Énergie élastique des dislocations du quartz

L. Trepied

► To cite this version:

L. Trepied. Énergie élastique des dislocations du quartz. Journal de Physique Lettres, 1978, 39 (22), pp.433-436. 10.1051/jphyslet:019780039022043300 . jpa-00231536

HAL Id: jpa-00231536

<https://hal.science/jpa-00231536>

Submitted on 1 Jan 1978

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
61.70G — 62.20D — 62.20F

ÉNERGIE ÉLASTIQUE DES DISLOCATIONS DU QUARTZ

L. TREPIED

Laboratoire de Structure et Propriétés de l'Etat solide (*)
Université des Sciences et Techniques de Lille, B.P. 36, 59650 Villeneuve d'Ascq, France

(Reçu le 10 juillet 1978, accepté le 3 octobre 1978)

Résumé. — Cette étude a pour objet le calcul de l'énergie élastique des dislocations rectilignes du quartz. Le problème a été programmé dans le cas général pour les cristaux de groupe spatial $P3_1 21$; ce qui permet de traiter le cas des cristaux de plus haute symétrie (en particulier quartz β). On envisage l'énergie élastique des dislocations de vecteurs de Burgers $\mathbf{a}$, $\mathbf{c}$, $\mathbf{a} + \mathbf{c}$ dans tous les plans de glissement possibles, compte tenu des effets piézoélectriques.

Abstract. — This study deals with the calculation of the elastic energy of the dislocations in quartz. The problem has been programmed for the general case for crystals of spatial group $P3_1 21$, which allows the case of crystals of higher symmetry to be treated. A full calculation is given for dislocations of Burgers vectors $\mathbf{a}$, $\mathbf{c}$ and $\mathbf{a} + \mathbf{c}$, in all possible glide planes, taking into account piezo-electric effects.

Introduction. — Les dislocations observées dans le quartz après déformations plastiques naturelles ou expérimentales ont pour vecteurs de Burgers les deux plus petites translations du réseau $\mathbf{a}$ et $\mathbf{c}$ ($|\mathbf{a}| = 4,913 \text{ \AA}$, $|\mathbf{c}| = 5,405 \text{ \AA}$ dans les conditions normales). Les vecteurs de Burgers $\mathbf{a} + \mathbf{c}$ ou $\mathbf{a} - \mathbf{c}$

$(|\mathbf{a} + \mathbf{c}| = |\mathbf{a} - \mathbf{c}| = 7,304 \text{ \AA})$

n'ont jamais été clairement mis en évidence, mais peuvent apparaître lors de jonctions de dislocations $\mathbf{a}$ et $\mathbf{c}$. Le tableau I résume les différents systèmes de glissement possibles associés à ces dislocations.

Certains de ces systèmes de glissement ont été effectivement observés [1]. Dans certains de ces plans de glissement, les dislocations présentent des directions préférentielles bien marquées (à 60° du vecteur de Burgers pour les $\mathbf{a}$ basales, coin pour les $\mathbf{a}$ prismatiques. Voir par exemple une bibliographie dans [2, 3]). Il était donc utile de déterminer l'énergie élastique de ces différentes dislocations (en tenant compte des effets piézoélectriques) pour savoir si ces orientations préférentielles sont dues à des effets d'anisotropie. Les résultats sont présentés et discutés ci-dessous.

TABLEAU I
Les systèmes de glissement possibles du quartz

Systèmes de glissement	Indices	Nombre	Domaine de température	Observations
$\mathbf{a}$ basal	$(0001) \langle 11\bar{2}0 \rangle$	3	basse T	bien caractérisé
$\mathbf{a}$ prismatique	$\{ 10\bar{1}0 \} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	3	haute T	caractérisé
$\mathbf{c}$ prismatique I	$\{ 10\bar{1}0 \} \langle 0001 \rangle$	3	haute T	observé
$\mathbf{c}$ prismatique II	$\{ 11\bar{2}0 \} \langle 0001 \rangle$	3	haute T	caractérisé
$\mathbf{a}$ pyramidal	$\{ 10\bar{1}1 \} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	6	haute T	observé
$\mathbf{a} + \mathbf{c}$ prismatique	$\{ 10\bar{1}0 \} \langle 11\bar{2}3 \rangle$	6	haute T	hypothétique
$\mathbf{a} + \mathbf{c}$ pyramidal	$\{ 10\bar{1}1 \} \langle 11\bar{2}3 \rangle$	6	haute T	hypothétique

(*) Laboratoire associé au C.N.R.S. n° 234.

