

**Jeudi 15 Février 2018 à 14h**

**Salle de réunion du SRMP – Bâtiment 520 - Pièce 109**

---

## ***Effet des contraintes non-glissiles sur l'anisotropie plastique du tungstène***

Antoine KRAYCH

*Université Claude Bernard Lyon 1 - Institut Lumière Matière*

---

À basse température, la déformation plastique du tungstène et des autres métaux de structure cubique centrée (CC) est anisotrope. La loi de Schmid qui s'applique dans la plupart des autres métaux n'est pas respectée pour les métaux CC. Cette particularité s'explique par le comportement des dislocations vis de type  $1/2\langle 111 \rangle$ , qui contrôlent la plasticité de ces métaux. La trajectoire suivie par ces dislocations lorsqu'elles glissent sous l'application d'une simple contrainte de cisaillement n'est pas droite mais dévie par rapport à une trajectoire rectiligne entre configurations d'équilibre. L'angle de cette déviation permet de prédire l'écart à la loi de Schmid dans ces matériaux [1]. Cependant, d'autres types de contraintes, les contraintes non-glissiles, sont connues pour affecter la mobilité des dislocations et l'écart à la loi de Schmid [2]. Ce travail propose d'utiliser des calculs DFT pour déterminer l'influence des contraintes non-glissiles sur la mobilité des dislocations dans le tungstène.

Les calculs DFT et la méthode de « nudged elastic band » sont utilisés pour déterminer le potentiel de Peierls des dislocations sous contrainte. Différents tenseurs de contrainte sont appliqués aux cellules de simulation, afin d'obtenir la sensibilité des potentiels de Peierls aux contraintes non-glissiles, et d'en déduire la dépendance de la contrainte de Peierls avec ces contraintes non-glissiles. Ces calculs sont utilisés pour ajuster une loi de comportement permettant de prédire la réponse plastique d'un monocristal à un essai mécanique de traction simple, et de prédire les systèmes de glissement activés. Nous discuterons en particulier des implications pour le glissement dit « anormal » prenant place dans des plans peu sollicités.

[1] L. Dezerald, D. Rodney, E. Clouet, L. Ventelon et F. Willaime, Nature Comm. 7, 11695 (2016).

[2] M. S. Duesbery et V. Vitek, Acta Mater. 46, 1481 (1998).

---

Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance, et ceux de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire, le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre : Tel : 01 69 08 66 64 - Fax : 01 69 08 68 67.

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives  
DEN/DANS/DMN Service de Recherches de Métallurgie Physique  
Centre de Saclay – Bât. 520 - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex – France