CALCUL NUMÉRIQUE DU FROTTEMENT INTÉRIEUR H: APPLICATION À MgO MONOCRISTALLIN

M. Gabbay, C. Esnouf, A. Vincent, Gilbert Fantozzi

► To cite this version:

M. Gabbay, C. Esnouf, A. Vincent, Gilbert Fantozzi. CALCUL NUMÉRIQUE DU FROTTEMENT INTÉRIEUR H: APPLICATION À MgO MONOCRISTALLIN. Journal de Physique Colloques, 1983, 44 (C9), pp.C9-569-C9-573. 10.1051/jphyscol:1983984 . jpa-00223434

HAL Id: jpa-00223434

<https://hal.science/jpa-00223434>

Submitted on 1 Jan 1983

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

CALCUL NUMÉRIQUE DU FROTTEMENT INTÉRIEUR ΔH : APPLICATION À MgO MONOCRISTALLIN

M. Gabbay, C. Esnouf, A. Vincent et G. Fantozzi

Groupe d'Etudes de Métallurgie Physique et de Physique des Matériaux,
L.A.-CNRS, I.N.S.A., Bât. 502, 69621 Villeurbanne Cedex, France

Résumé - ΔH est calculé en fonction de la température et de l'amplitude σ_0 de la contrainte de sollicitation. Pour un niveau donné ΔH , σ_0 décroît linéairement avec $T^{1/2}$ dans le domaine des basses températures. Au delà, la décroissance est toujours linéaire mais plus lente. L'extrapolation de la droite basse température définit une température T_c caractéristique qui permet d'évaluer l'énergie de liaison entre dislocation et défaut ponctuel. Dans ce domaine basse température, le désancrage du premier défaut ponctuel suffit pour entraîner le désancrage total alors que, dans le domaine haute température, le désancrage s'effectue collectivement à partir de plusieurs défauts ancreurs.

Abstract - ΔH is computed as a function of temperature and stress amplitude σ_0 . For a given level ΔH , σ_0 decreases linearly versus $T^{1/2}$ along the low temperature range. For higher temperature, such a linear decrease is observed but the slope is lower. The extrapolation of the low temperature straight line determine a critical temperature T_c which allows an estimation of the binding energy between dislocation and point defect. Along the low temperature range, complete breakaway is triggered by the breakaway of the first pin ; at higher temperature, several pins are collectively involved.

I - INTRODUCTION

L'étude de l'interaction dislocations-défauts ponctuels dans MgO monocristallin déformé plastiquement à l'ambiante nous a conduit à mesurer le frottement intérieur dû au désancrage ΔH en fonction de l'amplitude de vibration sinusoïdale (fréquence 10 kHz) pour différents états de recuit. Différents modèles théoriques de désancrage ont été appliqués à ces mesures expérimentales et les premières analyses des résultats ont été publiées par ailleurs {1},{2}. Parmi ces modèles, il est utile de rappeler les bases de celui issu de la théorie de LUCKE et al {3} décrivant le désancrage thermomécanique ; dans le domaine basse température, ΔH est donné par :

- (0) $\Delta H \approx 0$ pour $\sigma_0 \ll \sigma_{dT}$
 (1) $\Delta H = \Lambda L_T^2 f_m \left[(\sigma_0^2 - \sigma_{rT}^2) / 2 \sigma_0^2 \right]$ pour $\sigma_0 \leq \sigma_{dT}$
 (2) $\Delta H = \Lambda L_T^2 \left[(\sigma_{dT}^2 - \sigma_{rT}^2) / 2 \sigma_0^2 \right]$ pour $\sigma_0 > \sigma_{dT}$

avec Λ : densité des dislocations

L_T : longueur totale des segments entre ancrages durs.

σ_0 : amplitude de la contrainte $\sigma = \sigma_0 \sin 2\pi \nu t$ où ν est la fréquence de sollicitation

σ_{dT} , σ_{rT} : respectivement contraintes de désancrage et de réancrage thermique définies dans {3}

f_m : valeur maximale de la fraction désancrée f atteinte dans un demi-période ($f_m = 1$ lorsque $\sigma_0 > \sigma_{dT}$)

Pour des boucles longues, σ_{rT}^2 devient négligeable devant σ_{dT}^2 (car σ_{dT}/σ_{rT} est proportionnel à la longueur des segments) et les relations (1) et (2) se simplifient. En particulier, pour la région où ΔH croît avec σ_0 , (1) s'écrit alors

- (3) $\Delta H = \Lambda L_T^2 f_m / 2$.