1. **Méthode de calcul.** — Dans le cas des milieux continus anisotropes, les champs élastique et électrique autour d'une dislocation rectiligne et infinie dans un cylindre infini (de rayon intérieur r_0 , rayon du cœur et extérieur R avec $R \gg r_0$) peuvent être déterminés en résolvant le système d'équations aux dérivées partielles d'équilibre

$$\begin{cases} \operatorname{div} \sigma = 0 \\ \operatorname{div} \mathbf{D} = \rho \end{cases}$$

(σ = tenseur des contraintes, $\mathbf{D}$ vecteur déplacement électrique, ρ = charge électrique locale).

Moyennant les hypothèses suivantes :

— le cœur possède une charge Q par unité de longueur [4],

— hors du cœur la charge peut être considérée comme nulle [*Ibid.*], la méthode d'Eshelby *et al.* [5] généralisée aux cristaux piézoélectriques par Kossevitch *et al.* [6], Saada [4], Faivre et Saada [7] peut être appliquée au cas du quartz si l'on se donne les constantes élastiques, piézoélectriques et diélectriques du cristal, la charge Q jouant le rôle d'un paramètre. Nous avons utilisé comme constantes :

— les constantes élastiques (en 10^{10} N/m²) : $c_{11} = 8,54$, $c_{33} = 10,56$, $c_{44} = 5,71$, $c_{66} = 3,91$, $c_{12} = 0,726$, $c_{13} = 1,44$, $c_{14} = 1,69$ (d'après [8]),

— les constantes piézoélectriques (en 10^4 u.e.s.) : $e_{11} = 5,2$, $e_{14} = 1,2$ (d'après [9]),

— les constantes diélectriques : $d_{11} = 4,49$, $d_{33} = 4,55$ (d'après [8]).

L'énergie de ligne se met sous la forme simple :

$$W = \frac{Kb^2}{4\pi} \log \frac{R}{r_0}$$

avec

$$Kb^2 = K^{(b)} b^2 + bQK^{(b,Q)} + Q^2 K^{(Q)}.$$

Les constantes $K^{(b)}$, $K^{(b,Q)}$ et $K^{(Q)}$ (qui dépendent de θ , angle entre la ligne et le vecteur de Burgers) peuvent être calculées complètement. En fait, nous verrons par la suite que les termes dépendant de Q sont négligeables et ne peuvent faire apparaître de directions préférentielles.

Il est difficile de fixer *a priori* la charge de cœur. Une analyse structurale des dislocations du quartz [2, 3] montre toutefois qu'il existe pour chacune une densité de liaisons non saturées de l'ordre de 2 liaisons tous les 5 Å (0,4 Å), assurant la neutralité de la ligne. La diffusion d'impureté (essentiellement de l'eau sous forme $[H]^+$ et/ou $[OH]^-$) dans le cœur peut cependant charger celui-ci. Pour chaque cas envisagé, nous avons fait un calcul en supposant la charge nulle ($Q = 0$) puisque 10 % des liaisons étaient saturées par des impuretés correspondant à une charge de cœur $Q = 1,7 \times 10^{-3}$ C/m.

La détermination de K a été programmée en langage APL dans le cas général pour les cristaux de classe $P3_1 21$ (ce qui permet de traiter les cas de plus haute symétrie) et traitée sur ordinateur IBM 5100.

Nous donnons ci-dessous les résultats obtenus ($Kb^2(\theta)$) et les discutons.

2. Résultats. — 2.1 DISLOCATIONS a BASALES.

L'énergie élastique (Fig. 1, courbe 1) est indépendante de l'orientation de la ligne par rapport au vecteur de Burgers (variation de l'ordre de 10 % entre position vis et coin). L'orientation préférentielle à 60° du vecteur de Burgers observée en microscopie électronique [2, 3] n'est donc pas due à un effet d'anisotropie élastique.

FIG. 1. — Energies élastiques des dislocations non contenues dans les plans $\{10\bar{1}0\}$ (en 10^{-10} J/m). Dans tous les cas $Q = 0$. 1. Dislocations a basales. 2. Dislocations a pyramidales. 3. Dislocations c dans les plans prismatiques de 2^e espèce. 4. Dislocations a + c pyramidales.

[Elastic energy of the dislocations not contained in $\{10\bar{1}0\}$ planes (10^{-5} erg/cm). For all cases $Q = 0$. 1. a basal dislocations. 2. a pyramidal dislocations. 3. c dislocations in $\{1\bar{1}20\}$ planes. 4. a + c pyramidal dislocations.]

