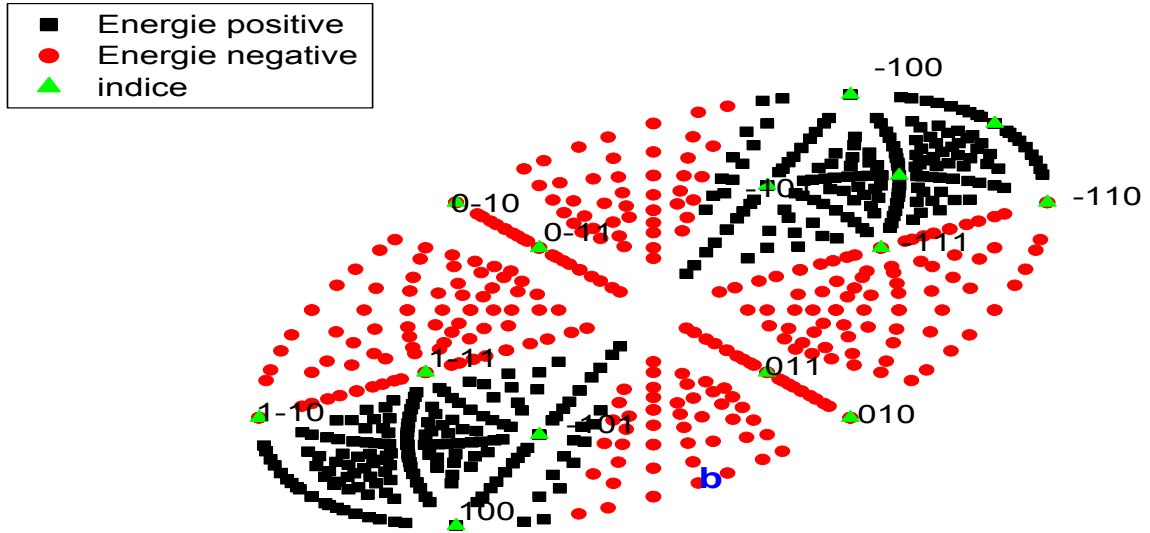


Figure III.1 : carte d'isoénergie pour l'Aluminium : $\Sigma=3$ $\vec{R} = [110]$, $\theta = 70.5^\circ$, $\vec{b}=[110]$

