

Étude ab initio de l'interaction dislocation vis - soluté dans le chrome

O.K. Ndiathie *, E. Clouet

Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherche en Corrosion et Comportements des matériaux, SRMP, F-91191, Gif-sur-Yvette

* oumou-koursoum.ndiathie@cea.fr

Cette étude vise à comprendre la fragilisation du chrome induite par la ségrégation de solutés interstitiels sur les dislocations. Dans les métaux cubiques centrés à basse température, la plasticité est contrôlée par le glissement des dislocations vis de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$, dont la mobilité est thermiquement activée. Des études ab initio antérieures dans des métaux de mêmes structure cristallographique comme le fer et le tungstène ont montré que la présence de solutés interstitiels induit une reconstruction du coeur de la dislocation vis, rendant leur glissement difficile [1–2].

Des calculs ab initio basés sur la DFT (code VASP) sont réalisés afin d'analyser l'interaction entre les dislocations vis et les solutés O, C et N dans le chrome, en tenant compte de ses deux phases magnétiques, non magnétique et antiferromagnétique.

L'interaction entre la dislocation vis et les solutés (O, C et N) est attractive et induit une reconstruction du cœur de la dislocation, qui passe d'une configuration « facile » à une configuration « difficile », le soluté occupant un site prismatique au centre de la dislocation. Les sites octaédriques quatrièmes voisins sont en dehors du cœur également attractifs. Un modèle d'Ising est développé pour décrire l'interaction de l'oxygène dans le coeur reconstruit de la dislocation, puis résolu en champs moyen pour prédire la ségrégation.

Enfin, nos résultats montrent qu'il n'y a pas d'effet du magnétisme sur cette interaction entre dislocation vis et les solutés dans le chrome.

[1] B. Luthi, Thèse, Université de Lyon, (2017).

[2] L. Ventelon, B. Luthi, E. Clouet, L. Proville, B. Legrand, D. Rodney and F. Willaime, PHYSICAL REVIEW B 91, 220102(R) (2015)

[3] G. Hachet, L. Ventelon, E. Clouet, F. Willaime, Acta Mat 200 (2020), 481-489.