

## **Reconstruction de cœur de dislocation induite par la ségrégation de solutés interstitiels dans les métaux cubiques centrés**

B. Lüthi<sup>1</sup>, L. Ventelon<sup>1</sup>, D. Rodney<sup>2</sup>, F. Willaime<sup>3</sup>

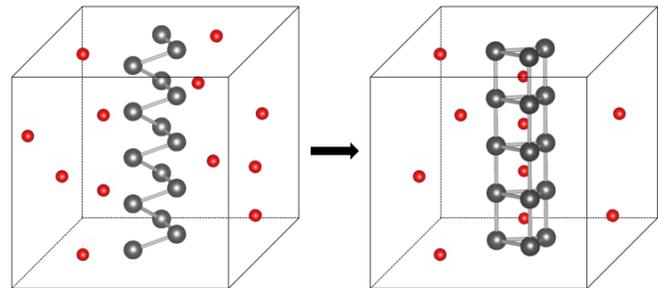
<sup>1</sup> DEN-Service de Recherches de Métallurgie Physique, CEA, Université Paris-Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

<sup>2</sup> Institut Lumière Matière, Université Lyon 1, CNRS, UMR 5306, 69622 Villeurbanne, France

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

Comprendre l'origine à l'échelle atomique de l'effet des interactions entre solutés et dislocations, responsables de la déformation plastique, sur les propriétés mécaniques des alliages métalliques, est essentiel pour mieux appréhender la plasticité des alliages. Une modélisation quantitative de la structure et des propriétés des dislocations nécessite alors une représentation fine de la structure électronique. Dans ce travail nous nous intéressons à l'effet des atomes de solutés interstitiels sur les dislocations vis  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$  dans les métaux cubiques centrés à partir de calculs *ab initio*.

En considérant tout d'abord le système fer-carbone, nous montrons que lorsqu'une colonne d'atomes de carbone est insérée au voisinage du cœur de la dislocation, les solutés et le cœur se reconstruisent spontanément vers une structure de basse énergie, où, de manière inattendue, le cœur de la dislocation adopte la configuration difficile, qui est instable dans les métaux purs<sup>1</sup>. Les solutés se placent au cœur de prismes trigonaux réguliers formés par les atomes de fer du cœur, une configuration qui est localement comparable à la cémentite. L'interaction fortement attractive associée peut alors conduire à une ségrégation saturant complètement le cœur de la dislocation<sup>2</sup>. Nous obtenons la même reconstruction pour de plus faibles concentrations en carbone dans le cœur, pour d'autres solutés (B, N O) dans le fer ainsi que pour le carbone dans d'autres métaux cubiques centrés (V, Nb, Ta, Mo, W). Les premiers résultats de l'effet de cette ségrégation sur la mobilité des dislocations seront présentés et mis en regard avec de récentes observations MET *in-situ* montrant dans le régime de vieillissement dynamique des aciers, la réapparition d'un nouveau mécanisme de Peierls aux hautes températures<sup>3,4</sup>.



Reconstruction du cœur de la dislocation vis dans le fer (en gris) en présence de carbone (en rouge).

1. Dézerald L., L. Ventelon, E. Clouet, C. Denoual, D. Rodney, F. Willaime, *Ab initio modeling of the two-dimensional energy landscape of screw dislocations in bcc transition metals*, Phys. Rev. B 89, 024104, 2014
2. Ventelon L., Lüthi B., Clouet E., Proville L., Legrand B., Rodney D., Willaime F., *Dislocation core reconstruction induced by carbon segregation in bcc iron*, Phys. Rev. B 91, 220102(R), 2015
3. Caillard D., Bonneville J., *Dynamic strain ageing caused by a new Peierls mechanism at high-temperature in iron*, Acta Mater. 95, 15-18, 2015
4. Caillard D., *Dynamic strain ageing in iron alloys: The shielding effect of carbon*, Acta Mater. 112, 273-284, 2016