



Centre d'Elaboration des Matériaux et d'Etudes Structurales
29 Rue J. Marvig, BP 4347, 31055 Toulouse Cedex 4, France



Etude des structures de cœur
des dislocations vis dans le Titane hcp
par simulations numériques

Nathalie Tarrat, Magali Benoit et Joseph Morillo

Collaboration avec A. Couret et D. Caillard (CEMES)
Projet soutenu par l'ANR BLANC ``SIMDIM" (2006-2010)



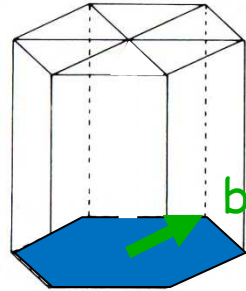
Plan

- ✓ Contexte
- ✓ Méthode
- ✓ Etat de l'art
- ✓ Simulation des cœurs de dislocation
 - ✓ la méthode - tests
 - ✓ γ Surfaces et γ lignes
 - ✓ Cœurs de dislocation (potentiels EAM et DFT)
 - ✓ Energies de coeur
- ✓ Conclusion - perspectives

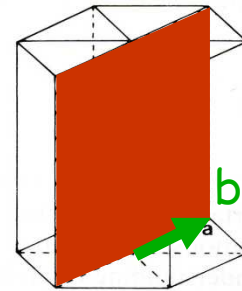
Contexte: dislocations dans les hexagonaux

Métaux hexagonaux: **Magnésium**, **Titane**
Systèmes à glissement facile

Mg



b dislocations
Plan **basal**
 $\tau = 5 \text{ MPa}$

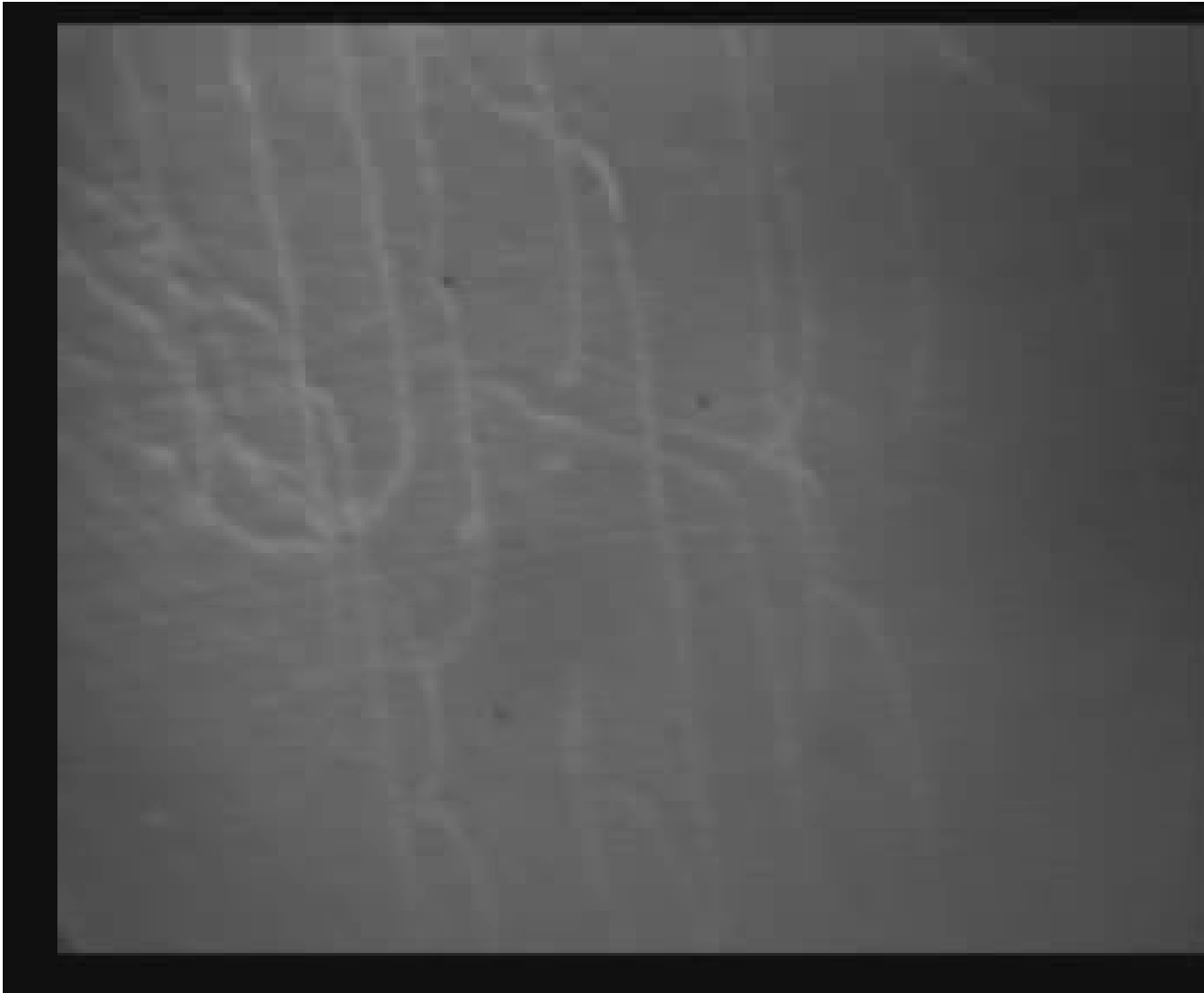


Ti

b dislocations
Plan **prismatique**
 $\tau = 20\sim 50 \text{ MPa}$

Importance du Titane dans les matériaux pour l'aéronautique
→ Dureté améliorée par la présence de solutés (C, N, O)

- ✓ Quels sont les obstacles à la mobilité des dislocations dans le Titane ?
- ✓ Structure atomique du cœur de la dislocation ?
- ✓ Effet des impuretés sur la mobilité ?

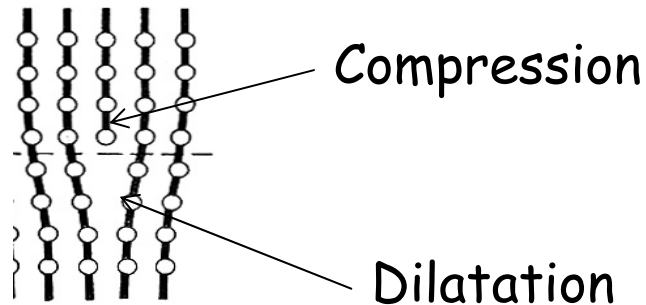


Glissement prismatique dans Ti - Température ambiante

→ Dislocations rectilignes avec un mouvement de blocage/déblocage

Contexte : Interaction dislocations - impuretés

Dislocation coin

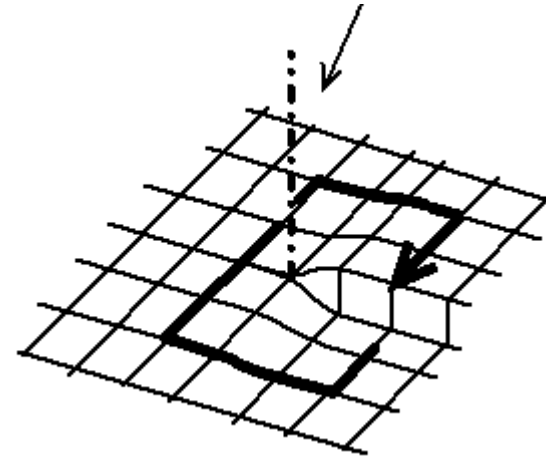


Champ de force élastique à longue distance :

- Attraction des gros solutés par la zone en dilatation
- Attraction des petits solutés par la zone en compression

Ancrage des dislocations

Dislocation vis



Uniquement cisaillement :

Aucune interaction attractive ou répulsive à longue distance sur les solutés

Contexte : Interaction dislocations - impuretés

Hypothèses :

- Etalement prismatique énergétiquement plus favorable que basal
- Etalement du cœur non planaire induisant une force de friction de Peierls
- Forte énergie de liaison soluté-dislocation vis

Méthode: simulations des dislocations

→ Comprendre les relations entre structure de cœur, mobilité et interactions avec les impuretés



Simulations au niveau atomique

Dislocations {
✓ Défauts étendus
✓ Champ élastique à longue portée (décroit en $1/r$)
✓ Élasticité linéaire ne rend pas compte des structures de cœur

★ *Ab initio* DFT
Description
quantique quasi-
exacte

★ Liaison forte et bond
order (BO) potential
Description approchée
de la structure
électronique

