Chap. II : Défauts dans les matériaux

II.1. Introduction

L'évolution spectaculaire de la diversité et des performances des matériaux est due à une compréhension et à une maîtrise de plus en plus fines de leur structure, ainsi que des relations entre structure et propriétés d'emploi. La diversification des matériaux est également liée à une spécialisation de plus en plus grande.

Les structures cristallines sont en réalité très rarement parfaites. On y trouve une grande variété de défauts qui jouent un rôle fondamental envers les propriétés des matériaux. Les défauts correspondent aux régions microscopiques d'un cristal dans lesquelles un atome est entouré de proches voisins situés en des positions différentes de celles observées dans un cristal parfait. Traditionnellement, les défauts sont répartis en quatre catégories suivant leur dimensionnalité. Les paragraphes suivants passent en revue les défauts ponctuels (0D), linéaires (1D), planaires (2D), et volumiques (3D).

II.2. Défauts ponctuels (Dimension 0)

Ce sont des perturbations du réseau à l'échelle atomique. Parmi les défauts atomiques (Fig. 1) on trouve les lacunes (sites vacants sur le réseau), les interstitiels (atomes situés entre les atomes du cristal), les atomes d'une espèce chimique différente en solution de substitution (dans le réseau) ou d'insertion (interstitiels). Parmi les défauts électroniques on trouve les paires électron/trou.



Figure 1 : Défauts ponctuels (lacunes, solutés en insertion et en substitution) et déplacements atomiques associés. D'après www.ocw.mit.edu



Figure 2 : Exemples de défauts ponctuels simples. (a) Lacune. (b) Atome en position interstitielle. (c) Atome en position substitutionnelle. *Figure extraite du livre « Bases physiques de la plasticité des solides », par J.-C. Tolédano.*

Dans les solides ioniques ou iono-covalents, les défauts (y compris les lacunes) peuvent être chargés et on trouve fréquemment des associations de défauts qui préservent la neutralité électrique (Fig.3) : défauts de Schottky (lacune de cation + lacune d'anion), défauts de Frenkel (lacune et interstitiel de charges opposées). Parmi les propriétés influencées par les défauts ponctuels on trouve le comportement mécanique à chaud, les propriétés de percolation et de transport (diffusion de matière, de chaleur), ainsi que la conductivité électrique.



Figure 3 : défauts de Schottky, défauts de Frenkel

II.2. Défauts Linéaire (Dimension 1)

Les défauts linéaires observés dans les cristaux sont appelés dislocations (Fig.4). Les dislocations sont obtenues par le glissement \vec{b} d'une partie du cristal le long d'un plan. La ligne de dislocation proprement dite correspond à la ligne du plan de glissement séparant la partie du cristal qui a glissé de celle qui est restée immobile. Le vecteur de glissement *b* est appelé **vecteur de Burgers** de la dislocation.

On distingue les **dislocations coin**, pour lesquelles \vec{b} est perpendiculaire à la ligne de dislocation, et les **dislocations vis**, pour lesquelles \vec{b} est parallèle à la ligne de dislocation. Les autres dislocations sont dites mixtes.



Figure 4 : Dislocation du type coin (Figure extraite du livre « Physique des matériaux »,par M. Gerl et J.-P. Issi.)

La moitié inférieure du cristal comporte un demi-plan atomique supplémentaire. Le bord supérieur de ce demi-plan constitue la ligne de dislocation. Les atomes situés sur cette ligne n'ont pas le même nombre d'atomes premiers voisins que les autres atomes au sein du cristal. La dislocation induit par ailleurs un important champ de déplacement des atomes dans son environnement proche



Figure 5 : Représentation du Vecteur du Berger



Figure 6 : Dislocation dans un alliage de titane (Cliché : Centre des Matériaux ; observation dans les années 1950) (Existance postulée dés 1934 : Orowan, Polanyi, Taylor et Burgers)

a) . Formation d'une dislocation de type « coin »

La Figure 7 montre la formation d'une dislocation de type coin par le glissement \vec{b} d'une partie d'un cristal cubique simple le long d'un plan (ABCD). La ligne de dislocation coin (PO) s'étend à l'infini dans le plan de glissement, dans une direction perpendiculaire à la direction de glissement \vec{b} .



Figure 7 : Formation d'une dislocation coin (OP) dans le plan de glissement ABCD. (Figure réalisée à partir de l'ouvrage « Dislocations et plasticité des cristaux », par J.-L. Martin.)

La portion de cristal située au-dessus du plan de glissement et à gauche de la ligne de dislocation (OP) subit un glissement \vec{b} par rapport au cristal situé en-dessous. Une dislocation est dite « coin » lorsque le vecteur de glissement \vec{b} impliqué dans sa formation lui est perpendiculaire.

La dislocation coin peut également être décrite comme faisant suite à l'insertion d'un demi-plan supplémentaire après écartement de deux plans atomiques adjacents. La ligne de dislocation coïncide avec l'extrémité de ce demi-plan supplémentaire.