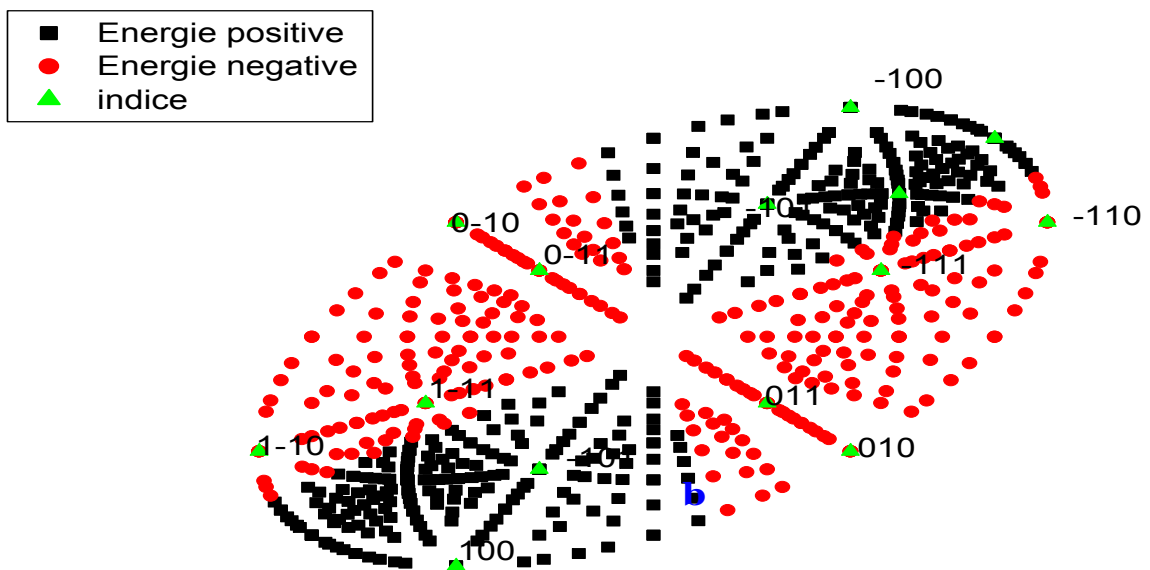


Figure III.2 :carte d'isoénergie pour l'Aluminium : $\Sigma=9, \vec{R} = [110], \theta = 38^\circ, \vec{b}=[110]$

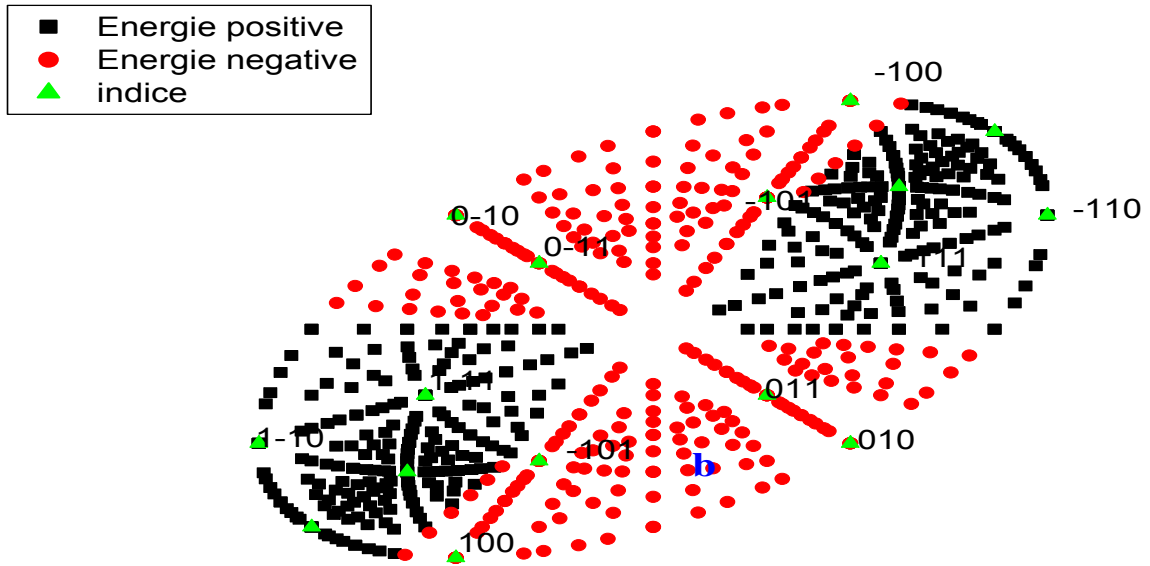


Figure III.3 :carte d'isoénergie pour l'Aluminium : $\Sigma=11, \vec{R} = [110], \theta = 130^\circ, \vec{b}=[110]$