2.2 DISLOCATIONS CONTENUES DANS LES PLANS $\{10\bar{1}0\}$. — On a tracé figure 2 le terme $Kb^2(\theta)$ pour les dislocations de vecteur de Burgers a (courbe 1), c (courbe 2), a + c (courbe 4) contenues dans les plans $\{10\bar{1}0\}$. Dans tous les cas la position de la ligne est repérée par rapport à l'axe c. Pour les dislocations a et c, l'énergie élastique est indépendante de l'orientation. Dans les deux cas il n'y a que des variations de quelques pourcents entre position vis et coin. Toutefois le calcul montre que l'énergie des c est environ 50 % plus grande que celle des a. Pour les dislocations a + c, les effets d'anisotropie sont plus marqués. L'énergie élastique présente un minimum vers 40° (correspondant à la position vis parallèle à la rangée dense $\langle 11\bar{2}3 \rangle$) et un maximum vers 130° (position coin). L'écart entre ces extrema est cependant

FIG. 2. — Energies élastiques des dislocations contenues dans les plans $\{10\bar{1}0\}$ (en 10^{-10} J/m). Dans tous les cas $Q = 0$. 1. Dislocations *a*. 2. Dislocations *c*. 3. Somme des énergies des dislocations *a* et *c*. 4. Dislocations *a + c*.

[Elastic energy of the dislocations contained in $\{10\bar{1}0\}$ planes (in 10^{-5} erg/cm). For all cases $Q = 0$. 1. *a* dislocations. 2. *c* dislocations. 3. Sum of the energies of dislocations with Burgers vectors *a* and *c*. 4. *a + c* dislocations.]

faible, de l'ordre de 20 %. La courbe 3 (Fig. 2) représente la somme des énergies élastiques des dislocations *a* et *c*. La comparaison avec l'énergie des dislocations *a + c* montre que pour des angles compris entre 0 et $\Pi/2$ (angles des lignes avec l'axe *c*), la recombinaison de deux dislocations parallèles de vecteurs de Burgers *a* et *c* en une dislocation de vecteur *a + c* doit se produire spontanément. Le diagramme de Wulf ($\rho = 1/Kb^2(\theta)$) montre de plus que dans cet intervalle la dislocation *a + c* est stable. On note cependant que le gain d'énergie entre la dislocation *a + c* et deux dislocations parallèles *a* et *c* est faible. Pour $\Pi/2 < \theta < \Pi$, les dislocations *a + c* doivent au contraire se décomposer en deux dislocations parallèles *a* et *c*.

La comparaison entre les dislocations *a* basales (Fig. 1, courbe 1) et *a* prismatiques (Fig. 2, courbe 1) montrent que leurs énergies sont équivalentes. Le fait que le système *a* basal soit le plus fréquemment rencontré à basse température [1] n'est pas dû à l'énergie élastique des dislocations mises en jeu.

2.3 DISLOCATIONS CONTENUES DANS LES PLANS $\{11\bar{2}0\}$. — Les dislocations *c* contenues dans ces plans ont une énergie indépendante de l'orientation de la ligne (Fig. 1, courbe 3). Cette énergie est équivalente à celles des dislocations *c* contenues dans les plans $\{10\bar{1}0\}$, ce qui suggère la possibilité de glissement dévié facile pour ces dislocations.

2.4 DISLOCATIONS CONTENUES DANS LES PLANS $\{10\bar{1}1\}$. — Les dislocations *a* contenues dans ces

plans sont très sensibles à l'orientation de la ligne (Fig. 1, courbe 2). La courbe Kb^2 montre deux minima très marqués pour $\theta = 0$ (position coin) et $\theta = \Pi/2$ (position vis). L'énergie varie de l'ordre de 70 % entre les extrema. Les minima correspondent à des valeurs d'énergie de l'ordre de celles des dislocations *a* basales ou *a* prismatiques de sorte que les dislocations *a* doivent présenter facilement du glissement dévié entre ces plans, bien que le système *a* pyramidal soit le plus difficile à développer, compte tenu des forts effets d'anisotropie.

2.5 DISLOCATIONS *a + c* PYRAMIDALES. — Dans ce cas les effets d'anisotropie sont bien marqués (Fig. 1, courbe 4). La courbe présente un minimum vers 150° qui ne correspond pas à une position particulière de la ligne. La différence d'énergie entre extrema est de l'ordre de 40 %.

