

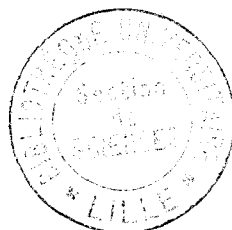
UNIVERSITÉ DE LILLE

FACULTÉ DES SCIENCES

THÈSE DE 3^{ÈME} CYCLE

MENTION PHYSIQUE DU SOLIDE

**Effets électroniques associés aux défauts
d'empilement dans les métaux
normaux et leurs alliages**



Membres du Jury:

M. TILLIEU	Président
M. SAADA	Rapporteur
M. BILLARD	Examineur
M. FRIEDEL	Invité

PRÉSENTÉE A LILLE, LE 8 AVRIL 1970

PAR

Christiane NOURTIER née LEFEBVRE

UNIVERSITE DE LILLE

FACULTE DES SCIENCES

DOYENS HONORAIRES

MM. H. LEFEBVRE, M. PARREAU

PROFESSEURS HONORAIRES

MM. ARNOULT, BEGHIN, BROCHARD, CAU, CHAPPELON, CHAUDRON, DEHEUVELS, DEHORNE, DOLLE, FLEURY, P. GERMAIN, KAMPE DE FERIET, KOURGANOFF, LAMOTTE, LELONG, Mme LELONG, MM. MAZET, MICHEL, NORMANT, PARISELLE, PASCAL, PAUTHENIER, ROIG, ROSEAU, ROUBINE, ROUELLE, WIEMAN, ZAMANSKY, CORDONNIER.

PROFESSEURS TITULAIRES

M. BACCHUS Pierre	Astronomie et Calcul Numérique
M. BEAUFILS Jean Pierre	Chimie Générale
M. BLOCH Vincent	Psychophysiologie
M. BONNEMAN Pierre	Chimie Industrielle
M. BONTE Antoine	Géologie Appliquée
M. BOUGHON Pierre	Mathématiques
M. BOURIQUET Robert	Biologie Végétale
M. CORSIN Pierre	Paléobotanique
M. DECUYER Marcel	Mathématiques
M. DEFRETIN René (Doyen)	Directeur du Laboratoire de Biologie Maritime de Wimereux
M. DELATTRE Charles	Géologie Générale
M. DURCHON Maurice	Biologie Animale
M. FOURET René	Physique
M. GABILLARD Robert	Electronique
M. GLACET Charles	Chimie Organique
M. GONTIER Gérard	Mécanique des Fluides
M. HEUBEL Joseph	Chimie Minérale
M. MONTREUIL Jean	Chimie Biologique
M. PHAM MAU QUAN	Mathématiques
Mme SCHWARTZ Marie Hélène	Mathématiques
M. TILLIEU Jacques	Physique
M. TRIDOT Gabriel	Chimie Minérale Appliquée E.N.S.C.L.
M. VIDAL Pierre	Automatique
M. VIVIER Emile	Biologie Animale
M. WATERLOT Gérard	Géologie et Minéralogie
M. WERTHEIMER Raymond	Physique

PROFESSEURS A TITRE PERSONNEL

M. BENABOU Jean	Mathématiques
M. LUCQUIN Michel	Chimie Physique
M. PARREAU Michel	Mathématiques
M. SAVARD Jean	Chimie Générale
M. SCHALLER François	Biologie Animale
M. SCHILTZ René	Physique
M. LEBRUN André	E.E.A.

PROFESSEURS SANS CHAIRE

M. BELLET Jean	Physique
M. BODART Marcel	Biologie Végétale
M. BOUISSET Simon	Physiologie Animale
M. BUI TRONG LIEU	Mathématiques
M. CELET Paul	Géologie Générale
M. CONSTANT Eugène	Electronique
M. DELHAYE Michel	Chimie Physique et Minérale 1er Cycle
M. DERCOURT Jean Michel	Géologie et Minéralogie
M. DEVRAINE Pierre	Chimie Minérale
M. GUILLAUME Jean	Biologie Végétale
Mme LENOBLE Jacqueline	Physique
M. LINDER Robert	Biologie Végétale
Mle MARQUET Simone	Mathématiques
M. MONTARIOL Frédéric	Chimie Minérale Appliquée
M. PROUVOST Jean	Géologie et Minéralogie
M. VAILLANT Jean	Mathématiques

PROFESSEUR ASSOCIE

M. DEDECKER Paul	Mathématiques
------------------	---------------

MAITRES DE CONFERENCES

M. AUBIN Thierry	Mathématiques Pures
M. BEGUIN Paul	Mécanique des Fluides
M. BILLARD Jean	Physique
M. BKOCHE Rudolphe	Mathématiques
M. BOILLET Pierre	Physique
M. BOILLY Bénoni	Biologie Animale
M. BONNOT Ernest	Biologie Végétale
M. CAPURON Alfred	Biologie Animale
M. CARREZ Christian	Calcul Numérique
M. CORTOIS Jean	Physique
M. COULON Jean	Electrotechnique
Mme DRAN Raymonde	Chimie Organique
M. DRIEUX Baudoin	Calcul Numérique
M. GOUDMAND Pierre	Chimie Physique
M. GRUSON Laurent	Mathématiques
M. GUILBAULT Pierre	Physiologie Animale
M. HUARD DE LA MARRE Pierre	Calcul Numérique
M. JOLY	Biologie Animale
Mle KOSMANN Yvette	Mathématiques
M. LABLACHE COMBIER Alain	Chimie Générale
M. LACOSTE Louis	Biologie Végétale
M. LANDAIS Jean	Chimie Organique
M. LAURENT François	Automatique
M. LEHMANN Daniel	Mathématiques
Mme LEHMANN Josiane	Mathématiques
M. LOUCHEUX Claude	Chimie Physique
M. MAES Serge	Physique
M. MAIZIERES Christian	Automatique
M. MESSELYN Jean	Physique
M. MONSIGNY Michel	Chimie Biologique

.../...

M. MONTEL Marc	Physique
M. PANET Marius	Electrotechnique
M. PONSOLLE	Chimie
M? PARSY Femand	Mécanique des Fluides
M. ROUSSEAU Jean Paul	Physiologie Animale
M. SAADA Georges	Electronique
M. RACZY	Radioélectrique
M. SALMER Georges	Electronique
M. SMET Pierre	Physique
Mme ZINN JUSTIN Nicole	Mathématiques
M. ROY Jean Claude	Psychophysiologie

Je tiens tout d'abord à remercier Monsieur G. SAADA, qui m'a guidée avec patience tout au long de ce travail. Je remercie Monsieur le Professeur J. FRIEDEL qui m'a fait bénéficier de ses conseils, et a bien voulu relire le manuscrit dont il m'a aidée à préciser certains points. Je leur suis d'autre part reconnaissante d'avoir, chaque fois que cela était possible, amélioré mes conditions de travail.

Je remercie très sincèrement J.L. DEPLANTE, qui m'a guidée dans mes premiers calculs sur la machine UNIVAC, et m'a aimablement fourni le programme de la fonction $\alpha_2(\theta)$. Je le remercie également, ainsi que B. JOUFFREY, d'avoir toujours accepté de discuter des points délicats qui se sont présentés au cours de ce travail. Je n'oublie pas mes camarades de Lille, avec lesquels j'ai eu de nombreuses discussions profitables au début de ce travail, ni mon mari, dont l'aide m'a été particulièrement précieuse.

Je suis reconnaissante à Madame REMY d'avoir bien voulu effectuer à la machine les calculs du chapitre III. Je remercie enfin tous ceux qui ont apporté une contribution matérielle à la réalisation de ce travail.

EFFETS ELECTRONIQUES ASSOCIES AUX DEFAUTS D'EMPILEMENTS
DANS LES METAUX NORMAUX ET LEURS ALLIAGES

SOMMAIRE

INTRODUCTION

I - MODELE DE L'ENERGIE DE PAIRE. SES LIMITATIONS

- 1) LE MODELE DE L'ENERGIE DE PAIRE
- 2) LIMITATIONS DU MODELE

II - RAPPELS SUR LES FAUTES D'EMPILEMENT ET LEUR ENERGIE DANS LES METAUX NORMAUX DE STRUCTURE CFC OU HC (5). DEVELOPPEMENTS : DISCUSSION DES RESULTATS EXPERIMENTAUX DANS L'ALUMINIUM ; INFLUENCE DU RAPPORT $\frac{c}{a}$ DANS LES HC.

- 1) FAUTES D'EMPILEMENT DANS UN CRISTAL CFC OU HC
- 2) FORMES DE L'ENERGIE D'INTERACTION ENTRE PLANS PARALLELES
- 3) ENERGIE DES FAUTES D'EMPILEMENT DANS LES METAUX NORMAUX CFC ET HC où $Z > Z_c$
 - a) Expression des énergies de faute
 - b) Cas de l'aluminium : énergie des fautes d'empilement intrinsèques et extrinsèques
 - c) Discussion des résultats expérimentaux pour l'aluminium
 - α. Faute d'empilement intrinsèque
 - β. Faute d'empilement extrinsèque
 - d) Energie des fautes Δ dans les HC ; influence du rapport $\frac{c}{a}$.

III - CALCUL DE L'ENERGIE D'INTERACTION ENTRE DEFAUTS PLANS DANS LES METAUX NORMAUX DE STRUCTURE CFC OU HC

1) METAUX CFC

- a) Energie Γ_{mm} de deux plans de macle parallèles supposés infinis
- b) Energie Γ_{ii} de deux fautes d'empilement intrinsèques parallèles et infinies
- c) Variation de l'énergie de deux fautes planes dans les alliages désordonnés de structure CFC ou fonction du nombre moyen \bar{Z} d'électrons de conduction par atome ; discussion de la stabilité des phases.
 - α. Courbes $\gamma_{mm}(\theta)$ et $\gamma_{ii}(\theta)$
 - β. Stabilité des phases
- d) Energie d'interaction entre deux plans de macle, puis entre deux fautes d'empilement intrinsèques dans l'aluminium.

2) METAUX HC

IV - ENERGIE D'INTERACTION ENTRE UNE FAUTE D'EMPILEMENT ET UN ATOME D'IMPURETE

- 1) DESCRIPTION DU MODELE
- 2) CALCUL DE L'ENERGIE D'INTERACTION ENTRE UNE IMPURETE ET UNE FAUTE D'EMPILEMENT DANS UN CRISTAL CFC OÙ HC OU L'INTERACTION ENTRE PLANS EST OSCILLANTE.
 - a) CFC ; $Z = 3$
 - b) HC ; $Z = 2$
- 3) RESULTATS
 - a) CFC
 - b) HC
- 4) EFFET SUZUKI ET PRESENTATION DE LA SUITE DES CALCULS
- 5) DIFFERENCE DES ENERGIES DE DISSOLUTION D'UNE IMPURETE DANS UN CRISTAL HC INFINI ET DANS UN CRISTAL CFC INFINI (APPROXIMATION DE SUZUKI)
- 6) CALCUL THERMODYNAMIQUE : VARIATION DE LA CONCENTRATION D'IMPURETES AVEC LEUR DISTANCE A LA FAUTE ; DIMINUTION DE L'ENERGIE DE FAUTE AVEC LA CONCENTRATION D'IMPURETES DANS LE CRISTAL PARFAIT, COMPARAISON DE NOTRE MODELE A CELUI DE SUZUKI.
- 7) CONSEQUENCE PHYSIQUE : LIMITE ELASTIQUE
- 8) COMPARAISON A L'EXPERIENCE
- 9) APPLICATION AUX LACUNES : GERMINATION D'UNE FAUTE D'EMPILEMENT SUR UNE FAUTE PREEXISTANTE.

CONCLUSION.

INTRODUCTION

Dans l'étude des propriétés des métaux normaux non nobles, le développement de l'énergie du métal sous la forme d'une somme d'énergies d'interaction entre paires d'atomes [1] [2] [3] a permis d'obtenir des résultats théoriques en bon accord avec l'expérience : le développement effectué par Pick [3], qui permet de comparer les différentes énergies du métal au cours de transformations à volume constant, a été utilisé avec succès pour l'étude des spectres de phonons [4] et pour le calcul de l'énergie de faute d'empilement dans les métaux normaux de structure CFC et HC [5]. Nous utiliserons cette expression de l'énergie pour calculer l'énergie d'interaction entre une impureté ou une lacune, et une faute d'empilement dans ces métaux [6]. Ceci nous permettra d'étudier l'effet Suzuki [7], c'est à dire la ségrégation des impuretés sur les fautes d'empilement qui en résulte.

Nous appliquerons aussi les résultats concernant l'énergie d'interaction d'une lacune et d'une faute d'empilement à la germination des boucles de trempe superposées dans l'aluminium. Nous aurons alors besoin, pour savoir si ces boucles peuvent se développer, de connaître l'énergie d'interaction entre fautes d'empilement : nous rappellerons donc le calcul de l'énergie de faute qui a été fait par A Blandin, J Friedel et G Saada [5], discuterons l'accord de ces résultats avec l'expérience ; nous étendrons ensuite ce calcul à celui de l'énergie d'interaction entre fautes, Nous considérerons uniquement les métaux normaux polyvalents, où les calculs [5] ont montré qu'il existait une énergie d'interaction importante entre fautes.

Notre travail comprend donc essentiellement deux parties :

- le calcul de l'énergie d'interaction entre fautes d'empilement
- le calcul de l'énergie d'interaction entre une impureté et une faute d'empilement et l'étude de l'effet Suzuki.

Dans le chapitre I nous présentons le modèle de l'énergie de paires. Nous rappelons ensuite, dans le chapitre II, les résultats [5] concernant l'énergie des fautes d'empilement dans les métaux normaux de structure CFC ou HC. Les deux derniers chapitres constituent l'essentiel de notre travail : le chapitre III est consacré au calcul de l'énergie d'interaction entre défauts plans dans les métaux normaux de structure CFC ou HC. Dans le chapitre IV nous calculons l'énergie d'interaction entre une faute d'empilement et un atome d'impureté. Nous en déduisons un modèle décrivant la variation de la concentration en impuretés dans les différents plans parallèles à la faute, et nous comparons ce modèle à celui de Suzuki.

I - MODELE DE L'ENERGIE DE PAIRES - SES LIMITATIONS

1) LE MODELE DE L'ENERGIE DE PAIRES

Pick a développé l'énergie totale d'un métal normal par un calcul de perturbation au second ordre en utilisant la méthode des pseudopotentiels. En supposant le volume constant, il a obtenu l'expression suivante de l'énergie totale du cristal [3] [5] :

$$E = E_0 + \sum_{i < j} W(R_{ij}) \quad (1)$$

où E_0 est un terme ne dépendant pas de la structure

R_{ij} est le vecteur joignant les ions i et j , R_{ij} est le module

$W(R_{ij})$ représente l'énergie d'interaction effective entre les ions i et j .

La forme asymptotique de $W(R)$ est, avec les conventions de [5] :

$$W(R) \approx \alpha \frac{\cos(2k_F R)}{(2k_F R)^3} \quad (2)$$

où k_F est le rayon de la sphère de Fermi.

La forme oscillante de (2) est une conséquence de la coupure en énergie de la distribution de Fermi.

La forme asymptotique de $W(R)$ constitue une bonne approximation dès que R devient supérieur ou égal à la distance entre seconds voisins [5]. Nous verrons que lors de l'introduction d'une faute d'empilement dans les plans (III) de la structure CFC et dans les plans de base de la structure HC, les distances entre atomes premiers voisins ne sont pas modifiées. La forme asymptotique conviendra donc, aussi bien pour le calcul de l'énergie de deux fautes d'empilement que pour celui de l'énergie d'interaction d'une impureté et d'une faute d'empilement [5] [6].

La valeur du coefficient α a été calculée numériquement pour un certain nombre de métaux normaux : elle est donnée dans le tableau 1 pour les métaux que nous étudierons.

Pour calculer l'énergie d'interaction entre une impureté et une faute d'empilement, nous utiliserons un modèle d'ions ponctuels, de charge

égale à la valence Z. Les résultats sont identiques aux précédents, seule l'amplitude α' de la forme asymptotique de l'énergie d'interaction entre paires d'atomes diffère : $\alpha' = \frac{2 Z_1 Z_2}{\pi \epsilon^2 (2k_F)}$, où Z_1 et Z_2 représentent le nombre d'électrons de conduction des 2 atomes qui interagissent, et où ϵ est la constante diélectrique statique du gaz d'électrons libres :

$$\epsilon(\underline{k}) = 1 + \frac{2k_F}{\pi k} g\left(\frac{k}{2k_F}\right)$$

$$\text{avec } g(x) = 1 + \frac{1-x^2}{2x} \text{Log} \left| \frac{1+x}{1-x} \right| .$$

Les valeurs de α' pour les métaux étudiés sont portées dans le tableau 1.

Tableau 1 : valeurs de α et α' en unités atomiques (27,2 eV)
(d'après [5])

	Be	Mg	Zn	Al
α	2,38	0,73	non calculé	1,70
α'	1,91	1,63	1,79	4,20

Pour le zinc, où la constante α , à notre connaissance, n'a pas été calculée, nous utiliserons pour nos calculs la valeur α' : ceci nous donnera un ordre de grandeur de l'énergie calculée.

2) LIMITATIONS DU MODELE

Tout d'abord nous constatons que le seul paramètre intervenant dans l'expression de l'énergie est le rayon de la sphère de Fermi, qui est donné. Ceci est un inconvénient par rapport à d'autres expressions de l'énergie obtenues par la méthode des pseudopotentiels : ces expressions comportaient plusieurs paramètres et permettaient, par l'ajustement de ces paramètres, d'obtenir un meilleur accord avec l'expérience.

Mais une limitation essentielle est due au fait que le calcul a été effectué dans l'approximation de Hartree self consistente, en négligeant les énergies de corrélation et d'échange. Ces termes interviennent assez peu si

tous les calculs sont effectués à volume constant, mais ils deviennent importants dès que la densité électronique moyenne varie ; la forme (1) de l'énergie d'un métal ne permet donc d'étudier que des transformations à volume constant.

Une seconde approximation consiste à séparer les états des électrons en états de coeur et en états de la bande de conduction, et à négliger le recouvrement des fonctions d'onde de coeur entre ions voisins. On considère alors les couches d complètes comme couches internes ; dans les métaux nobles, ces états sont trop étendus pour que l'approximation soit valable. Quant aux électrons d des métaux de transition, ils se trouvent dans des états trop étendus pour être considérés comme électrons du coeur, et sont trop liés aux atomes pour être considérés comme appartenant à la bande de conduction [8]. Finalement, cette approximation n'est valable que pour les métaux normaux non nobles.

En résumé, la forme (1) de l'énergie totale d'un métal obtenue par Pick s'applique uniquement aux métaux normaux à l'exclusion des métaux nobles ; elle ne permet de comparer leurs énergies que lors de transformations à volume constant.

II - RAPPELS SUR LES FAUTES D'EMPILEMENT ET LEUR ENERGIE DANS LES METAUX NORMAUX DE STRUCTURE CFC OU HC [5]. DEVELOPPEMENTS : DISCUSSION DES RESULTATS EXPERIMENTAUX POUR L'ALUMINIUM ; INFLUENCE DU RAPPORT $\frac{c}{a}$ DANS LES HC

1) FAUTES D'EMPILEMENT DANS UN CRISTAL CFC OU HC

Un cristal parfait de structure CFC ou HC peut être représenté comme un empilement de plans denses de même structure, (111) ou (0001) respectivement : la maille élémentaire plane est un parallélogramme constitué de deux triangles équilatéraux accolés (v. fig 1). Désignons par A l'un de ces plans. Les plans cristallins étant translatés l'un par rapport à l'autre d'un vecteur du type \vec{b} joignant un sommet d'un triangle équilatéral au centre de ce triangle, les seuls plans pouvant succéder au plan A sont de type B ou C. Un cristal parfait CFC est constitué par l'empilement périodique ABC ABC ABC ... ou, suivant la notation de Frank [9], $\Delta\Delta\Delta\Delta\Delta\Delta\Delta...$. Un cristal parfait HC est caractérisé par l'empilement

A B A B A B ...
 $\Delta \nabla \Delta \nabla \Delta \dots$

La création d'une faute d'empilement ou d'un plan de macles translate tous les plans de la partie supérieure du cristal d'un vecteur multiple de \vec{b} par rapport à la partie inférieure du cristal (v. tableaux 1 et 2). Elle ne modifie donc pas le volume moyen par atome, et le développement (1) de l'énergie totale du cristal sous forme d'une somme d'énergies de paire est particulièrement adapté au calcul de l'énergie de faute.

Tableau 1 : défauts plans dans un cristal CFC (d'après [3])

cristal parfait	A B C A B C A B C $\Delta \Delta \Delta \Delta \Delta \Delta \Delta \Delta$
faute d'empilement intrinsèque	A B C B+C A B C $\Delta \Delta \nabla \Delta \Delta \Delta \Delta$
faute d'empilement extrinsèque	A B C+B+A B C A B C $\Delta \Delta \nabla \nabla \Delta \Delta \Delta \Delta \Delta$
plan de macles	A B C+B+C+A+B+C+A $\Delta \Delta \nabla \nabla \nabla \nabla \nabla \nabla$

Tableau 2 : défauts plans dans un cristal HC (d'après [3])

cristal parfait	A B A B A B A B $\Delta \nabla \Delta \nabla \Delta \nabla \Delta$
faute 1Δ	A B A B+C B C B $\Delta \nabla \Delta \Delta \nabla \Delta \nabla$

2) FORMES DE L'ENERGIE D'INTERACTION ENTRE PLANS PARALLELES

Pour déterminer l'énergie de faute, il faut calculer la variation de l'énergie d'interaction par unité de surface entre deux plans P et P' lorsque l'un d'eux est translaté d'un vecteur \vec{b} . On remarque que l'introduction d'une faute d'empilement ne modifie pas les distances relatives des atomes situés dans des plans premiers voisins (v fig 2) : les distances atomiques intervenant dans le calcul sont donc supérieures à la distance entre plans (111) seconds voisins, et l'utilisation de la forme asymptotique (1) semble justifiée.

A Blandin, J Friedel et G Saada [5] ont tout d'abord calculé l'énergie d'interaction par unité de surface entre deux plans atomiques parallèles P et P', distant de z , supposés infinis. Dans chacun de ces plans, les atomes sont disposés aux noeuds du réseau plan décrit précédemment (fig 1). On désignera par $\vec{\lambda}$ les vecteurs du réseau réciproque de ce réseau plan. En sommant les énergies d'interaction entre paires d'atomes, on trouve que l'énergie d'interaction entre plans admet des formes asymptotiques très différentes suivant qu'il existe ou non des vecteurs $\vec{\lambda}$ de module inférieur à $2k_F$:

- . Si tous les vecteurs $\vec{\lambda}$ ont un module supérieur à $2k_F$, la forme asymptotique de l'énergie d'interaction entre plans décroît exponentiellement en fonction de leur distance.
- . S'il existe des vecteurs $\vec{\lambda}$ de module inférieur à $2k_F$, l'énergie d'interaction est une fonction oscillante de z .

Or, dans le cas de métaux CFC, ou de métaux HC dont le rapport $\frac{c}{a}$ est idéal et égal à $\frac{8}{3}$, les rapports $\frac{\lambda}{2k_F}$ dépendent uniquement du nombre Z d'électrons de conduction par atome. Les vecteurs de base $\vec{\lambda}_0$ du réseau réciproque du réseau plan ont un module inférieur à $2k_F$ pour $Z > Z_c = 1,14$. (D'autre part, dans les métaux normaux et leurs alliages, seuls ces vecteurs de base $\vec{\lambda}_0$ ont un module inférieur à $2k_F$).

Dans les métaux divalents et trivalents, le terme prépondérant dans l'expression de l'énergie d'interaction entre plans atomiques est donc une fonction oscillante de z , dont l'amplitude décroît en z^{-2} à grande distance.

Par contre, dans les métaux normaux monovalents tels que Na, Li, K, l'énergie d'interaction entre plans est une fonction exponentiellement décroissante de z , nécessairement à plus courte portée que dans les divalents et les trivalents.

En réalité, dans les métaux normaux divalents HC tels que le béryllium ou le zinc, le rapport $\frac{c}{a}$ diffère du rapport idéal $\sqrt{\frac{8}{3}}$. Le rapport $\frac{\lambda}{2k_F}$ y dépend

donc non seulement de Z , mais aussi de $\frac{c}{a}$. Nous pouvons calculer la nouvelle valeur de Z_c défini par $\lambda = 2k_F(Z_c)$: ce calcul très simple est effectué dans l'appendice A. En posant $\frac{c}{a} = y$, on trouve :

$$Z_c = \frac{2\pi}{9} y \quad (4)$$

Le tableau 6 permet de comparer la valeur de $\frac{c}{a}$ dans le béryllium, le magnésium et le zinc à sa valeur idéale $\sqrt{\frac{8}{3}} = 1,633$.

Les variations de $\frac{c}{a}$ autour de sa valeur idéale ne dépassent pas 15 %, donc les variations relatives de Z_c pour les divalents sont inférieures à 15 %. On a donc toujours $Z > Z_c$, et les conclusions précédentes ne sont pas modifiées : l'énergie d'interaction entre plans est bien une fonction oscillante de leur distance. Seules les valeurs numériques, en particulier celle de Z_c , sont légèrement modifiées.

3) ENERGIE DES FAUTES D'EMPILEMENT DANS LES METAUX NORMAUX OU $Z > Z_c$

- a) Expression des énergies de faute |5|

Soit d la distance entre plans compacts premiers voisins dans un cristal CFC ou HC. Alors la distance séparant 2 plans quelconques est nd , où n est un entier.

Dans la référence |5| est calculée la variation $\Psi(nd)$ de l'énergie d'interaction de deux plans atomiques de type A, distants de nd , lorsque l'un d'entre eux est, par translation, transformé en un plan de type B ou C (les variations des distances entre atomes étant les mêmes dans les deux cas, la variation d'énergie est la même).

Dans les métaux où le nombre moyen d'électrons de conduction par atome est supérieur à Z_c , la forme asymptotique de $\Psi(nd)$ est :

$$\Psi(nd) \approx g \frac{\sin n \Theta}{n^2} \quad (5)$$

$$\text{où } g = \frac{\alpha k_F^2}{(2\pi)^3 Z^2} \left[1 - \left(\frac{Z_c}{Z} \right)^{\frac{2}{3}} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

$$\text{et } \Theta = \left(4k_F^2 - \lambda_0^2 \right)^{\frac{1}{2}} d \quad (7)$$

Ces formules restent les mêmes dans le cas d'un métal HC dont le

rapport $\frac{c}{a}$ n'est pas idéal, mais k_F et Z_c , qui dépendent du rapport $\frac{c}{a} = y$, sont modifiés.

Dans les HC, on peut exprimer Θ en fonction de y , Z , et $Z_c = \frac{2\pi}{g} y$:

$$\Theta = (4\sqrt{3}\pi^2)^{\frac{1}{3}} y^{\frac{2}{3}} (Z^{\frac{2}{3}} - Z_c^{\frac{2}{3}})^{\frac{1}{2}} \quad (8)$$

Connaissant l'expression de $\Psi(nd)$, il est facile de calculer l'énergie d'un plan de macle ou d'une faute d'empilement : il faut sommer les variations des énergies d'interaction entre plans appartenant respectivement à la partie translatée et à la partie non translatée du cristal. La référence [5] donne les expressions suivantes de l'énergie des fautes :

- dans les métaux CFC

. énergie Γ_m d'un plan de macle :

$$\Gamma_m = \sum_{n=1}^{\infty} n \left[-\Psi(3nd - d) + 2\Psi(3nd) - \Psi(3nd + d) \right] \quad (9)$$

. énergie Γ_i d'une faute d'empilement intrinsèque :

$$\Gamma_i = \sum_{n=1}^{\infty} \left[-(3n - 1) \Psi(3nd - d) + 3n \Psi(3nd) \right] \quad (10)$$

. énergie Γ_e d'une faute d'empilement extrinsèque

$$\Gamma_e = \sum_{n=1}^{\infty} \left[-2\Psi(3nd - d) + (3n + 1) \Psi(3nd) - 3n \Psi(3nd + d) \right] \quad (11)$$

- dans les métaux HC

Energie $\Gamma_{1\Delta}$ d'une faute 1Δ

$$\Gamma_{1\Delta} = \sum_{n=1}^{\infty} n \Psi(2nd) \quad (12)$$

Remarque : par la suite, nous désignerons toujours par Γ l'énergie de faute par cm^2 , tandis que $\frac{\Gamma}{g}$, nombre sans dimension qui est la somme de fonctions oscillantes de Θ , sera noté γ .

Les valeurs de g pour les différents métaux étudiés sont données par le tableau 3 :

Tableau 3

Al	Zn		Mg	Be		(g(erg/cm ²))
	$\frac{c}{a}$ idéal	$\frac{c}{a}$ exact		$\frac{c}{a}$ idéal	$\frac{c}{a}$ exact	
700	1190	980	335	2140	2260	

Pour le zinc, le calcul de g a été effectué à l'aide du coefficient α' , seul connu.

- b) Cas de l'aluminium : énergie des fautes d'empilement intrinsèques et extrinsèques :

- Résultats théoriques :

On rappelle dans l'appendice B les expressions des sommes des séries infinies intervenant dans le calcul des fonctions γ (expressions tirées de [5]). Nous avons fait le calcul numérique pour l'aluminium. On trouve :

Tableau 4

$$\left| \begin{array}{l} \Gamma_m = 60 \text{ erg/cm}^2 \\ \Gamma_i = 150 \text{ erg/cm}^2 \\ \Gamma_e = 130 \text{ erg/cm}^2 \end{array} \right.$$

Ces résultats sont voisins de ceux de la référence [5].

On constate que l'énergie d'une faute extrinsèque est voisine de celle d'une faute intrinsèque. Or une faute d'empilement extrinsèque peut être considérée comme la superposition de deux fautes d'empilement intrinsèques situées dans des plans (111) premiers voisins. On définit l'énergie d'inte-

reaction de deux fautes intrinsèques comme la différence entre l'énergie des deux fautes, et deux fois l'énergie d'une faute seule.

Si ces deux fautes intrinsèques sont distantes de d , les résultats précédents nous donnent une énergie d'interaction $\Gamma_e = 2\Gamma_i - \Gamma_i$. Cette énergie est importante, négative ; sa valeur absolue est de l'ordre de grandeur de l'énergie d'une faute intrinsèque seule.

- Résultats expérimentaux

Des résultats expérimentaux concernant les énergies de faute d'empilement intrinsèque ou extrinsèque ont été obtenus récemment par une étude de la cinétique de montée des boucles de dislocation imparfaites bordant une faute d'empilement dans l'aluminium (|10|, |11|, |12|). Ils sont reportés dans le tableau 5 :

Tableau 5

Γ_i (erg/cm ²)		Γ_e
10	11	12
Dobson, Goodhew, Smallman	Tartour, Washburn	Goodhew, Dobson, Smallman
135 ± 20	110	1,3 Γ_i

D'après ces résultats, l'énergie d'interaction $\Gamma_e = 2\Gamma_i$ entre deux fautes d'empilement intrinsèques distantes de d est voisine de $-0,7 \Gamma_i$.

Comparaison des résultats expérimentaux et théoriques :

Les énergies de faute calculées sont du même ordre de grandeur que les valeurs expérimentales. Mais les expérimentateurs |12| trouvent que l'énergie d'une faute extrinsèque est supérieure à celle d'une faute intrinsèque, et nous obtenons le résultat inverse. Par contre, l'ordre de grandeur de l'énergie d'interaction entre fautes d'empilement intrinsèques situées dans des plans (111) premiers voisins est dans les deux cas du même ordre de grandeur : elle est voisine de $-\Gamma_i$, où Γ_i est l'énergie d'une faute intrinsèque seule.

Nous discutons maintenant les résultats expérimentaux.

- c) Discussion des résultats expérimentaux pour l'aluminium

° Faute d'empilement intrinsèque

Nous nous intéresserons d'abord aux fautes d'empilement intrinsèques : les résultats sont obtenus par étude de la cinétique de montée de boucles de dislocation imparfaites bordant une faute d'empilement intrinsèque.

Deux modèles permettent d'interpréter le rétrécissement des boucles par émission de lacunes vers la surface. Un premier modèle, dû à Friedel [13], explique ce rétrécissement par le déplacement des crans le long de la boucle de dislocation sous l'effet de deux forces de sens opposés :

- une force F_m qui tend à diminuer le rayon de la boucle par émission de lacunes aux crans
- une force F_s , dépendant de la sursaturation de lacunes au voisinage des crans, qui tend à augmenter le rayon R par absorption de lacunes aux crans.

Dans le cas limite où les lacunes émises aux crans s'éliminent très rapidement à travers le cristal, la concentration de lacunes au voisinage des crans est égale à sa valeur d'équilibre dans le cristal parfait, et le modèle est désigné par "modèle de montée contrôlée par l'émission".

Un second modèle décrit le cas suivant : supposons qu'au départ le flux de lacunes diffusant des boucles de dislocation vers la surface du cristal soit inférieur au flux émis au niveau des crans ; la concentration de lacunes au voisinage des crans tend alors à augmenter, et il s'établit un état stationnaire lorsque le flux de lacunes émis au niveau des crans est égal au flux diffusé à travers le cristal. A la limite, les crans se saturent en lacunes et le rétrécissement des boucles est contrôlé uniquement par la diffusion des lacunes dans le cristal : c'est le modèle de "montée contrôlée par la diffusion" de Friedel ([14] [15] [10]).

En fait, Tartour et Washburn [11] ont remarqué que le flux de lacunes émis au niveau des crans et le flux diffusant des boucles vers la surface du cristal dépendaient tous deux de la concentration de lacunes au voisinage des crans. Ils en ont déduit que la concentration au voisinage des crans "s'ajustait" à une valeur comprise entre les deux valeurs limites précédentes, telles que le flux émis soit égal au flux diffusé et qu'un état stationnaire s'établisse dans le cristal.

De plus, pour le rétrécissement des boucles, Tartour et Washburn ont tenu compte de la diffusion des lacunes le long de la ligne de

dislocation : ceci équivaut à accroître le nombre de lacunes émises au niveau des crans de faible concentration. Pour en tenir compte, Tartour et Washburn ont, dans les équations décrivant le rétrécissement de la boucle, donné à la concentration des crans tout le long de la boucle sa valeur maximum.

Tous ces modèles conduisent en fait à une même forme de l'équation décrivant la diminution du rayon moyen R des boucles :

$$\frac{dR}{dt} = - A \exp\left(-\frac{U_D}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{F_m B^2}{kT}\right) - \frac{c'_0}{c_0} \right] \quad (13)$$

où . U_D est l'enthalpie libre d'autodiffusion

. T est la température absolue à laquelle a lieu le recuit

. F_m est la force de montée par unité de longueur de la dislocation, normale à la dislocation en chaque point

. B^2 mesure la section d'une lacune dans le plan de la boucle

. c_0 est la concentration de lacunes à l'équilibre thermique dans le cristal parfait

. La signification des paramètres c'_0 et A varie suivant les modèles :

- dans le modèle de montée contrôlée par l'émission, c'_0 , concentration de lacunes au voisinage de la boucle, est voisin de c_0 ; A est proportionnel à la concentration des crans c_c , à leur fréquence de vibration et à la constante D_0 telle que $D_0 \exp\left(-\frac{U_D}{kT}\right)$ soit égal au coefficient d'autodiffusion.

$\frac{dR}{dt}$ est alors lié à la vitesse des crans sous l'effet de la force F_m , dans le cas d'une sursaturation nulle au voisinage de la boucle.

- dans le modèle de montée contrôlée par la diffusion, c'_0 est la concentration de lacunes au voisinage de la surface. A est encore proportionnel à D_0 ; on le calcule de façon approchée en considérant que la symétrie de la diffusion est sphérique pour les boucles de petit rayon, cylindrique pour les boucles de grand rayon. La valeur du coefficient A varie alors avec la valeur du rayon R.

Dans ce cas, l'équation (13) s'interprète simplement : la concentration des crans saturés en lacunes étant $c_0 \exp\left(\frac{F_m B^2}{kT}\right)$, $\frac{dR}{dt}$ est proportionnel à la différence entre la concentration de lacunes au voisinage des crans et leur

concentration c'_o au voisinage de la surface.

- Pour Tartour et Washburn, c'_o est la concentration de crans au voisinage de la surface. Tartour et Washburn ne déterminent le coefficient A que de façon approchée, en écrivant que le flux diffusé est égal au flux émis et en considérant une concentration de crans maximum tout le long de la boucle. Ils obtiennent un coefficient A proportionnel à D_o , et indépendant du rayon R de la boucle.

La similitude des équations décrivant la variation du rayon moyen des boucles en fonction du temps rend le choix d'un modèle de montée difficile. Dobson, Goodhew et Smallman [10] ont utilisé le modèle de diffusion, tandis que Tartour et Washburn ont utilisé le modèle [11]. Le coefficient A dans l'équation (13) est donc très imprécis, et le choix d'un modèle de montée constitue une source d'erreur importante.

Nous allons maintenant discuter l'erreur sur Γ provenant des mesures expérimentales. Pour cela déterminons tout d'abord l'expression de Γ .

D'après Tartour et Washburn [11], l'équation décrivant la variation dans le temps du rayon R d'une boucle parfaite contenant une faute est :

$$R_c = R - \beta b \text{ Log } \frac{R+\beta b}{R_o+\beta b} = F_o - A_F t \exp\left(-\frac{U_D}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{\Gamma B^2}{kT}\right) - \frac{c'_o}{c_o} \right] \quad (14)$$

où le terme $\beta b \text{ Log } \frac{R+\beta b}{R_o+\beta b}$ représente la correction due à la tension de ligne, et où A_F est la valeur du coefficient A pour une boucle imparfaite bordant une faute d'empilement.

On en déduit :

$$\frac{dR_c}{dt} = - A_F \exp\left(-\frac{U_D}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{\Gamma B^2}{kT}\right) - \frac{c'_o}{c_o} \right] \quad (15)$$

Si on néglige $\frac{c'_o}{c_o}$ devant $\exp\left(\frac{\Gamma B^2}{kT}\right)$, l'expression (15) devient :

$$\frac{dR_c}{dt} \approx - A_F \exp\left(-\frac{U_D - \Gamma B^2}{kT}\right) \quad (15')$$

Cette première équation permet une mesure de Γ , mais celle-ci est très imprécise car le terme ΓB^2 , de l'ordre de 0,1eV, est nettement inférieur à U_D . Dobson, Goodhew et Smallman [10] ont proposé d'éviter cet inconvénient

en éliminant U_D : ils comparent pour cela, à une même température, la cinétique de montée de boucles imparfaites bordant une faute, et de boucles parfaites.

Si la température de recuit des boucles parfaites est égale à T , température de recuit des boucles imparfaites, la diminution du rayon R_p des boucles parfaites est donnée par :

$$\frac{1}{2\alpha b} (R_p^2 - R_o^2) = - A_p t \exp\left(-\frac{U_D}{kT}\right) \quad (16)$$

où α est une constante dépendant de la température

. A_p est la valeur du coefficient A pour les boucles parfaites.

$$\text{D'où} \quad \frac{1}{2\alpha b} \frac{dR_p^2}{dt} = - A_p \exp\left(-\frac{U_D}{kT}\right) \quad (17)$$

En comparant les équations (15') et (17), on obtient :

$$\Gamma \approx \frac{kT}{B^2} \text{Log} \left(2\alpha b \frac{A_p}{A_F} \frac{\frac{dR_c}{dt}}{\frac{dR_p^2}{dt}} \right) \quad (18)$$

L'erreur sur Γ dépend de façon critique de l'erreur sur la température de l'échantillon, plus exactement de la différence entre la température de recuit de la boucle parfaite et celle de la boucle imparfaite ; ceci bien que le terme $\frac{\Delta T}{T}$ soit faible. Ceci est développé dans l'appendice C. On montre que pour les mesures de Tartour et Washburn, l'erreur qui en résulte sur Γ est négligeable. Par contre, Dobson, Goodhew et Smallman [10], qui ont effectué certains recuits à l'intérieur du microscope, font une erreur sur la température pouvant atteindre 10°C : il en résulte une erreur absolue sur Γ d'environ 70 erg/cm^2 .

A cette erreur sur Γ provenant de l'erreur sur la température s'ajoute celle due aux autres erreurs de mesure. Le calcul, classique, est effectué dans l'appendice D. On trouve une erreur relative sur Γ d'environ 35 %.

On obtient finalement les résultats suivants :

- mesure de Dobson, Goodhew et Smallman [10] : $\Gamma = (135 \pm 110) \text{ erg/cm}^2$
- mesure de Tartour et Washburn [11] : $\Gamma = (110 \pm 40) \text{ erg/cm}^2$.

Nous adopterons donc ce dernier résultat.

Le résultat théorique $\Gamma_i = 150 \text{ erg/cm}^2$ est, aux erreurs de mesure près, compatible avec les résultats expérimentaux.

β. Faute d'empilement extrinsèque

La valeur de l'énergie d'une faute extrinsèque a été déduite |12| de la mesure du rapport $\frac{\Gamma_e}{\Gamma_i}$ où $\left\{ \begin{array}{l} \Gamma_e \text{ est l'énergie d'une faute extrinsèque} \\ \Gamma_i \text{ est l'énergie d'une faute intrinsèque.} \end{array} \right.$

Pour cela, Goodhew, Dobson et Smallman |12| ont étudié la cinétique de montée de deux boucles de dislocation (v fig 3).

Dans une première phase du recuit isotherme, le rayon de la boucle extérieure, bordant une faute d'empilement intrinsèque, diminue, et le rayon de la boucle intérieure augmente. Dans une deuxième phase, les deux boucles, observées au microscope électronique, semblent superposées ; elles bordent une faute d'empilement extrinsèque, et leur rayon décroît à une vitesse plus faible que celui de la boucle extérieure au cours de la première phase. Goodhew, Dobson et Smallman ont considéré que le rétrécissement de la boucle extérieure dans le premier cas, des deux boucles superposées dans le deuxième cas, étaient contrôlés par la diffusion des lacunes vers la surface. Ils en ont déduit que le rapport $\frac{\Gamma_e}{\Gamma_i}$ était voisin de 1,3.

En fait, le problème de la cinétique de montée de deux boucles de dislocation bordant une faute d'empilement n'a pas encore été résolu théoriquement. Aussi considérerons-nous que le résultat de Goodhew, Dobson et Smallman ne constitue qu'un ordre de grandeur.

Le calcul et les résultats expérimentaux donnent un même ordre de grandeur du rapport $\frac{\Gamma_e}{\Gamma_i}$.

Le calcul donne donc des résultats compatibles avec les résultats expérimentaux en ce qui concerne l'ordre de grandeur des énergies de faute intrinsèque ou extrinsèque, et celui de l'énergie d'interaction entre deux fautes d'empilement intrinsèques.

- d) Energie des fautes 1Δ dans les HC ; influence du rapport $\frac{c}{a}$

Le calcul de l'énergie d'une faute 1Δ dans le zinc, le magnésium et le béryllium, a été effectué en utilisant les formules du 2) et du 3a).

Ces formules font apparaître explicitement le rapport $\frac{c}{a}$. Ce rapport variant assez peu suivant les métaux, il est fréquent de lui donner sa valeur

idéale = 1,633 (correspondant à l'espacement des plans dans la structure CFC). Pour donner une idée de l'approximation ainsi faite, nous avons calculé l'énergie à la fois pour le rapport $\frac{c}{a}$ exact et pour le rapport $\frac{c}{a}$ idéal. Il faut noter que nous avons pris la même valeur de a dans les deux cas, ceci réduit la valeur de la comparaison, car les densités électroniques ne sont pas les mêmes.

Les résultats sont reportés dans le tableau 6, à côté des valeurs du rapport $\frac{c}{a}$ exact correspondant à chaque métal.

Tableau 6

	$\frac{c}{a}$ exact	$\Gamma_{1\Delta}$ calculé pour $\frac{c}{a}$ idéal = 1,633 (erg/cm ²)	$\Gamma_{1\Delta}$ calculé pour $\frac{c}{a}$ exact (erg/cm ²)	$\Gamma_{1\Delta}$ expérimental d'après 19 et 20 (erg/cm ²)	$\Gamma_{1\Delta}$ expérimental d'après 18 (erg/cm ²)
Zn	1,856	215	180	140	300 ± 150
Mg	1,625	60	60	125	280 ± 100
Be	1,567	385	405		

On constate que l'énergie de faute varie peu avec le rapport $\frac{c}{a}$: pour une variation de $\frac{c}{a}$ d'environ 15 % (Zn), la variation de l'énergie de faute est de 20 %. On commet donc une erreur assez faible en calculant l'énergie de faute pour le rapport $\frac{c}{a}$ idéal.

La valeur obtenue pour le zinc ne constitue qu'un ordre de grandeur, car elle a été calculée à l'aide du coefficient α' , le coefficient α n'étant pas connu.

Nous comparerons très rapidement nos résultats aux résultats expérimentaux. Les résultats obtenus par étude de la cinétique de montée de boucles de dislocation imparfaites contenant une faute 1Δ sont portées dans le tableau 6.

Hales, Smallman et Dobson [19] ont comparé les cinétiques de montée de boucles de dislocation parfaites, et de boucles imparfaites bordant une faute 1Δ ; ils ont interprété les résultats à l'aide d'un modèle de montée contrôlée par la diffusion. Leur méthode de mesure est donc analogue à celle qui a été utilisée dans les métaux CFC, et les sources d'erreur sont les mêmes. On a vu que l'erreur relative sur l'énergie de faute atteignait $\frac{1}{3}$.

Les résultats de Harris et Masters [18] diffèrent notablement des précédents, car ils ont utilisé un modèle de montée différent (émission). De plus, ils ont calculé l'énergie de faute Γ en étudiant uniquement la cinétique de montée de boucles imparfaites bordant une faute, ce qui donne des résultats encore bien moins précis que la méthode précédente.

Ceci explique la forte marge d'incertitude qui affecte les résultats du tableau 8, ainsi que leur divergence. Il est donc difficile d'en tirer des conclusions nettes quant à la validité des résultats théoriques.

On peut toutefois remarquer que, dans le magnésium, l'énergie de faute calculée est nettement inférieure aux valeurs expérimentales. Dans le zinc, la concordance est meilleure.

Conclusion :

L'énergie de paire permet, dans le cas de l'aluminium, de calculer les énergies de faute d'empilement et un ordre de grandeur de l'énergie d'interaction entre fautes intrinsèques en bon accord avec les résultats expérimentaux. C'est pourquoi, dans ce qui suit, nous calculerons systématiquement, en fonction de leur distance, l'énergie de deux plans de macles puis de deux fautes d'empilement extrinsèques dans les métaux normaux CFC. Nous calculerons aussi l'énergie de deux fautes 1Δ dans les HC.

III - CALCUL DE L'ENERGIE D'INTERACTION ENTRE DEFAUTS PLANS DANS LES METAUX NORMAUX DE STRUCTURE CFC OU HC.

1) METAUX CFC

- a) Energie Γ_{mm} de deux plans de macles parallèles et infinis

Puisque la périodicité de l'empilement est $3d$, on considérera séparément les cas où les deux plans sont distants de $3kd-d$, $3kd$ et $3kd+d$, où k est un nombre entier quelconque.

Le calcul de l'énergie Γ_{mm} ($3kd+d$) de deux plans de macles distants de $3kd+d$ est traité en détail dans l'appendice E. Les autres cas peuvent être traités de façon analogue.

On trouve les expressions suivantes :

$$\Gamma_{mm}(3kd+d) = \sum_{n=1}^k \left[(n-k-1) \Psi(3nd-d) + (n-k) \Psi(3nd) - 2(n-k) \Psi(3nd+d) \right] + \sum_{n=1}^{\infty} \left[- (3n-k-1) \Psi(3n\theta-\theta) + (3n+k) \Psi(3n\theta) - 2k \Psi(3n\theta+\theta) \right] \quad (20)$$

$$\Gamma_{mm}(3kd) = \sum_{n=1}^{k-1} \left[-2(n-k) \Psi(3nd-d) + 4(n-k) \Psi(3nd) - 2(n-k) \Psi(3nd+d) \right] + \sum_{n=1}^{\infty} \left[-2k \Psi(3nd-d) + 4k \Psi(3nd) - 2k \Psi(3nd+d) \right] \quad (21)$$

$$\Gamma_{mm}(3kd-d) = \sum_{n=1}^{k-1} \left[-2(n-k) \Psi(3nd-d) + (n-k) \Psi(3nd) + (n-k+1) \Psi(3nd+d) \right] + \sum_{n=1}^{\infty} \left[-2k \Psi(3nd-d) + (3n+k) \Psi(3nd) - (3n-k+1) \Psi(3nd+d) \right] \quad (22)$$

L'énergie d'interaction des deux plans de macles est $(\Gamma_{mm} - 2\Gamma_m)$, l'expression de Γ_m étant donnée par la formule (9).

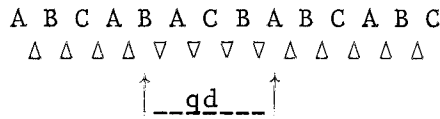


Tableau 7A : deux plans de macle distants de qd

- b) Energie Γ_{ii} de deux fautes d'empilement intrinsèques parallèles et infinies

De la même façon, on trouve :

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{ii} (3kd+d) &= \sum_{n=1}^k \left[- (6n-6k-4) \Psi (3nd-d) + (3n-3k-1) \Psi (3nd) + (3n-3k) \Psi (3nd+d) \right] \\
 &+ \sum_{n=1}^{\infty} \left[- (6k+2) \Psi (3nd-d) + (3n+3k+1) \Psi (3nd) - (3n-3k) \Psi (3nd+d) \right] \quad (23)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{ii} (3kd) &= \sum_{n=1}^k \left[- (6n-6k-2) \Psi (3nd-d) + (3n-3k) \Psi (3nd) \right] + \sum_{n=1}^{k-1} (3n-3k+1) \Psi (3nd+d) \\
 &+ \sum_{n=1}^{\infty} \left[-6k \Psi (3nd-d) + (3n+3k) \Psi (3nd) - (3n-3k+1) \Psi (3nd+d) \right] \quad (24)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{ii} (3kd-d) &= \sum_{n=1}^{k-1} \left[- (6n-6k) \Psi (3nd-d) + (3n-3k+1) \Psi (3nd) + (3n-3k+2) \Psi (3nd+d) \right] \\
 &+ \sum_{n=1}^{\infty} \left[- (6k-2) \Psi (3nd-d) + (3n+3k-1) \Psi (3nd) - (3n-3k+2) \Psi (3nd+d) \right] \quad (25)
 \end{aligned}$$

L'énergie d'interaction des deux fautes d'empilement est $\Gamma_{ii} - 2\Gamma_i$; l'expression de Γ_i est donnée par la formule (10).

On peut vérifier, sur les formules ci-dessus, que l'énergie d'interaction entre fautes planes tend vers 0 quand leur distance tend vers l'infini.

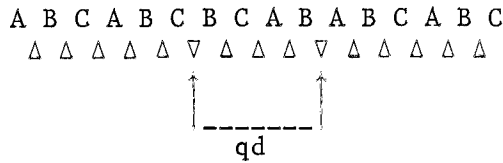


Tableau 7B : deux fautes intrinsèques distantes de qd .

- c) Variation de l'énergie de deux fautes planes dans les alliages désordonnés de structure CFC en fonction du nombre moyen \bar{Z} d'électrons de conduction par atome ; stabilité des phases

On pose $\Gamma_{mm} = g \gamma_{mm}$, et $\Gamma_{ii} = g \gamma_{ii}$

α . Courbes $\gamma_{mm}(\theta)$ et $\gamma_{ii}(\theta)$

Pour calculer l'énergie moyenne d'interaction entre atomes dans les alliages désordonnés de métaux normaux, on peut définir une amplitude moyenne $\bar{\alpha}$ de la forme asymptotique, qui dépend de la concentration c du constituant le moins abondant; ceci permet de calculer l'énergie de fautes planes [5] :

$$\bar{\alpha} = (1-c)^2 \alpha_{AA} + 2c(1-c) \alpha_{AB} + c^2 \alpha_{BB}$$

α_{AA} , α_{BB} et α_{AB} sont respectivement les amplitudes des formes asymptotiques décrivant l'interaction entre deux atomes de type A, deux atomes de type B, un atome A et un atome B.

L'énergie de faute se calcule alors en remplaçant dans les formules α par $\bar{\alpha}$, et Z par le nombre moyen \bar{Z} d'électrons de conduction par atome.

Cette méthode de calcul approchée est valable dans les solutions solides diluées, où on néglige la ségrégation des impuretés sur les fautes d'empilement.

On a calculé, pour une distance entre plans de faute variant de d à $6d$, les sommes γ_{mm} et γ_{ii} en fonction de \bar{Z} . Dans les métaux ou alliages désordonnés de structure CFC, θ est une fonction univoque de \bar{Z} donnée par la formule (8), où on remplace y par sa valeur idéale $\sqrt{\frac{8}{3}}$. On a donc représenté sur les figures 4A, 4B, 5A, 5B, les fonctions γ_{mm} et γ_{ii} en fonction de θ sur l'intervalle $[0, \pi]$. Les valeurs de ces fonctions pour θ compris entre π et 2π s'en déduisent immédiatement par les relations

$$\begin{cases}
 \gamma_{mm}(\theta) = -\gamma_{mm}(2\pi-\theta) \\
 \gamma_{ii}(\theta) = -\gamma_{ii}(2\pi-\theta).
 \end{cases}$$

La notation γ_{mmq} où $q = 1, 2, \dots, 6$ représente la fonction γ_{mm} calculée pour deux plans de macles distants de qd (tableau 7A).

De même γ_{iiq} se rapporte à deux fautes d'empilement intrinsèques distantes de qd (tableau 7B).

Pour interpréter les courbes 4A, 4B, 5A, 5B, il est utile de connaître la correspondance entre θ et \bar{Z} sur l'intervalle $|0, 2\pi|$:

Tableau 8

θ	0	$\frac{2\pi}{3}$	π	$\frac{4\pi}{3}$	2π
\bar{Z}	1,14	1,36	1,65	2,1	3,53

La méthode de calcul des fonctions γ à partir des expressions (17), (18), (19), (20), (21), (22) est exposée dans l'appendice F.

Sur les figures 4A, 4B, 5A, 5B, on a aussi tracé les courbes $2\gamma_m(\theta)$ et $2\gamma_i(\theta)$, qui permettent d'obtenir respectivement :

- l'énergie d'interaction entre plans de macles : $\bar{g} [\gamma_{mm}(\theta) - \gamma_m(\theta)]$
- l'énergie d'interaction entre fautes intrinsèques : $\bar{g} [\gamma_{ii}(\theta) - 2\gamma_i(\theta)]$

le coefficient \bar{g} se calcule en remplaçant, dans l'expression de g , α par $\bar{\alpha}$ et Z par \bar{Z} .

Les renseignements que peuvent fournir les courbes $\gamma_{mm}(\theta)$ et $\gamma_{ii}(\theta)$ sont limités car, pour obtenir la valeur de l'énergie Γ , il faut multiplier γ par le coefficient \bar{g} , calculé à partir de $\bar{\alpha}$, qui dépend du métal ou de l'alliage considéré : on ne peut donc en général comparer les énergies que pour une valeur de θ , c'est-à-dire de \bar{Z} , donnée.

β . Stabilité des phases

Les courbes donnant l'énergie d'une faute intrinsèque et extrinsèque dans un métal CFC ont été obtenues par A Blandin, J Friedel et G Saada [5].

De même pour l'énergie d'une faute Δ dans les HC. Dans les régions où l'énergie de faute est négative, il existe une phase plus stable que la phase CFC ou HC considérée. A Blandin, J Friedel et G Saada ont ainsi pu obtenir les domaines d'instabilité des phases HC et CFC. Ceux-ci sont reportés dans le tableau 9 :

Tableau 9

\bar{z}	1,14	1,27	1,36	1,66	2,1	2,29	3,53
θ	0	$\frac{\pi}{2}$	$\frac{2\pi}{3}$	π	$\frac{4\pi}{3}$	$\frac{3\pi}{2}$	2π
HC		← instable →				← instable →	
CFC	← instable →			← instable →			

La plupart des limites de stabilité des phases correspondent aux valeurs de θ pour lesquelles la sphère de Fermi touche une limite de zone de Brillouin: (θ voisin de $\frac{2\pi}{3}$ et $\frac{4\pi}{3}$ pour les CFC, $\theta = \pi$ pour les HC) : on retrouve donc les règles de Hume Rothery. De nouvelles limites ($\theta = \pi$ pour les CFC, $\theta = \frac{\pi}{2}$ et $\frac{3\pi}{2}$ environ pour les HC) correspondent au changement de signe de l'énergie de faute, c'est-à-dire à la valeur de θ limitant la région où la faute est instable.

Les courbes représentant l'énergie de deux fautes planes parallèles dans les CFC fournissent, pour l'instabilité de la phase CFC, des valeurs limites de θ très voisines (*) de celles qui ont été obtenues pour une faute seule ; leur intérêt, pour la stabilité des phases, est de donner quelques indications supplémentaires au voisinage de $\theta = \frac{2\pi}{3}$ et $\theta = \frac{4\pi}{3}$. Au voisinage de ces valeurs, l'énergie de deux fautes varie très rapidement en grandeur et en signe, et sa valeur absolue devient généralement très grande. On peut alors s'attendre à rencontrer, de préférence à la phase CFC contenant des groupes de fautes dont

(*) très voisines : en effet, la phase CFC est instable jusqu'à une valeur de θ légèrement supérieure à $\frac{2\pi}{3}$, puis entre π et une valeur de θ légèrement supérieure à $\frac{4\pi}{3}$.

l'énergie tend vers une valeur négative, de très grande valeur absolue.

Les conclusions pouvant être tirées de notre étude sont toutefois limitées, car nous avons calculé uniquement l'énergie de deux fautes parallèles. Pour connaître les structures stables au voisinage de $\theta = \frac{2\pi}{3}$ et $\theta = \frac{4\pi}{3}$, il faudrait connaître l'énergie d'un ensemble de fautes parallèles : une étude sérieuse de la stabilité des phases exigerait l'étude de phases comportant des fautes de périodicité variable. Cette dernière étude a été faite par J.L Déplanté [21], pour \bar{Z} compris entre 1,27 et 1,36, c'est-à-dire lorsque les plans CFC et HC sont toutes deux instables.

En outre, il faut tenir compte des limitations suivantes :

- D'après la discussion de Pick [3], le développement de l'énergie totale du cristal sous forme d'un terme constant augmenté d'une somme d'énergies de paires est valable pour $\theta = \frac{2\pi}{3}$ et $\theta = \frac{4\pi}{3}$, valeurs pour lesquelles la surface de Fermi touche une limite de zone de Brillouin, uniquement si la surface de Fermi n'est pas déformée au premier ordre. Nos résultats au voisinage de $\theta = \frac{2\pi}{3}$ et $\theta = \frac{4\pi}{3}$ ne sont donc valables qu'à cette condition.

- Nous nous sommes placés dans l'approximation d'un cristal infini : c'est ce qui fait que, au voisinage de $\theta = \frac{2\pi}{3}$ et $\theta = \frac{4\pi}{3}$, nous obtenons des énergies de faute infinies. En fait, lorsque la valeur absolue de l'énergie est très grande, son ordre de grandeur est celui du nombre de plans (111) parallèles à la faute dans le cristal.

Nous pouvons maintenant indiquer les types de fautes qu'on peut rencontrer au voisinage de $\theta = \frac{2\pi}{3}$ et $\theta = \frac{4\pi}{3}$:

a) Pour \bar{Z} tendant vers 1,36 (la phase HC est instable, certaines énergies de faute étant négatives, la phase CFC l'est aussi) :

- deux fautes intrinsèques parallèles de distance quelconque
- deux plans de macles parallèles distants de $3kd + 2d$, où k est un entier quelconque ; un cas particulier est une faute intrinsèque seule.

b) Pour \bar{Z} tendant vers 2,1 (aucune conclusion quant à la stabilité de la phase HC ; certaines énergies de faute de la structure CFC étant négatives, la phase CFC est instable), l'énergie de deux plans de macles distants de $3kd + d$, donc en particulier d'une faute intrinsèque, tend vers $-\infty$. Par contre, l'énergie de deux fautes d'empilement intrinsèques séparées par une distance quelconque tend vers $+\infty$. On ne devrait donc pas observer de fautes intrinsèques superposées.

Ce dernier cas illustre bien les limites de notre étude : le fait que l'énergie de certaines fautes est négative ne permet pas de conclure quant à la possibilité d'existence de deux ou plusieurs de ces fautes : il est alors nécessaire de connaître leur énergie d'interaction, ce qui peut modifier totalement les conclusions.

Ainsi, les courbes représentant l'énergie de deux fautes planes parallèles en fonction de \bar{Z} ne fournissent que quelques indications quant à la stabilité des phases. Par contre, elles sont utiles pour déterminer l'énergie d'interaction de deux fautes planes dans un métal ou un alliage désordonné de \bar{Z} donné : elles permettent alors de prévoir les distances entre fautes planes. Nous allons étudier plus particulièrement le cas de l'aluminium où, comme nous l'avons vu, on observe après trempe des fautes d'empilement intrinsèques superposées.

- d) Energie d'interaction entre deux plans de macle, puis entre deux fautes d'empilement intrinsèques dans l'aluminium :

Le coefficient g étant connu dans l'aluminium, nous avons pu calculer l'énergie $\Gamma_{mm} = g \gamma_{mm}$ de deux plans de macle et l'énergie $\Gamma_{ii} = g \gamma_{ii}$ de deux fautes d'empilement intrinsèques. Connaissant l'énergie Γ_m ou Γ_i d'une seule de ces fautes, il est alors facile de calculer l'énergie d'interaction de deux plans de macle $\Gamma_{mm} - 2\Gamma_m$, et l'énergie d'interaction de deux fautes d'empilement intrinsèques $\Gamma_{ii} - 2\Gamma_i$.

Les résultats sont reportés dans les tableaux 10 et 11

Tableau 10

q	1	2	3	4	5	6	7	8	---	13	15
Γ_{mm} (qd) erg/cm ²	147	132	108	120	118	123	117	118	---	119	119

↑
 faute intrinsèque
 ↑
 faute extrinsèque

On rappelle que $2\Gamma_m = 119 \text{ erg/cm}^2$.

Tableau 11

q	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	17	18	19
Γ_{ii} (qd) erg/cm ²	132	381	293	278	287	300	300	286	292	294	291	293	294

↑
faute
extrinsèque

On rappelle que $2\Gamma_i = 293 \text{ erg/cm}^2$

On constate que, lorsque la distance entre les fautes croît, l'énergie des deux fautes planes parallèles tend rapidement vers le double de l'énergie d'une faute ; ceci est réalisé dès que la distance entre plans de macle atteint $4d$, et que celle entre fautes intrinsèques atteint $3d$. Par contre, pour des fautes planes proches, l'énergie d'interaction peut être importante, surtout pour des fautes intrinsèques.

L'énergie d'interaction entre deux plans de macle distants de d ou de $2d$ est positive et non négligeable : ceci devrait gêner la nucléation de macles mécaniques par le processus de Cottrell et Bibby [27] .

L'énergie de deux plans de macle calculée ci-dessus est minimum lorsque les plans sont distants de $3d$. Les expérimentateurs ne signalent pas l'observation de telles fautes, dont le contraste en microscope électronique doit être faible [22] .

L'énergie de deux fautes d'empilement intrinsèques présente un minimum très net lorsque ces deux fautes, distantes de d , constituent une faute d'empilement extrinsèque: leur énergie d'interaction est alors négative, et sa valeur absolue atteint l'énergie d'une faute intrinsèque seule. Ceci, comme nous l'avons vu, est compatible avec les résultats expérimentaux.

La croissance d'une faute d'empilement intrinsèque devrait donc avoir lieu préférentiellement au-dessus d'une faute préexistante, à une distance d de cette faute. Ceci explique en partie l'observation, après trempe et recuit, de boucles de dislocation superposées contenant une faute d'empilement intrinsèque dans l'aluminium. Il reste à expliquer le mécanisme de nucléation d'une seconde faute au-dessus de la première: comme les boucles de dislocation

observées sont attribuées à la coalescence de lacunes dans les plans (111), nous calculerons dans le chapitre IV l'énergie d'interaction d'une lacune et d'une faute d'empilement intrinsèque, que nous trouverons négative au voisinage immédiat de la faute.

Finalement, nous trouverons que le mécanisme de formation de fautes intrinsèques superposées a lieu en deux étapes :

- précipitation de lacunes sur une faute d'empilement intrinsèque et coalescence des lacunes dans un plan (111) de façon à produire une faute d'empilement intrinsèque, située à la distance d de la première ; on observe donc deux boucles de dislocation : la boucle intérieure contient une faute d'empilement extrinsèque, tandis qu'entre les deux boucles on observe une faute d'empilement intrinsèque.
- Croissance de la seconde faute intrinsèque au-dessus de la première. Cette croissance est possible car l'énergie d'une faute extrinsèque est voisine de celle d'une faute intrinsèque.

Il y a nucléation successive de deux boucles de Frank associées à une faute intrinsèque plutôt que d'une seule boucle associée à une faute extrinsèque car ceci "réduit l'énergie de ligne, prédominante dans le germe".

2) METAUX HC

L'énergie Γ_{11} (qd) de deux fautes 1Δ distantes de qd (v fig 8) est $g \gamma_{11}$. Si on définit $\Psi^{(*)}(nd) = \frac{\Psi(nd)}{g} = \frac{\sin n\theta}{n^2}$, on obtient :

$$\gamma_{11} (2kd-d) = \sum_{n=1}^k \left[(n-k) \Psi^{*}(2nd-d) \right] + \sum_{n=1}^{\infty} \left[2n \Psi^{*}(2nd) - (n-k) \Psi^{*}(2nd-d) \right] \quad (27)$$

$$\gamma_{11} (2kd) = \sum_{n=1}^k \left[2(n-k) \Psi^{*}(2nd) \right] + 2k \sum_{n=1}^{\infty} \Psi^{*}(2nd) \quad (28)$$

La méthode de calcul de γ_{11} est indiquée dans l'appendice G.

γ_{11} a été calculé à l'aide du rapport $\frac{c}{a}$ exact. On en déduit la valeur γ_{11} de l'énergie de deux fautes. Les résultats pour le zinc, le magnésium et le béryllium sont reportés dans le tableau 12. On rappelle d'autre part la valeur de $2\Gamma_{1\Delta}$, où $\Gamma_{1\Delta}$ est l'énergie d'une faute 1Δ seule.

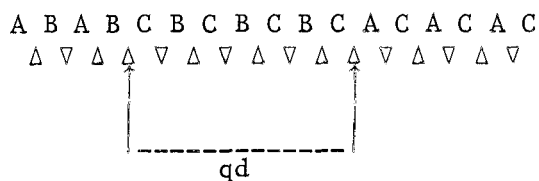
Tableau 12

	q	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
$2\Gamma_{1\Delta} = 398 \text{erg/cm}^2$	$\Gamma_{11}(\text{qd})$ erg/cm^2	Zn	420	457	368	425	399	381	406	390	397	405	394	401
$2\Gamma_{1\Delta} = 120 \text{erg/cm}^2$		Mg	121	145	112	124	123	114	122	121	119	123	120	119
$2\Gamma_{1\Delta} = 806 \text{erg/cm}^2$		Be	808	973	748	827	824	762	816	812	796	822	804	798

suite

q		16	20		
$\Gamma_{11}(\text{qd})$ erg/cm^2	Zn	---	395	---	399
	Mg	---	121	---	120
	Be	---	812	---	801

Tableau 13



Deux fautes 1Δ distantes de qd

L'énergie des deux fautes 1Δ est minimum lorsque celles-ci sont distantes de $3d$, mais ce minimum est très peu prononcé, et l'énergie des deux fautes 1Δ distantes de $3d$ est voisine du double de l'énergie d'une faute. L'énergie de deux fautes 1Δ parallèles est donc toujours importante. La valeur minimum de cette énergie atteint 370erg/cm^2 dans le zinc et 750erg/cm^2 dans le

béryllium, ce qui rend l'existence de telles fautes improbable dans ces métaux.

Ceci est compatible avec les observations expérimentales : dans les HC, on n'observe pas de fautes 1Δ superposées ; lorsqu'on observe deux boucles de dislocation concentriques, l'espace entre les deux boucles comporte une faute d'empilement qu'on suppose de nature 1Δ ; les vecteurs de Burgers des parties bordant les boucles sont tels que la boucle intérieure ne contienne pas de faute.

Notons que bien que le calcul suggère que l'énergie de deux fautes 1Δ superposées n'est pas élevée dans le magnésium, une telle situation n'a pas été observée jusqu'ici.

Conclusion :

Nous avons vu que dans les métaux normaux CFC l'énergie d'interaction entre deux fautes d'empilement intrinsèques était négative et importante lorsque ces fautes étaient distantes de d : ceci explique qu'une faute intrinsèque se développe facilement au-dessus d'une faute préexistante et permet de comprendre l'observation de boucles de dislocation superposées contenant une faute d'empilement dans l'aluminium. Mais il faudrait aussi connaître le processus de germination d'une seconde faute au-dessus d'une faute préexistante : on suppose généralement que ceci se produit par coalescence des lacunes dans un plan (111) parallèle à la faute. Nous allons essayer de justifier théoriquement ce modèle : nous calculerons l'énergie d'interaction d'une lacune (ou d'une impureté) avec une faute d'empilement, et nous en déduirons quels sont les plans atomiques dont la concentration en lacunes est importante : la coalescence des lacunes dans ces plans devrait permettre la nucléation d'une nouvelle faute d'empilement au-dessus de la première.

IV - ENERGIE D'INTERACTION ENTRE UNE FAUTE D'EMPILEMENT ET UN ATOME D'IMPURETE

1) DESCRIPTION DU MODELE

Lorsque la concentration c d'impuretés dans un cristal est faible, on peut négliger leur interaction, et l'énergie d'interaction ΔW d'une impureté et d'une faute d'empilement est indépendante de la concentration.

L'énergie d'interaction ΔW sera donc définie comme la différence entre :

- d'une part l'énergie d'une matrice M contenant un atome d'impureté unique I , situé à une distance z de la faute (v fig 6,7)
- d'autre part la somme des énergies d'une faute d'empilement dans la matrice parfaite, et du cristal contenant une impureté seule.

La modèle, qui néglige l'énergie d'interaction entre impuretés, ne sera donc valable que pour les solutions solides très diluées.

L'introduction d'une faute d'empilement dans un cristal contenant une impureté est une transformation à volume constant ; le développement de l'énergie en interactions de paire convient donc bien pour le calcul. D'autre part, les distances entre atomes situés dans des plans premiers voisins sont inchangées : on pourra donc utiliser la forme asymptotique de l'énergie de paire.

Pour faciliter le calcul, nous ferons deux hypothèses complémentaires :

- d'une part, nous négligerons l'effet de taille dû à l'impureté ; les atomes restent alors disposés aux noeuds de plans superposés de type A, B ou C, et le calcul ne présente pas de difficulté.
- d'autre part, nous nous placerons dans un modèle d'ions ponctuels. L'amplitude α'_{IM} de la forme asymptotique de l'énergie d'interaction entre les atomes M de la matrice, de valence Z , et l'atome d'impureté I , de valence $Z + Z'$, sera donc :

$$\alpha'_{IM} = \frac{2Z(Z+Z')}{\pi \epsilon^2 (2k_F)}$$

De même, dans cette approximation, l'amplitude de la forme asymptotique de l'énergie d'interaction entre deux atomes M de la matrice est :

$$\alpha'_{MM} = \frac{2Z^2}{\pi \epsilon^2 (2k_F)}$$

En résumé, le modèle utilisé est très approché : il néglige l'énergie d'interaction entre impuretés et l'effet de taille ; il considère le cristal comme constitué d'ions ponctuels. Ce modèle permet toutefois d'obtenir un ordre de grandeur de l'énergie d'interaction entre l'impureté et la faute, et une description qualitative de l'effet Suzuki.

2) CALCUL DE L'ENERGIE D'INTERACTION ENTRE UNE IMPURETE ET UNE FAUTE D'EMPILEMENT DANS UN CRISTAL CFC OU HC OU L'INTERACTION ENTRE PLANS EST OSCILLANTE :

Nous raisonnerons à titre d'exemple sur une faute d'empilement intrinsèque dans un cristal CFC. Pour une faute extrinsèque dans un CFC ou une faute Δ dans un HC, le raisonnement serait analogue.

La faute d'empilement translate la partie M_2 du cristal en M_{2t} , tandis que la partie M_1 est inchangée (v fig 6). Désignons par m l'atome de la matrice qui aurait la même position que l'atome d'impureté I , par m_1 tout atome quelconque de la partie M_1 autre que m . Si W_{mM_2} est la somme des énergies d'interaction de paire entre l'atome m et les atomes de la partie M_2 du cristal, l'énergie d'une faute d'empilement est :

$$E_F = (W_{mM_{2t}} - W_{mM_2}) + \sum_{m_1} (W_{m_1M_{2t}} - W_{m_1M_2})$$

D'autre part, la variation d'énergie du cristal contenant une impureté I lorsqu'on y introduit une faute d'empilement est :

$$E_F(I) = (W_{IM_{2t}} - W_{IM_2}) + \sum_{m_1} (W_{m_1M_{2t}} - W_{m_1M_2})$$

L'énergie d'interaction entre l'impureté et la faute est donc :

$$\Delta W = E_{F(I)} - E_F = (W_{IM_{2t}} - W_{IM_2}) - (W_{mM_{2t}} - W_{mM_2}) \quad (31)$$

La première expression entre parenthèses (resp la seconde) représente la variation de l'énergie d'interaction entre l'atome I (resp m) et les atomes de la partie M_2 du cristal lorsqu'on introduit une faute d'empilement. Pour les calculer, nous devons connaître la variation $\Phi'(nd)$ de l'énergie d'interaction entre un atome en position A et les atomes d'un plan A distant de nd lorsque le plan A est translaté par la faute d'empilement en un plan de

type B ou C. Nous connaissons la variation $\Psi'(nd)$ de l'énergie d'interaction par unité de surface entre deux plans de type A lorsque l'un d'eux est translaté en un plan de type B ou C :

$$\Psi'(nd) = g' \frac{\sin n \theta}{n} \quad (32)$$

où g' est l'analogie de g : il suffit dans la formule (6) de remplacer α par α' . Par la suite, le signe " ' " indiquera que nous utilisons un modèle d'ions ponctuels.

Si l'aire de la maille élémentaire des plans (111) est Ω , on en déduit immédiatement :

$$\Phi'(nd) = \Omega \Psi'(nd) \quad (33)$$

- a) CFC ; Z = 3 :

- Energie d'interaction d'une impureté de valence $3+Z'$ avec une faute d'empilement intrinsèque (v fig 6) : $\Delta W = \Omega \frac{Z'}{Z} x$

On notera $x_{(3kd-d)}$, x_{3kd} , x_{3kd+d} suivant que $z = 3kd+d$, $3kd+d$, $3kd+2d$, respectivement. De même pour ΔW .

$$x_{(3kd)} = \sum_{n=k+1}^{\infty} \left| \Psi'(3nd) - \Psi'(3nd-d) \right| \quad (34A)$$

$$x_{(3kd+d)} = x_{(3kd)} \quad (34B)$$

$$x_{(3kd+2d)} = \sum_{n=k+1}^{\infty} \Psi'(3nd) - \sum_{n=k+2}^{\infty} \Psi'(3nd-d) \quad (34C)$$

- Faute d'empilement extrinsèque :

Le calcul s'effectue de façon analogue à celui d'une faute d'empilement intrinsèque, à condition de décomposer le cristal en trois parties (v fig 7).

Si l'impureté se trouve dans le plan limitant la faute ($z=0$ en utilisant les conventions de la fig 7), on considère que la faute a été introduite en translatant les deux parties du cristal situées de part et d'autre de

la faute de deux vecteurs opposés de type \vec{b} , tandis que le plan médian contenant l'impureté est inchangé (v fig 8) : le calcul ne présente alors aucune difficulté. On obtient :

$$x_0 = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left[\Psi'(3nd) - \Psi'(3nd-d) \right] \quad (35A)$$

Puis

$$x_{(3kd+d)} = \sum_{n=k+1}^{\infty} \left[\Psi'(3nd) - \Psi'(3nd+d) \right] \quad (35B)$$

$$x_{(3kd+2d)} = -\Psi'(3kd+2d) + \sum_{n=k+1}^{\infty} \left[\Psi'(3nd) - \Psi'(3nd+d) \right] \quad (35C)$$

$$x_{(3kd+3d)} = x_{(3kd+d)} \quad (35D)$$

- b) HC ; Z = 2 : énergie d'interaction d'une impureté de valence $2+Z'$ avec une faute 1Δ (fig 9).

On a encore $\Delta W = \Omega \frac{Z'}{Z} x$, avec

$$x_{(2kd-d)} = \sum_{n=k}^{\infty} \Psi'(2nd) \quad (36)$$

$$x_{(2kd)} = 0$$

3) RESULTATS

Le calcul, bien que beaucoup plus simple, est analogue à celui des fonctions $\gamma(\theta)$ au paragraphe III.

- a) CFC

- Faute intrinsèque (v fig 6)

Tableau 14

$\frac{zi}{d}$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
$\frac{\Delta W}{Z'} (10^{-2} \text{ eV})$	3,7	3,7	-2,5	0,20	0,20	0,28	-0,19	-0,19	0,17	0,02	0,02	-0,13	0,05	0,05

- Faute extrinsèque (v fig 7 et 8)

Tableau 15

$\frac{z_e}{d}$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$\frac{\Delta W}{Z^+}(10^{-2} \text{ eV})$	+7,3	-1,7	+4,4	-1,7	+0,08	+0,03	+0,08	+1,26	-0,23	1,26	-0,06	+0,09

suite

$\frac{z_e}{d}$	12	13	14	15	16	17	18
$\frac{\Delta W}{Z^+}(10^{-2} \text{ eV})$	-0,06	-0,02	+0,03	-0,02	+0,03	-0,05	+0,03

D'après les tableaux 14 et 15, l'énergie d'interaction d'une impureté et d'une faute d'empilement présente les caractéristiques suivantes :

- elle est proportionnelle à l'excès de valence Z^+ de l'impureté par rapport à la matrice : ceci est une conséquence de l'utilisation du modèle d'ions ponctuels.
- elle est appréciable jusqu'à une distance de la faute d'empilement de l'ordre de $10d$; il s'ensuit que la concentration d'impuretés dans les plans atomiques parallèles à la faute peut varier de façon appréciable autour de sa valeur d'équilibre jusqu'à une distance d'environ $10d$. Ceci est dû à l'interaction à grande distance entre atomes, qui se traduit par la forme asymptotique de l'énergie de paire en $\frac{\cos(2k_F R)}{R^3}$.
- elle décroît de façon oscillante avec la distance de l'impureté à la faute : la concentration d'impuretés dans les plans parallèles à la faute est donc alternativement supérieure ou inférieure à la concentration d'équilibre, suivant le signe de l'énergie d'interaction.

A la température ambiante, la valeur absolue de l'énergie d'interaction est supérieure à $kT \approx \frac{1}{40} \text{ eV}$ dans les plans les plus proches de la faute, ce qui entraîne à l'équilibre des variations relatives importantes de la concentration en impuretés.

En examinant les tableaux 14 et 15, on constate que cet effet est particulièrement important pour une faute extrinsèque dans les métaux CFC, dans les plans $z = 0, \pm 2d$. L'effet reste appréciable pour une faute d'empilement intrinsèque dans les plans $z = 0, d, 2d$, et leurs symétriques par rapport au plan de la faute.

Remarquons que pour une faute intrinsèque l'énergie d'interaction est la même dans les plans $z = 0, d$ et leurs symétriques par rapport au plan de la faute.

L'énergie d'interaction entre l'impureté et la faute ayant été calculée pour une faute d'empilement infinie, il faut voir dans quelle mesure nos calculs s'appliquent aux rubans ou aux disques de faute d'empilement.

La largeur des rubans de faute d'empilement, estimée à l'aide des énergies de faute du II pour des dislocations partielles de Shockley, est inférieure à $8b$ pour le magnésium, à $5b$ pour l'aluminium, le zinc et le béryllium. Il faut alors tenir compte de l'énergie d'interaction des dislocations partielles et des impuretés. En effet, l'énergie d'interaction due à l'effet de taille décroît en $\frac{1}{r}$, où r est la distance de l'impureté à la dislocation ; sa valeur maximum, obtenue pour $r \approx \frac{2b}{3}$, est inférieure à quelques $\frac{1}{10}$ eV. L'énergie d'interaction entre une impureté et les dislocations partielles bordant la faute n'est donc pas négligeable devant l'énergie d'interaction de l'impureté et de la faute d'empilement.

De plus, les dislocations partielles bordant le ruban perturbent fortement la faute, de sorte que celle-ci n'est parfaite au mieux que dans la partie médiane du ruban : elle ne peut donc pas être assimilée à une faute infinie.

Nos résultats ne s'appliquent donc pas directement aux rubans de faute d'empilement.

Par contre, on observe après des trempes assez rapides des boucles de dislocation imparfaites bordant une faute d'empilement, dont le rayon peut atteindre quelques milliers d'Å. Le calcul s'applique alors aux impuretés situées à une distance du plan de faute faible devant ses dimensions.

Dans ce cas, si l'impureté est assez proche du centre de la faute, son énergie d'interaction W_{Id} avec la dislocation bordant la faute est négligeable devant son énergie d'interaction ΔW avec la faute d'empilement. Pour les plans proches voisins de la faute d'empilement, où ΔW est supérieur à 10^{-2} eV, ceci est réalisé dès que W_{Id} est de l'ordre de 10^{-3} eV, c'est-à-dire pour $r \approx 200$ Å. Par contre, pour que les résultats soient valables jusqu'à une

distance d'environ $10d$ de la faute (distance sur laquelle s'étend l'interaction), il faut que W_{Id} soit inférieur à 10^{-4} eV, donc r supérieur à 2000 \AA ; cette dernière condition est assez restrictive.

Nos calculs s'appliquent donc aux boucles de dislocation imparfaites bordant une faute d'empilement, mais il peut être nécessaire de tenir compte de l'énergie d'interaction de l'impureté avec la dislocation bordant la faute.

Les calculs s'appliquent, dans les mêmes conditions, aux noeuds dissociés dont le paramètre y atteint environ 100 \AA (v fig 10).

-b) HC (v fig 9).

Tableau 16

$\frac{z_{1\Delta}}{d}$		0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
$\frac{\Delta W}{Z^T}$ (10^{-2} eV)	Zn	0	4,3	0	-0,3	0	-0,4	0	0,08	0	0,15	0	-0,03	0	-0,07	0
	Mg	0	4,5	0	-0,6	0	-0,3	0	0,2	0	0,05	0	-0,11	0	négl	0
	Be	0	5,5	0	-0,8	0	-0,3	0	0,3	0	0,06	0	-0,13	0	+0,03	0

L'énergie d'interaction ΔW calculée présente les mêmes caractéristiques que dans un cristal CFC : c'est en particulier une fonction oscillante de z , de l'ordre de kT à la distance $z = d$ de la faute.

Mais l'énergie ΔW calculée est nulle dans les plans $z_{1\Delta} = 2kd$: le fait d'avoir négligé l'effet de taille conduit donc à une erreur relative trop importante dans ces plans. Une correction due à l'effet de taille, bien qu'étant probablement faible en valeur absolue, serait nécessaire.

3) EFFET SUZUKI ET PRESENTATION DE LA SUITE DES CALCULS

La notion d'énergie de liaison entre une impureté et une faute d'empilement avait déjà été introduite par Suzuki [7]. Suzuki avait considéré qu'un cristal CFC contenant une faute d'empilement était constitué de deux phases : d'une part une phase HC entourant la faute d'empilement et composée de deux plans atomiques, d'autre part la phase CFC. Pour une concentration d'impuretés

donnée, les deux phases ont une énergie libre par unité de volume différente : Suzuki en avait déduit qu'à l'équilibre thermique les concentrations d'impuretés dans les deux phases sont différentes, de façon à minimiser l'énergie libre du cristal et l'énergie de faute : il y a alors "ségrégation" des impuretés sur la faute d'empilement.

Nous comparerons nos résultats à ceux de Suzuki, d'une part en ce qui concerne l'énergie de liaison entre l'impureté et la faute, d'autre part en ce qui concerne la ségrégation des impuretés sur la faute.

Nous calculerons d'abord l'énergie de liaison entre l'impureté et la faute d'empilement dans le modèle de Suzuki : c'est la différence des énergies de dissolution d'une impureté dans la phase HC et dans la phase CFC ; Suzuki avait supposé qu'en première approximation le calcul pouvait être fait pour un cristal HC et un cristal CFC infinis. Nous comparerons le résultat obtenu à l'énergie de liaison maximum entre l'impureté et la faute dans notre modèle.

Nous calculerons ensuite, dans notre modèle et dans le modèle à deux phases, la concentration d'impuretés dans les différents plans parallèles à la faute à l'équilibre thermique et la variation de l'énergie de faute due à la répartition des impuretés de façon non homogène dans les différentes phases. Nous comparerons alors nos résultats à ceux du modèle à deux phases.

Ces résultats nous permettront de préciser le modèle à deux phases de Suzuki

5) DIFFERENCE DES ENERGIES DE DISSOLUTION D'UNE IMPURETE DANS UN CRISTAL HC INFINI ET DANS UN CRISTAL CFC INFINI (approximation de Suzuki)

Soit I l'atome d'impureté, m l'atome de la matrice qui aurait même position que I. Pour faciliter le calcul, on supposera que m est dans un plan de type A aussi bien dans le cristal HC que dans le cristal CFC (v fig 11). Désignons par h les autres atomes de la matrice dans le cristal HC ; désignons les par c dans le cristal CFC; soit W_{Ih} l'énergie d'interaction (énergie de paire) entre l'atome d'impureté I et l'atome h.

L'énergie de dissolution de l'impureté I dans le cristal HC et dans le cristal CFC est respectivement :

$$E_{D(HC)} = \sum_h (W_{Ih} - W_{mh})$$

$$E_{D(CFC)} = \sum_c (W_{Ic} - W_{mc})$$

L'énergie de dissolution que nous calculons met en jeu l'échange, avec le vide, d'un atome gazeux d'impureté contre un atome gazeux de la matrice. Le choix de cet état de référence n'a pas d'importance, car nous désirons seu-

lement obtenir une différence d'énergies de dissolution.

La différence des énergies de dissolution cherchée est donc :

$$\Delta E = E_{D(HC)} - E_{D(CFC)} = \sum_h (W_{Ih} - W_{mh}) - \sum_c (W_{Ic} - W_{mc}) \quad (37)$$

En utilisant les mêmes conventions qu'au 1) (les atomes de la matrice ont la valence Z, l'atome d'impureté a la valence Z'), on obtient dans un modèle d'ions ponctuels :

$$\Delta E = \frac{Z'}{Z} (\sum_h W_{mh} - \sum_c W_{mc})$$

Les énergies d'interaction de l'atome m avec les atomes situés dans les plans premiers voisins de celui de m sont les mêmes (v fig 11). On doit donc uniquement comparer les énergies d'interaction entre l'atome m et des atomes situés dans des plans seconds voisins ou à des distances supérieures : l'utilisation de la forme asymptotique est alors justifiée.

En sommant sur tous les plans parallèles à celui de m la différence $W_{mh} - W_{mc}$, on obtient :

$$\Delta E = 2\Omega \frac{Z'}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} \left[-\psi'(6nd+2d) + \psi'(6nd+3d) - \psi'(6nd+4d) \right] \quad (38)$$

La méthode de calcul de ΔE est indiquée dans l'appendice H.

On obtient : - pour l'aluminium :

$$\Delta E = + 0,08 Z' \text{ eV}$$

- pour le magnésium :

$$\Delta E = - 0,13 Z' \text{ eV}$$

L'énergie de liaison d'une impureté et d'une faute d'empilement est donc, dans l'approximation de Suzuki :

- pour l'aluminium (on considère la faute d'empilement comme une tranche d'HC dans un cristal CFC)

$$E_{C(HC)} - E_{D(CFC)} = \Delta E = + 0,08 Z' \text{ eV}$$

- pour le magnésium (on considère la faute d'empilement comme une tranche de CFC dans un cristal HC) :

$$E_{D(CFC)} - E_{C(HC)} = - \Delta E = + 0,13 Z' \text{ eV}$$

Le calcul plus rigoureux de l'énergie de liaison que nous avons fait donne 0,04 Z' eV pour l'aluminium, 0,045 Z' eV pour le magnésium (v tableaux 14 et 16).