★ Potentiels empiriques
Pour les métaux nécessité
d'utiliser des modèles à N-
corps
• A force centrale: EAM
• Avec composantes
angulaires : MEAM

Etat de l'art: études antérieures

1) Potentiels de paires classiques :

- Bacon, D. J., and Martin, J. W., 1981, Phil. Mag. A, 43 , 901
- Bacon, D. J., and Liang , M. H., 1986, Phil. Mag. A, 53 , 163
- A. Girshick, D. G. Pettifor and V. Vitek, 1998, Phil. Mag. A 77, 999

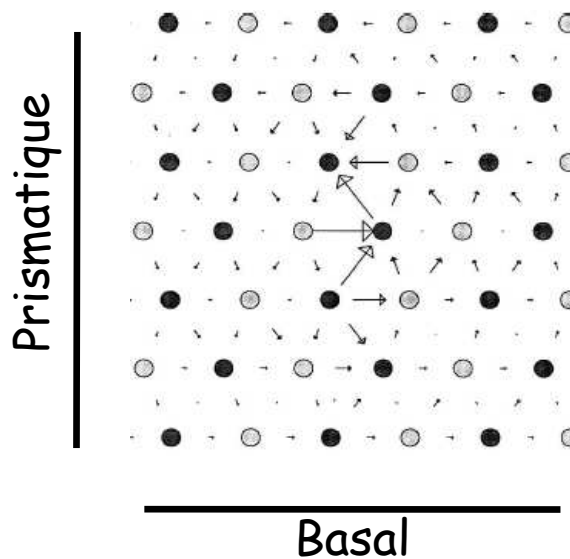
Etalement basal



Inadapté

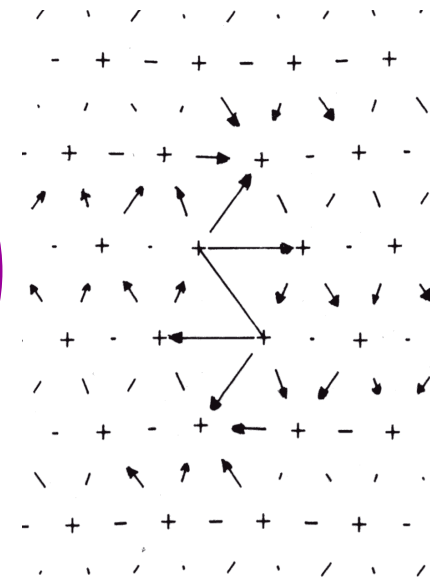
2) Liaisons fortes et Bond Order potential:

Bond order (Girshick)



Prismatique
légèrement plus
stable que basal
(-20 meV/Å et
-24 meV/Å)

Liaisons fortes (Legrand)



A. Girshick, D. G. Pettifor and V. Vitek, 1998, Phil. Mag. A 77, 999

B. Legrand, Phil. Mag. A 52, 83 (1985)

Simulations des dislocations: notre étude

★ Potentiels empiriques

Pour les métaux: potentiels de type Embedded Atom Method (EAM)

$$V = \sum_{i=1}^N F(\rho_i) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j>i}^N \phi_{ij}(r_{ij})$$

- La fonction d'immersion F décrit l'énergie d'immersion d'un atome dans une densité d'électrons locale

$$\rho_i = \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^N \rho_{ij}(r_{ij})$$

- Φ_{ij} est une fonction de paires répulsive

→ Pot. de Hammerschmidt *et al.* (HKV, 2005) et de Zope & Mishin (ZM, 2003)

★ Ab initio (DFT)

- DFT en ondes planes : VASP
- DFT en orbitales localisées : SIESTA

Simulations des dislocations : tests

Propriétés élastiques

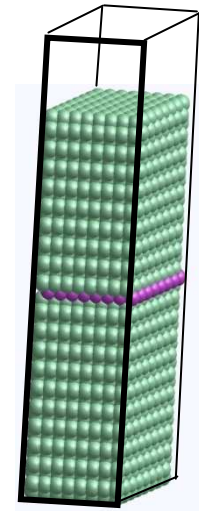
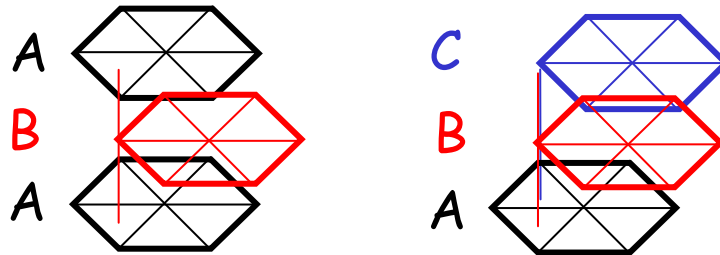
| | DFT-PBE ² (SIESTA) | Pot. de Zope et Mishin | Pot. de Hammer- schmidt | Exp. | BO Girshick |
|-------------------------|--|------------------------------|-------------------------------|------|----------------|
| | Déformation isotrope | | | | |
| B [GPa] | 110.2 | 110.5 | 110.1 | 110 | 113.6 |
| | Cisaillements | | | | |
| C_{44} [GPa] | 48.8 | 46.4 | 45.5 | 50.8 | 50.7 |
| C_{66} [GPa] | 49.4 | 58.3 | 61.1 | 44.9 | 51.0 |
| | Pressions de Cauchy (interactions à N-corps - nulles pour potentiels de paire) | | | | |
| $C_{12} - C_{66}$ [GPa] | 35.2 | 11.2 | 10.8 | 41.8 | 22.9 |
| $C_{13} - C_{44}$ [GPa] | 15.0 | 29.8 | 21.3 | 17.5 | 32.5 |



Choix de SIESTA pour les calculs DFT
car meilleure représentation des effets à N-corps

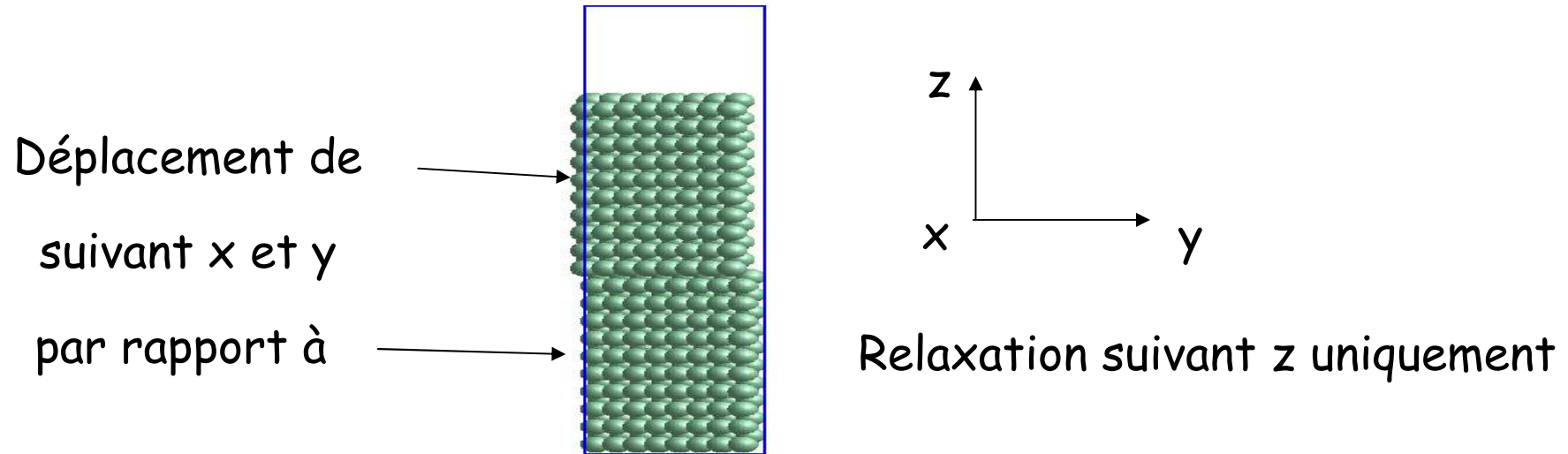
Simulations des dislocations: fautes d'empilement

