Calculs d'énergie de faute d'empilement dans le sesquioxyde d'yttrium (Y_2O_3)

M. Boisson, R.J. Gaboriaud

► To cite this version:

M. Boisson, R.J. Gaboriaud. Calculs d'énergie de faute d'empilement dans le
sesquioxyde d'yttrium (Y_2O_3). Journal de Physique Lettres, 1977, 38 (8), pp.177-181.
10.1051/jphyslet:01977003808017700 . jpa-00231354

HAL Id: jpa-00231354

<https://hal.science/jpa-00231354>

Submitted on 1 Jan 1977

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.

Classification
Physics Abstracts
9.126

CALCULS D'ÉNERGIE DE FAUTE D'EMPILEMENT DANS LE SESQUIOXYDE D'YTTRIUM (Y_2O_3)

M. BOISSON et R. J. GABORIAUD

Laboratoire de Métallurgie Physique, Faculté des Sciences,
40, avenue du Recteur-Pineau, 86022 Poitiers, France

(Reçu le 28 janvier 1977, accepté le 10 mars 1977)

Résumé. — Un calcul théorique de l'énergie des différentes fautes d'empilement pouvant être rencontrées dans le sesquioxyde d'yttrium (Y_2O_3) est proposé.

Le cristal est supposé ionique. Une méthode de sommation d'interactions de paires est employée.

Les énergies de faute d'empilement calculées sont fortes dans les plans (111) et (110) mais plus faibles dans (100).

Une faute d'empilement correspondant au cisaillement $b = a/2 \langle 110 \rangle (001)$ de basse énergie ($\Gamma = 80 \text{ mJ/m}^2$) est trouvée. Une relation est faite avec des résultats expérimentaux de déformation plastique.

Abstract. — Theoretical calculations of stacking fault energy have been performed in the yttrium oxide (Y_2O_3). A method of pair potential interactions, based on an ionic crystal model, is used. The stacking fault energies are found to be high in the (111) and (110) planes but lower in the (100) plane. A low stacking fault energy ($\Gamma = 80 \text{ mJ/m}^2$) corresponding to the shear $b = a/2 \langle 110 \rangle (001)$ is found. This fact is connected to the experimental plastic deformation results obtained in Y_2O_3 .

1. Introduction. — L'étude des propriétés plastiques des oxydes suscite, depuis quelques années, un regain d'intérêt. Les possibilités, relativement récentes dans ce domaine, d'élaboration de monocristaux, permettent l'étude fondamentale des processus de déformation.

Au même titre que dans les métaux, l'énergie de faute d'empilement (E.F.E.) est un des paramètres pouvant jouer un rôle prépondérant dans les mécanismes de déformation plastique. Malheureusement l'évaluation expérimentale de ce facteur, principalement basée sur la microscopie électronique est difficile et sujette à caution.

Un calcul théorique, donnant un ordre de grandeur de l'E.F.E. et en particulier, montrant une éventuelle différence notable entre plusieurs possibilités de cisaillement est donc d'un intérêt certain.

Dans le cadre de l'étude des propriétés plastiques du sesquioxyde d'yttrium (Y_2O_3) [1] monocristallin, un calcul d'E.F.E. dans les plans de bas indices a donc été entrepris.

2. Structure. — L'oxyde d'yttrium a une structure cubique type C [2, 3, 4] jusqu'à la température de 2 350 °C [5].

Cette structure peut être obtenue à partir de la structure fluorine plus connue (CaF_2 , UO_2 ...) dans

laquelle on enlève le quart des anions de façon particulière.

Le groupe d'espace est Ia_3 (Th 7).

Cet oxyde possède 16 molécules d' Y_2O_3 par maille, soit 80 atomes.

Le paramètre cristallin est de $a_0 = 10,604 \text{ \AA}$ à 27 °C.

Une représentation idéalisée de la structure consiste à considérer chaque ion métallique au centre d'un cube entouré de 6 oxygènes. Les 2 oxygènes manquants sont soit sur une diagonale du cube, soit sur une diagonale d'une face créant ainsi 2 sortes de sites pour Y^{+++} appelés respectivement S_6 et C_2 (Fig. 1).

La structure cubique type C présente donc un sous-réseau anionique largement déficient.

