

Du 3 au  
5 avril  
2023



# Colloque Plasticité

## 3-5 Avril 2023

### Recueil des résumés



Comité d'organisation:

- Tristan ALBARET (ILM, Univ Lyon 1)
- Stéphanie DESCHANEL (MatéIS, INSA-Lyon)
- Pierre-Antoine GESLIN (MatéIS, INSA-Lyon)
- Gergely MOLNAR (LaMCoS, INSA-Lyon)
- Michel PEREZ (MatéIS, INSA-Lyon)
- David RODNEY (ILM, Univ Lyon 1)

**Présentations orales  
(dans l'ordre de passage)**

# Lois de comportement de plasticité cristalline intégrant le tenseur densité de dislocations

Samuel Forest<sup>1)\*</sup>

1) Mines Paris PSL University Centre des Matériaux CNRS UMR7633

\*adresse email: samuel.forest@minesparis.psl.eu

## Résumé pour : invité

La théorie de la plasticité à gradient est un modèle continu de la plasticité cristalline prenant en compte le tenseur densité de dislocations. Elle est utilisée pour représenter la formation d'empilements de dislocations aux interfaces dans les cristaux [1]. Le modèle *microcurl* [2], par exemple, prévoit les effets de la taille des canaux dans la réponse contrainte-déformation des microstructures laminées composées de couches alternées élastiques et plastiques. Le choix de la loi de comportement liée aux termes de gradient est essentiel pour la description quantitative de ces effets. En particulier, on montre que l'ansatz quadratique par rapport au tenseur densité de dislocations pour la fonction de densité d'énergie libre de Helmholtz, largement utilisé dans les modèles de plasticité à gradient et de champ de phase, conduit à des lois d'échelle physiquement irréalistes. Des potentiels alternatifs ont été proposés dans [3]. Le concept de plasticité renversable est mis en avant dans cette dernière contribution, conduisant à des boucles contrainte-déformation cycliques inhabituelles avec des points d'inflexion. Il représente un modèle continu du scénario *first-in/last out* pour les empilements de dislocations initialement proposé dans l'article fondateur [4]. Un effet remarquable a été prédit par le modèle *microcurl* dans la plasticité des polycristaux. Les tailles de grain inférieures au micron favorisent la localisation du glissement plastique sous la forme de bandes de glissement intenses interconnectant les grains des polycristaux, alors qu'un glissement plus diffus est observé pour des tailles de grain plus importantes [5]. Cela est dû au coût énergétique élevé associé à la courbure du réseau. Les avancées récentes impliquent également la prise en compte des contributions dissipatives de l'évolution du tenseur de densité des dislocations [6].

[1] S.D. Mesarovic, R. Baskaran, and A. Panchenko. *Thermodynamic coarsening of dislocation mechanics and the size-dependent continuum crystal plasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 58:311–329, 2010.

[2] N. M. Cordero, A. Gaubert, S. Forest, E. Busso, F. Gallerneau, and S. Kruch. *Size effects in generalised continuum crystal plasticity for two-phase laminates*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 58:1963–1994, 2010.

[3] S. Wulfinghoff, S. Forest, and T. Böhlke. *Strain gradient plasticity modeling of the cyclic behavior of laminate microstructures*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 79:1–20, 2015.

[4] R. J. Asaro. *Elastic-plastic memory and kinematic hardening*. Acta Metallurgica, 23:1255–1265, 1975.

[5] N. M. Cordero, S. Forest, E. P. Busso, S. Berbenni, and M. Cherkaoui. *Grain size effects on plastic strain and dislocation density tensor fields in metal polycrystals*. Computational Materials Science, 52:7–13, 2012.

[6] M. Jebahi and S. Forest, *An alternative way to describe thermodynamically-consistent higher-order dissipation within strain gradient plasticity*. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 170, pp. 105103, 2022.