Calculs des énergies de fautes d'empilement et des énergies de surface



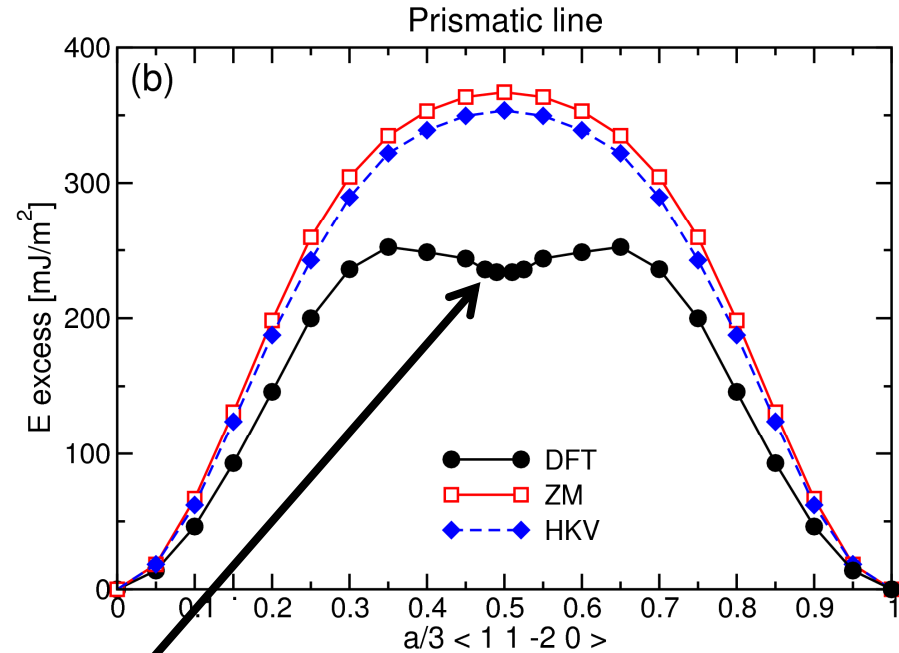
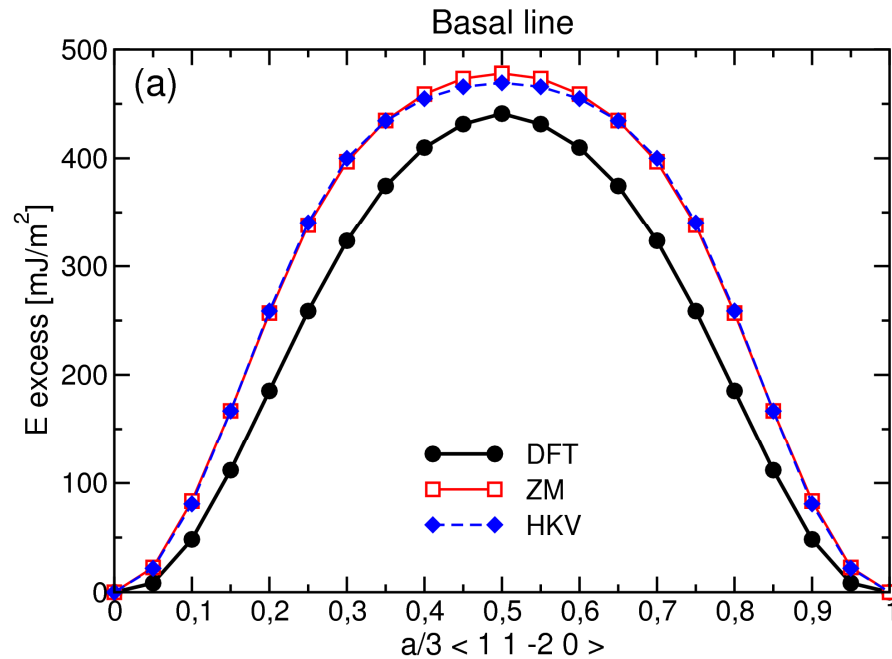
| Energies d'excès en mJ/m^2 | DFT-PBE (SIESTA) | Pot. de Hammer-schmidt | Pot. de Zope et Mishin | Exp. | BO Girshick |
|--|------------------|------------------------|------------------------|------|-------------|
| $\gamma_s(001)$ | 2048 | 992 | 1221 | 2100 | |
| $\gamma_{I1}(AB CB)$ | 149 | 34 | 31 | - | 110 |
| $\gamma_{I2}(AB CA)$ | 259 | 66 | 56 | 290 | |
| $\gamma_{IE}(AB C AB)$ | 353 | 96 | 82 | - | |
| γ_{prism} | 238 | 355 | 364 | | 260 |

Simulations des dislocations : γ surfaces



- Mise en évidence de fautes d'empilement métastables
- Sa forme détermine les détails de l'étalement du cœur des dislocations dans ce plan (Christian and Vitek, 1970, Rep. Prog. Phys. 33, 307)
- Etalement préférentiel du cœur des dislocations dans les plans de faute d'empilement d'énergie minimale

Simulations des dislocations: lignes γ



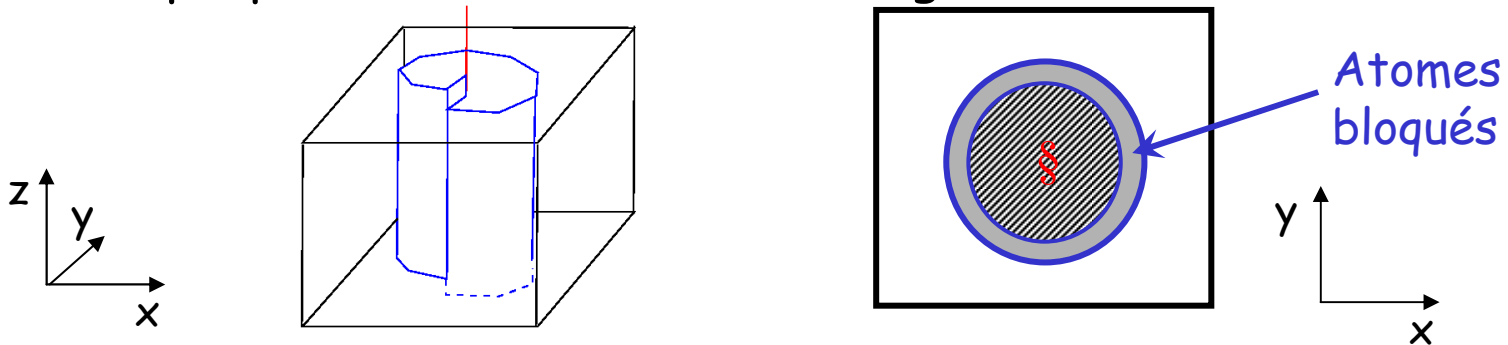
Faute d'empilement metastable

Indication d'une insuffisance probable des potentiels à décrire la structure de coeur des dislocations

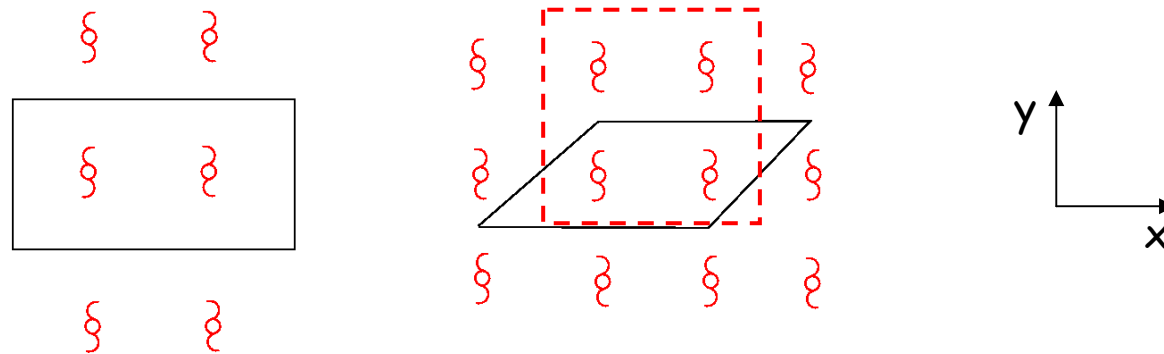
Méthode: simulations des dislocations

Deux types d'approche:

1. Cluster périodique le long de la ligne de dislocation et isolé perpendiculairement à cette ligne



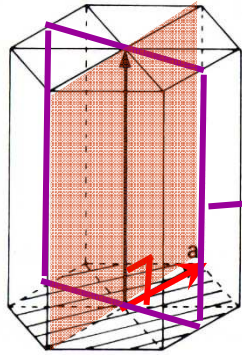
2. Dipôles (ou quadrupôles) de dislocations de signe opposé dans une cellule périodique