FIG. 1. — Les sites de Y^{+++} dans Y_2O_3 . a) site C_2 ; b) site S_6 .

[The two Y^{+++} sites in Y_2O_3 . a) C_2 site; b) S_6 site.]

3. **Principe du calcul.** — Le calcul des E.F.E. basé sur un modèle ionique est réalisé en terme d'interaction de paires.

L'énergie d'interaction entre 2 ions i et j distant de r_{ij} s'écrit [6] :

$$W_{ij} = Z_i Z_j e^2 r_{ij}^{-1} - C_{ij}^{(6)} r_{ij}^{-6} - C_{ij}^{(8)} r_{ij}^{-8} + bb_i b_j f_{ij} \exp - \frac{r_{ij}}{\rho}.$$

On reconnaît dans cette expression

- l'énergie électrostatique ;
- les termes de Van der Waals correspondant aux interactions dipôles-dipôles, dipôles-quadrupôles ;
- l'énergie de répulsion.

Le calcul se résume en termes de sommation d'interactions plan à plan [7]. Le calcul de W_{ij} défini précédemment nécessite la connaissance d'un certain nombre de paramètres, pour l'évaluation de toutes les composantes. La fluorine CaF_2 , par exemple, se prête bien à ce genre de calcul [8, 9].

Les données expérimentales disponibles pour Y_2O_3 ne permettent que le calcul de la composante électrostatique. Une étude géométrique des liaisons au niveau de la faute permet de prévoir l'importance relative des autres composantes comme la répulsion ou la polarisation et donc d'avoir une idée de la validité des résultats.

4. Calculs d'énergies de faute d'empilement.

4.1 PLANS (001). — Les résultats expérimentaux de déformation plastique [1] montrent que les plans (001) jouent un rôle prépondérant dans les mécanismes de déformation plastique. Il y sera donc porté une attention toute particulière.

La séquence complète suivant (100) se compose de 4 plans d'anions notés A_1, A_2, A_3, A_4 séparés par 4 plans de cations appelés α et β

$$\beta \parallel A_1 \alpha A_2 \beta A_3 \alpha A_4 \beta \parallel A_1 \quad (1)$$

les deux couches de cations se déduisent l'une de l'autre par une translation $a/4 \langle 110 \rangle$; les couches d'anions sont superposables deux à deux de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \text{translation } \frac{a}{2} \langle 1, 0, 0 \rangle & A_1 \leftrightarrow A_4 \\ & A_2 \leftrightarrow A_3 \\ \frac{a}{2} \langle 0, 1, 0 \rangle & A_1 \leftrightarrow A_2 \\ & A_3 \leftrightarrow A_4 \\ \frac{a}{2} \langle 1, 1, 0 \rangle & A_1 \leftrightarrow A_3 \\ & A_2 \leftrightarrow A_4 \end{aligned}$$

les couches β contiennent uniquement des cations en site C_2 (Fig. 1a) alors que les couches α contiennent des cations alternativement disposés suivant les lignes de sites C_2 ou S_6 (Fig. 1a, b). La figure 2 montre la répartition des lacunes dans les couches d'anions.

On constate, en regardant la figure 2, que les fautes résultantes sont différentes selon que le cisaillement a lieu au niveau d'une couche α ou au niveau d'une couche β .

FIG. 2. — Projection sur (100) des cations et des lacunes d'anions de la séquence (1). ● A_i Lacune d'anion dans le plan A_i . ○ Cations de la couche α en site S_6 . ⊗ Cations de la couche α en site C_2 . ⊙ Cations de la couche β (tous en site C_2).

[Projection on (100) of the cation and anion vacancy of the sequence (1). ● A_i anion vacancy in plane A_i . ○ Cations in α plane and S_6 site. ⊗ Cations in α plane and C_2 site. ⊙ Cations in β plane (all in C_2 site).]

a) Cisaillement $a/2 \langle 010 \rangle$

L'empilement qui résulte de ce déplacement est

$$\dots A_1 \alpha A_2 \beta A_3 \uparrow \alpha' A_3 \beta A_2 \beta$$

si la coupure se fait entre A_3 et α ou A_4 et α

$$A_1 \alpha A_2 \beta' \uparrow A_4 \alpha A_3 \beta A_2 \alpha \dots$$

lorsqu'elle se produit au niveau d'un plan β .