L'énergie de liaison calculée dans l'approximation de Suzuki (différence des énergies de dissolution dans une phase HC et une phase CFC infinies) est donc environ double de l'énergie de liaison maximum calculée plus rigoureusement dans le modèle des interactions de paire : les deux méthodes donnent donc le même ordre de grandeur de l'énergie de liaison de l'impureté et de la faute.

6) CALCUL THERMODYNAMIQUE : VARIATION DE LA CONCENTRATION D'IMPURETES AVEC LEUR DISTANCE A LA FAUTE ; DIMINUTION DE L'ENERGIE DE FAUTE AVEC LA CONCENTRATION D'IMPURETES DANS LE CRISTAL PARFAIT . COMPARAISON DE NOTRE MODELE A CELUI DE SUZUKI :

Nous étudierons un cristal fini, symétrique par rapport à la faute d'empilement. Nous considérerons que le cristal est constitué d'un grand nombre de phases : dans chacune d'elles, l'énergie d'interaction d'une impureté et de la faute d'empilement est constante. Dans un cristal CFC, chaque phase est donc constituée d'un ou deux plans atomiques (v fig 12). Nous caractériserons chaque phase par un indice i , chaque plan atomique par un indice q .

Le calcul de la concentration d'impuretés à l'équilibre thermique dans chaque phase s'effectue facilement si on remarque que le potentiel chimique des impuretés est alors le même dans toutes les phases. Soit ϵ_i l'énergie d'interaction entre une impureté située dans la phase i et la faute. On montre dans l'appendice I que, aux températures supérieures à la température ambiante et pour des concentrations d'impuretés assez faibles, la concentration c_i d'impuretés dans la phase i est voisine de $c_\infty \exp(-\frac{\epsilon_i}{kT})$ (39) .

c_∞ est la concentration dans la phase la plus éloignée de la faute, symétrique par rapport à celle-ci : dans cette phase on peut supposer que l'énergie d'interaction entre une impureté et la faute est nulle. c_∞ peut être déterminé en écrivant que le nombre total d'impuretés dans le cristal est fixé et égal à N .

Deux approximations importantes nous ont permis de simplifier le calcul :

- d'une part nous avons supposé que l'entropie de vibration d'une impureté était la même dans tout le cristal : nous avons en particulier négligé sa variation au voisinage de la faute d'empilement.

- d'autre part, nous nous sommes placés dans l'approximation des solutions idéales : nous avons donc négligé le terme d'ordre, $c(1-c)\phi$, où ϕ est le paramètre d'interaction. Nos calculs ne s'appliqueront donc pas aux alliages dans lesquels les phénomènes d'ordre sont importants.

Rappelons qu'en outre les résultats concernant l'énergie d'interaction entre une impureté et une faute d'empilement sont uniquement valables dans les solutions solides diluées où l'effet de taille est négligeable.

Considérons maintenant l'équation (39) : comme la valeur absolue de ϵ_i est voisine de kT au voisinage immédiat de la faute, mais qu'elle devient rapidement inférieure à $\frac{kT}{10}$ lorsqu'on s'écarte de la faute, la concentration d'impuretés ne prend des valeurs nettement différentes de c_∞ qu'au voisinage immédiat de la faute : en ce qui concerne la concentration des impuretés, le cristal est donc correctement décrit par l'ensemble de quelques phases voisines de la faute, pour lesquelles (ϵ) est voisine de kT , et d'une phase $\epsilon=0$.

Nous calculerons ensuite la variation ΔF_{Suz} de l'énergie libre de la faute due à la ségrégation des impuretés sur celle-ci, c'est-à-dire la différence entre l'énergie libre $F(c_i)$ du cristal à l'équilibre thermique contenant une faute d'empilement et une concentration c_i d'impuretés dans chaque phase i , et l'énergie libre $F(c_0)$ du cristal contenant la faute d'empilement et une concentration d'impuretés uniforme c_0 . Nous utiliserons pour cela le modèle du cristal à grand nombre de phases i ; nous verrons en quoi les résultats du calcul nous permettent de simplifier ce modèle.

Si s est le nombre moyen de sites par plan du cristal parallèle à la faute, N le nombre total d'impuretés dans le cristal, c_0 la concentration uniforme d'impuretés dans le cristal, on obtient les expressions suivantes de l'énergie interne, de l'entropie et de l'énergie libre du cristal contenant des impuretés par rapport au cristal pur :

- pour une concentration uniforme c_0 :

$$E(c_0) - E_{\text{pur}} = s c_0 \sum_q \epsilon_q + N E_D$$

E_D est l'énergie de dissolution d'une impureté dans la matrice.

On rappelle que l'indice q désigne un plan atomique

$$S(c_0) - S_{\text{pur}} \approx -k N (\text{Log } c_0 - 1)$$

$$D'où $F(c_0) - F_{\text{pur}} = s c_0 \sum_q \epsilon_q + N E_D + N kT (\text{Log } c_0 - 1)$ (40)$$

- pour des concentrations c_q :

$$E(c_i) - E_{\text{pur}} = s \sum_q c_q \varepsilon_q + N E_D = s c_\infty \sum_q \varepsilon_q \exp\left(-\frac{\varepsilon_q}{kT}\right) + N E_D$$

$$\begin{aligned} S(c_i) - S_{\text{pur}} &= -k s \sum_q c_q (\text{Log } c_q - 1) \\ &= -k s c_\infty \sum_q \exp\left(-\frac{\varepsilon_q}{kT}\right) (\text{Log } c_\infty - 1 - \frac{\varepsilon_q}{kT}) \end{aligned}$$

$$\text{D'où } F(c_i) - F_{\text{pur}} = N E_D + N kT (\text{Log } c_\infty - 1) \quad (41)$$

On en déduit la variation ΔF_{Suz} de l'énergie libre de la faute due à la ségrégation des impuretés :

$$\Delta F_{\text{Suz}} = F(c_i) - F(c_o) = N kT \text{Log } \frac{c_\infty}{c_o} - s c_o \sum_q \varepsilon_q$$

Comme le nombre total d'impuretés dans le cristal est constant, et que la variation de la concentration en impuretés n'est importante que dans quelques plans voisins de la faute, c_∞ est voisin de c_o . On développe c_∞ en fonction de c_o et de $\frac{1}{p}$, où p est le nombre total de plans parallèles à la faute dans le cristal, et on obtient (appendice J) :

$$\Delta F_{\text{Suz}} = -s c_o kT \sum_q \left[\exp\left(-\frac{\varepsilon_q}{kT}\right) - \left(1 - \frac{\varepsilon_q}{kT}\right) \right] \quad (42)$$

On en déduit la variation de l'énergie libre par unité de surface de la faute :

$$\Delta \Gamma = \frac{\Delta F_{\text{Suz}}}{s \Omega} = -c_o \frac{kT}{\Omega} \sum_q \left[\exp\left(-\frac{\varepsilon_q}{kT}\right) - \left(1 - \frac{\varepsilon_q}{kT}\right) \right] \quad (43)$$

où Ω est l'aire de la maille élémentaire dans les plans parallèles à la faute.

Remarquons qu'aux températures T assez importantes pour que kT soit très supérieur à tous les ε_q , $\Delta \Gamma$ varie proportionnellement à $\frac{1}{T}$.

Le calcul de $\Delta \Gamma$ a été effectué à la température ordinaire (20°C), et à une température d'environ 130°C , pour des impuretés de valence 2. On obtient :

- pour une faute intrinsèque :

$$\text{à } T \approx 300^\circ \text{ K} \quad \Delta F \text{ (erg/cm}^2\text{)} \approx - 460 c_o \quad (44A)$$

$$\text{à } T \approx 400^\circ \text{ K} \quad \Delta F \text{ (erg/cm}^2\text{)} \approx - 310 c_o \quad (44B)$$

- pour une faute extrinsèque :

$$\text{à } T \approx 300^\circ \text{ K} \quad \Delta F \text{ (erg/cm}^2\text{)} \approx - 1240 c_o \quad (45A)$$

$$\text{à } T \approx 400^\circ \text{ K} \quad \Delta F \text{ (erg/cm}^2\text{)} \approx - 690 c_o \quad (45B)$$

Lorsque la température augmente, la ségrégation des impuretés sur la faute est moins importante : c'est pourquoi la variation de l'énergie de faute est alors plus faible qu'à la température ambiante.

Les résultats obtenus nous permettent d'estimer la variation de l'énergie de faute due à l'effet Suzuki pour les concentrations habituelles d'impuretés dans un cristal. Pour une concentration d'impuretés d'environ 1 % (concentration importante dans le cas de nos calculs, qui négligent l'énergie d'interaction entre impuretés), on obtient ΔF de l'ordre de 3 à 4 erg/cm² pour une faute intrinsèque, une dizaine d'erg/cm² pour une faute extrinsèque. Ces variations sont faibles par rapport à l'énergie de faute dans l'aluminium.

ΔF s'obtient en effectuant dans l'expression (43) la sommation sur l'ensemble des phases. Voyons à partir de quel nombre de termes on peut considérer que la série a atteint sa valeur limite. Ceci indiquera le nombre de phases nécessaire pour décrire le cristal. On a vu qu'après quelques plans atomiques, $|\epsilon_q|$ devient inférieur à $\frac{kT}{10}$ environ, donc les termes de la somme deviennent voisins de $\frac{q}{kT} \approx \frac{1}{100}$; on s'attend donc à une convergence rapide. Nous avons calculé les valeurs successives de ΔF en fonction du nombre de phases auxquelles nous étendons la somme, pour une impureté de valence 2 dans l'aluminium à 300° K (tableau 17).

Tableau 17

- Faute intrinsèque :

nombre de phases	valeurs de ε pour chaque phase (10^{-2} eV)	$\Delta\Gamma$ (erg/cm ²)	écart relatif par rapport à la valeur limite
2	- 3,7; 0	- 425 c_0	10 %
3	- 3,7; 2,5; 0	- 465 c_0	moins de 0,2 %
11	- 3,7; 2,5; -0,2; -0,3; 0,2; -0,2; - 0,02 0	- 465 c_0	

- Faute extrinsèque :

nombre de phases	valeurs de ε pour chaque phase (10^{-2} eV)	$\Delta\Gamma$ (erg/cm ²)	écart relatif par rapport à la valeur limite
2	- 7,3; 0	- 848 c_0	50 %
3	- 7,3; 1,7; 0	- 890 c_0	40 %
4	- 7,3; 1,7; -4,4; 0	- 1239 c_0	moins de 0,1 %
10	- 7,3; 1,7; -4,4; -0,08; -0,03; - 1,3; 0,2; 0,06 0	- 1239 c_0	

Ainsi, en considérant (outre la phase où $\varepsilon = 0$) les phases où $|\varepsilon|$ est voisin de kT (soit deux phases pour une faute intrinsèque, trois phases pour une faute extrinsèque), on obtient la valeur de $\Delta\Gamma$ à moins de 0,2 % près, alors qu'un modèle à deux phases donne un écart de 10 % dans un cas et de 50 % dans l'autre.

Ces résultats sont à rapprocher de ceux que nous avons obtenus pour

la concentration : nous avons trouvé aussi que celle-ci variait fortement dans les phases où $|e| \sim kT$. On peut donc conclure en disant que le modèle à deux phases est assez grossier : il l'est pour fournir la variation de l'énergie de faute, et il l'est encore plus pour décrire la variation de la concentration d'impuretés au voisinage de la faute. Nous avons trouvé qu'il fallait trois ou quatre phases selon le cas pour décrire le cristal.

7) CONSEQUENCE PHYSIQUE : LIMITE ELASTIQUE

Cette variation de l'énergie de faute d'empilement avec la concentration en impuretés permet de calculer, dans des alliages où le facteur de taille et l'ordre local sont négligeables, la variation de la limite élastique avec la concentration. En effet, une dislocation dissociée sur laquelle il y a eu ségrégation d'impuretés possède une énergie de faute inférieure à sa valeur dans le reste du cristal. La contrainte nécessaire à son déplacement est donc plus grande que si la concentration d'impuretés était uniforme.

Soit $\{c_i\}$ l'ensemble des concentrations d'impuretés dans les portions de plan parallèles à la faute, ces portions étant délimitées par rapport au reste du cristal comme l'indique la figure 13A. c_0 est la concentration dans le reste du cristal. On désignera par $\Gamma(c_i)$ l'énergie de la faute après ségrégation d'impuretés, $\Gamma(c_0)$ l'énergie qu'elle aurait dans le reste du cristal. Lorsque les dislocations partielles bordant la faute se sont toutes deux déplacées (v fig 13A et B), la contrainte nécessaire au déplacement ultérieur de la dislocation dissociée est $\frac{\Gamma(c_0) - \Gamma(c_i)}{b}$ ([7], [23]), expression qu'on obtient en considérant les forces s'exerçant sur les deux dislocations partielles.

Nous avons vu que, pour une faible concentration c_0 d'impuretés, $\Gamma(c_i)$ était une fonction linéaire de c_0 . Il en est évidemment de même de $\Gamma(c_0)$. Nous obtenons donc ce résultat assez trivial : aux faibles concentrations d'impuretés, la limite élastique croît linéairement avec la concentration. Ceci n'est évidemment plus valable aux fortes concentrations, pour lesquelles intervient l'énergie d'interaction entre impuretés.

8) COMPARAISON A L'EXPERIENCE

Les seuls exemples d'alliages où on pense avoir observé un effet Suzuki sont des alliages comprenant des métaux nobles ou même des métaux de transition (Al Ag : [25], Ag Cu, Ag Au et Au Cu : [24] par exemple ; Cu Ni : d'après [7]). Or le modèle de l'énergie de paires que nous avons utilisé dans nos calculs n'est pas valable pour ces métaux. Nous ne pourrions donc comparer que qualitativement nos résultats aux résultats expérimentaux, et nous nous

bornerons aux alliages comportant uniquement des métaux normaux ou nobles.

Remarquons que l'effet de valence ne suffit pas, à lui seul, pour expliquer l'effet Suzuki : on observe en effet un effet Suzuki dans l'alliage de métaux nobles Ag Au, où la différence de valence entre le soluté et la matrice est nulle.

Un exemple d'observation de l'effet Suzuki est fourni par la solution solide sursaturée Al 16 % Ag [25], pour laquelle l'effet de taille est peut important : il y a nucléation du précipité γ' , plus riche en Ag, aux fautes d'empilement formées par trempe ; au cours du vieillissement, les fautes d'empilement s'enrichissent en argent, et ceci est attribué à la ségrégation des atomes d'argent sur la faute d'empilement (effet Suzuki). Il se forme alors une phase HC stable à partir de la solution solide CFC sursaturée.

Cet exemple ne permet pas une comparaison quantitative avec nos résultats, car la concentration des atomes d'argent est trop importante pour que nous puissions négliger leur énergie d'interaction. Par contre, il montre la ségrégation des impuretés sur la faute d'empilement contenues dans les boucles de trempe.

Ceci est l'analogie de la précipitation des lacunes sur les fautes d'empilement, qui permet de nucléer une nouvelle faute sur une faute préexistante et explique l'apparition après trempe de boucles de dislocation multiples bordant des fautes d'empilement dans l'aluminium.

9) APPLICATION AUX LACUNES : NUCLEATION D'UNE FAUTE D'EMPILEMENT SUR UNE FAUTE PREEXISTANTE

Le calcul de l'énergie d'interaction entre une lacune et une faute d'empilement permet, comme pour les impuretés, de prévoir la concentration de lacunes à l'équilibre thermique dans les différents plans parallèles à la faute : l'énergie d'interaction entre une lacune et une faute d'empilement intrinsèque est négative, minimum et égale à $-11,1 \cdot 10^{-2}$ eV à une distance $z = 0$ et $z = d$ de la faute (v fig 14) ; la concentration de lacunes devrait donc être maximum dans ces deux plans. Une faute d'empilement peut alors être formée par coalescence des lacunes dans l'un de ces plans. Or les lacunes ne peuvent pas coalescer dans le plan $z = 0$, car deux plans de type c seraient alors superposés et leur énergie serait trop importante. Les lacunes ne peuvent donc coalescer que dans le plan $z = d$. L'arrangement obtenu est reproduit dans la fig 15 (identique à la figure 7a de [16]).

On observe maintenant, à l'intérieur de la boucle de Franck initiale,

une seconde boucle de dislocation bordant une faute d'empilement extrinsèque. C'est justement ce qu'ont observé différents expérimentateurs après trempe dans l'aluminium ([16] et [17]). L'énergie de liaison existant entre les lacunes et la faute au voisinage immédiat de la faute permet donc d'expliquer la nucléation d'une seconde faute d'empilement intrinsèque au-dessus d'une faute préexistante, et elle prévoit qu'on obtient dans la partie commune aux deux boucles de dislocation une faute d'empilement extrinsèque.

Nous avons vu d'autre part que l'énergie d'une faute extrinsèque était voisine de celle d'une faute intrinsèque : ceci explique la croissance de la faute extrinsèque ainsi créée.

Le modèle d'interaction de paires permet donc, dans l'aluminium, d'expliquer l'observation de deux boucles de dislocation superposées bordant une faute d'empilement.

Il explique aussi, comme nous allons le voir, l'existence de trois boucles de dislocation superposées, dont deux bordent une faute d'empilement.

En effet, l'énergie d'interaction entre une lacune et une faute d'empilement extrinsèque est négative, minimum et égale à $-21,9 \cdot 10^{-2}$ eV à une distance $z = 0$ du plan "médian" de la faute (v fig 16) : la concentration de lacunes à l'équilibre thermique sera donc maximum dans ce plan ; les lacunes en coalescant dans ce plan suppriment la faute d'empilement (ce qui constitue un gain d'énergie appréciable). Ceci permet d'expliquer la nucléation d'une troisième boucle de dislocation ne bordant pas de faute d'empilement au-dessus de la faute extrinsèque de la fig 16. Cette boucle peut croître facilement, car elle réduit alors la faute et diminue l'énergie du cristal. On obtient donc la configuration de la fig 17, comportant trois boucles de dislocation superposées (fig prise dans [26]). Ceci coïncide exactement avec les observations des expérimentateurs [26].

En conclusion, le calcul de l'énergie d'interaction entre une lacune et une faute d'empilement, et celui de l'énergie de faute, effectués à l'aide du modèle d'interactions de paire, permettent d'expliquer la nucléation et la croissance des boucles de dislocation superposées bordant des fautes d'empilement dans l'aluminium ; ceci est parfaitement conforme aux résultats expérimentaux, bien que nous ayons négligé l'effet de taille.

CONCLUSION

Le développement de l'énergie totale d'un métal normal, non noble, sous la forme (1) d'une somme d'énergies d'interaction entre paires d'atomes convient bien au calcul de l'énergie d'interaction entre une impureté et une faute d'empilement dans un cristal CFC, si on néglige l'effet de taille. Le calcul permet de préciser l'état d'un cristal contenant une faute d'empilement et des impuretés : il y a ségrégation des impuretés sur la faute (effet Suzuki), ce qui entraîne une diminution de l'énergie de faute. On peut considérer le cristal comme étant constitué de plusieurs phases parallèles à la faute, chacune d'elles étant caractérisée par une valeur ϵ_i de l'énergie d'interaction entre l'impureté et la faute ; la concentration d'impuretés dans la phase i sera $c_i = c_\infty \exp(-\frac{\epsilon_i}{kT})$. Nous avons montré qu'il suffit de se limiter à deux ou trois phases voisines de la faute, celles qui sont caractérisées par une énergie d'interaction telle que (ϵ_i) soit de l'ordre de kT , et à la phase $\epsilon = 0$ comprenant le reste du cristal ; en même temps, nous avons fait apparaître le caractère approché du modèle à deux phases utilisé par Suzuki.

Le modèle s'applique aux lacunes : il permet d'expliquer la formation de deux ou trois boucles de dislocation superposées contenant une faute d'empilement après trempe dans l'aluminium : chaque nouvelle boucle se formerait par précipitation de lacunes sur une faute préexistante, puis par coalescence de ces lacunes dans un plan (111) parallèle à la faute. La configuration prévue par le calcul de l'énergie d'interaction entre une lacune et la faute et par le calcul des énergies de faute est en parfait accord avec la configuration déduite de l'expérience.

APPENDICE A

- Calcul du plus petit module des vecteurs du réseau réciproque du réseau plan.

Dans une phase HC les vecteurs de base du réseau plan ont un module a . Les vecteurs du réseau réciproque qui ont un module minimum λ_0 se déduisent de $\vec{\lambda}_1$ ou $\vec{\lambda}_2$ par des rotations de $\frac{2\pi}{3}$ autour de 0 (v fig 18). Ils ont un module

$$\lambda_0 = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}}$$

- Calcul du rayon de la sphère de Fermi dans le modèle d'électrons libres :

$$k_F = (3\pi^2 \frac{Z}{v})^{\frac{1}{3}}$$

où v est le volume atomique.

La structure HC contient deux atomes par maille. Or la maille élémentaire, qui est un prisme de hauteur c construit sur la maille élémentaire du réseau plan (v fig 19), a pour volume $a^2 c \frac{\sqrt{3}}{2}$. Le volume atomique est donc $v = a^2 c \frac{\sqrt{3}}{4}$ ou, en posant $\frac{c}{a} = y$, $v = a^3 y \frac{\sqrt{3}}{4}$.

$$\text{D'où } k_F^3 = \frac{4\sqrt{3}\pi^2 Z}{y a^3}$$

La valeur de Z telle que $\lambda_0 = 2k_F$ (soit $\lambda_0^3 = \frac{k_F^3}{8}$) est donc $Z_c = \frac{2\pi}{9} y$.