Dans cette première approche où l'on considère $\sigma_T \ll \sigma_d T$, le réancrage des segments désancrés peut être négligé et cette fraction maximum fm obtenue au cours du cycle sera quasiment constante lorsque (4) $P_d \Delta t = K$

où : - P_d est la fréquence de désancrage donnée par $P_d = v_d \exp \{-U_d/kT\}$ (5)

v_d et U_d sont la fréquence d'attaque et l'énergie d'activation du désancrage.

- $\Delta t = \alpha/v$, α étant une fraction de la période de mesure $1/v$ pendant laquelle la contrainte agit au voisinage de son maximum σ_0 (LUCKE et al {3}).

- K est une constante au maximum égale à 1.

En utilisant la force d'interaction linéarisée proposée par TEUTONICO et al {4}, l'énergie U_d est donnée par :

(6) $U_d = U_d (1 - \sigma_0/\sigma_d)$ avec U_d : énergie de liaison dislocation-défaut ponctuel et σ_d : contrainte de désancrage mécanique, on obtient une fraction désancrée constante (c'est-à-dire ΔH constant) lorsque la condition suivante est satisfaite :

$$(7) \sigma_0 = \sigma_d \left\{ 1 - \left(T^{1/2} / \left[U_d/k \cdot \ln(\alpha \cdot v_d/K \cdot v) \right]^{1/2} \right) \right\}$$

Si $U_d/k \cdot \ln(\alpha \cdot v_d/K \cdot v) = C^{te} = T_c$ (8) alors (7) s'écrit $\sigma_0 = \sigma_d \left[1 - (T/T_c)^{1/2} \right]$ (9)

L'analyse de nos résultats expérimentaux selon le diagramme $\epsilon(T^{1/2})$ présente un bon accord avec la relation (7) vers les basses températures (Figure 1). Ainsi, nous observons lors de recuits successifs :

- i) une température caractéristique T_c quasiment commune montrant que l'énergie moyenne des ancreurs varie peu lors des différents traitements;
- ii) le module de la pente des droites $\sigma(T^{1/2})$ augmente indiquant une augmentation de σ_d , c'est-à-dire une augmentation du nombre de défauts piégeant la dislocation. Au delà de ce domaine linéaire, il apparaît une diminution plus lente de ϵ avec $T^{1/2}$, mais nous n'avons pas pu déterminer si ce changement était dû à un défaut ancrant d'un autre type ou à un autre mode de désancrage. Nous avons donc entrepris un calcul numérique de ΔH afin de :
- i/ préciser cette analyse et définir son domaine d'application;
- ii/ interpréter le changement de pente du diagramme $\sigma(T^{1/2})$.

II - PRINCIPE DU CALCUL

Les dislocations sont piégées par N défauts ponctuels identiques répartis selon le

schéma de la figure 2. Pour une telle distribution, utilisée par VINCENT et al {5}, le défaut central définissant une double boucle symétrique est celui dont le désancrage est le plus probable. Ensuite le chemin de désancrage doit s'effectuer par désépinglages successifs des points adjacents à la grande boucle précédemment désancrée de longueur $L_d = 2L, 2L + 1, 2L + 2, \dots$ ainsi formée. Les longueurs

totales L_T et désancrées L_d , sont données par :

$L_T = L (2 + (N-1)/\beta)$ et $L_d = L (2 + (N_d-1)/\beta)$ avec $\beta = L/l$;

N_d est le nombre de défauts adjacents désancrés.

Pour T et σ_0 donnés, ΔH est calculé à partir de l'aire du cycle $\epsilon_{dis}(\sigma)$, ϵ_{dis} étant la déformation due au désancrage. Un pas de contrainte $\Delta\sigma = \sigma_0/I$ (I : nombre de pas), choisi à priori, conduit à une variation de σ en escalier $\sigma(p) = (p/I) \sigma_0$, p entier $0 < p < I$. Le calcul de ϵ_{dis} nécessite la détermination à chaque pas, des populations partiellement ou totalement désancrées. Ce calcul est réalisé de la façon

Figure 1: Analyse des mesures sur MgO pour différents états de recuit. a-293K, b-366K, c-429K, d-521K, e-593K.