Pour Lithium

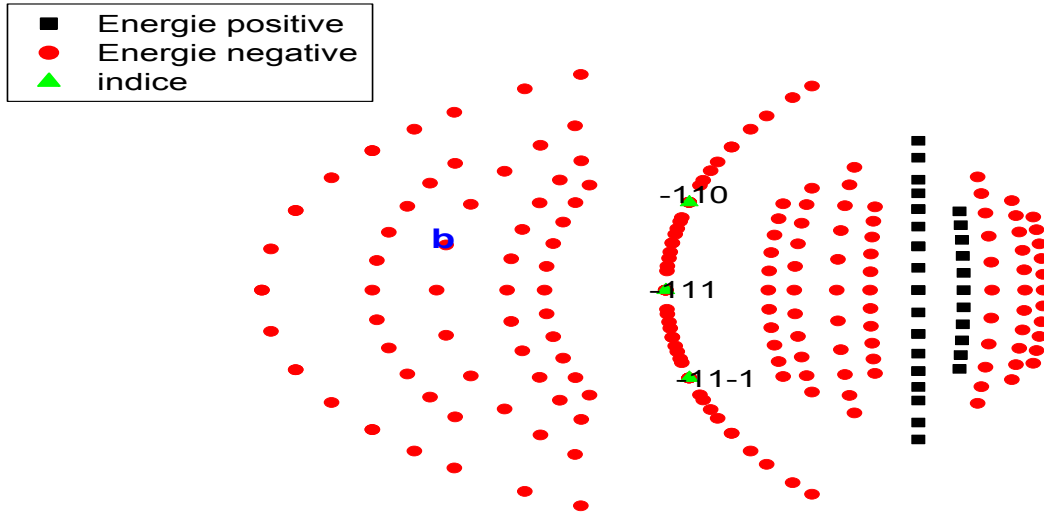


Figure III.4 : Carte d'isoénergie pour Lithium : $\Sigma=3, \vec{R} = [110], \theta = 60^\circ, \vec{b} = [111]$

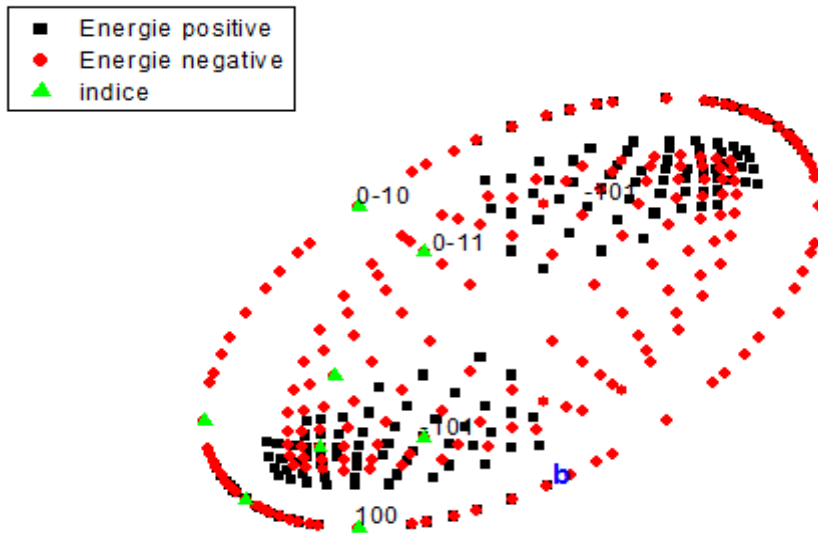


Figure III.5 : Carte d'isoénergie pour Lithium : $\Sigma=9, \vec{R} = [110], \theta = 38.94^\circ, \vec{b} = [111]$