APPENDICE B

Les fonctions $\gamma(\theta)$ peuvent être calculées à partir des fonctions de période 2π suivantes :

$$\alpha_1(\theta) = \sum_1^\infty \frac{\sin n\theta}{n} = \frac{\pi - \theta}{2} \quad 0 < \theta < 2\pi$$

$$\beta_1(\theta) = \sum_1^\infty \frac{\cos n\theta}{n} = -\text{Log } 2 \left| \sin \frac{\theta}{2} \right|$$

$$\alpha_2(\theta) = \sum_1^\infty \frac{\sin n\theta}{n^2} = \theta\beta_1(\theta) + 2 \int_0^{\frac{\theta}{2}} \frac{\psi \, d\psi}{\text{tg } \psi}$$

$$\beta_2(\theta) = \sum_1^\infty \frac{\cos n\theta}{n^2} = \frac{\theta^2}{4} - \frac{\theta\pi}{2} + \frac{\pi^2}{6} \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi$$

Le calcul sur machine de $\alpha_2(\theta)$ s'effectue en développant l'intégrale $\int_0^{\frac{\theta}{2}} \frac{\psi \, d\psi}{\text{tg } \psi}$ en série d'Euler-Maclaurin à l'aide des polynômes de Bernouilli.

APPENDICE C

1) Erreur relative sur Γ provenant du terme $\frac{\Delta T}{T}$

$$T \approx 400^\circ \text{ K} \quad \Delta T \approx 0,1^\circ \text{ K} \quad |11|$$

$$\Delta T \approx 10^\circ \text{ K} \quad |10|$$

Le terme $\frac{\Delta T}{T}$ est toujours faible.

2) Erreur sur Γ provenant de la différence entre la température de recuit de la boucle parfaite et celle de la boucle imparfaite : cette différence provient à la fois de l'erreur de mesure de la température et des inhomogénéités possibles de la température de l'échantillon.

Si la température de recuit de la boucle parfaite est $T' \neq T$ température de recuit de la boucle imparfaite, l'équation (17) s'écrit :

$$\frac{1}{2\alpha b} \frac{dR_p^2}{dt} = - A_p \exp\left(-\frac{U_D}{kT'}\right) \quad (17')$$

En comparant les équations (17') et (15'), on obtient :

$$\Gamma = \frac{kT'}{B^2} \text{ Log} \left| 2\alpha b \frac{A_p}{A_F} \frac{\frac{dR_c}{dt}}{\frac{dR_p}{dt}} \right| + \frac{k(T-T')}{B^2} \text{ Log} \left| \frac{1}{A_F} \frac{dR_c}{dt} \right|$$

Le deuxième terme est, au signe près, l'erreur faite sur Γ quand on suppose que $T' = T$.

En utilisant les données de Tartour et Washburn |11|, on trouve :

- mesure de Tartour et Washburn |11| $\Delta\Gamma = 0,7 \text{ erg/cm}^2$

négligeable devant $\Gamma = 110 \text{ erg/cm}^2$

- mesure de Dobson, Goodhew et Smallman |10| : $\Delta\Gamma \approx 70 \text{ erg/cm}^2$

important par rapport à $\Gamma = 135 \text{ erg/cm}^2$



APPENDICE D

$$\Gamma = \frac{kT}{B^2} \text{Log} \left| 2\alpha b \frac{A_p}{A_F} \cdot \frac{\frac{dR_c}{dt}}{\frac{dR_p}{dt}} \right| \quad (18)$$

Si on néglige l'erreur sur la température ,

$$\frac{\Delta\Gamma}{\Gamma} \approx \frac{kT}{\Gamma B^2} \left(\frac{\Delta \left(\frac{A_p}{A_F} \right)}{\frac{A_p}{A_F}} + \frac{\Delta \left(\left| \frac{dR_c}{dt} \right| \right)}{\left| \frac{dR_c}{dt} \right|} + \frac{\Delta \left(\left| \frac{dR_p^2}{dt} \right| \right)}{\left| \frac{dR_p^2}{dt} \right|} \right)$$

Evaluation des différentes erreurs :

- On suppose généralement que le rapport $\frac{A_p}{A_F}$ est égal à 1 ; or ceci n'est vrai qu'en première approximation ; on peut estimer que l'erreur relative introduite est de l'ordre de $\frac{1}{4}$.

- Dobson, Goodhew et Smallman [10] estiment que l'erreur relative sur $\left| \frac{d(R_p^2)}{dt} \right|$ est d'environ $\frac{1}{4}$. L'erreur faite par Tartour et Washburn [11] doit être aussi importante, car leurs courbes $R_p^2(t)$ tracées à différentes températures ne comportent que deux ou trois points.

- on néglige $\frac{\Delta \left(\left| \frac{dR_c}{dt} \right| \right)}{\left| \frac{dR_c}{dt} \right|}$ devant les autres termes.

$$\text{D'où } \frac{\Delta\Gamma}{\Gamma} \approx \frac{1}{2} \frac{\Gamma B^2}{kT}$$

Pour la mesure de Γ faite par Tartour et Washburn [11] ($\Gamma \approx 110 \text{ erg/cm}^2$, $T \approx 350^\circ \text{ K}$) : $\frac{\Delta\Gamma}{\Gamma} \approx \frac{1}{3}$.

APPENDICE E

Calcul de l'énergie de deux plans de macles distants de $3kd+d$ (v fig 20)

Le cristal peut être décomposé en trois régions, l'une d'elles étant comprise entre les deux plans de macle et les deux autres étant situées de part et d'autre des défauts (v fig).

L'arrangement ... ABCABC ... des plans dans le cristal parfait ayant la période $3d$, la variation de l'énergie d'interaction entre plans appartenant chacun à une région déterminée du cristal sera la même lorsque leur distance augmentera de $3nd$, n étant un nombre entier. On peut donc tout d'abord associer les régions du cristal deux à deux et obtenir une formule générale donnant la variation de leur énergie d'interaction :

- Variation de l'énergie d'interaction 1.2

C'est la somme des variations des énergies d'interaction entre plans.

- plans distants de $3nd-d$

modification des positions respectives des plans	variation de leur énergie d'interaction
---	--

AC → AB

0

CB → CC

$$-\sum_1^k n \Psi(3nd-d) - \sum_{k+1}^{\infty} k \Psi(3nd-d)$$

BA → BA

0

D'où $\Delta W_{12}(3nd-d) = -\sum_1^k n \Psi(3nd-d) - \sum_{k+1}^{\infty} k \Psi(3nd-d)$

- plans distants de $3nd$:

AA → AA

0

CC → CB

$$\sum_1^k n \Psi(3nd) + \sum_{k+1}^{\infty} k \Psi(3nd)$$

BB → BC

"

D'où $\Delta W_{12}(3nd) = 2 \sum_1^k n \Psi(3nd) + 2 \sum_{k+1}^{\infty} k \Psi(3nd)$

- plans distants de $3nd+d$

$$AB \rightarrow AC \quad 0$$

$$CA \rightarrow CA \quad 0$$

$$BC \rightarrow BB \quad - \sum_1^k n \Psi(3nd+d) - \sum_{k+1}^{\infty} k \Psi(3nd+d)$$

$$D'où \Delta W_{12}(3nd+d) = - \sum_1^k n \Psi(3nd+d) - \sum_{k+1}^{\infty} k \Psi(3nd+d)$$

- Variation de l'énergie d'interaction 2.3. :

$$\text{On montre que } \Delta W_{23} = \Delta W_{12}$$

- Variation de l'énergie d'interaction 1.3. :

De la même façon, on montre que

$$\Delta W_{13}(3nd-d) = - 2 \sum_{k+1}^{\infty} (n-k) \Psi(3nd-d) - \sum_{k+1}^{\infty} (n-k-1) \Psi(3nd-d)$$

$$\Delta W_{13}(3nd) = 3 \sum_{k+1}^{\infty} (n-k) \Psi(3nd)$$

$$\Delta W_{13}(3nd+d) = 0$$

D'où la variation totale de l'énergie d'interaction entre plans dans le cristal:

$$\begin{aligned} \gamma_{mm}(3kd+d) &= 2\Delta W_{12} + \Delta W_{13} \\ &= \sum_1^k \left[- 2n \Psi(3nd-d) + 4n \Psi(3nd) - 2n \Psi(3nd+d) \right] \\ &\quad + \sum_{k+1}^{\infty} \left[- (3n-k-1) \Psi(3nd-d) + (3n+k) \Psi(3nd) - 2k \Psi(3nd+d) \right] \end{aligned}$$

On vérifie que, pour $k = 0$, on obtient bien l'énergie d'une faute d'empilement intrinsèque.

APPENDICE F

Pour calculer les sommes infinies intervenant dans le calcul de $\gamma_{mm}(\theta)$ et $\gamma_{ii}(\theta)$, on utilise les résultats suivants :

$$1) \sum_1^{\infty} \frac{\sin 3n\theta}{3n} = \frac{\alpha_1(3\theta)}{3}$$

$$\sum_1^{\infty} \frac{\sin(3n-1)\theta}{3n-1} = \frac{1}{2} \left[\alpha_1(\theta) - \frac{\alpha_1(3\theta)}{3} \right] - \frac{\sqrt{3}}{6} \left[\beta_1\left(\theta + \frac{4\pi}{3}\right) - \beta_1\left(\theta + \frac{2\pi}{3}\right) \right]$$

$$\sum_1^{\infty} \frac{\sin(3n-2)\theta}{3n-2} = \frac{1}{2} \left[\alpha_1(\theta) - \frac{\alpha_1(3\theta)}{3} \right] + \frac{\sqrt{3}}{6} \left[\beta_1\left(\theta + \frac{4\pi}{3}\right) - \beta_1\left(\theta + \frac{2\pi}{3}\right) \right]$$

$$\sum_1^{\infty} \left[-\frac{\sin(3n-2)\theta}{3n-2} - \frac{\sin(3n-1)\theta}{3n-1} + 2 \frac{\sin 3n\theta}{3n} \right] = \alpha_1(3\theta) - \alpha_1(\theta) = f(\theta)$$

$$\begin{aligned} \text{où } f(\theta) &= -\theta & 0 < \theta < \frac{2}{3} \\ &= (\pi - \theta) & \frac{2\pi}{3} < \theta < \frac{4\pi}{3} \\ &= (2\pi - \theta) & \frac{4\pi}{3} < \theta < 2\pi \end{aligned}$$

$$2) \sum_1^{\infty} \frac{\sin 3n\theta}{(3n)^2} = \frac{1}{9} \alpha_2(3\theta)$$

$$\sum_1^{\infty} \frac{\sin(3n-1)\theta}{(3n-1)^2} = \frac{1}{2} \left[\alpha_2(\theta) - \frac{\alpha_2(3\theta)}{9} \right] - \frac{\sqrt{3}}{6} \left[\beta_2\left(\theta + \frac{4\pi}{3}\right) - \beta_2\left(\theta + \frac{2\pi}{3}\right) \right]$$

$$\sum_1^{\infty} \frac{\sin(3n-2)\theta}{(3n-2)^2} = \frac{1}{2} \left[\alpha_2(\theta) - \frac{\alpha_2(3\theta)}{9} \right] + \frac{\sqrt{3}}{6} \left[\beta_2\left(\theta + \frac{4\pi}{3}\right) - \beta_2\left(\theta + \frac{2\pi}{3}\right) \right]$$

$$\text{Posons } \Psi^*(nd) = \frac{\sin n\theta}{n^2} = \frac{\Psi(nd)}{g}$$

Pour calculer γ_{mm} et γ_{ii} , on pose :

$$. A = \sum_1^{\infty} \left[\Psi^* (3nd-d) + \Psi^* (3nd) - 2\Psi^* (3nd+d) \right]$$

$$= 2\sin \theta + \frac{1}{2} \left[\alpha_2 \left(\theta + \frac{2\pi}{3} \right) + \alpha_2 \left(\theta + \frac{4\pi}{3} \right) \right] - \frac{\sqrt{3}}{2} \left[\beta_2 \left(\theta + \frac{4\pi}{3} \right) - \beta_2 \left(\theta + \frac{2\pi}{3} \right) \right]$$

$$. B = \sum_1^{\infty} \left[- 2 \Psi^* (3nd-d) + \Psi^* (3nd) + \Psi^* (3nd+d) \right]$$

$$= - \sin \theta + \frac{1}{2} \left[\alpha_2 \left(\theta + \frac{2\pi}{3} \right) + \alpha_2 \left(\theta + \frac{4\pi}{3} \right) \right] + \frac{\sqrt{3}}{2} \left[\beta_2 \left(\theta + \frac{4\pi}{3} \right) - \beta_2 \left(\theta + \frac{2\pi}{3} \right) \right]$$

$$. C = \sum_1^{\infty} \left[- \Psi^* (3nd-d) + 2 \Psi^* (3nd) - \Psi^* (3nd+d) \right]$$

$$= \sin \theta + \alpha_2 \left(\theta + \frac{2\pi}{3} \right) + \alpha_2 \left(\theta + \frac{4\pi}{3} \right)$$

$$. \gamma_{mm1} = \sum_1^{\infty} \left[3n \Psi^* (3nd) - (3n-1) \Psi^* (3nd-d) \right]$$

$$= \frac{1}{2} f(\theta) + \frac{\sqrt{3}}{6} \left[\beta_1 \left(\theta + \frac{4\pi}{3} \right) - \beta_1 \left(\theta + \frac{2\pi}{3} \right) \right]$$

$$. \beta = \sum_1^{\infty} \left[3n \Psi^* (3nd) - (3n+1) \Psi^* (3nd+d) \right]$$

$$= \sin \theta + \frac{1}{2} f(\theta) - \frac{\sqrt{3}}{6} \left[\beta_1 \left(\theta + \frac{4\pi}{3} \right) - \beta_1 \left(\theta + \frac{2\pi}{3} \right) \right]$$

On obtient :

$$\gamma_{mm} (3kd+d) = \sum_{n=1}^k \left[(n-k-1) \Psi^* (3nd-d) + (n-k) \Psi^* (3nd) - 2(n-k) \Psi^* (3nd+d) \right]$$

$$+ \lambda_{mm1} + kA$$

$$\gamma_{mm} (3kd) = \sum_{n=1}^{k-1} \left[- 2(n-k) \Psi^* (3nd-d) + 4(n-k) \Psi^* (3nd) - 2(n-k) \Psi^* (3nd+d) \right]$$

$$+ 2 k C$$

$$\gamma_{mm} (3kd-d) = \sum_{n=1}^{k-1} \left[- 2(n-k) \Psi^* (3nd-d) + (n-k) \Psi^* (3nd) + (n-k-1) \Psi^* (3nd+d) \right]$$

$$+ \beta + k B.$$

$$\gamma_{ii}(3kd+d) = \sum_{n=1}^k \left[-(6n-6k-4) \Psi^*(3nd-d) + (3n-3k-1) \Psi^*(3nd) + (3n-3k) \Psi^*(3nd+d) \right] + \beta + (3k+1) B$$

$$\gamma_{ii}(3kd) = \sum_{n=1}^k \left[-(6n-6k-2) \Psi^*(3nd-d) + (3n-3k) \Psi^*(3nd) \right] + \sum_{n=1}^{k-1} \left[(3n-3k+1) \Psi^*(3nd+d) \right] + \beta + 3k B$$

$$\gamma_{ii}(3kd-d) = \sum_{n=1}^{k-1} \left[-(6n-6k) \Psi^*(3nd-d) + (3n-3k+1) \Psi^*(3nd) + (3n-3k+1) \Psi^*(3nd+d) \right] + \beta + (3k-1) B$$

Les sommes finies intervenant dans l'expression de γ_{mm} et γ_{ii} se calculent facilement à la machine.

APPENDICE G

Pour calculer les sommes infinies intervenant dans le calcul de γ_{11} , on utilise les égalités suivantes :

$$\sum_1^{\infty} \frac{\sin 2n \theta}{2n} = \frac{1}{2} \left[\alpha_1(\theta) + \alpha_1(\theta+\pi) \right]$$

$$\sum_1^{\infty} \frac{\sin (2n-1)\theta}{2n-1} = \frac{1}{2} \left[\alpha_1(\theta) - \alpha_1(\theta+\pi) \right]$$

$$\sum_1^{\infty} \frac{\sin 2n \theta}{(2n)^2} = \frac{1}{2} \left[\alpha_2(\theta) + \alpha_2(\theta+\pi) \right]$$

$$\sum_1^{\infty} \frac{\sin (2n-1) \theta}{(2n-1)^2} = \frac{1}{2} \left[\alpha_2(\theta) - \alpha_2(\theta+\pi) \right]$$

On obtient :

$$\begin{aligned} \gamma_{11}(2kd-d) &= \sum_1^k (n-k) \Psi^*(2nd-d) + \frac{1}{4} \alpha_1(\theta) + \frac{3}{4} \alpha_1(\theta+\pi) \\ &+ \frac{2k-1}{4} \left[\alpha_2(\theta) - \alpha_2(\theta+\pi) \right] \end{aligned}$$

$$\gamma_{11}(2kd) = 2 \sum_1^k \left[(n-k) \Psi^*(2nd) \right] + k \left[\alpha_2(\theta) + \alpha_2(\theta+\pi) \right]$$

$$2 \Omega \left[-\Psi(2\theta) + \Psi(3\theta) - \Psi(4\theta) \right]$$

La différence des énergies d'interaction de l'atome m avec les plans du cristal HC et du cristal CFC respectivement est donc, en tenant compte de la périodicité 5 dans l'empilement relatif des plans,

$$\sum_h W_{mh} - \sum_c W_{mc} = 2 \Omega \sum_{n=0}^{\infty} \left[-\Psi(6nd+2d) + \Psi(6nd+3d) - \Psi(6nd+4d) \right]$$

$$\text{D'où } \Delta E = 2 \Omega \frac{Z'}{Z} \sum_{n=0}^{\infty} \left[-\Psi(6nd+2d) + \Psi(6nd+3d) - \Psi(6nd+4d) \right]$$

$$= 2 \Omega \frac{Z'}{Z} g' \sum_{n=0}^{\infty} \left[-\frac{\sin(3n+1)2\theta}{4(3n+1)^2} + \frac{\sin(2n+1)3\theta}{9(2n+1)^2} - \frac{\sin(3n+2)2\theta}{4(3n+2)^2} \right]$$

En utilisant les sommes des séries infinies définies dans les appendices D et E, on obtient :

$$\Delta E = 2 \Omega \frac{Z'}{Z} g' \left[-\frac{\alpha_2(2\theta)}{4} + \frac{\alpha_2(3\theta)}{9} \right]$$

APPENDICE I

A l'équilibre thermodynamique le potentiel chimique est le même dans toutes les phases.

Or l'enthalpie libre G_i par site dans la phase i est, par rapport à l'enthalpie libre du cristal pur G_i^* ,

$$\begin{aligned} G_i - G_i^* &= c_i (E_D + \epsilon_i) - T \Delta S_{\text{mélange}} \\ &= c_i (E_D + \epsilon_i) + kT \left[c_i \text{Log } c_i + (1-c_i) \text{Log } (1-c_i) \right] \end{aligned}$$

où c_i est la concentration d'impuretés dans la phase i

- E_D est l'énergie de dissolution d'une impureté dans le cristal parfait

- ϵ_i est l'énergie d'interaction de l'impureté et de la faute d'empilement dans la phase i .

On a négligé la différence des entropies de vibration de l'impureté dans la phase i et dans le cristal parfait. On a d'autre part supposé le terme d'ordre négligeable.

On en déduit :

$$\mu_i = \frac{\partial G_i}{\partial c_i} = E_D + \epsilon_i + kT \text{Log } \frac{c_i}{1-c_i}$$

Ecrivons qu'à l'équilibre thermodynamique les potentiels chimiques des phases i et $i+1$ sont égaux (v fig 21) :

$$E_D + \epsilon_i + kT \text{Log } \frac{c_i}{1-c_i} = E_D + \epsilon_{i+1} + kT \text{Log } \frac{c_{i+1}}{1-c_{i+1}}$$

$$\text{D'où } kT \text{Log } \frac{c_i}{1-c_i} \cdot \frac{1-c_{i+1}}{c_{i+1}} = \epsilon_{i+1} - \epsilon_i$$

$$\frac{c_i}{1-c_i} = \frac{c_{i+1}}{1-c_{i+1}} \exp \left(- \frac{\epsilon_i - \epsilon_{i+1}}{kT} \right) \quad (1)$$

Soit c_∞ la concentration dans la phase la plus éloignée de la faute d'empilement, où l'énergie d'interaction ϵ_∞ est voisine de 0 : en appliquant la relation (1) de proche en proche aux différentes phases du cristal,

on obtient :

$$\frac{c_i}{1-c_i} = \frac{c_\infty}{1-c_\infty} \exp\left(-\frac{\epsilon_i}{kT}\right)$$

comme c_∞ est $\ll 1$,

$$\frac{c_i}{1-c_i} \approx c_\infty \exp\left(-\frac{\epsilon_i}{kT}\right) \text{ d'où } c_i = \frac{c_\infty \exp\left(-\frac{\epsilon_i}{kT}\right)}{1+c_\infty \exp\left(-\frac{\epsilon_i}{kT}\right)}$$

Aux températures supérieures à la température ambiante et pour des concentrations d'impureté c_∞ assez faibles, $c_\infty \exp\left(-\frac{\epsilon_i}{kT}\right)$ est petit devant 1, et $c_i \approx c_\infty \exp\left(-\frac{\epsilon_i}{kT}\right)$.