Le signe ' (α') signifie que les cations de la couche α bordant la faute ont vu le nombre (passant de 6 à 4, 5, 7, ou 8) ou la disposition (de S_6 ou C_2 à 6 A, figure 3) de leurs premiers voisins modifiés.

Dans le premier cas, de part et d'autre du plan de cations α' , les deux demi-cristaux sont symétriques et une macle est formée. Toutefois deux plans d'anions A_3 se retrouvent face à face, ceci devant

FIG. 3. — Cation en site 6 A.

[Cation in 6 A site.]

conduire à une énergie de faute plus élevée que dans le 2^e cas. Les cations α' ont toujours six premiers voisins anioniques mais disposés comme le montre la figure 3.

b) Cisaillement $a/2 \langle 100 \rangle$
La séquence des plans devient dans ce cas

$$\dots A_1 \alpha A_2 \beta A_3 \uparrow \alpha' A_1 \beta A_4 \alpha \dots$$

ou

$$\dots A_1 \alpha A_2 \beta' \uparrow A_2 \alpha A_1 \dots$$

c'est le cisaillement au niveau de β qui cette fois produit une macle avec le même empilement anionique que précédemment. On doit donc s'attendre à ce que les énergies de faute soient égales.

c) Cisaillement $a/2 \langle 110 \rangle$
Cette faute est intéressante car il s'agit d'un déplacement égal au vecteur de Burgers parfait de la structure fluorine.
L'empilement après cisaillement compte tenu du fait que

$$\begin{aligned} A_1 &\leftrightarrow A_3 & \alpha &\leftrightarrow \alpha \\ A_2 &\leftrightarrow A_4 & \beta &\leftrightarrow \beta \end{aligned}$$

devient

$$A_1 \alpha A_2 \beta A_3 \alpha \downarrow A_2 \beta A_3 \alpha A_4 \beta \dots$$

ou

$$A_1 \alpha A_2 \beta \downarrow A_1 \alpha A_2 \beta A_3 \alpha A_4 \beta$$

qui sont identiques. Cette faute créée par cisaillement $a/2 \langle 110 \rangle$ est identique à celle produite par l'enlèvement de 4 plans successifs de l'empilement du cristal parfait, soit par formation d'une boucle lacunaire intéressant quatre plans. De plus, on peut aisément constater que les cations au niveau de la faute ont le même environnement anionique avant et après la faute ; ce qui veut dire que les deux plans d'anions encadrant cette couche de cations ne sont pas modifiés par la faute. L'effet d'un tel cisaillement ne se fera donc sentir qu'en 4^e voisin et doit nécessairement conduire à une énergie de faute extrêmement faible (Fig. 4).

4.2 PLAN (110). — Chaque plan (110) contient les deux espèces d'ions avec un rapport de stœchiométrie : 1,5. Il s'agit donc d'un plan propice à la formation de boucles de dislocations prismatiques.
La séquence des huit plans (110) peut s'écrire :

$$A_1 \ B_2 \ A_3 \ B_4 \ A_5 \ B_6 \ A_7 \ B_8$$

A et B désignent les deux positions possibles des anions, les couches A possédant des cations dans des sites α et les couches B des cations dans des sites β. Par une translation $a/2 \langle 001 \rangle$ ou $a/2 \langle 110 \rangle$ les plans se déduisent deux à deux comme suit :

$$A_1 \leftrightarrow A_5 \quad B_2 \leftrightarrow B_6 \quad A_3 \leftrightarrow A_7 \quad B_4 \leftrightarrow B_8 .$$

FIG. 4. — Faute $\frac{a}{2} \langle 110 \rangle (001)$. En trait plein : interactions non modifiées par le cisaillement. En pointillés : interactions modifiées par le cisaillement.

[$\frac{a}{2} \langle 110 \rangle (001)$ fault. Full line arrow : interactions un-modified by the shear. Dashed line arrow : interaction modified by the shear.]

Un cisaillement $a/2 \langle 001 \rangle$ ou $a/2 \langle 110 \rangle$ conduit alors à la séquence suivante :

$$A_1 \ B_2 \ A_3 \ B_4 \downarrow A_1 \ B_2 \ A_3 \ B_4$$

analogue à la faute créée par l'enlèvement de 4 plans (110) successifs.