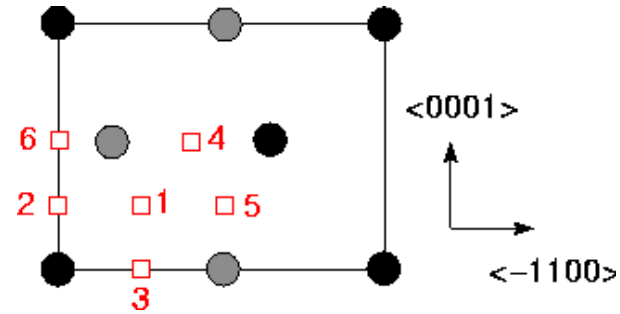
→ Approche "dipôles" abandonnée car les dislocations se recombinent pour des séparations $< 20-30 \text{ \AA}$

Simulations des dislocations (approche "cluster")

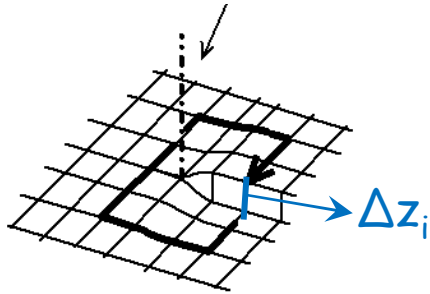
Plan prismatic



Positions initiales des dislocations dans la cellule élémentaire



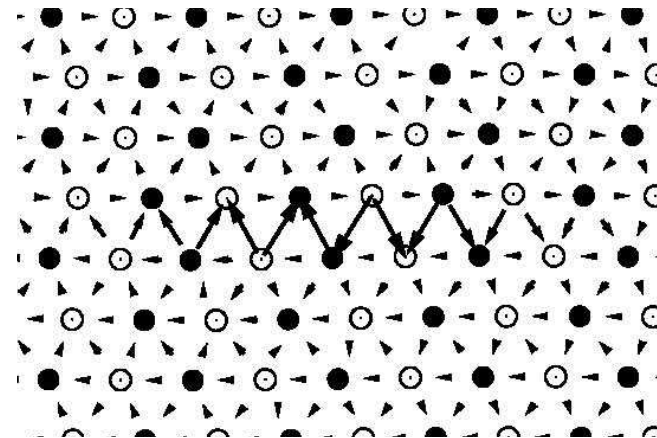
Carte des déplacements différentiels



$$\Delta z_{ij} = (z_{\text{final}} - z_{\text{cristal}})_j - (z_{\text{final}} - z_{\text{cristal}})_i$$

$$\Delta z_{ij} = \Delta z_j - \Delta z_i$$

Les flèches vont du plus grand vers le plus petit déplacement



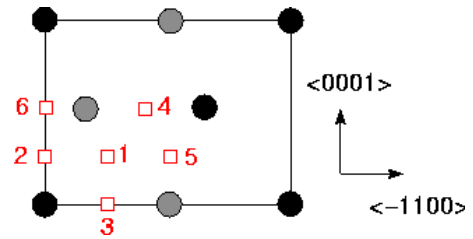
Plan basal

Plan prismatic

Simulations des dislocations (potentiel Zope et Mishin)

Etalement « basal »
planaire

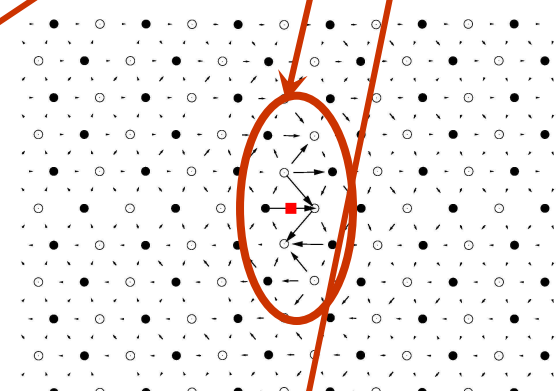
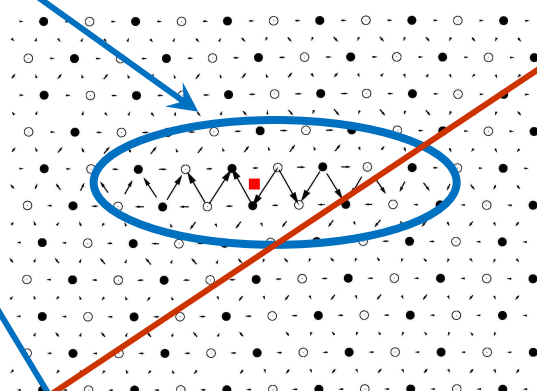
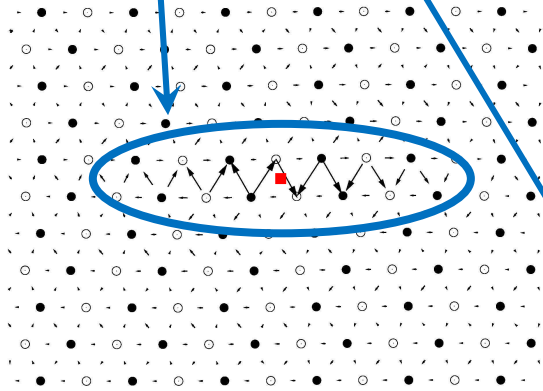
Etalement « prismatique »
non planaire



Position 1

Position 2

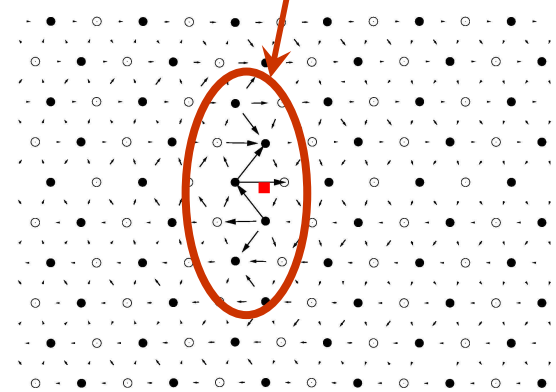
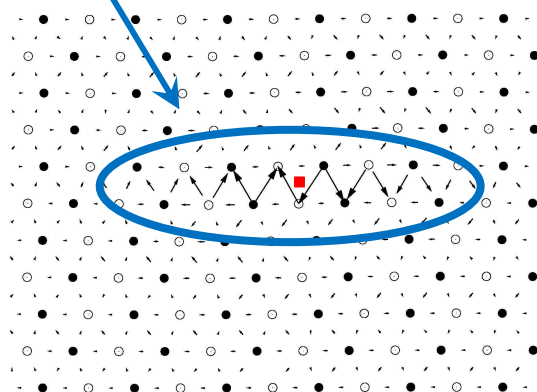
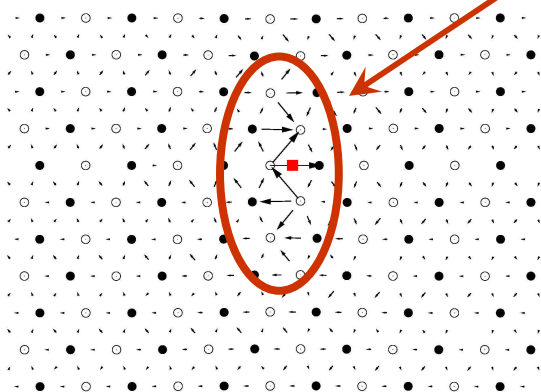
Position 3