APPENDICE J

c_∞ se calcule en écrivant que le nombre total N d'impuretés dans le cristal est le même avant et après ségrégation :

$$\begin{aligned} N &= s p c_o \\ &= \sum_q s c_q = s c_\infty \sum_q \exp\left(-\frac{\epsilon_q}{kT}\right) \end{aligned}$$

l'indice q représentant un plan atomique.

$$\text{D'où } p c_o = c_\infty \sum_q \exp\left(-\frac{\epsilon_q}{kT}\right)$$

$$\frac{c_\infty}{c_o} = \frac{p}{\sum_q \exp\left(-\frac{\epsilon_q}{kT}\right)} = \frac{p}{\sum_q 1 + \sum_q \left[\exp\left(-\frac{\epsilon_q}{kT}\right) - 1\right]} = \frac{p}{p + \sum_q \left[\exp\left(-\frac{\epsilon_q}{kT}\right) - 1\right]}$$

$$\frac{c_\infty}{c_o} = \frac{1}{1 + \frac{1}{p} \sum_q \left[\exp\left(-\frac{\epsilon_q}{kT}\right) - 1\right]}$$

Le terme $\exp\left(-\frac{\epsilon_q}{kT}\right)$ n'est sensiblement différent de 1 qu'au voisinage immédiat de la faute ; comme le nombre p de plans parallèles à la faute dans le cristal est très supérieur à 1, on voit que c_∞ est voisin de c_o , à un terme correctif près en $\frac{1}{p}$.

$$\begin{aligned} \text{D'où } N kT \text{ Log } \frac{c_\infty}{c_o} &= - N kT \text{ Log } \left[1 + \frac{1}{p} \sum_q \left[\exp\left(-\frac{\epsilon_q}{kT}\right) - 1\right] \right] \\ &= - \frac{N kT}{p} \sum_q \left[\exp\left(-\frac{\epsilon_q}{kT}\right) - 1\right] \\ &= - s c_o kT \sum_q \left[\exp\left(-\frac{\epsilon_q}{kT}\right) - 1\right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta F_{\text{Suz}} &\approx N kT \text{ Log } \frac{c_\infty}{c_o} - s c_o \sum_q \epsilon_q \\ &= - s c_o kT \sum_q \left[\exp\left(-\frac{\epsilon_q}{kT}\right) - 1 + \frac{\epsilon_q}{kT}\right] \end{aligned}$$

qui est le résultat cherché.

BIBLIOGRAPHIE

- | 1 | Morrell H. COHEN : Alloying Behavior and effects in concentrated solid solutions - edited by T.B. Massalski - 1963
(Gordon and Breach)
- | 2 | A. BLANDIN : "
- | 3 | R. PICK : Thèse 1965 rapport CEA R 2820
- | 4 | J.L. DEPLANTE : J. Phys 1967, 28, 465
- | 5 | A. BLANDIN, J. FRIEDEL et G. SAADA : Suppl. au J. de Phys, 1966 fasc.7.8,
tome 27, C3-128
- | 6 | C. NOURTIER, G. SAADA : Int. Conf. on disl. theory Washington (1969) à paraître.
- | 7 | H.SUZUKI : Sci. Repts. Res. Inst. Tohoku University, 1952, A4, 455
- | 8 | W.A. HARRISON : Pseudopotentials in the theory of metals (Benjamin)
- | 9 | F.C. FRANK et J.F. NICHOLAS : Phil. Mag., 1953,7,44, 358
- | 10 | P.S. DOBSON, P.J. GOODHEW et R.E. SMALLMAN : Phil. Mag., 1967, 16, 9
- | 11 | J.P. TAROUR et J. WASHBURN : Phil. Mag., 1968, 18, 1257
- | 12 | P.J. GOODHEW, P.S. DOBSON et R.E. SMALLMAN : Metal Science J., 1967,
1, 198
- | 13 | J. FRIEDEL 1956 Les Dislocations (Gauthiers Villars) p 72
- | 14 | J. FRIEDEL 1964 Dislocations (Pergamon ; Gauthier Villars)
- | 15 | J. SILCOX, M.J. WHELAN : Phil. Mag., 1960, 5, 1.
- | 16 | S. YOSHIDA, Y. SHIMOMURA : J. Phys. Soc. Jap., 1963, 18, 1590
- | 17 | J.W. EDINGTON, R.E. SMALLMAN : Phil. Mag., 1965, 11, 2
- | 18 | J.E. HARRIS, B.C. MASTERS : Proc. Roy. Soc. Am., 1966, 292, 1429
- | 19 | R. HALES, R.E. SMALLMAN et P.S. DOBSON : Proc. Roy. Soc. Am, 1968, 307, 71
- | 20 | P.S. DOBSON, R.E. SMALLMAN : Proc. Roy. Soc. Am., 1966, 293, 423
- | 21 | J.L. DEPLANTE, Thèse 1969 (archives Centre Docum. CNRS n° A. O. 3496)
- | 22 | B. JOUFFREY : communication particulière
- | 23 | R. DE WIT et R.E. HOWARD : Acta Met., 1965, 13, 655
- | 24 | L.E. VASSAMILLET et T.B. MASSALSKI : J. Appl. Phys., 1963, 34, 3402

- |25| R.B. NICHOLSON et J. NUTTING : Acta Met. 1961, 9 , 332.
- |26| J.W. EDINGTON et D.R. WEST : Phil. Mag, 1966, 14, 603.
- |27| A.H. COTTRELL et B.A. BILBY : Phil. Mag., 1951, 42 , 573.

TABLE DES FIGURES

- fig 1 - positions relatives des atomes dans les plans de type A,B,C (d'après [5])
- fig 2 - position des atomes dans les deux plans limitant une faute d'empilement intrinsèque avant et après introduction de la faute.
- fig 3 - deux boucles de dislocation, de vecteur de Burgers $\frac{a}{3} \langle 111 \rangle$, dans des plans (111) superposés.
- fig 4A et 4B - courbes $\gamma_{mm}(\theta)$
- fig 5A et 5B - courbes $\gamma_{ii}(\theta)$
- fig 6 - faute intrinsèque et impureté I à la distance z_i de la faute
- fig 7 - faute extrinsèque et impureté I à la distance z_e de la faute
- fig 8 - faute extrinsèque et impureté I à la distance $z_e = 0$ de la faute
- fig 9 - faute 1Δ et impureté I à la distance $z_{1\Delta}$ de la faute
- fig 10 - noeud dissocié : paramètre y
- fig 11 - calcul de la différence des énergies de dissolution d'une impureté I dans un cristal HC infini et dans un cristal CFC infini.
- fig 12 - cristal à grand nombre de phases, chacune d'elles étant caractérisée par une valeur de l'énergie d'interaction entre l'impureté et la faute d'empilement ; cas d'une faute d'empilement intrinsèque (v tableau 14).
- fig 13A et 13B - déplacement des dislocations partielles bordant une faute d'empilement dans un cristal contenant des impuretés.
- fig 14 - faute intrinsèque et lacune L située à la distance $z = d$ de la faute
- fig 15 - deux boucles de Franck situées dans des plans (111) superposés dans l'aluminium.
- fig 16 - faute extrinsèque et lacune L située à la distance z de la faute
- fig 17 - trois boucles de Franck situées dans les plans (111) superposés dans l'aluminium.
- fig 18 - vecteurs de base \vec{a}_1 et \vec{a}_2 d'un plan (111) dans un cristal CFC et vecteurs du réseau réciproque de plus petit module.
- fig 19 - maille élémentaire de l'HC.
- fig 20 - deux plans de macles distants de $3kd+d$ dans un cristal CFC
- fig 21 - cristal à grand nombre de phases i (chacune d'elles étant caractérisée par une énergie d'interaction ϵ_i entre l'impureté et la faute et par une concentration d'impuretés c_i).