4.3 PLANS (111). — L'empilement comprend 9 plans. Un plan de cations s'insère tous les deux plans d'anions. La distance entre une couche de cations et une couche d'anions étant la moitié de la distance entre deux couches d'anions (égale à $a_0 \sqrt{3}/12$). On écrira symboliquement :

$$\vdots A \ \gamma \ B \ C \ \beta \ A \ B \ \alpha \ C \ \vdots A \ \gamma \ B .$$

Les lacunes constitutionnelles anioniques forment des motifs réguliers semblables à des Y.

La séquence ci-dessus suggère qu'il y ait le choix entre neuf plans de faute possibles. Ces possibilités se réduisent finalement à 2. Cisaillement entre deux plans d'anions.

$$\begin{aligned} AB \ \alpha \ C \ \updownarrow B \ \alpha \ C \ A \\ \text{faute } F_1 \end{aligned}$$

ou cisaillement entre un plan d'anions et un plan de cations :

$$\begin{aligned} B \ \alpha \ C \ A \ \updownarrow \alpha \ C \ A \\ \text{faute } F_2 \end{aligned}$$

cette dernière faute paraît beaucoup plus difficile à réaliser que la faute F_1 : en effet anions et cations se retrouvent face à face ce qui bien sûr est très défavorable. Cependant on peut imaginer un processus de synchro shear [8] où les cations se déplacent

dans une direction différente de la couche d'anions immédiatement supérieure. La séquence devient alors :

4.4 RÉSULTATS DES CALCULS. — Les valeurs de l'énergie de faute pour les cisaillements décrits précédemment sont résumés dans le tableau suivant

TABLEAU I

Résultats des calculs d'énergies de faute d'empilement dans Y_2O_3 (β/α : cisaillement au niveau d'une couche β ou α).

[Results of the stacking fault energy calculation in Y_2O_3 (β/α : shear at β or α plane).]

Faute	EF (mJ/m ²)	EF/ μb
Plan (001)	β/α	β/α
$\frac{a}{4} \langle 100 \rangle$	4 140/4 831	$6 \times 10^{-2}/7 \times 10^{-2}$
$\frac{a}{2} \langle 100 \rangle$	2 353/935	$3,4 \times 10^{-2}/1,3 \times 10^{-2}$
$\frac{a}{4} \langle 010 \rangle$	4 831/4 140	$7 \times 10^{-2}/6 \times 10^{-2}$
$\frac{a}{2} \langle 010 \rangle$	935/2 353	$1,3 \times 10^{-2}/3,4 \times 10^{-2}$
$\frac{a}{4} \langle 110 \rangle$	842	$1,2 \times 10^{-2}$
$\frac{a}{2} \langle 110 \rangle$	79	$0,1 \times 10^{-2}$
Plan (110)		
$\frac{a}{4} \langle \bar{1}1\bar{2} \rangle$	1 275	$1,85 \times 10^{-2}$
$\frac{a}{4} \langle \bar{1}1\bar{0} \rangle$	//	//
$\frac{a}{2} \langle \bar{1}1\bar{0} \rangle$	2 725	4×10^{-2}
$\frac{a}{2} \langle 001 \rangle$	//	//
$\frac{a}{4} \langle \bar{1}1\bar{1} \rangle$	5 582	8×10^{-2}
Plan (111)		
$\frac{a}{12} \langle \bar{1}1\bar{2} \rangle$	7 191	$1,04 \times 10^{-1}$
F_1		
$\frac{a}{12} \langle \bar{1}2\bar{1} \rangle$	7 197	//
F_2		
$F_2 + SS$	3 477	5×10^{-2}

5. Discussion. — Les calculs d'énergie de faute tels qu'ils sont exposés reposent sur deux approximations :

— le cristal est considéré comme un solide purement ionique.

— Seule la composante électrostatique de l'E.F.E. est prise en considération.

Si la première hypothèse se justifie par la forte ionicité de la liaison Y-O, la seconde approximation est moins évidente pour les fautes créant des perturbations importantes dans la répartition des sites cationiques. En effet lorsqu'un cation voit modifier le nombre de ses premiers voisins de 2 unités il s'ensuit une forte polarisation électrique qui doit écranter l'interaction électrostatique. Cependant la composante électrostatique étant toujours beaucoup plus importante que les termes de polarisation [8] les valeurs données dans le tableau ci-dessus permettent quand même de comparer l'ordre de grandeur des diverses fautes.