3. Discussion. — L'ensemble de ces résultats montre clairement que, sauf pour les dislocations contenues dans les plans pyramidaux, les effets d'anisotropie sont négligeables. Ce résultat est directement lié à la structure du quartz, les liaisons entre chaînes de tétraèdres SiO_4 et à l'intérieur des chaînes étant de même nature fortement covalente. Il s'ensuit que les constantes élastiques sont peu dispersées

$$(c_{33}/c_{11} = 1,24, \quad c_{13}/c_{12} = 0,5)$$

ce qui n'est pas le cas pour des cristaux de même symétrie (T_c par exemple [10]) pour lesquels les effets d'anisotropie sont plus marqués. De plus, il apparaît que le couplage piézoélectrique est très faible, en raison de la grande disparité entre les constantes élastiques et piézoélectriques. Enfin nos calculs montrent que la charge de cœur ne crée aucune variation sensible sur l'énergie, au plus quelques pourcents non significatifs.

De ces calculs, il résulte que les orientations préférentielles des dislocations (à 60° du vecteur de Burgers pour les dislocations *a* basales ou coin pour les dislocations *a* prismatiques) ne sont pas dues à des effets d'anisotropie mais à des problèmes de cœur. Dans [2, 3], nous avons montré au moyen d'un modèle cristallographique simplifié, que ces orientations préférentielles correspondent à des positions très stables des lignes, leur propagation nécessitant la rupture d'un maximum de liaisons Si-O. Ces orientations se prêtent à une dissociation en deux partielles colinéaires donnant une faute de faible énergie dans les deux cas cités. Pour les autres dislocations aucune orientation préférentielle n'a été observée jusqu'à présent. On peut cependant s'attendre à des orientations vis ou coin pour les *a* pyramidaux et vis pour les *a + c* prismatiques.

Le choix d'un système de glissement est donc déterminé par des considérations de mobilité de cœur pour les dislocations de vecteurs de Burgers *a* et *c*. S'agissant des plans pyramidaux on devrait percevoir

l'effet d'anisotropie, mais dans ce cas encore, on sait que les dislocations de vecteurs de Burgers $\mathbf{a}$ se dissocient en deux partielles colinéaires [3]. Restent les dislocations de vecteurs de Burgers $\mathbf{c} + \mathbf{a}$. Le calcul montre qu'elles n'existent pas pour certaines directions. Dans le glissement pyramidal, la décomposition d'une dislocation de vecteur de Burgers $\mathbf{c} + \mathbf{a}$ en deux dislocations parallèles de vecteurs de Burgers $\mathbf{a}$ et $\mathbf{c}$ donnerait une configuration complètement sessile. De plus, la microscopie électronique de sous-joints formés de dislocations $\mathbf{a}$ et $\mathbf{c}$ ne met pas en évidence de segments $\mathbf{a} + \mathbf{c}$ aux jonctions. L'existence de telles dislocations reste donc très hypothétique.

Rappelons enfin les limitations de ces calculs. Nous avons supposé un cristal infini ($R \gg r_0$) et nous avons

donc négligé les effets des relaxations élastiques et électriques aux surfaces. De plus nous ne tenons pas compte de l'énergie de cœur qui est sans doute de l'ordre de grandeur des variations obtenues dans certains cas. Enfin nous ne tenons pas compte des effets de température. La variation continue des constantes élastiques entre 0 et 573 °C (température de transition entre quartz α et quartz β à la pression normale) pourrait donner des résultats légèrement différents suivant le domaine de température.

Remerciements. — L'auteur remercie J. C. Marti du laboratoire d'I.E.E.A., service Informatique, qui s'est chargé de la mise au point du programme de calcul APL.

Bibliographie

- [1] BAËTA, R. D., ASHBEE, K. H. G., *Am. Miner.* **54** (1969) 1551, 1574.
- [2] TREPIED, L., DOUKHAN, J. C., *J. Mat. Sci.* **13** (1978) 492.
- [3] TREPIED, L., DOUKHAN, J. C., Soumis à *Phys. Status Solidi*.
- [4] SAADA, G., *Phys. Status Solidi* (b) **44** (1971) 717.
- [5] ESHELBY, J. D., READ, W. T., SHOCKLEY, W., *Acta Met.* **1** (1953) 251.
- [6] KOSSEVITCH, A. M., PASTOUR, A. P., *Kristallografiya* **12** (1967) 115.
- [7] FAIVRE, G., SAADA, G., *Phys. Status Solidi* (b) **52** (1972) 127.
- [8] PASCAL, P., *Nouveau Traité de Chimie Minérale*, tome VIII, Deuxième fascicule (Masson et Cie Ed.) 1965, p. 57 et 61.
- [9] CADY, W. G., *Piezoelectricity*, First Edition (Mc Graw Hill Book Company, Inc. New York) 1946, p. 219.
- [10] DI PERSIO, J., DOUKHAN, J. C., SAADA, G., *Phys. Status Solidi* **42** (1970) 297.