# Vers un transfert discret-continu de la description des défauts cristallins

Houssam Kharouji<sup>1,2)\*</sup>, Vincent Taupin<sup>1,2)</sup>, Julien Guénoles<sup>1,2)</sup>, Lucile Dezerald<sup>2,3)</sup>, Pierre Hirel<sup>4)</sup>, Philippe Carrez<sup>4)</sup>, Patrick Cordier<sup>4)</sup>

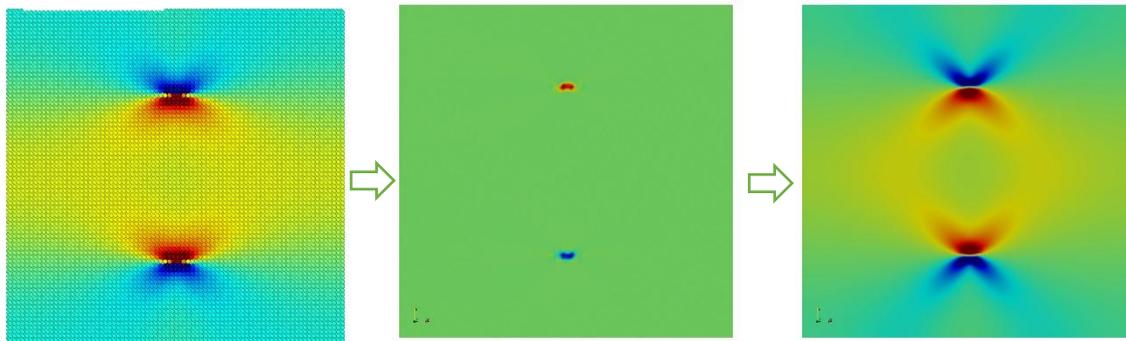
- 1) Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers, LEM3, F-57000 Metz, France
- 2) Labex DAMAS, Université de Lorraine, F-57000 Metz, France
- 3) Institut Jean Lamour, CNRS, Université de Lorraine, Nancy F-54000, France
- 4) Univ. Lille, CNRS, INRAE, Centrale Lille, UMR 8207 - UMET - Unité Matériaux et Transformations, F-59000 Lille, France

\* adresse email : houssam.kharouji@univ-lorraine.fr

## Résumé pour : Oral

Le comportement mécanique des matériaux cristallins est régi par des processus qui se produisent à de nombreuses échelles de longueur. À une échelle de longueur de l'ordre de l'angström, les interactions et la structure atomique des défauts cristallins contrôlent les réponses élastiques et plastiques. Les modélisations par des approches Ab Initio et de Dynamique/Statique moléculaire sont adaptées à cette échelle. Pour étudier le comportement mécanique des matériaux à une échelle plus grande, microscopique, des approches continues sont nécessaires. Cependant elles ne sont pas applicables à l'échelle atomique. Inversement, les méthodes atomistiques ne sont pas applicables à l'échelle microscopique. Ce travail propose une démarche multi-échelles via le croisement d'approches atomistiques et continues. L'objectif est de transférer des propriétés (vecteur de Burgers, énergie, mobilité...) des défauts cristallins (dislocations, joints de grains/phases...) de l'échelle atomique à l'échelle continue. La méthode repose sur un croisement entre les méthodes atomistiques et un modèle de mécanique des champs de dislocations/désinclinaisons [1] développé pour simuler la structure de cœur des défauts cristallins.

[1] C. Fressengeas, V. Taupin, L. Capolungo, An elasto-plastic theory of dislocation and disclination fields, Int. J. Solids Structures 48, 3499 (2011).



*Transfert atomistique-continu du champ de déformation créé par un dipôle de dislocations coin dans MgO*

# Investigation des effets de taille sous chargements complexes par la dynamique des dislocations discrètes en 3D

Yaovi Armand AMOUZOU-ADOUN<sup>1)\*</sup>, Mohamed JEBABI<sup>1)</sup>, Marc FIVEL<sup>2)</sup>, Samuel FOREST<sup>3)</sup>, Jean-Sebastien LECOMTE<sup>1)</sup>, Christophe SCHUMAN<sup>1)</sup>, Farid ABED-MERAIM<sup>1)</sup>