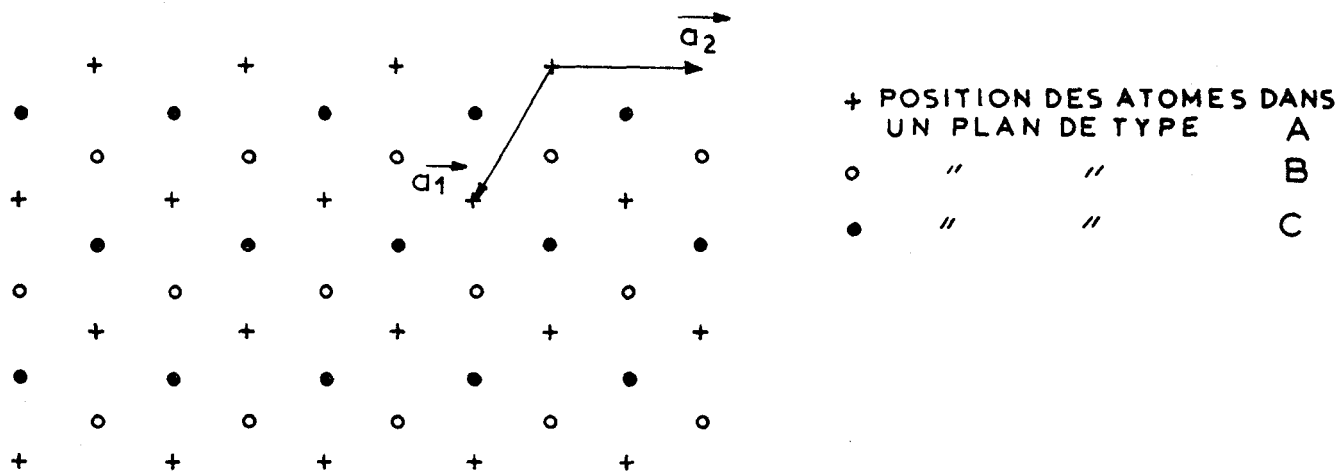


Figure : 1

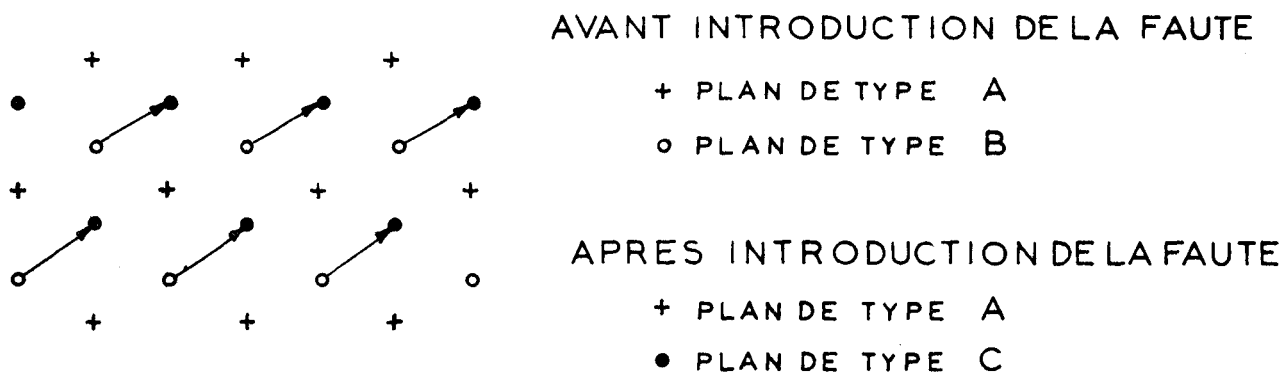


Figure : 2

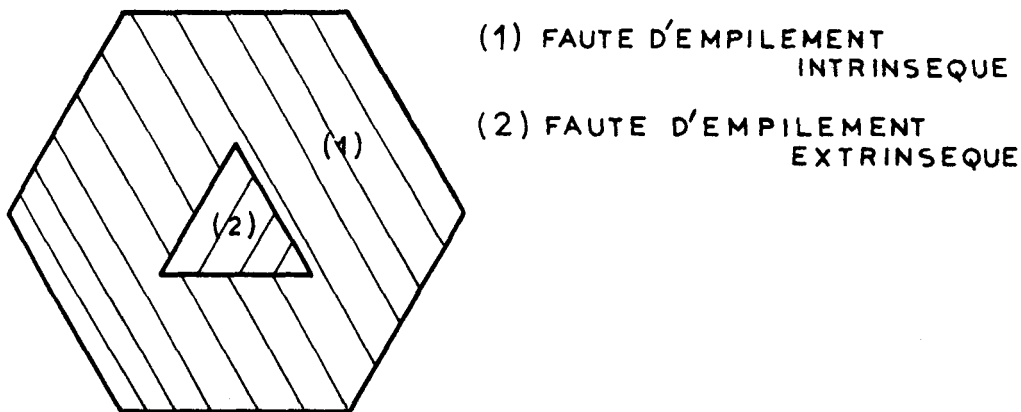


Figure : 3



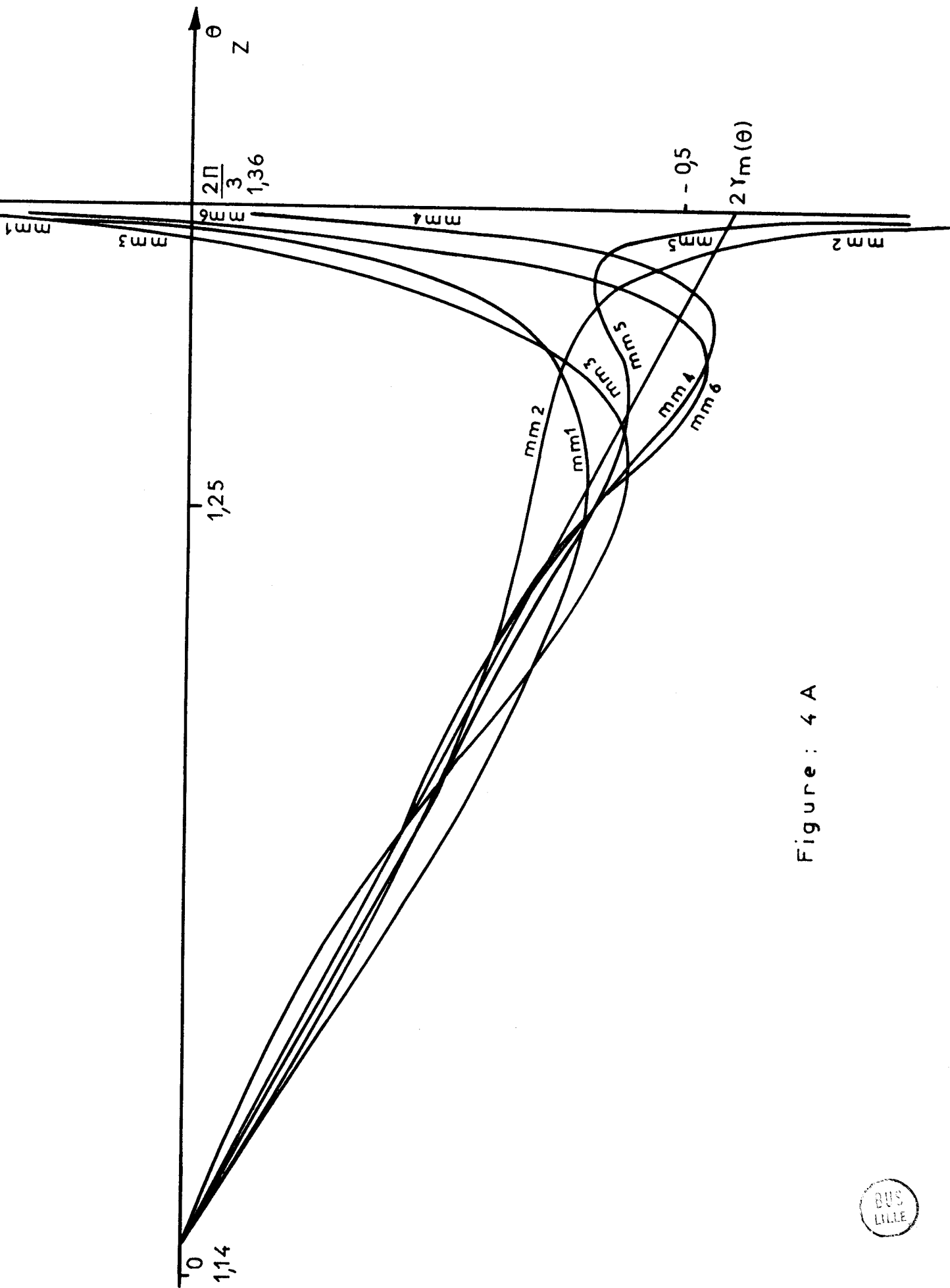


Figure : 4 A



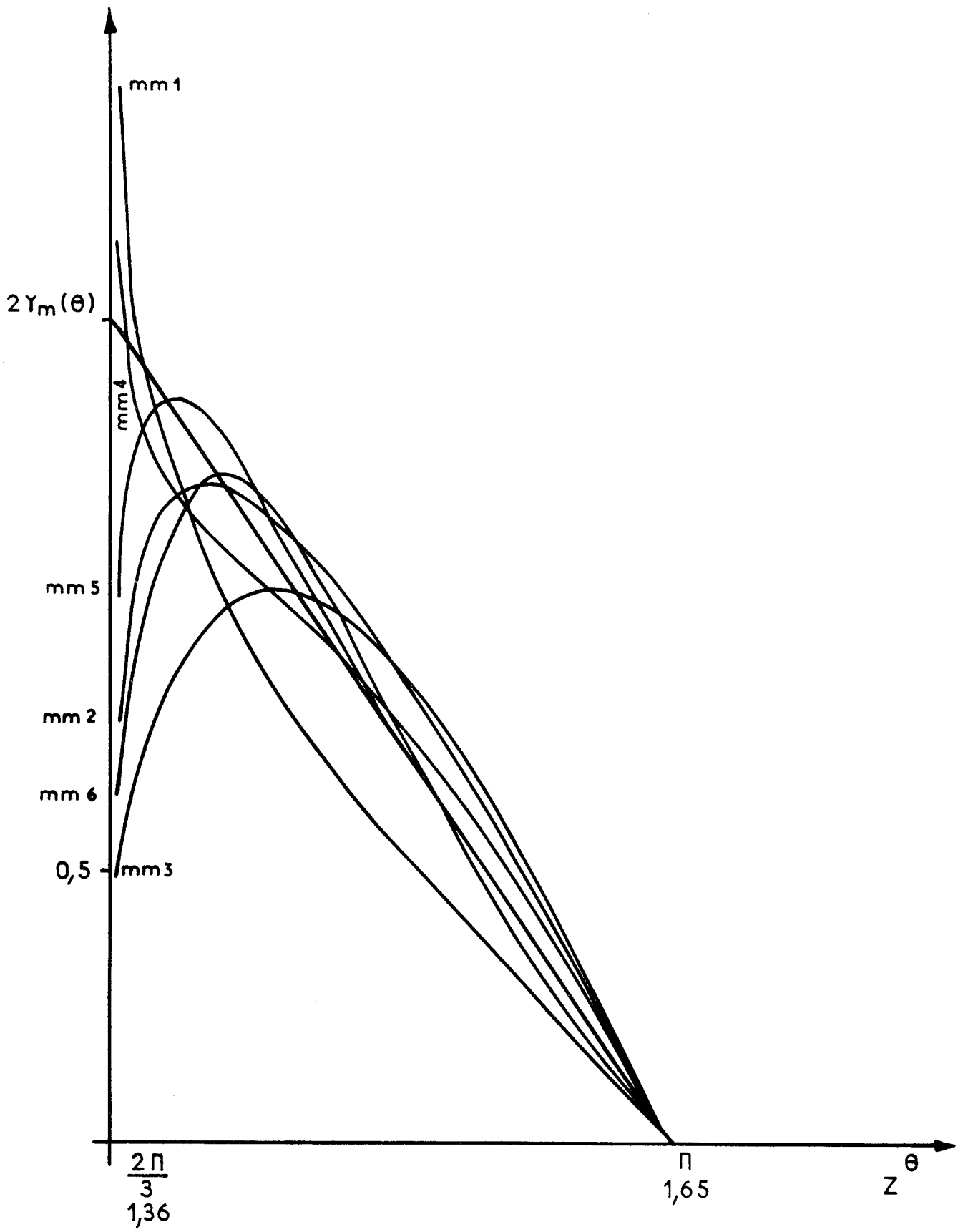


Figure : 4 B



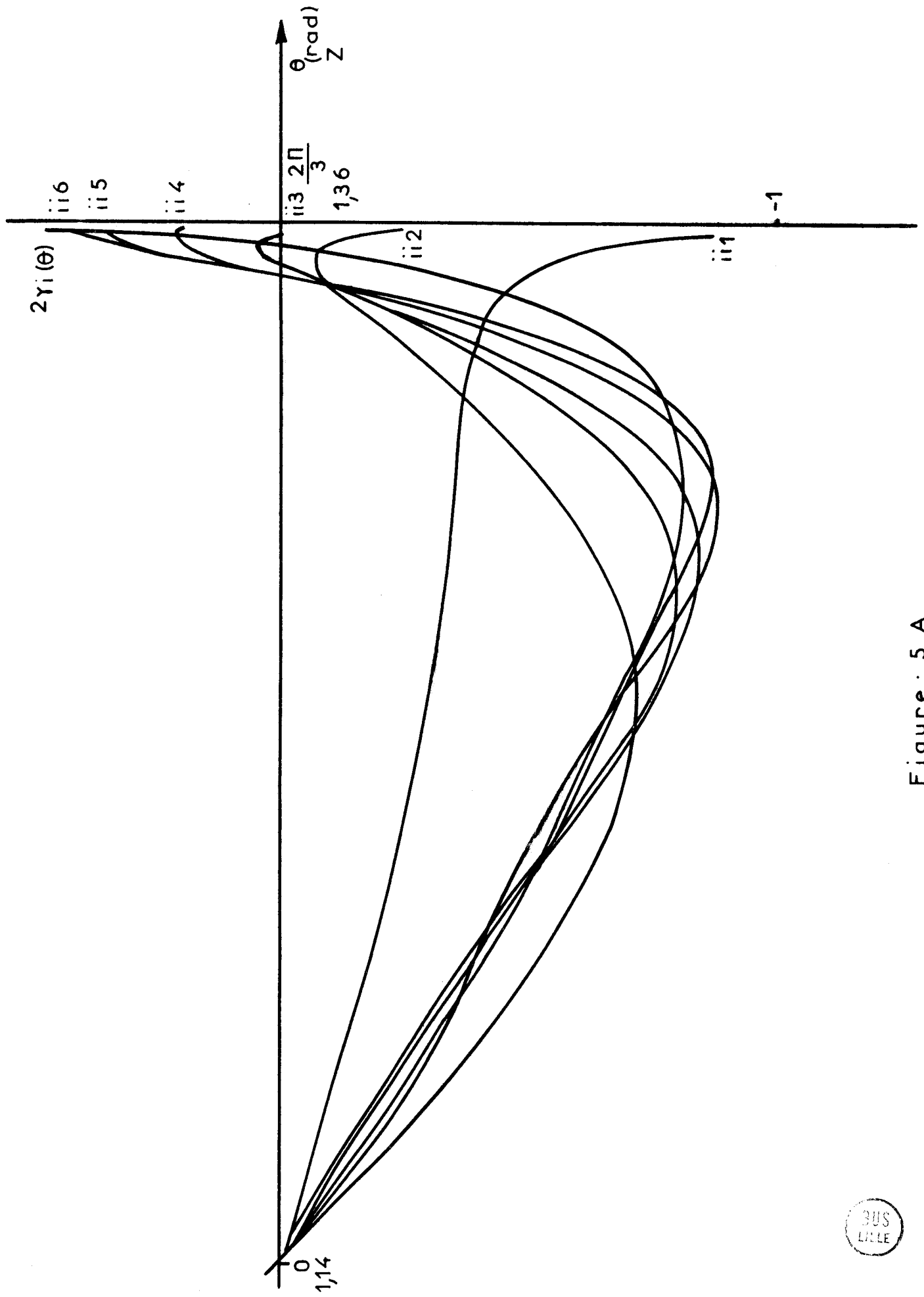
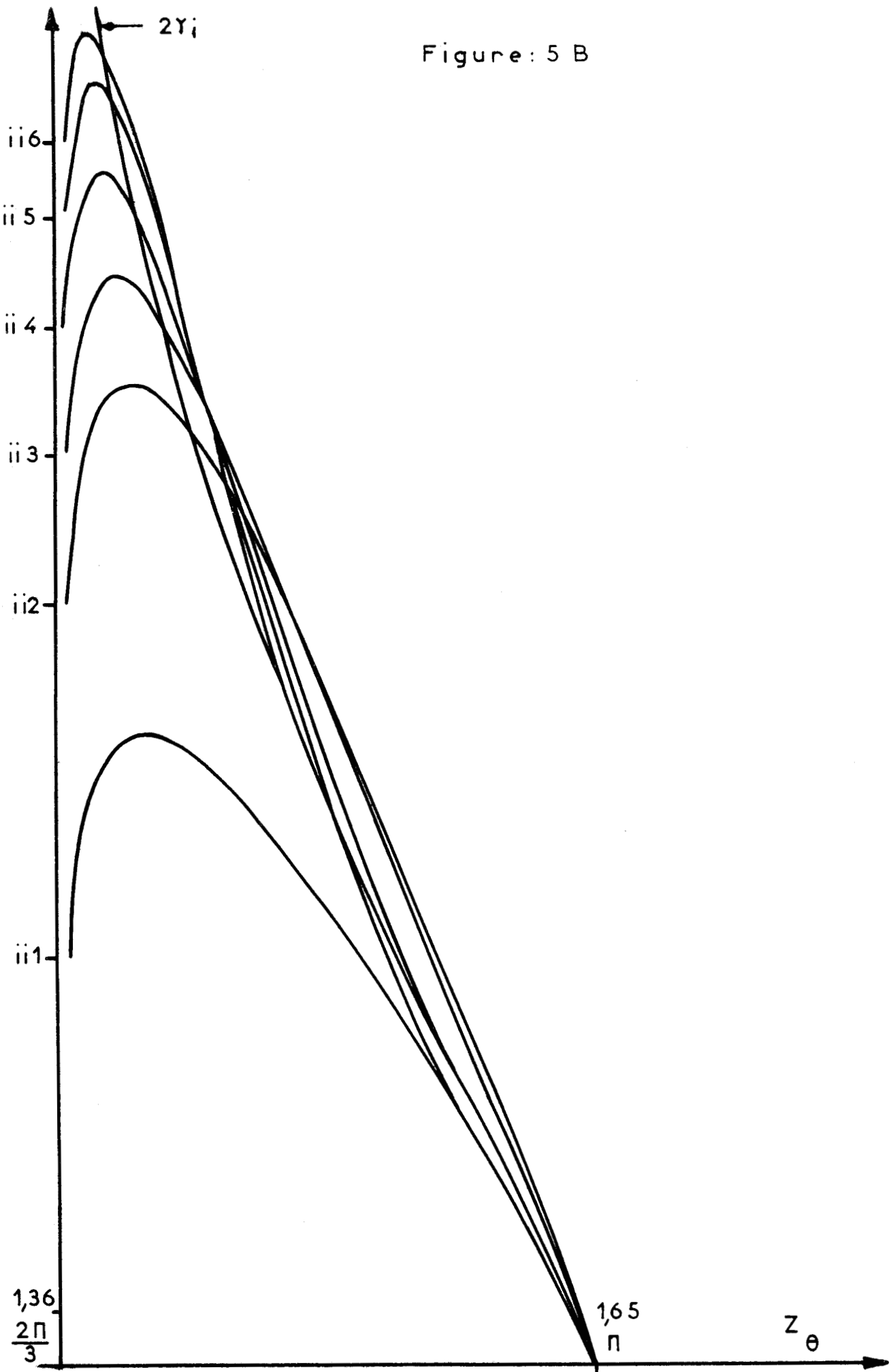


Figure : 5 A



Figure: 5 B



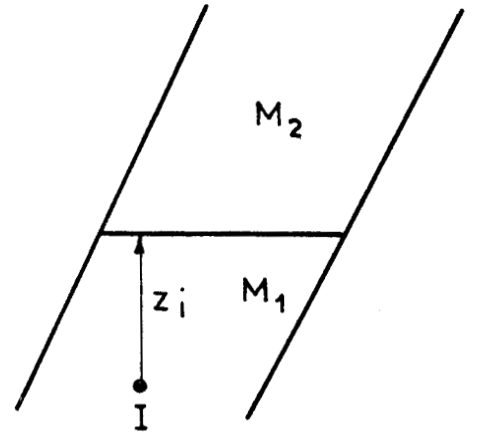
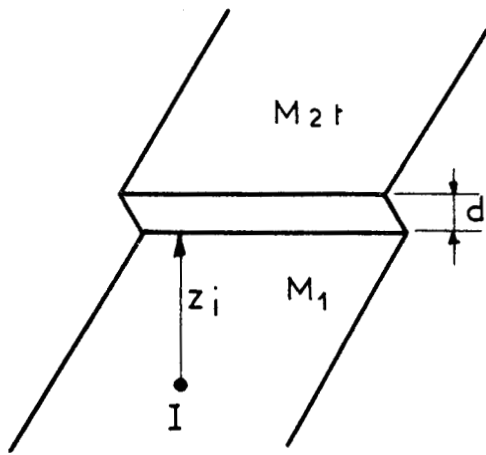


Figure : 6

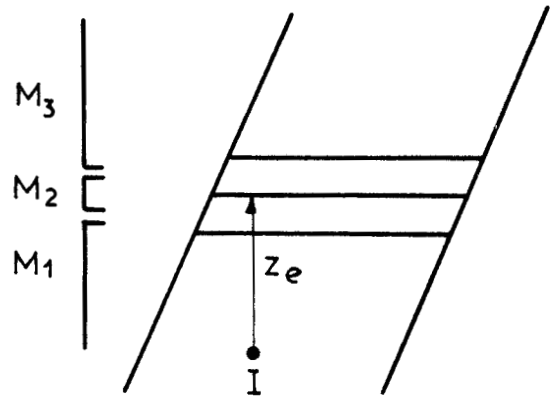
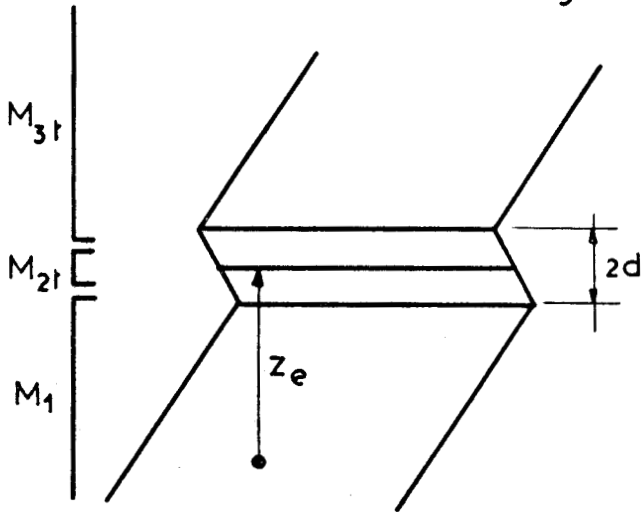


Figure : 7

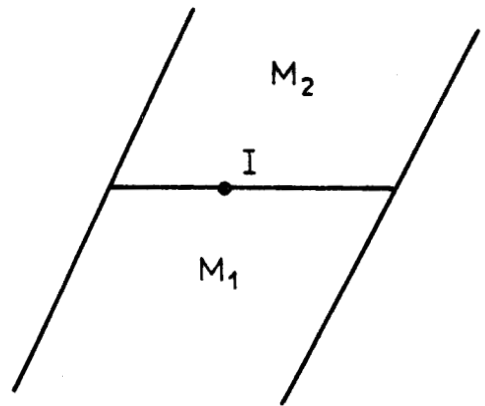
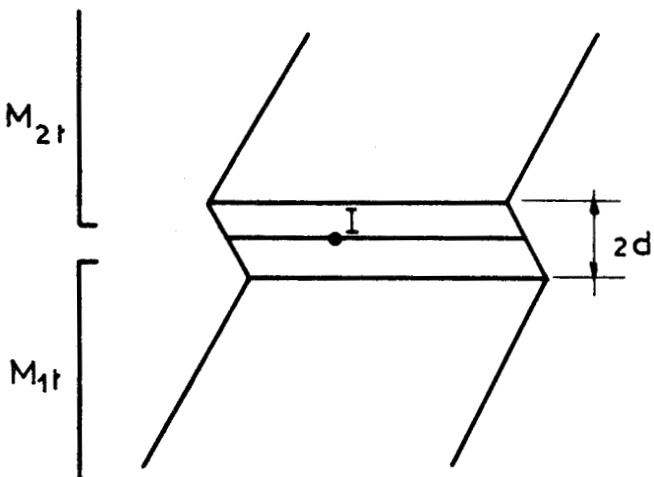


Figure : 8



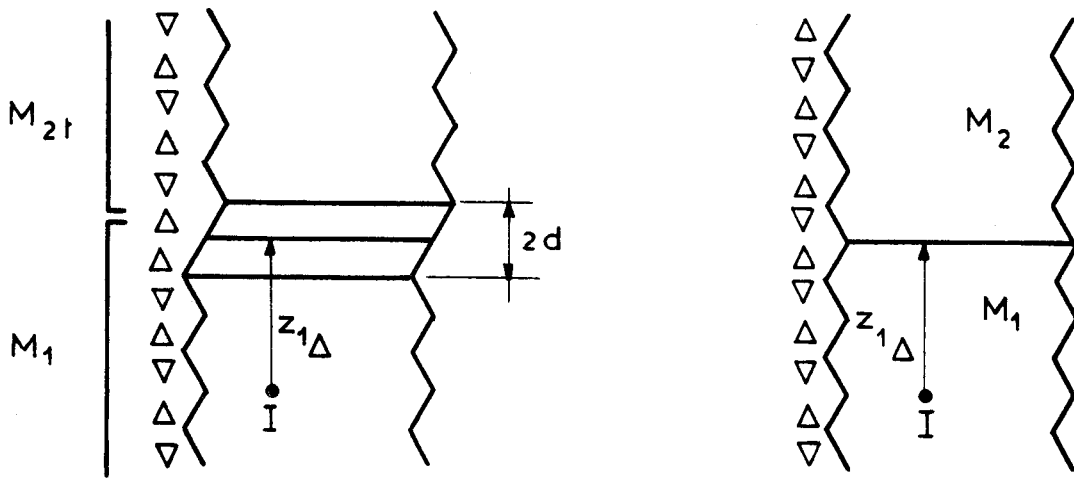


Figure : 9

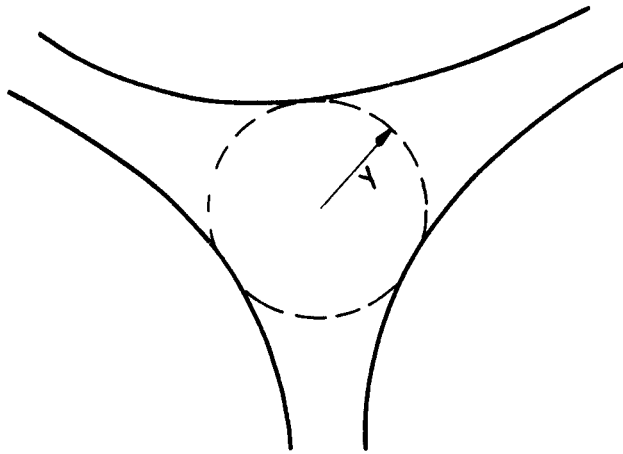


Figure : 10

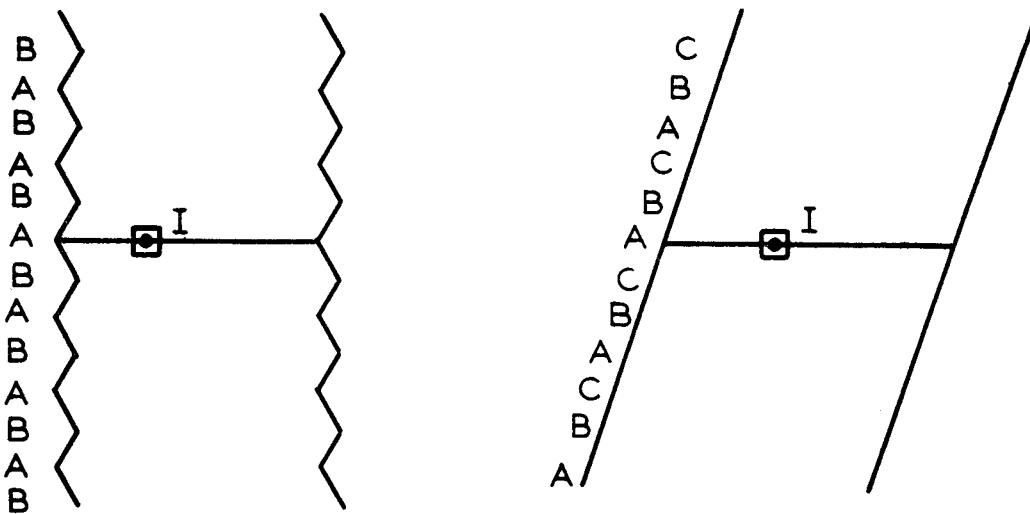


Figure : 11

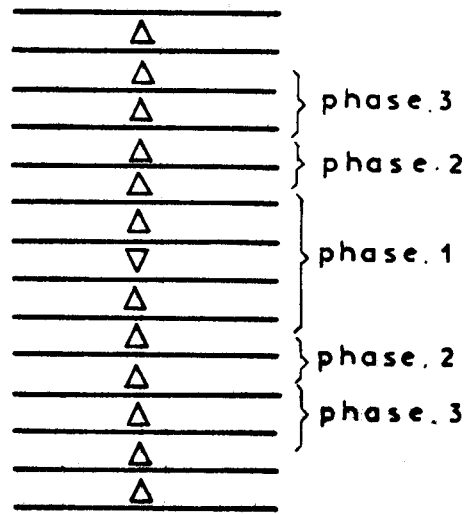
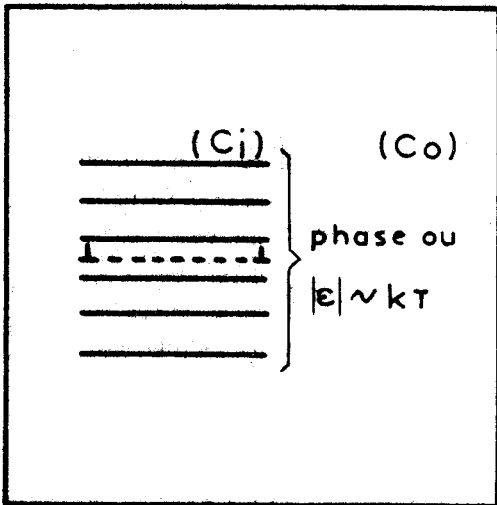


Figure: 12



----- faute d'empilement

Figure: 13 A

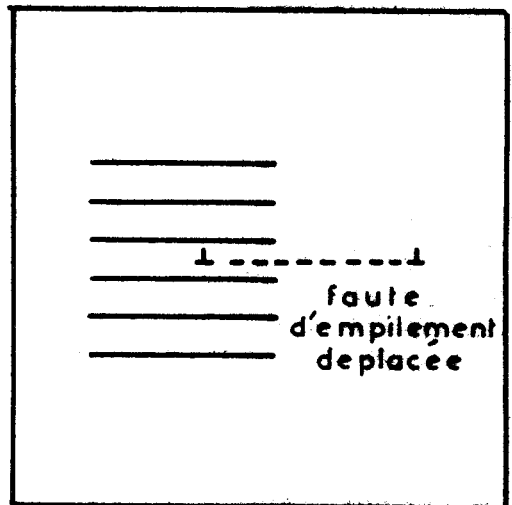


Figure: 13 B

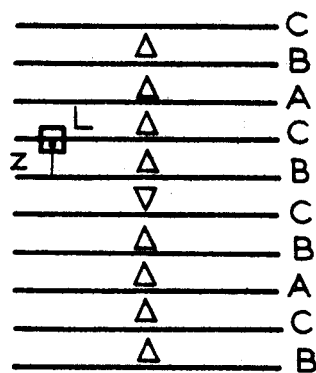


Figure: 14



Figure : 15

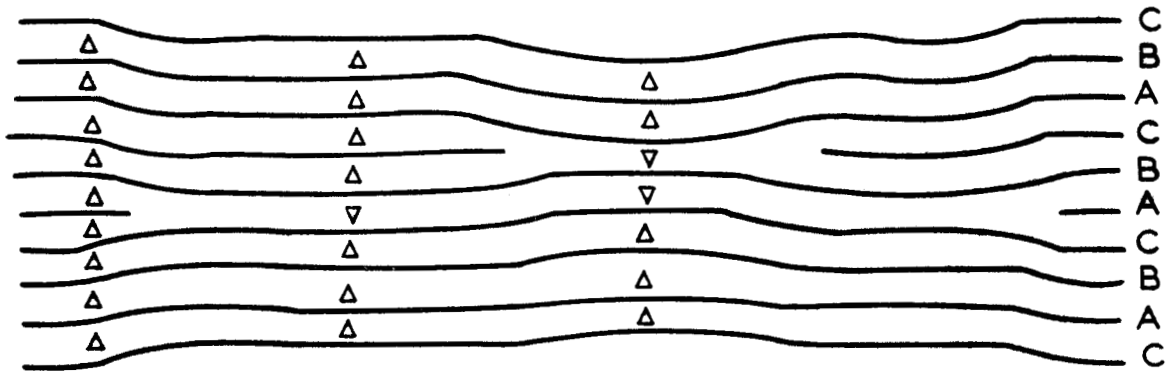


Figure : 16

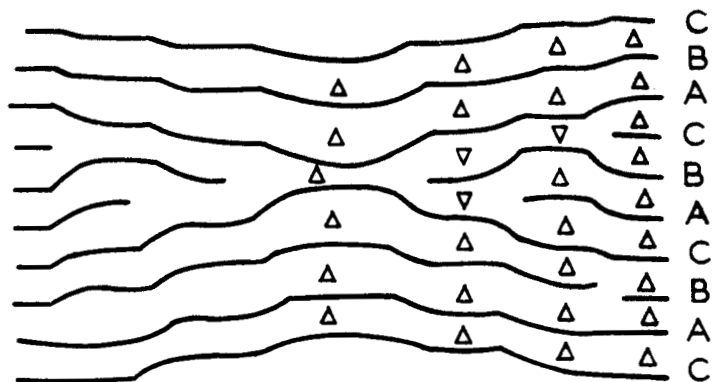
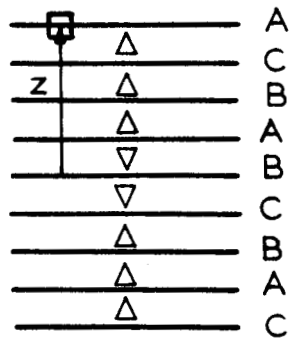


Figure : 17



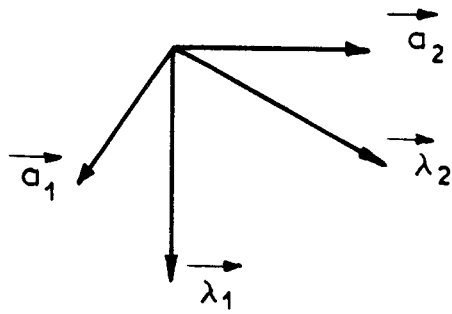


Figure : 18

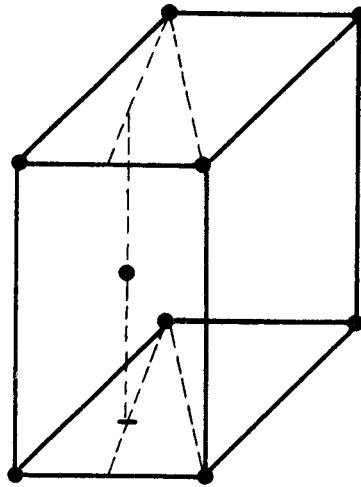


Figure : 19

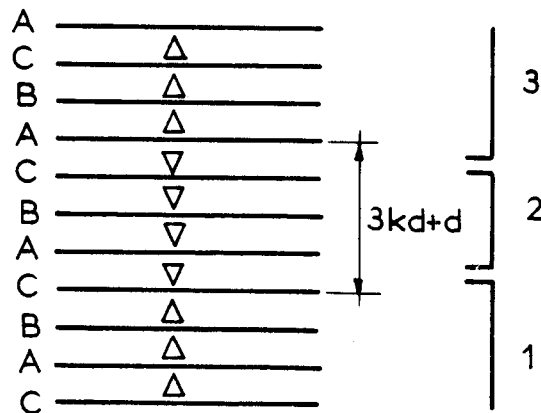


Figure : 20



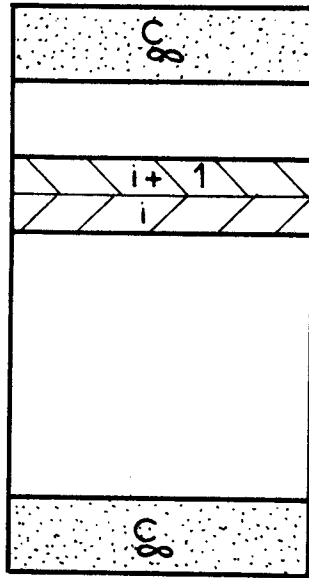


Figure : 21