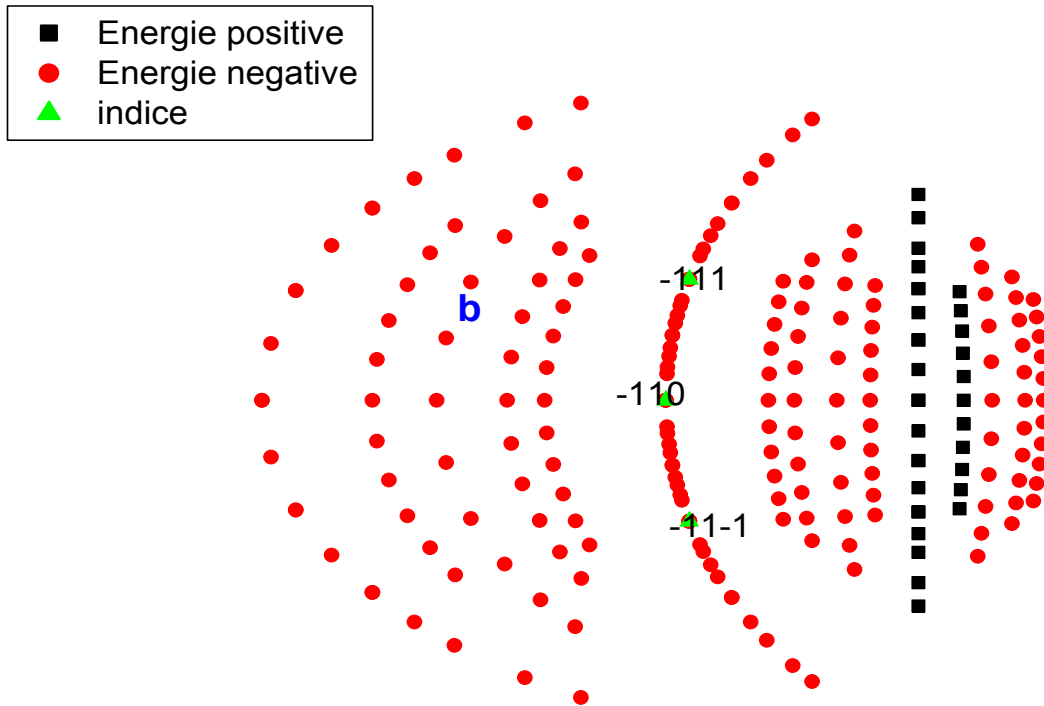


Figure III.6 : Carte d'isoénergie pour Lithium : $\Sigma=11, \vec{R} = [110], \theta = 50^\circ, \vec{b}=[111]$

III.1 Discussion

a / Examen des cartes d'isoénergie :

*Aluminium

L'énergie d'interaction a été calculée pour Aluminium dans le cas d'un vecteur de Burgers

$\vec{b} = [110]$ représentant le vecteur de Burgers parfait et le plus probable dans la structure cubique à face centrée.

- Pour les joint de grains $\Sigma 3$ et $\Sigma 11$ les cartes d'isoénergie présentent des valeurs d'énergie négatives plus importante que les valeurs positives, il semble que la force image a un effet attractive plus dominant que le répulsive. Pour le joint de grains $\Sigma 9$ les valeurs positives de l'énergie d'interaction semble l'égerment plus élevées que les valeurs négatives. La répartition de l'effet de la force image (attraction ou répulsion) sur les dislocations semble équitable.
- La dislocation vis c'est la dislocation avec une ligne parallèle à $[110]$. La dislocation coin c'est la dislocation avec une ligne qui se trouve à 90° de la $[110]$ à partir de la projection stéréographique.
- Pour les dislocations vis, les joints de grains type $\Sigma = 3$ et $\Sigma = 11$ possèdent des énergies négatives contrairement au joint de grains type $\Sigma = 9$, l'énergie d'interaction entre le joint et la dislocation vis est positive dans ce cas la force image est répulsive.
- Pour la dislocation coin, peu importe la configuration cristallographique et le type du joint de grain, l'énergie d'interaction entre le joint de grain et la dislocation est négative, par conséquence la force image est attractive.
- Toutes les cartes d'isoénergie de l'aluminium présentent une symétrie binaire

*Lithium

Le Lithium possède une structure type cubique centré, l'énergie d'interaction a été calculée pour un vecteur de Burgers type $\vec{b} = [111]$, représentant la vecteur de la dislocation parfaite et le plus probable pour cette structure

Chapitre III : Carte d'isoénergie

- Pour les dislocations vis, les joints de grains type $\Sigma = 3$, $\Sigma = 9$ et $\Sigma = 11$ possèdent des énergies négatives donc la force image est attractive.
- La dislocation coin possède une force image attractive pour toutes les configurations cristallographiques et tous les types de joints de grains.
- Contrairement à l'aluminium les cartes d'isoénergie du Lithium ne présentent aucune symétrie

b/Mobilité des dislocations en l'absence de contraintes extérieures :

En l'absence de contraintes extérieures le mouvement d'une dislocation est contrôlé par le bilan des contraintes internes qui sont la force de friction du réseau appelée force de Peierls.

La force image, F_i , exercée sur une dislocation parallèle à un joint de grains et située à une distance d , est dérivée de l'énergie d'interaction, ΔE :

$$F_i = -\Delta E / d.$$

La force de Peierls exercée sur une dislocation de vecteur de Burgers \vec{b} est de largeur de cœur w est donnée par :

$$F_p = (2\mu b / (1 - \nu)) \cdot \sin 4\pi \alpha \exp(-2\pi w / b)$$

$$W = b / (1 - \nu).$$

τ_p : Contrainte de Peierls maximale.

$$\tau_p = (2\mu b / (1 - \nu)) \cdot \exp(-2\pi / (1 - \nu))$$

Où μ module de cisaillement, et ν le module de Lamé.

Les paramètres élastiques μ et ν sont obtenus par la moyenne de Voigt pour les matériaux de structure cubique.

$$\lambda + 2\mu = 1/15 (8 C_{11} + 4C_{13} + 3C_{33} + 8C_{44}).$$

$$\mu = 1/30 (7C_{11} - 5C_{12} + 2C_{33} + 12C_{44} - 4C_{13})$$

$$\lambda = 1/15 (C_{11} + C_{33} + 5C_{12} + 8C_{13} - 4C_{44}).$$

$$\nu = \frac{\lambda}{2} (\mu + \lambda).$$

- Pour l'Aluminium le μ module de cisaillement, et ν le module de lamé sont calculés

Chapitre III : Carte d'isoénergie

$$\mu = 0.28 \cdot 10^{11} \text{ N/m}^2$$

$$\nu = 0.34$$

La contrainte de Peierls maximale pour :

Le vecteur de Burgers $\vec{b} = [110]$ est égale à $\tau_p = 3.59 \cdot 10^{-18} \text{ PJ/m}^2$

- Pour Lithium le μ module de cisaillement, et ν le module de lamé sont calculés

$$\mu = 0.042 \cdot 10^{11} \text{ N/m}^2$$

$$\nu = 0.34$$

La contrainte de Peierls maximale pour :

Le vecteur de Burgers $\vec{b} = [111]$ est égale à $\tau_p = 5.70 \cdot 10^{-19} \text{ PJ/m}^2$

En comparant la valeur de la force de Peierls aux valeurs extrêmes (maximales et minimales) de la force image pour toutes les configurations cristallographique et pour les deux types de matériaux, on trouve que la valeur de la force de Peierls (qui est de l'ordre de 10^{-18} PJ/m^2) reste inférieure à celle de la force image (qui est de l'ordre de 10^{12} P J/m^2) pour une distance de 1.b.

Sur une distance de 5.b le mouvement de la dislocation est contrôlé par la force image ; au-delà de cette distance la force image devient négligeable devant la force de Peierls, et dans ce cas le mouvement de la dislocation est indépendant de la force image il est géré par la force de friction du réseau (la force de Peierls).

C/ Variation de l'énergie d'interaction en fonction de l'angle de rotation :

La trace de la variation des valeurs extrêmes (maximales et minimales) de l'énergie d'interaction entre dislocation et joint de grain en fonction de l'angle de rotation pour un vecteur de Burgers et un axe de rotation donnés dans le cas de l'aluminium montre que l'évolution de l'énergie d'interaction est indépendante de l'angle de rotation (Figure III.7) . l'angle de rotation n'a aucun effet sur la force image.