- 1) Arts et Metiers Institute of Technology, CNRS, Université de Lorraine, LEM3, F-57000 Metz, France
- 2) Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMaP, F-38000 Grenoble, France
- 3) Mines Paris, PSL University, Centre des matériaux (CMAT), CNRS UMR 7633, BP 87, 91003 Evry, France

\*adresse email: yaovi.amouzou-adoun@ensam.eu

## Résumé pour oral

Bien qu'ils présentent des fortes capacités en matière de prédiction des effets de taille, les modèles de plasticité à gradient développés dans la littérature manquent encore de maturité pour être appliqués dans le monde industriel. Il a été démontré que ces modèles peuvent conduire à des phénomènes méconnus sous certains chargements complexes, comme l'apparition de 'gaps' élastiques qui caractérisent la classe de modèles à gradient la plus utilisée dans la littérature. Ce phénomène, qui consiste en un retardement de l'écoulement plastique suite à un changement infinitésimal dans les conditions aux limites, n'a pas encore été observé dans la réalité et sa nature physique ne cesse de susciter la controverse [1,2]. Dans le but d'élucider le mystère des 'gaps' élastiques, ce travail propose d'appliquer la dynamique des dislocations discrètes en 3D (DDD-3D) pour faire une étude approfondie des effets de tailles dans les monocristaux sous chargements proportionnels et non-proportionnels complexes. Les résultats obtenus ont permis de reproduire des effets intéressants prouvés expérimentalement, comme l'effet « Hall-Petch », l'écrouissage non-linéaire de type III d'Asaro [3] ou encore la plasticité réversible [4]. Toutefois, aucun signe de 'gaps' élastiques n'a été obtenu, même sous des chargements non-proportionnels générant de tels 'gaps' en appliquant des modèles de plasticité à gradient. Ceci constitue une première preuve que ces 'gaps' peuvent ne pas être physiques.

[1] M. Jebahi, L. Cai, and F. Abed-Meraim. Strain gradient crystal plasticity model based on generalized non-quadratic defect energy and uncoupled dissipation. *International Journal of Plasticity*, 126:102617, 2020.

[2] M. Jebahi and S. Forest. An alternative way to describe thermodynamically-consistent higher-order dissipation within strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 170:105103, 2023.

[3] R. J. Asaro. Elastic-plastic memory and kinematic-type hardening. *Acta Metallurgica*, 23:1255–1265, 1975.

[4] Y. Xiang and J. J. Vlassak. Bauschinger and size effects in thin-film plasticity. *Acta Materialia*, 54:5449–5460, 2006.

# **Ecrouissage d'un acier 316L élaboré par fabrication additive : caractérisation mécanique, microstructurale et simulation.**

Léo MONIER<sup>1\*</sup>, Arthur DESPRES<sup>1</sup>, Muriel VERON<sup>1</sup>, Jean-Jacques BLANDIN<sup>1</sup>, Guilhem MARTIN<sup>1</sup>, Flore VILLARET<sup>2</sup>, Yang Shen<sup>2</sup>

1) Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMAP, F-38000 Grenoble

2) EDF R&D, Avenue des Renardières, 77250 Orvanne, France

\* leo.monier@grenoble-inp.fr

## **Résumé pour : oral**

Le 316L élaboré par fabrication additive fusion laser lit de poudre a des exigences de limite élastique et de ductilité pour son utilisation dans le domaine du nucléaire. Il y a alors un besoin d'examiner le comportement plastique du matériau en fonction du traitement thermique. La microstructure obtenue par fabrication additive du 316L comporte des différences avec son équivalent forgé, où l'on peut citer : une texture cristallographique, des ségrégations chimiques, une importante quantité de dislocations organisées en cellules, la présence d'oxydes. L'objectif de ce travail est d'essayer d'évaluer l'impact de ces différences sur l'écrouissage du matériau. Il est notamment dit dans la littérature que la texture peut avoir un impact très important en favorisant ou non la formation de macle lors de la déformation [1] ; mais aussi que les dislocations organisées en cellules favorisent le maclage ce qui permet d'obtenir un excellent compromis limite élastique/allongement à rupture [2]. Des pièces en acier inoxydable 316L ont été fabriquées pour obtenir deux microstructures différentes. Des traitements thermiques sont appliqués sur ces microstructures dans l'objectif de progressivement enlever les spécificités de la microstructure issue de solidification. Une approche expérimentale et de simulation est mise en place. Pour l'approche expérimentale, des essais de tractions sont effectués dans différentes directions par rapport à la direction de construction et sur les différentes microstructures. Des caractérisations au cours de la déformation sont réalisées au MEB et au MET, notamment pour examiner le maclage. Pour l'approche de simulation, un modèle de plasticité basé sur le modèle Kocks & Mecking prenant en compte le maclage est implémenté pour discuter de l'impact des différents éléments microstructuraux sur les paramètres du modèle.