suivante :

i) Pour le pième pas de contrainte, le diagramme énergétique de la dislocation est déterminé pour le chemin de désancrage le plus probable. Les énergies d'activation du désancrage $U_d(i)$ et du réancrage $U_r(i)$ du i ème ancreur sont déterminées à partir du modèle de la double boucle dissymétrique de TEUTONICO et al' {4}.

ii) Pour le désancrage du i ème point, les fréquences de désancrage $P_d(i)$ et de réancrage $P_r(i)$ sont alors calculées à partir de $U_d(i)$, $U_r(i)$ et des fréquences d'attaque efficaces de désancrage et de réancrage v_d et v_r calculées par TEUTONICO et al' {6}.

iii) $P_d(i)$ et $P_r(i)$ permettent le calcul de la population $n_i + \Delta n_i$ des dislocations comportant i points désancrés à partir des populations n_i calculées pour le pas de contrainte précédent ($p-1$).

(10) $\Delta n_i = [n(i-1) \cdot P_d(i-1) + n(i+1) \cdot P_r(i+1) - n_i \cdot P_d(i) - n_i \cdot P_r(i)] \Delta t$

où Δt est la durée du pième pas de contrainte.

iii) ΔH étant obtenu, le calcul complet est réitéré pour un nombre de pas de contrainte double du précédent jusqu'à convergence satisfaisante de ΔH .

ΔH a ainsi été calculé pour diverses longueurs de dislocations. Ensuite, pour nous rapprocher de la réalité physique, nous avons calculé ΔH en tenant compte d'une distribution des longueurs autour d'une valeur moyenne L_m . ΔH est obtenu par la relation (11) $\Delta H = \int_{L_0}^{\infty} \Delta H(L) \mathcal{N}(L) dL$ avec $\mathcal{N}(L) dL \propto L \exp \left\{ -\frac{L}{L_m} \right\} dL$. L_0 étant la plus courte longueur en-dessous de laquelle $\Delta H=0$.

III - RESULTATS

La figure 3 présente un réseau de courbes $\Delta H(\sigma_0)$ pour $L=2000b$, $N=9$, $\beta=2$ et pour

Figure 3 - ΔH en fonction de σ pour différentes températures : a-20K, b-30K, c-50K, d-70K, e-100K, f-200K, g-250K.

Figure 2 - schéma d'une dislocation piégée. $N=9$ $\beta=2$

Figure 4 - ΔH calculé en fonction de σ compte tenu d'une distribution de longueurs autour d'une longueur moyenne $L_m=700b$: a-20K, b-30K, c-50K, d-70K, e-100K, f-200K, g-300K.

$L=2000b$, $N=9$, $\beta=2$ et pour différentes températures. Avec l'aide du tableau des populations en fonction de la contrainte, nous avons vérifié que, pour T donné, l'allure de la partie ascendante de la courbe $\Delta H(\sigma_0)$ traduit exactement l'évolution de la fraction désancrée f avec σ_0 . Les résultats du calcul de ΔH avec distribution des longueurs sont présentés sur la figure 4. La distribution a pour effet de rendre les maximums moins aigus et la croissance de ΔH avec σ_0 moins abrupte.

IV- DISCUSSION

La figure 5 présente les diagrammes $\sigma(T^{1/2})$ pour trois longueurs distinctes. Nous constatons une variation linéaire avec changement de pente séparant basses et hautes températures : cette variation est qualitativement comparable à l'analyse des résultats expérimentaux. Les diagrammes énergétiques sur la figure 6 permettent d'expliquer l'allure de la variation de σ avec $T^{1/2}$. Dans le domaine basse température (jusqu'au changement de pente), les diagrammes 6a et 6b montrent que le désancrage du premier point conditionne le désancrage de toute la ligne. Au-delà, c'est un groupe de plusieurs ancreurs qui définit la barrière énergétique à franchir pour entraîner le désancrage total (figure 6c); l'énergie d'activation du phénomène est alors plus élevée.

Comme l'analyse conduisant à la relation (9) le prévoyait, nous vérifions que, du côté des basses températures, pour $L=1000b$ et $2000b$:

Figure 5 - Diagramme $\sigma(T^{1/2})$ pour ΔH calculé pour trois longueurs distinctes de dislocation et pour la même fraction désancrée ($f=0,5$).

Figure 6 - Diagramme énergétique pour $L=1000b$ et pour les contraintes a,b,c repérées dans la figure 5.