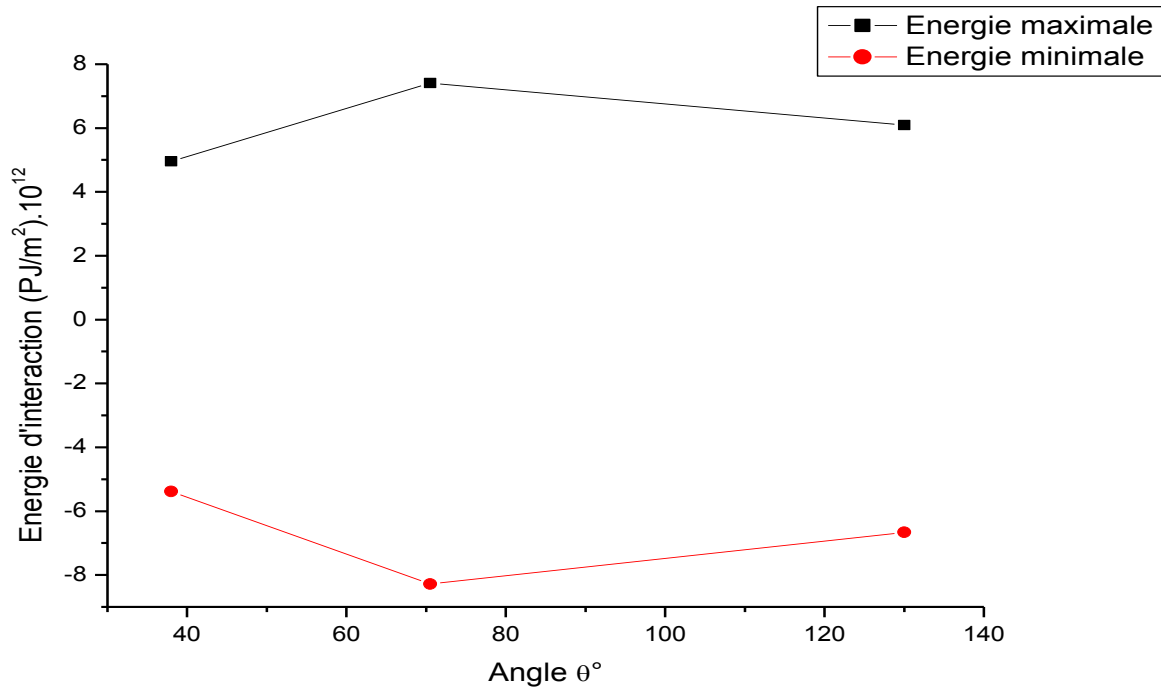


Figure III.7 : Variation de l'énergie en fonction de l'angle pour l'Aluminium

-le paramètre Σ , indice de coïncidence des joints, qui mesure d'une certaine manière l'ordre conservé dans la bicristal, ne semble pas être un facteur pertinent pour l'analyse de l'énergie d'interaction.

Conclusion

Conclusion

Notre étude a été portée sur l'énergie d'interaction élastique entre des dislocations et joints de grains dans des matériaux élastiquement anisotrope et de structure cubique. Cette interaction est à l'origine de la force image, cette dernière contribue au mouvement des dislocations dans un milieu élastiquement anisotrope.

Nous proposons dans ce travail de calculer l'énergie d'interaction entre des dislocations les plus fréquentes dans l'Aluminium et lithium de structure cubique, et des joints de grains de coïncidence avec un indice de coïncidence inférieur à 11. Pour se faire la mise au point des programmes pour le calcul a été nécessaire, la fabrication des lignes de dislocation a été la première étape de notre programme. Nous avons également écrit les programmes pour tracer des projections stéréographiques dans la cubique.

Les résultats obtenus montrent que l'énergie d'interaction élastique entre dislocations et joint de grains est indépendante de l'angle de rotation pour un axe et un vecteur de Burgers donnés. La force image peut être répulsive ou attractive selon la configuration étudiée. L'énergie d'interaction semble être réactive à la variation du matériau (Constantes élastiques) plus que à la configuration cristallographique (axe et angle de rotation).

Les cartes d'isoénergie pour Aluminium présentent une symétrie binaire contrairement aux cartes du Lithium qui ne présentent aucune symétrie.

Le mouvement de la dislocation est contrôlé par la force image sur une distance de $5b$, au-delà de cette distance la force image devient négligeable devant la force de Peierls, dans ce cas le mouvement de la dislocation est contrôlé par la force de friction du réseau.

Notre étude qui reste théorique ne concerne que les effets à longue distance et ne traite que l'interaction élastique entre deux défauts, un linéaire et le deuxième plan, dans un matériau modèle libre de tous défauts dans des conditions géométriques idéales.

Les résultats obtenus et la technique d'étude mise au point ouvrent de nombreuses perspectives. D'un point de vue pratique, il est souhaitable d'approfondir l'étude afin d'obtenir un modèle prédictif pour le sens de la force image.