[1] Wang et al, 2020, Material science and engineering A

[2] Wang et al, 2017, Nature Materials

# **Do dislocations evolve during additive manufacturing?**

## **– A synchrotron X-ray diffraction study**

S. Gaudez<sup>1</sup>, K. A. Abdesselam<sup>1</sup>, H. Gharbi<sup>1</sup>, Z. Hegedüs<sup>2</sup>, U. Lienert<sup>2</sup>, W. Pantleon<sup>3</sup>,  
M. V. Upadhyay<sup>1\*</sup>

- 1) Solid Mechanics Laboratory (LMS), CNRS, Ecole Polytechnique, IP Paris, Palaiseau, France
- 2) Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), Hamburg, Germany
- 3) Department of Civil and Mechanical Engineering, Technical University of Denmark (DTU), Kongens Lyngby, Denmark

\*adresse email: [manas.upadhyay@polytechnique.edu](mailto:manas.upadhyay@polytechnique.edu)

### **Résumé pour : Oral**

During additive manufacturing (AM) of alloys, just after melting of feedstock, the material rapidly solidifies. Then, for the remaining build time, it is subjected to heating-cooling cycles in the solid-state i.e., solid-state thermal cycling (SSTC), at varying temperature amplitudes and rates. These highly non-equilibrium processes together determine the microstructure of as-built alloys, which exhibit heterogeneities at multiple length scales.

Amongst the different possible microstructural features, dislocations are ubiquitous in any as-built alloy. They mainly organize in intragranular dislocation cells with a high dislocation density in the cell walls and a low density in the cell interiors. Currently, there are two main hypotheses on their origin in as-built alloys. One hypothesis is that they form in interdendritic regions during rapid solidification and do not significantly evolve, if at all, during SSTC. The opposing hypothesis is that thermo-mechanical forces occurring during SSTC result in significant changes in the dislocation structures formed during rapid solidification. Both hypotheses are based on studies performed on as-built samples; yet, it is impossible to univocally separate the role of SSTC from that of solidification on dislocation structure and internal stress formation and evolution during AM by solely analyzing as-built samples. A clear insight can only be gained by tracking their evolution during the AM process.

To that end, we have conducted an experiment that involves performing high resolution reciprocal space mapping (HRRSM), a synchrotron-based X-ray diffraction technique, during AM of a thin-wall from a single-phase alloy [1]. AM is performed using a miniature Laser Metal Deposition (mini-LMD) machine that has been specially designed for synchrotron-based experiments. HRRSM during AM allows tracking the evolution of intragranular strains and orientations in individual grains embedded in the bulk as a function of added layers, and thus SSTC. Using a single-phase alloy, specifically 316L stainless steel, ensures that intragranular evolutions, if any, would be mainly due to dislocation evolution, and there are no solid-state phase transformations. In this talk, I will first show how these experiments answer the question posed in the title.

[1] S. Gaudez, K. A. Abdesselam, H. Gharbi, Z. Hegedüs, U. Lienert, W. Pantleon, M. V. Upadhyay, “High resolution reciprocal space maps reveal dislocation structure evolution during 3D printing” (submitted).