Position 4

Position 5

Position 6

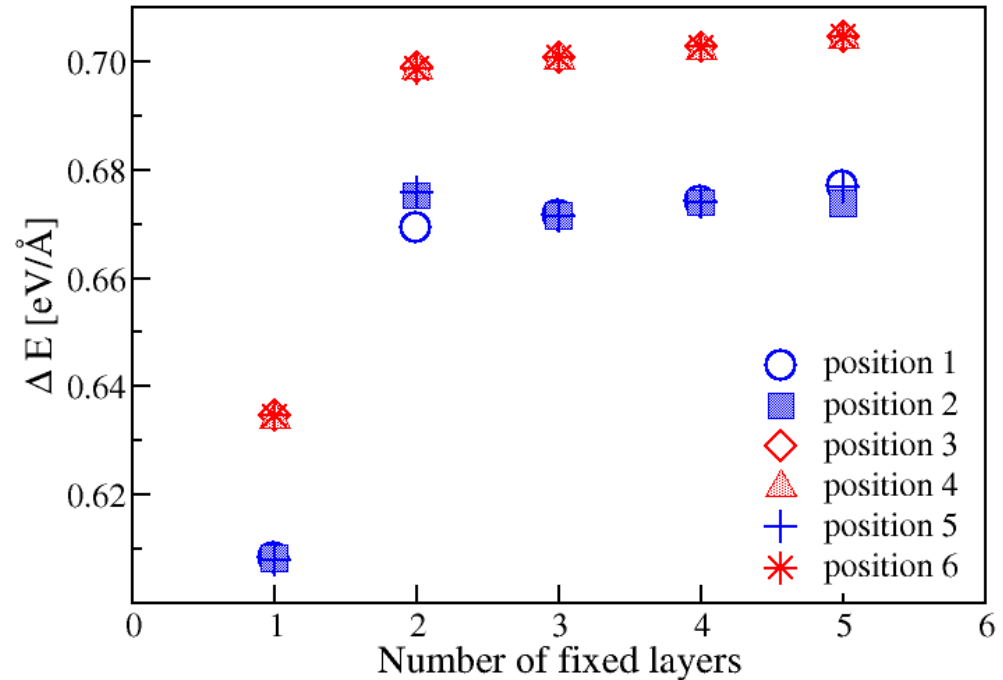
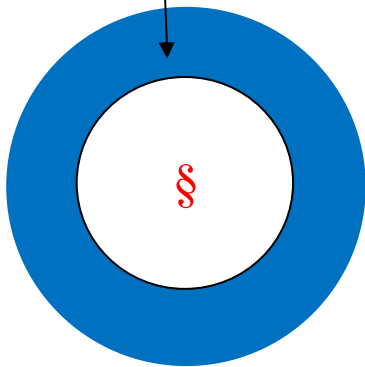


Etalement basal plus stable !

Simulations des dislocations (approche "cluster")

Effets de bord

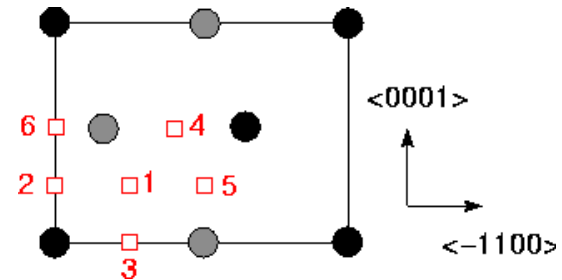
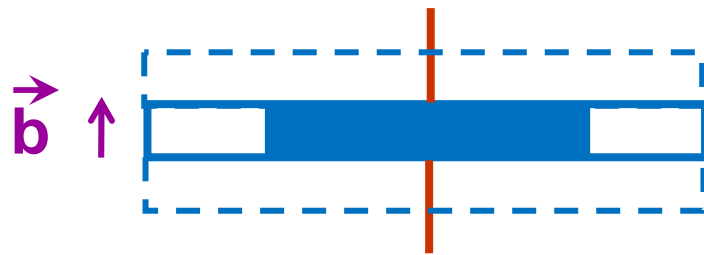
N couches fixées sur positions
théorie élastique



→ 2 couches suffisent

Simulations des dislocations (DFT-PBE)

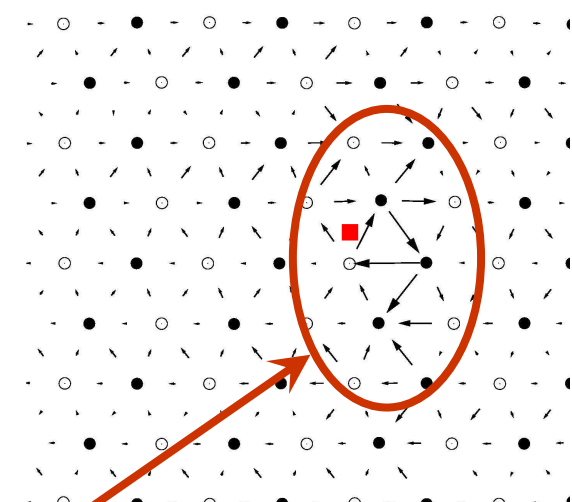
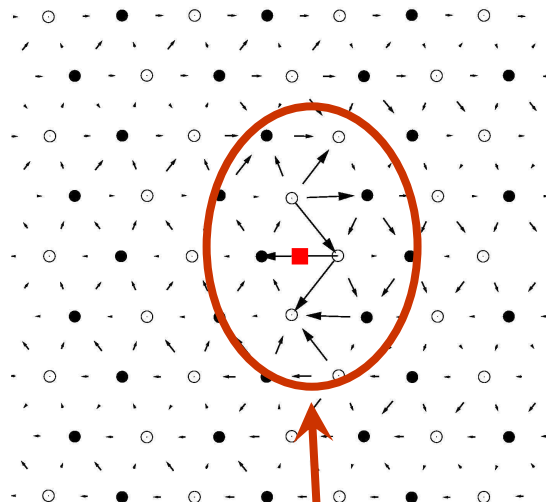
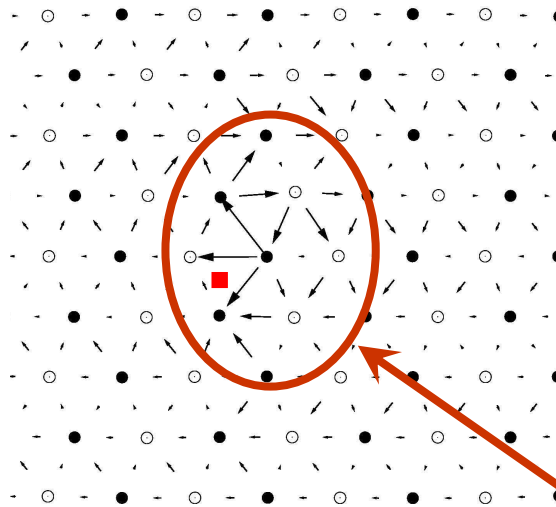
↳ Calculs réalisés avec SIESTA sur des clusters de 154 et 200 atomes, périodiques le long de la ligne de dislocation, isolés dans les 2 directions perpendiculaires à la dislocation



Position 2

Position 3

Position 5

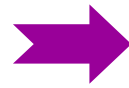
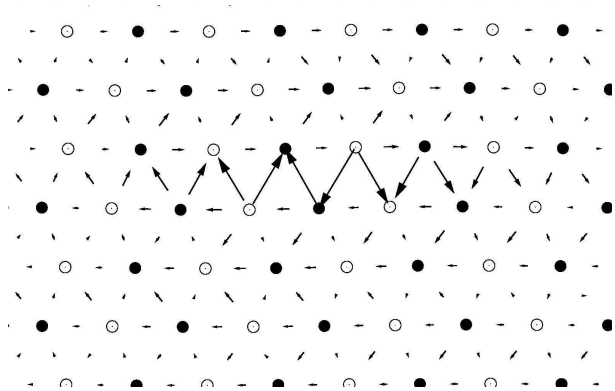


Etalements « prismatiques » uniquement !

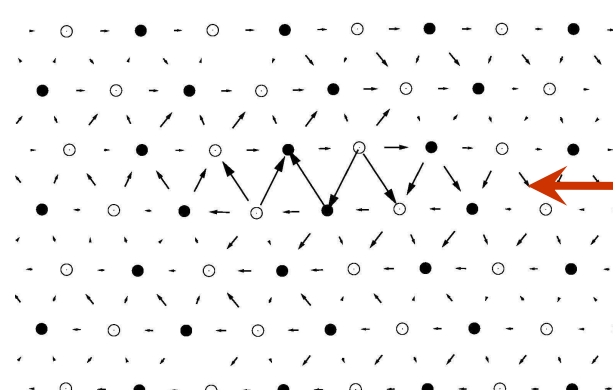
Simulations des dislocations (DFT-PBE)