Les atomes situés sur une ligne de dislocation coin n'ont pas le nombre de voisins attendu dans une structure sans défauts. Dans les régions très proches de la ligne de dislocation, les atomes ont un environnement similaire à celui d'un cristal parfait, mais ils sont déplacés par rapport à leurs positions d'équilibre. Du côté du demi-plan supplémentaire par rapport au plan de glissement, les distances interatomiques observées entre les atomes sont plus petites que la distance attendue à l'équilibre : la zone correspondante est dite en compression. Du côté opposé au demi-plan supplémentaire, les distances interatomiques sont à l'inverse plus grandes que la distance attendue à l'équilibre : la zone est alors dite en traction. La présence d'une dislocation augmente donc l'énergie interne du cristal, d'une quantité qui dépend de la nature des liaisons chimiques.

b) . Formation d'une dislocation de type « vis »

La Figure 8 montre la formation d'une dislocation de type vis par le glissement \vec{b} d'une partie d'un cristal cubique simple le long d'un plan (ABCD). La ligne de dislocation vis (PO) marque la limite entre la région du cristal qui a glissé et celle qui n'a pas glissé. Celle-ci s'étend à l'infini dans le plan de glissement, dans une direction parallèle à la direction de glissement \vec{b} .



Figure 8 : Formation d'une dislocation vis (OP) dans le plan de glissement ABCD. Figure réalisée à partir de l'ouvrage « Dislocations et plasticité des cristaux », par J.-L. Martin.

La portion de cristal située à droite du plan de glissement et au-dessus de la ligne de dislocation (OP) subit un glissement \vec{b} par rapport au cristal situé en-dessous.

On peut également se représenter une dislocation vis en imaginant que l'on fait une coupure plane à travers le cristal, et que l'on fait glisser l'un des bords obtenus par rapport à l'autre d'une distance interatomique. La ligne de dislocation vis correspond alors au fond de la coupure. Une dislocation vis transforme les plans successifs d'atomes en surfaces hélicoïdales, d'où son nom.



Figure 9 : Déformation plastique par déplacement d'une dislocation coin et vis

c) . Dislocations mixtes

Une dislocation n'est en général pas rectiligne. La Figure 10 présente une ligne de dislocation courbe *VC* séparant les parties d'un cristal restées immobiles et celles qui ont subi le glissement \vec{b} sur le plan défini par les points *V*, *M* et *C*.

La portion de l'arc *VC* perpendiculaire à \vec{b} , autour du point *C*, a un caractère de dislocation coin. La portion de la dislocation parallèle à \vec{b} , autour du point *V*, est de type vis. La portion restante de l'arc *VC* constitue une portion de dislocation de type mixte.



Figure 10 : Exemple de dislocation mixte. (Figure extraite du livre « Introduction to dislocations », par D. Hull et D.J. Bacon).

II.3. Défauts Planaire (Dimension 2)

Un défaut planaire correspond à une région perturbée du cristal dont le volume est comparable à celui d'un plan d'atomes. Des exemples de défauts planaires sont :

- 1. les surfaces libres qui limitent un échantillon cristallin réel.
- 2. les joints de grains, surfaces frontières entre les cristallites constituant les échantillons polycristallins [Figure 11a].
- 3. Les défauts d'empilement sont également courants dans les structures compactes formées par les métaux [Figure 11b].



Figure 11 : (a) Représentation schématique de l'arrangement des atomes au niveau d'un joint de grain dans un échantillon polycristallin. (b) Défaut d'empilement produit par l'absence d'un plan C dans la séquence …ABC ABC A… constituant une structure cubique compacte..

Le joint de grain, zone située entre deux cristallites adjacentes, est un défaut qui correspond à la fois à une discontinuité d'orientation cristalline et à une zone dans laquelle les positions relatives des atomes ne correspondent pas aux positions d'équilibre minimisant le potentiel d'interaction.

II.4. Défauts volumiques

Un défaut volumique est un défaut à trois dimensions. Quand une partie du cristal est remplacée par un volume d'un composé différent, la différence est de nature chimique et peut ou non être accompagnée de différences cristallographiques.

II.4.1 Les différents types de défauts volumiques

La partie étrangère du cristal peut être un précipité, une inclusion, un pore.

a). Pores

Un pore est une cavité fermée à l'intérieur d'un cristal ou d'un poly-cristal.





b). Inclusion

Les inclusions sont des « impuretés » dans le métal, qui proviennent de son élaboration à l'état liquide. Elles sont le plus souvent des oxydes, des sulfures ou des silicates.



Figure 13 : micrographie optique :a) oxydes ; b)Sulfures ; c) silicates

c). Précipité

Particule solide de petite taille entièrement enrobée à l'intérieur d'un grain qui constitue sa matrice. En général les précipités apparaissent dans un cristal à l'issue de réactions à l'état solide. Selon les caractéristiques des deux réseaux cristallins, les joints de phases entre précipité et matrice peuvent avoir différentes structures :



Figure 14 : a) Précipité cohérent : continuité de certains plans cristallins entre le précipité et la matrice. b) Précipité semi-cohérent : les déformations sont relaxées par la présence de dislocations aux interfaces. c) Précipité incohérent.

II.4.2. Les effets des défauts volumiques:

Les défauts volumiques n'ont pas les mêmes propriétés mécaniques, en particulier module de Young, que le reste du matériau. Il s'ensuit des concentrations de contrainte et donc un amorçage de rupture possible.

Ils n'ont pas non plus les mêmes propriétés chimiques. Il peut donc se produire des piles de corrosion localisées, produisant de la piqûration.

Enfin, ce sont des obstacles aux dislocations. Dans les matériaux ductiles, la présence de précipités entraîne donc une élévation de la limite élastique R_e . Ce mécanisme est appelé « durcissement structural ».