D'une manière générale, les E.F.E. calculées sont plus faibles dans les plans (001) que dans les autres plans considérés, en particulier dans les plans (111) où il n'est pas possible d'analyser ces résultats en termes de dissociation des dislocations. Il est d'ailleurs curieux de noter, dans ces plans (111), la valeur identique de l'énergie électrostatique des fautes F_1 et F_2 . Cependant une grande différence va intervenir dans les termes de répulsion puisque pour F_2 anions et cations se trouvent face à face.

Le résultat le plus intéressant des calculs est la valeur exceptionnellement faible pour un cristal ionique de l'E.F.E. correspondant à un cisaillement $b = a/2 \langle 110 \rangle$ (001) : $\Gamma = 80$ mJ/m² ce qui correspond pour une dislocation coin à une dissociation de l'ordre de 600 Å.

De plus, le voisinage de cette faute d'empilement ne variant pas (Fig. 4), la répulsion de Born et les phénomènes de polarisation ne joueront qu'un rôle minime.

D'un point de vue ionique, l'énergie trouvée est donc assez bien représentative de la faute d'empilement. D'autre part, suivant une direction $\langle 110 \rangle$ le vecteur de cisaillement, avant de créer la faute $b = a/2 \langle 110 \rangle$, passe par la position $b = a/4 \langle 110 \rangle$ qui crée une faute d'énergie à peu près dix fois plus forte. La faute d'empilement $b = a/2 \langle 110 \rangle$ serait donc une faute stable ce qui n'est pas toujours le cas dans les cristaux ioniques [7]. On peut remarquer que ce vecteur de cisaillement correspond au vecteur de Burgers parfait de la structure fluorine dont est dérivée la structure cubique type C.

L'expérience montre l'importance des plans (001) dans le processus de déformation plastique de Y_2O_3 [1]. Ce résultat est surprenant dans la mesure où ces plans ne contiennent pas le vecteur de Burgers le plus court de la structure qui est $b = a/2 \langle 111 \rangle$.

Les faibles énergies de faute d'empilement rencontrées dans ces plans, et, en particulier celles créées par $b = a/2 \langle 110 \rangle$ peuvent être une explication à ce glissement préférentiel sur (001).

Les observations faites en microscopie électronique à partir de coupes (001) découpées dans un mono-

cristal d' Y_2O_3 déformé tendent à supporter cette hypothèse.

6. **Conclusion.** — Nous avons calculé les énergies de faute d'empilement dans les plans (100), (110) et

(111) de l'oxyde d'yttrium. Une faute $b = a/2 \langle 110 \rangle$ d'énergie très faible ($\Gamma = 80 \text{ mJ/m}^2$) a été mise en évidence. Ce résultat va dans le sens d'une corrélation étroite entre l'énergie de faute d'empilement et les processus de déformation plastique dans les oxydes.

Bibliographie

- [1] GABORIAUD, R. J., BOISSON, M., GRILHÉ, J., Rapport A.T.P. N° 1 SO7 déc. 1976.
 - [2] PAULING, L., SHAPPEL, M. D., *Z. Kristallogr.* **75** (1932) 128.
 - [3] FERT, A., *Bull. Soc. Fr. Mineral. Cristallogr.* **85** (1962) 267.
 - [4] PATON, M. G., MASLEN, E. N., *Acta Crystallogr.* **19** (1965) 3, 307.
 - [5] FOEX, M., TRAVERSE, J. P., *Bull. Soc. Fr. Mineral. Cristallogr.* **89** (1966) 184.
 - [6] BENSON, G. C., DEMPSAY, E., *Proc. Roy. Soc.* **266A** (1962) 344.
 - [7] FONTAINE, G., *J. Phys. & Chem. Sol.* **28** (1967) 2553.
 - [8] GABORIAUD, R. J., BOISSON, M., GRILHÉ, J., *J. Phys. C. Solid state Phys.* **8** (1975) 3499.
 - [9] GABORIAUD, R. J., BOISSON, M., GRILHÉ, J., *J. Phys. & Chem. Sol.* in press.
-