- D'autres matériaux de structure cubique peuvent être considérés afin d'identifier l'effet des paramètres élastiques et cristallographiques
- Des joints de grains moins généraux peuvent être pris pour une étude plus profonde.

- Une configuration cristallographique (axe et angle de rotation ainsi que vecteur de Burgers) plus large est à prendre en compte

D'un point de vue expérimental, l'effet de la force image sur une dislocation parallèle à un joint de grains peut être étudié en microscope électronique en transmission en prenant compte de l'effet image du aux surfaces libres de l'échantillon.

D'un point de vue théorique pour ce rapproché des configurations réelles il serait préférable de traiter le cas des dislocations non parallèles au plan du joint de grains d'une part et celui des interactions avec des points triple et la présence d'autre défauts.

Références

- [1]- G. Benchabane., Thèse de doctorat université Mohamad khider, Biskra
- [2]- L. Priester., « approche géométrique des joint du grains, Intérêt et limite, Revu de physique applique, 15(4),(1980),789-830
- [3]-L. Priester., « les joints de grains de la théorie à l'ingénieur », parc d'activité de conrtaboef, Bp112, France, (2006) ,88
- [4]-L. Priester., cour de « structures et défauts de structure des joints de grains », France (2009)
- [5]-H. Tenzenas du montcel., L.Nazé., V.Maurel., N. Souai., R.logé, J, Y Guedou, « ingénierie des joint de grains dans les alliages a base de Nickel » 19^{ème} congrès, Marseille 24-28 aout(2009).
- [6]-G. Daveau., Thèse de doctorat, Ecole centrale paris,(2012).
- [7]-O. Kalfallah., Thése de Doctorat d'état, Orsay, (1988).
- [8]-J. P.Hirth., J.Lonth., « Théory of Dislocation, Ed, N.Y, (1982) ,468.
- [9]- J. P.Hirth., J.Lonth., « Théory of Dislocation, Ed, N.Y, (1982) ,473.
- [10]-Y. T.Chou., phys, Stat. Sol, 15, (1966), 123.
- [11]-M. O.Tucker., phil.Mag, 19, (1969) ,1141.
- [12]-J. Gemperlova.,J.Sexal.Czeauch, phys, B18, (1968), 1085.
- [13]- J. Gemperlova., phys, Stat. Sol, 30, (1968).216.
- [14]-D. M.Barnett ., J.Loith, JPY, F4, (1974) ,1618.
- [15]- O. Kalfallah., M.Condat, L.Priester et H.O.K, Kirchnern Phil.Mag.A, 61-2, (1990) ,291.
- [16]- O. Kalfallah., M.Condat, L.Priester, Phil.Mag.A, 67-1, (1993) ,231.
- [17]- L. Priester., O.Kalfallah, Phil.Mag.A, 69-3,(1994),471.

Résumé

L'interaction élastique entre les joints de grains est à l'origine de la force image et la majorité des propriétés mécaniques.

L'énergie d'interaction élastique entre une dislocation et un joint de grains a été calculée. Dans le cas où le matériau est anisotrope cette interaction conduit à une force image exercée sur la dislocation. La force image peut être attractive ou répulsive selon les caractéristiques du matériau, du joint de grains et dislocation. L'analyse des paramètres qui contrôlent, dans les matériaux de structure cubique, cette interaction élastique constitue l'objectif principal de cette étude.

Sur la base de la théorie de l'élasticité anisotrope, l'énergie dont dérive la force image est calculée pour différentes situations cristallographiques (\vec{b}, \vec{R}, θ). L'Aluminium et Lithium sont les matériaux choisis pour l'étude. Les résultats du calcul de l'énergie d'interaction sont représentés sous forme de carte d'isoénergie. L'examen de ces cartes révèle que la force image est indépendante de l'angle de rotation. Le calcul de la force de Peierls et la force image révèle que le mouvement des dislocations dépend de l'intensité et le sens de la force image.

Mots clés : Dislocation ; joint de grain ; Structure Cubique ; Force Image ; Anisotropie ; Coefficient d'élasticité.