Position 2

Potentiel Zope et Mishin



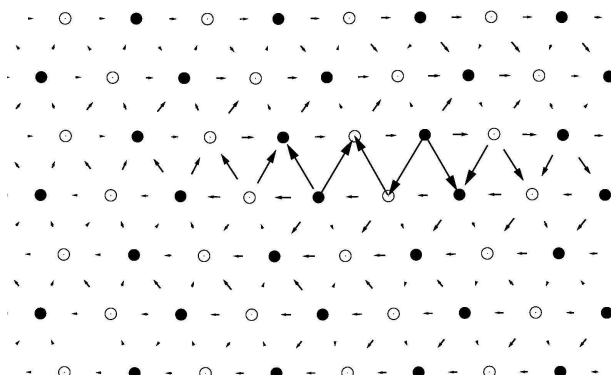
DFT-PBE



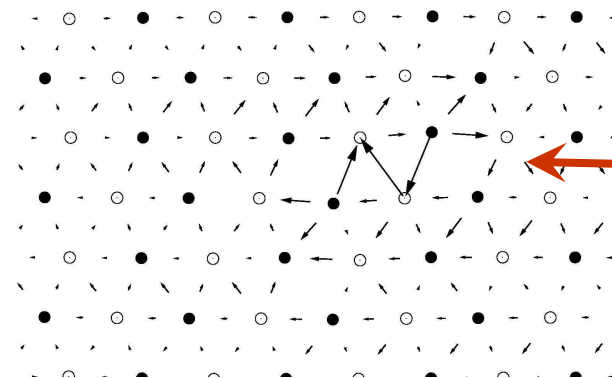
Étalement basal

Position 5

Potentiel Zope et Mishin



DFT-PBE



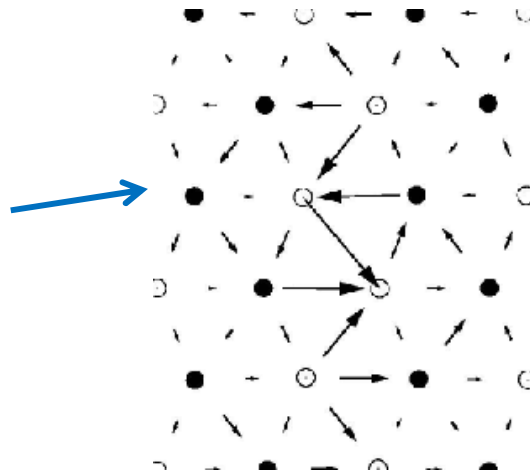
??

Simulations des dislocations (approche "cluster")

Anisotropie élastique

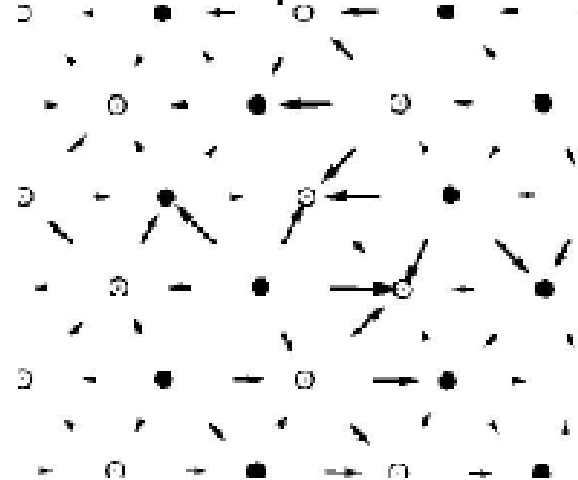
EAM position 1,2 et 5 : étalement basal en isotrope

Relaxation à partir des positions élastiques anisotropes



Uniquement étalement prismatique mais l'étalement basal est toujours le plus stable !

Différence entre les positions initiales isotropes et anisotropes



Simulations des dislocations (DFT-PBE)

Bilan énergétique DFT

| | Position 2 | Position 3 | Position 5 | Position 2 pré- relaxée | Position 5 pré- relaxée |
|------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------------------------|-------------------------------|
| Structure de cœur | prismatique | prismatique | prismatique | basale | ?? |
| Energie d'excès [eV/Å] | 0.4721 | 0.4155 | 0.4618 | 0.5029 | 0.4669 |

✓ Structures de cœur différentes à des énergies très comparables → multiplicité des configurations d'équilibre

✓ Différences d'énergie basale-prismatique:

DFT-PBE
-0.087 eV/Å

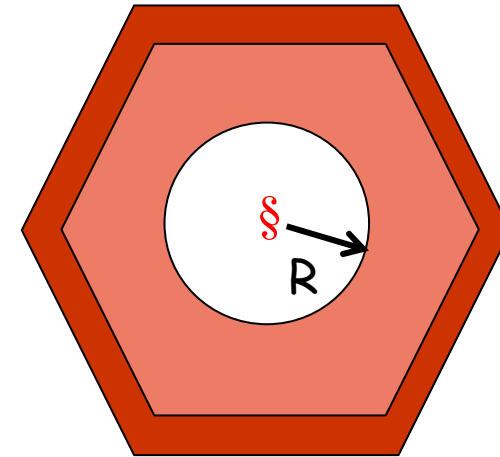
EAM
+0.029 eV/Å

BO (Girshick)
-0.020 eV/Å

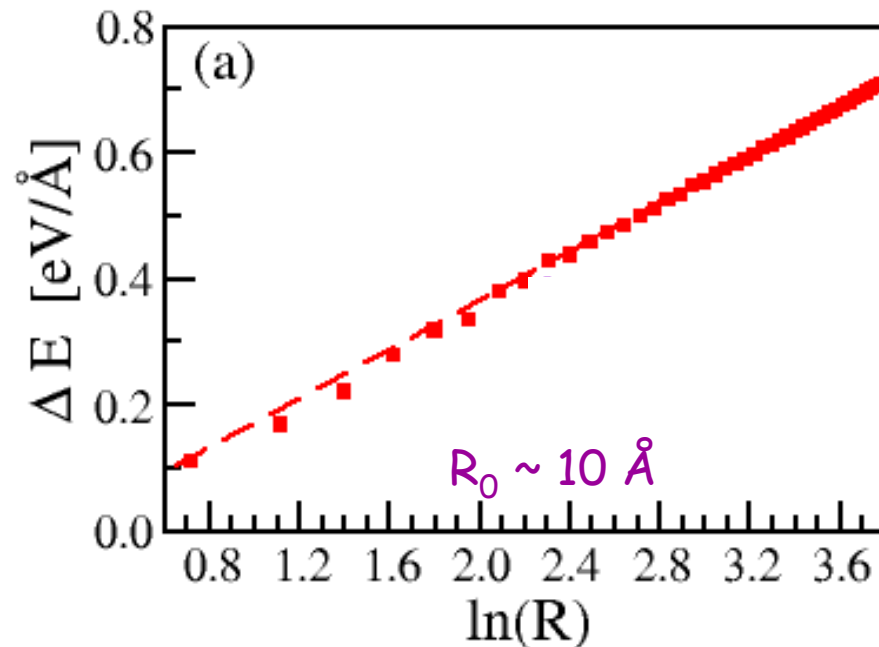
Simulations des dislocations : énergie de cœur

Estimation de l'énergie du cœur (élasticité isotrope):

$$\Delta E(R) = \underbrace{\frac{Kb^2}{4\pi} \ln\left(\frac{R}{R_0}\right)}_{\text{élasticité}} + E_{\text{cœur}}$$



Energie par atome (8540 atomes)



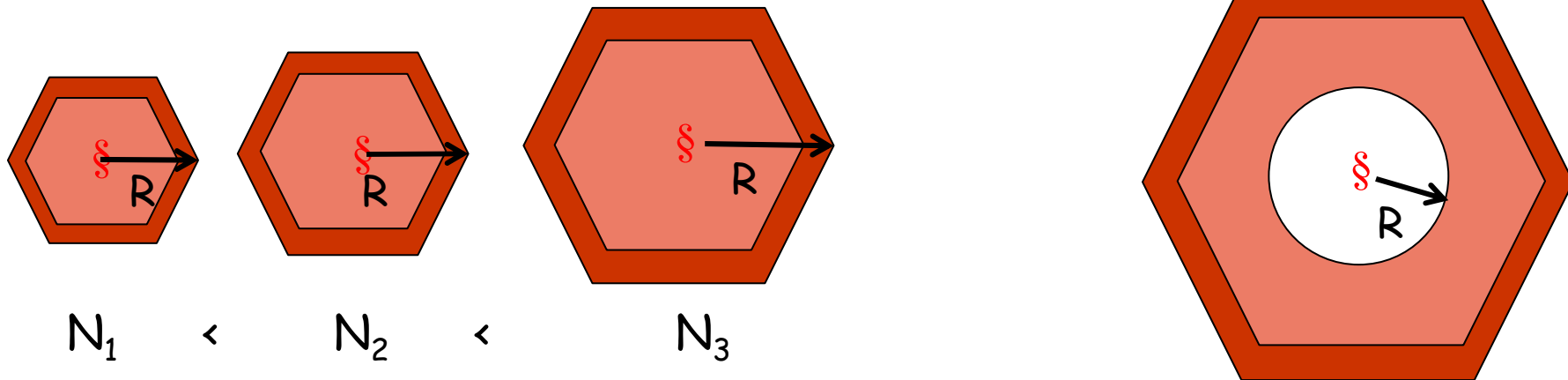
Potentiels EAM:

$$E_{\text{cœur}} \sim 234 \text{ meV/Å}$$

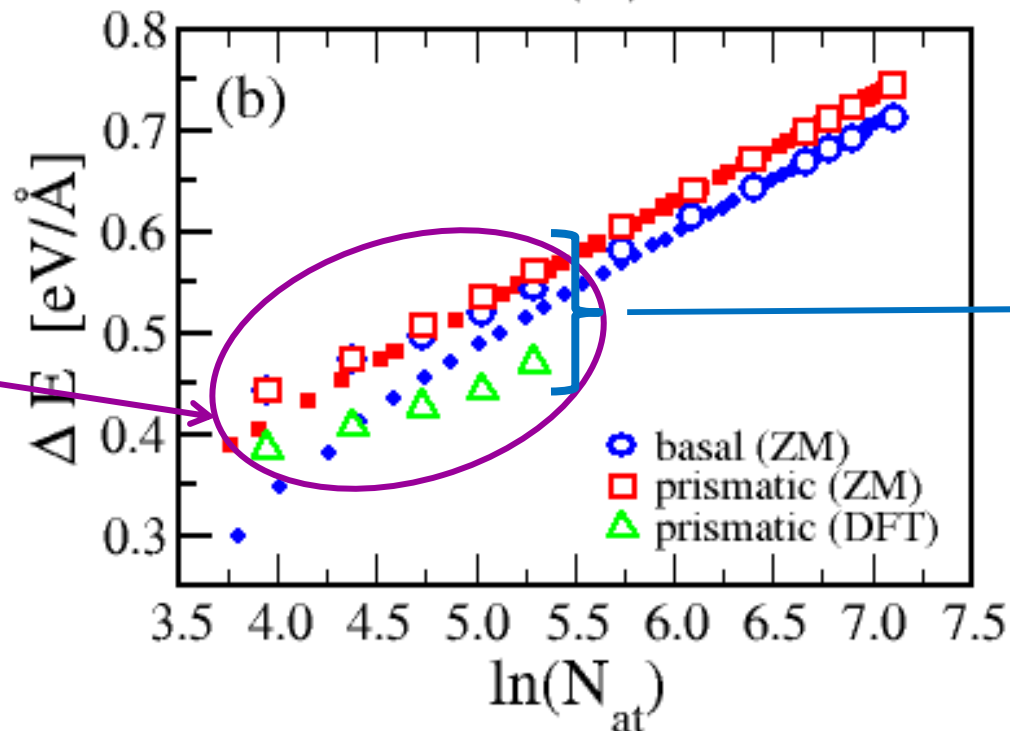
Simulations des dislocations : énergie de cœur

Energie totale = $E(N)$

Energie par atome = $E(N)$



Effets de
taille:
Interactions
cœur/surface



Différence
d'énergies de
cœur EAM/DFT:
 $\sim 92 \text{ meV/Å}$

Energie de cœur
(DFT)
 $\sim 142 \text{ meV/Å}$

Conclusion et perspectives

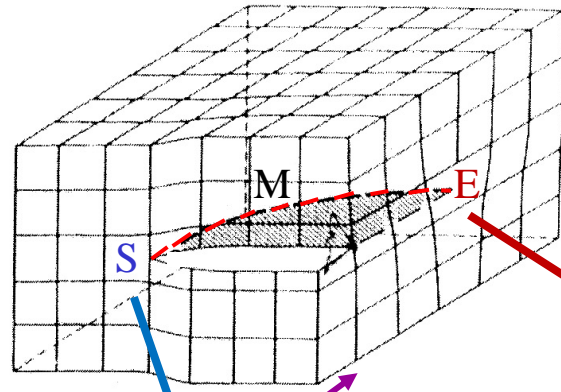
- Importance du calcul *ab initio* pour la simulation des dislocations dans le Ti
- Résultats en accord avec les observations expérimentales sur la mobilité des dislocations dans ce matériau
- Potentiels EAM inadaptés, Tight-binding ok mais énergétique pas bonne

Perspectives:

- ✓ Faire bouger les dislocations:
 - ✓ barrière de Peierls → faisable mais difficile en DFT (couteux)
 - ✓ cisaillement (cellule périodique) → impossible en DFT
- ✓ Mettre des impuretés → impossible en DFT (taille des cellules)

- Solutions
- ★ DFTB
 - ★ approche multi-échelle (cœur en DFT, le reste en potentiels)
 - ★ ...?

Dislocations "vis", "coins" et mixtes

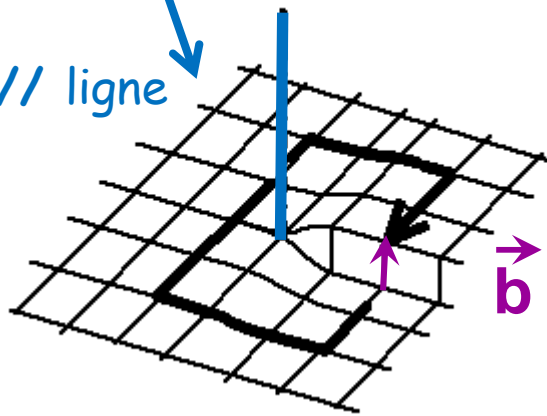


Dislocations :

- courbes
- ne se terminent pas dans le cristal

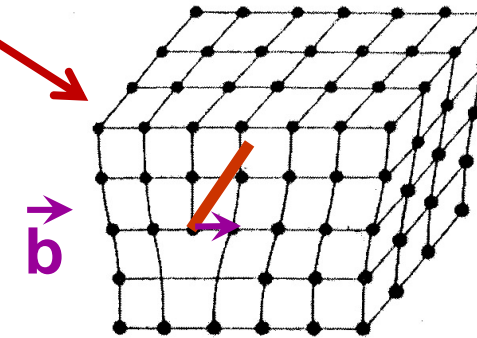
Vecteur de Burgers

$b // \text{ligne}$



Vis

$b \perp \text{ligne}$



Coin

Simulations des dislocations: tests

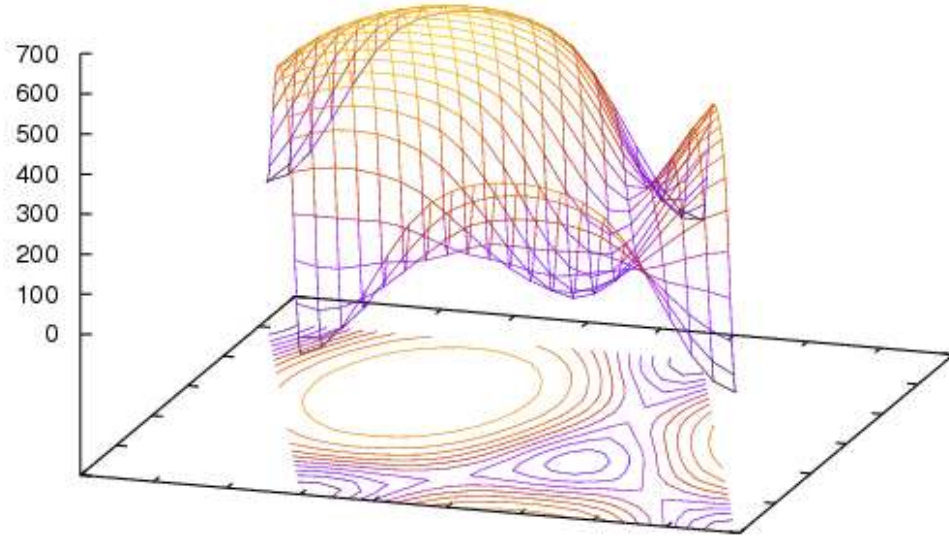
Volumes d'équilibre et constantes élastiques Ti hcp

| | DFT-PBE ² (SIESTA) | Pot. de Zope et Mishin | Pot. de Hammer- schmidt | Exp. | BO Girshick |
|------------------------------------|----------------------------------|------------------------------|-------------------------------|-------|----------------|
| V_0 [$\text{\AA}^3/\text{at}$] | 18.49 | 17.64 | 18.02 | 17.65 | 17.65 |
| C_{11} [GPa] | 183.4 | 186.2 | 188.6 | 176.1 | 175.9 |
| C_{12} [GPa] | 84.6 | 69.5 | 65.4 | 86.9 | 73.9 |
| C_{13} [GPa] | 63.8 | 76.2 | 67.4 | 68.3 | 83.2 |
| C_{33} [GPa] | 204.9 | 189.4 | 216.9 | 190.5 | 190.2 |
| C_{44} [GPa] | 48.8 | 46.4 | 45.8 | 50.8 | 50.7 |