# Finite element implementation of the thermal field dislocation mechanics model

Gabriel D. Lima-Chaves<sup>1)\*</sup>, Manas V. Upadhyay<sup>1)</sup>

1) Laboratoire de Mécanique des Solides (LMS), Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), École Polytechnique, Institut Polytechnique de Paris, 91128 Palaiseau, France

\*adresse email: gabriel-dante.lima-chaves@polytechnique.edu

## Résumé pour : oral

Recently, a thermo-mechanical model of field dislocations, henceforth called the T-FDM model [1], was proposed. The motivation behind the development of this model was two-fold: (i) to study the dynamics of dislocations under transient heterogeneous temperature fields such as those occurring during metal additive manufacturing, quenching, etc., and (ii) calculate the temperature changes induced due to dislocation activity.

In this study, the partial differential equations (PDEs) of the T-FDM model are numerically solved using the finite element (FE) method. The three main governing equations of this model are (i) the balance of linear momentum, which gives the stress equilibrium equation, (ii) the conservation of energy, which gives the temperature evolution equation, and (iii) the conservation of the defect character, which reduces to the dislocation transport equation under isothermal conditions. The first two governing equations are elliptic and parabolic PDEs in space and time, and they are solved using time-explicit continuous Galerkin FE schemes. The third governing equation is a first-order hyperbolic PDE, and it is numerically solved using the time-explicit Runge-Kutta discontinuous Galerkin FE approach developed in [2]. This approach is implemented in FEniCS [3], which is an open-source platform built to solve PDEs via the FE method.

In this talk, I will present the governing equations of the T-FDM model, its numerical implementation using the FE method and its validation, followed by some illustrative examples. Specifically, the validation is done by performing a simulation of the movement of a screw dislocation under a constant stress field and comparing the temperature field generated around the dislocation core with the analytical solution derived in [4] for different dislocation velocities.

## Rerences:

- [1] M.V. Upadhyay, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 145 (2020) 104150.
- [2] M.V. Upadhyay, J. Bleyer, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 30 (2022) 034002.
- [3] M. Alnæs, J. Blechta, J. Hake, A. Johansson, B. Kehlet, A. Logg, C. Richardson, J. Ring, M.E. Rognes, G.N. Wells, *Archive of Numerical Software* Vol 3 (2015)
- [4] B. Gurrutxaga-Lerma, *International Journal of Solids and Structures* 108 (2017), 263–274

# Construction d'un modèle de Mécanique des Champs de Dislocations pour le comportement viscoplastique de l'UO<sub>2</sub>

Étienne Castelier<sup>1)\*</sup>, Hakima Bouizem<sup>1)</sup>, Vincent Taupin<sup>2)</sup>

1) CEA, DES, IRESNE, DEC, Cadarache F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance, France

2) Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers, LEM3, 57070 Metz, France

\*adresse email: etienne.castelier@cea.fr

## Résumé pour : oral

Le dioxyde d'uranium (UO<sub>2</sub>) est utilisé comme combustible nucléaire dans les Réacteurs nucléaires à Eau Pressurisée (REP). À haute température, son comportement mécanique viscoplastique est contrôlé par des mouvements de dislocations. Les dislocations responsables des déformations viscoplastiques sont souvent considérées comme Statistiquement Stockées (Statistically Stored Dislocations ou SSDs).

Cependant, des examens à l'échelle microscopique, sur des pastilles déformées, montrent la formation de sous-grains, caractérisés par une rotation du réseau cristallin. Cette désorientation du réseau est attribuée à d'autres dislocations en excès dans le matériau, qui sont dites Géométriquement Nécessaires (Geometrically Necessary Dislocations ou GNDs). La modélisation du comportement viscoplastique du polycristal d'UO<sub>2</sub> proposée s'appuie donc sur la Mécanique des Champs de Dislocations (Field Dislocations Mechanics ou FDM), car elle permet de décrire l'écoulement plastique des deux populations de dislocations : les SSDs et les GNDs.

La construction du modèle de FDM présenté ici commence par décrire les dislocations à l'échelle microscopique. À cette échelle, toutes les dislocations sont équivalentes, la distinction entre SSDs et de GNDs n'existe pas : chaque dislocation est décrite par un tenseur de Nye, associé à de la déformation plastique. Les contraintes mettent les dislocations en mouvement, et créent ainsi de la déformation plastique. Un travail d'homogénéisation permet de faire apparaître les densités de SSDs et de GNDs, de retrouver les lois classiques de plasticité cristalline (loi d'Orowan, etc.), adaptées à ces deux populations, et de constituer ainsi un modèle de FDM.