- i - l'extrapolation à $T^{1/2}=0$ des droites D_2 (1000b) et D_3 (2000b) conduit bien à la contrainte de désancrage mécanique du premier ancreur à savoir respectivement $\sigma_d=2,27 \cdot 10^{-5}G$ et $1,14 \cdot 10^{-5}G$.
 - ii - la variation de la pente des droites D_2 et D_3 s'effectue dans le rapport des contraintes σ_d respectives.
 - iii - l'extrapolation de D_2 et D_3 à $\sigma=0$ détermine une température caractéristique commune $T_C=410K$.
- Ces variations linéaires de σ_0 avec $T^{1/2}$ du côté des basses températures ainsi que

les trois observations précédentes s'expliquent par la relation (7); toutefois, précisons que, dans cette relation le coefficient n'est pas constant mais l'influence de ce terme reste faible puisqu'il intervient en $(\ln \alpha)^{1/2}$.

Au sujet du cas $L=200b$, la droite D_1 obtenue ne correspond pas à celle attendue (droite D'_1): ce décalage et son sens ($D'_1 \rightarrow D_1$) s'expliquent par le fait que le modèle rappelé dans l'introduction néglige le réancrage-relation (3) - alors que cette approximation n'est plus valable. En effet, σ_{rT}^2 n'est plus négligeable devant σ_{dT}^2 puisque la limite inférieure du rapport σ_{rT}/σ_{dT} est égale à $\sigma_r/\sigma_d = 0,42$. Ce décalage est d'autant plus important que le rapport σ_{rT}/σ_{dT} est grand, c'est-à-dire que la température est élevée (voir relation 1).

La figure 7 présente les diagrammes $\sigma(T^{1/2})$ obtenus en tenant compte d'une distribution des longueurs dans le calcul de ΔH . Ces diagrammes, tout-à-fait semblables aux précédents, montrent que la distribution n'a pas d'effet déterminant; ils ne sont en fait qu'une combinaison des droites décalées de la figure 5. La température T_c obtenue est de 410K environ.

En vue de l'analyse des résultats expérimentaux, il est utile de préciser la relation entre T_c et l'énergie de liaison U_0 ; nous avons donc déterminé, à partir des courbes $\sigma_0(T^{1/2})$ obtenues numériquement, le coefficient A tel que $A=U_0/kT_c$ donc $A \approx 14$. En utilisant cette valeur, nous déduisons pour nos résultats expérimentaux, une énergie de liaison $U_0=0,31\text{eV}$.

V - CONCLUSION

Notre calcul numérique du désancrage précise la nature des deux domaines observés dans les analyses $\sigma_0=f(T^{1/2})$ à ΔH constant: le domaine basse température correspond au désancrage catastrophique à partir du premier ancreur; le domaine haute température correspond au désancrage collectif à partir de plusieurs ancreurs. Pour le domaine basse température, la variation linéaire de σ_0 avec $T^{1/2}$ peut être approchée par une loi de la forme: $\sigma_0 = \sigma_d [1 - (T/T_c)^{1/2}]$.

Dans cette relation nous avons relié T_c à U_0 pour les boucles longues, mais la relation reste à établir pour les boucles très courtes.

Par ailleurs, une étude plus complète est en cours afin de préciser l'effet des différents paramètres.

REFERENCES

- 1 - GABBAY M., FANTOZZI G., J. Physique C3 6 42 (1981) 31.
- 2 - GABBAY M., ESNOUF C., VINCENT A., FANTOZZI G., J. Physique C5 10 42 (1981) 289.
- 3 - LÜCKE K., GRANATO A.V., TEUTONICO L.J., J. App. Physics 39 11 (1968) 5181.
- 4 - TEUTONICO L.J., GRANATO A.V., LÜCKE K., J. App. Physics 35 1 (1964) 220.
- 5 - VINCENT A., PEREZ J., Phil. Mag. A 40 3 (1979) 377.
- 6 - GRANATO A.V., LÜCKE K., SCHLIPH J., TEUTONICO L.J., J. App. Physics 35 9 (1964) 2732.

Figure 7 - Diagramme $\sigma(T^{1/2})$ pour ΔH calculé avec distribution des longueurs autour de 2 longueurs moyennes 500b et 700b et pour le même rapport $\Delta H/\Delta H_{\text{max}}$.