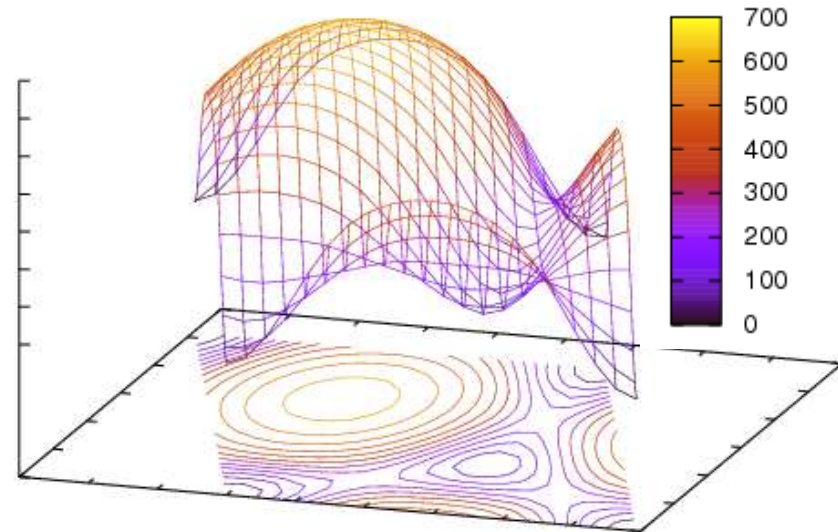
² calculs réalisés en orbitales localisées avec un pseudo-potentiel de type Trouiller-Martins et de 500 à 1536 pts k

Simulations des dislocations : γ surface basale du Ti

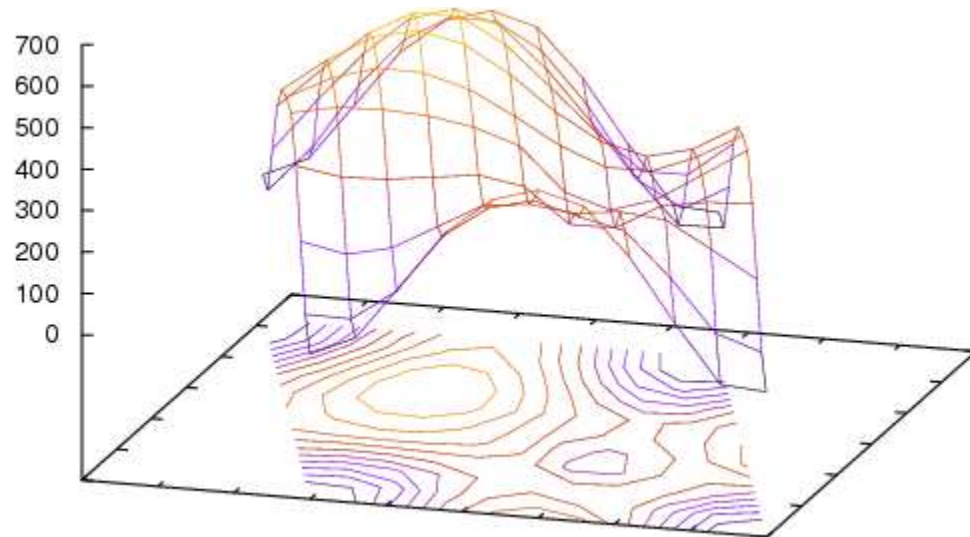
Potentiel de Hammerschmidt



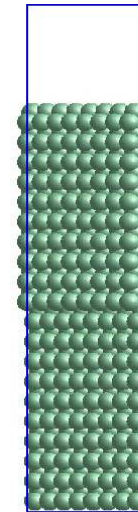
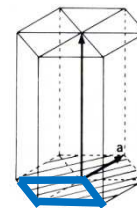
Potentiel de Zope et Mishin



DFT-PBE (SIESTA)



Plan basal

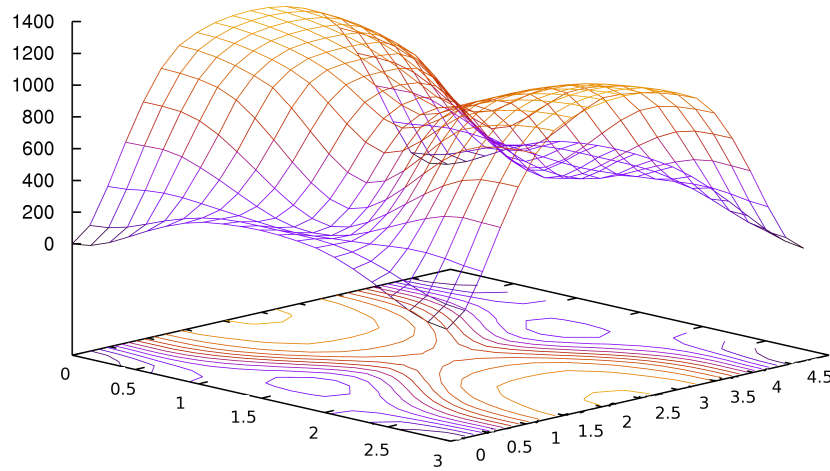


Boite de simulation

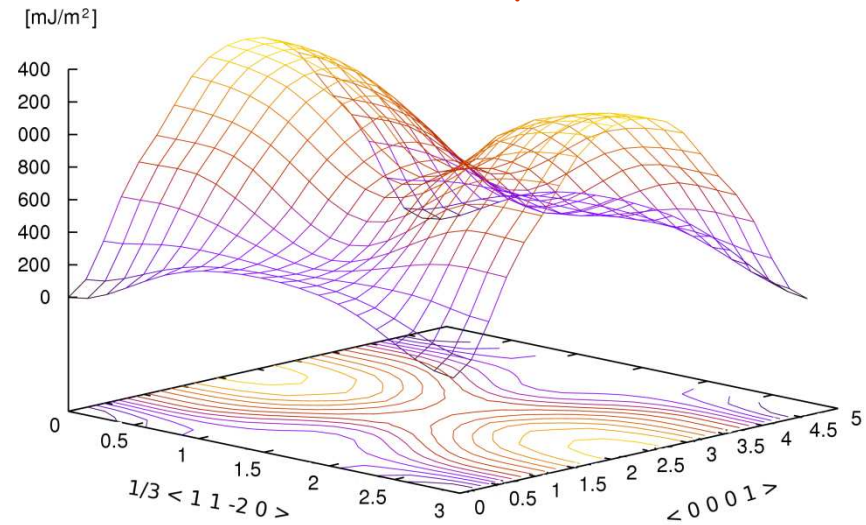


Simulations des dislocations : γ surface prismatique

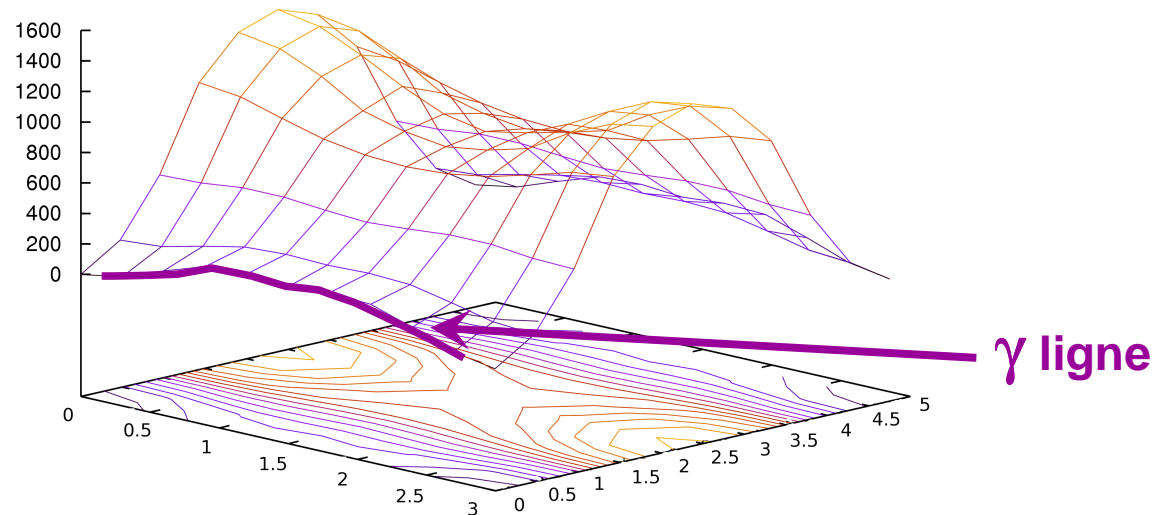
Potentiel de Hammerschmidt



Potentiel de Zope et Mishin



DFT-PBE (SIESTA)



Plan prismatique

