

Influence de la structure électronique sur la plasticité des métaux de transition cubiques centrés

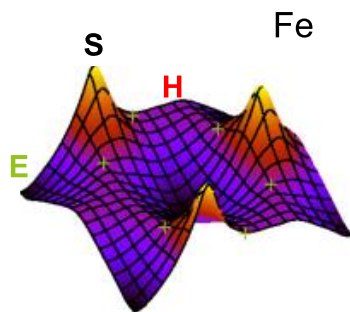
L. Dezerald¹, L. Ventelon², E. Clouet², F. Willaime³, D. Rodney⁴

¹ Institut Jean Lamour, Université de Lorraine - CNRS, F-54011 Nancy, France

² DEN-Service de Recherches de Métallurgie Physique, CEA, Université Paris-Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

³ DEN-Département des Matériaux pour le Nucléaire, CEA, Université Paris Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

⁴ Institut Lumière Matière, Université Lyon 1 - CNRS, F-69622 Villeurbanne, France



Potentiel de Peierls dans Fe

Les métaux de transition cubiques centrés (CC) ont une plasticité atypique à basse température qui est gouvernée par le glissement des dislocations vis $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$. Ces dislocations présentent de forts effets de cœur responsables, entre autres, de la dépendance de la limite d'élasticité en fonction de l'orientation cristalline, connue sous le nom *d'écart à la loi de Schmid*, qui est caractéristique de la plasticité atypique des métaux CC.

Nous avons effectué une étude systématique des propriétés de cœur des dislocations vis à l'échelle atomique par simulations *ab initio* dans les métaux de transition CC suivants : V, Nb, Ta, Mo, W et Fe. Cette étude a permis de mettre en évidence des tendances de groupe marquées sur l'énergie de cœur et de les relier à la position du niveau de Fermi par rapport au minimum du pseudo-gap de la densité d'états électroniques¹. Le potentiel de Peierls, c'est-à-dire le paysage énergétique vu par la dislocation dans le plan (111), s'avère être d'une part très différent de ceux basés sur des approches classiques et d'autre part dépendant du métal considéré¹. Ce potentiel détermine la trajectoire suivie par la dislocation lorsqu'elle glisse dans le cristal : celle-ci dévie du plan de glissement moyen des dislocations et l'amplitude de cette déviation dépend elle aussi du métal considéré². En incluant ces déviations dans une version modifiée de la loi de Schmid, nous obtenons des variations de la contrainte de Peierls en bon accord qualitatif avec les mesures expérimentales et nous pouvons expliquer pourquoi l'écart à la loi de Schmid dépend du métal considéré². Cette étude met en évidence la nécessité de prendre en compte la structure électronique des métaux CC pour expliquer leur plasticité atypique à l'échelle macroscopique.

1. Dezerald L, Ventelon L, Clouet E, Denoual C, Rodney R et Willaime F, *Ab initio modeling of the two-dimensional energy landscape of screw dislocations in bcc transition metals*, Physical Review B 89, 024104, 2014.

2. Dezerald L, Rodney D, Clouet E, Ventelon L et Willaime F, *Plastic anisotropy and dislocation trajectory in BCC metals*, Nature Communications (sous presse).