



**Lisa Ventelon** soutiendra sa thèse de doctorat de l'Université Claude Bernard Lyon 1 préparée au Service de Recherches de Métallurgie Physique (CEA/Saclay) sur :

## **Simulation *ab initio* des cœurs de dislocation vis dans le fer**

le lundi 17 novembre 2008 à 14h00

Institut National des Sciences et Techniques Nucléaires, Gif-sur-Yvette

Les propriétés des dislocations vis des métaux cubiques centrés, dont le fer, sont étroitement liées à la structure de cœur. Les études menées sur ce sujet depuis les années 70 ont montré que cette structure dépendait elle-même fortement du potentiel interatomique utilisé pour les modéliser. En vue de valider et/ou améliorer les potentiels empiriques, nous avons étudié ces défauts par des méthodes plus précises de calcul de structure électronique *ab initio*. Il s'agit plus précisément de décrire la structure de cœur et les mécanismes de glissement de la dislocation vis [111] dans le fer cubique centré. Pour cela, nous avons mis en œuvre les deux types d'approches, "agrégat" et "dipôle", pour étudier sur des cellules de taille réduite les dislocations rectilignes et avec décrochement.

Nous avons obtenu en *ab initio* une structure non dégénérée qui présente un volume de relaxation significatif, contrairement à ce qui est prédit par la plupart des potentiels empiriques. Le potentiel d'Ackland-Mendelev, seul potentiel publié reproduisant la structure non dégénérée du cœur de la dislocation vis, conduit à des différences sur l'écart à l'élasticité anisotrope des composantes coin. Nous avons mis en œuvre un couplage calcul atomistique – élasticité anisotrope, qui prend en compte l'effet de dilatation du cœur en plus du champ de Volterra. Cette approche nous a permis de rationaliser les effets de taille, et de corriger les effets d'interaction élastiques entre dislocations dans l'approche dipôle. Nous avons par ailleurs obtenu une description quantitative du potentiel de Peierls. Du point de vue énergétique, nous avons conclu de nos résultats *ab initio*, que le potentiel d'Ackland-Mendelev conduit à une barrière de Peierls qui est trois fois trop basse, mais surtout qui présente une forme en double bosse, avec une configuration de cœur métastable à mi-chemin qui n'existe pas en *ab initio*. Nous avons développé une méthodologie robuste permettant d'introduire un seul décrochement dans la cellule de calcul quadripolaire et tri-périodique, et nous l'avons validée par des calculs en potentiel empirique. Enfin nous avons étudié le comportement sous contrainte des dislocations vis, en particulier l'écart à la loi de Schmid, propre aux métaux cubiques centrés. La validation croisée des méthodes des conditions aux limites flexibles et conditions tri-périodiques en géométrie quadripolaire permet d'anticiper les calculs *ab initio* de la contrainte de Peierls.

### **Composition du jury**

<i>Directeur de thèse :</i>	M. Xavier Blase	CNRS-Institut Néel, Grenoble
<i>Co-encadrant :</i>	M. François Willaime	CEA-SRMP, Saclay
<i>Rapporteurs :</i>	M. Benoit Devincré	CNRS-ONERA, Châtillon
	M. David Rodney	INPG-SIMAP, Grenoble
<i>Examineurs :</i>	M. Jean-Louis Barrat	UCBL-LPMCN, Lyon
	M. Daniel Caillard	CNRS-CEMES, Toulouse
	M. Christopher Woodward	Air Force Research Laboratory, USA