

Modélisation des dislocations dans des oxydes perovskites

Gabrel Tsogo Onana^{*}, Pierre Hirel, Philippe Carrez

Univ. Lille, CNRS, INRAE, Centrale Lille, UMR 8207 UMET Unité Matériaux et Transformations, F-59000 Lille, France

* igor-gabrel.tsogo-onana@univ-lille.fr

Résumé pour une présentation orale

Les oxydes perovskites de formule générale ABO_3 où A et B sont des cations, sont des céramiques et à ce titre, sont censés être des matériaux fragiles. La découverte de multiples systèmes de glissement et de la mobilité des dislocations dans $SrTiO_3$ [1], $KNbO_3$ [2] et $KTaO_3$ [3] ont prouvé que certains de ces matériaux peuvent se déformer plastiquement. Cependant, à température ambiante la plasticité ne s'active pas dans toutes les perovskites. La question des critères permettant la plasticité reste donc ouverte.

Dans ce travail, nous utilisons la DFT et la dynamique moléculaire pour modéliser différentes perovskites parmi lesquelles $BaSnO_3$, $CaSiO_3$, $NaTaO_3$ et $CaTiO_3$, afin d'identifier les systèmes de glissement et d'étudier les dislocations. Le calcul des γ -surfaces prédit l'activation des mêmes systèmes de glissement dans chaque perovskite, avec des énergies de défauts d'empilements similaires. Ce calcul ne permettant pas de dégager un critère de fragilité ou de plasticité dans ces matériaux, nous avons donc modélisé explicitement les dislocations afin de déterminer leur structure de cœur et leur mobilité.

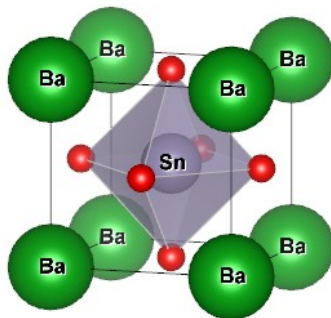


Figure 2: Maille élémentaire de $BaSnO_3$

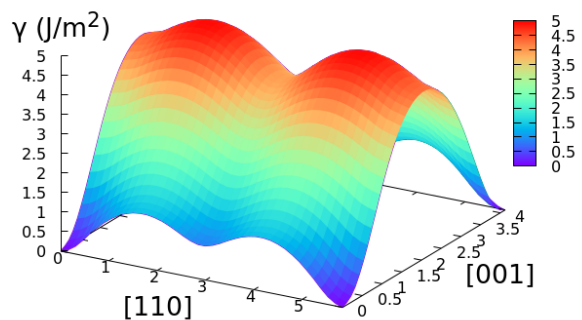


Figure 1: γ -surface du plan $(\bar{1}10)$ dans $BaSnO_3$

- [1] D. Brunner, S. Taeri-Baghdadrani, W. Sigle, et M. Rühle, « Surprising Results of a Study on the Plasticity in Strontium Titanate », *J. Am. Ceram. Soc.*, vol. 84, n° 5, p. 1161-1163, mai 2001, doi: 10.1111/j.1151-2916.2001.tb00805.x.
- [2] A. F. Mark, M. Castillo-Rodriguez, et W. Sigle, « Unexpected plasticity of potassium niobate during compression between room temperature and 900°C », *J. Eur. Ceram. Soc.*, vol. 36, n° 11, p. 2781-2793, sept. 2016, doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2016.04.032.
- [3] X. Fang *et al.*, « Room-temperature bulk plasticity and tunable dislocation densities in $KTaO_3$ », *J. Am. Ceram. Soc.*, vol. 107, n° 11, p. 7054-7061, 2024, doi: 10.1111/jace.20040.