Pour appliquer ce modèle, la vitesse de glissement a été identifiée à partir d'essais sur des monocristaux d'UO<sub>2</sub>. Ce modèle a été utilisé pour modéliser la compression d'agrégats polycristallins d'UO<sub>2</sub>. L'équilibre mécanique et le transport des GNDs sont résolus par Transformée de Fourier Rapide (FFT). Les résultats montrent l'accumulation des GNDs sur les joints de grains, leur glissement dans les grains et la formation de sous-grains, ce qui reproduit qualitativement les observations expérimentales. Le modèle prédit bien le comportement moyen des polycristaux, ainsi que l'influence des conditions expérimentales : vitesse de déformation et température.

# Thermally-activated hardening recovery in viscoplastic materials with kinematic hardening at high temperatures

Léo Thiercelin<sup>1)\*</sup>, Francis Praud<sup>1)</sup>, Fodil Meraghni<sup>1)</sup>, Eric Fleury<sup>1)</sup>

1) Arts et Métiers Institute of Technology, CNRS, Université de Lorraine, LEM3-UMR 7239, F-57000, Metz

\*adresse email: [leo.thiercelin@ensam.eu](mailto:leo.thiercelin@ensam.eu)

**Résumé pour (effacer les mentions inutiles): invité / oral / poster**

The hardening recovery is a thermally activated phenomenon that enables metallic alloys to restore their mechanical properties upon high temperature exposures. Such a process is induced by microstructural changes like dislocations rearrangements and annihilation or recrystallization [1].

In this work, a new constitutive model is proposed to describe the thermally- activated hardening recovery mechanism in metallic materials. This model takes up the concept of hardening recovery variable [2], which is extended to the case of kinematic hardening within a thermo-viscoplastic formulation including high temperature dependencies for both elastic and viscoplastic properties.

The model was identified for AISI 316L austenitic stainless steel using experimental data from uni-axial tests conducted over a wide range of temperature (from room temperature to 1273 K) and at two different strain rates ( $2.5 \times 10^{-4}$  and  $2.5 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ ) [3].

Validation is further achieved with rather good agreements by comparing the simulated responses with additional experimental data where the material is subjected to complex thermomechanical loading paths while other examples are presented to provide a better insight of the model and to illustrate its predictive capabilities.

## References

- [1] J. Humphreys, G. Rohrer, and A. Rollet, *Recrystallization and Related Annealing Phenomena*. Elsevier, 2017. doi: 10.1016/B978-0-08-098235-9.01001-6.
- [2] L. Mouelle, F. Praud, G. Chatzigeorgiou, F. Meraghni, J. Serri, and E. Fleury, “Thermally-activated hardening recovery of thermo-elasto-plastic metals during annealing: Constitutive modeling for the simulation of welding process,” *Mechanics of Materials*, vol. 140, p. 103218, Jan. 2020, doi: 10.1016/j.mechmat.2019.103218.
- [3] L. Depradeux, “Simulation numérique du soudage - acier 316L : Validation sur cas tests de complexité croissante,” PhD thesis, INSA Lyon, France, 2004.

# Approche variationnelle non linéaire des fissures et des dislocations

Godefroy Engrand<sup>1\*</sup>, Antoine Ruffini<sup>1</sup>, Yann Le Bouar<sup>1</sup>, Alphonse Finel<sup>1</sup>

1 : Université Paris-Saclay, ONERA, CNRS, Laboratoire d'Etude des Microstructures, 92320 Châtillon, France.

\* [godefroy.engrand@onera.fr](mailto:godefroy.engrand@onera.fr)

## Résumé pour oral

Les problématiques de durée de vie des alliages métalliques nécessitent de développer des modèles numériques efficaces qui décrivent leurs mécanismes d'endommagement. Dans les matériaux cristallins, cela passe notamment par la description de la fissuration dans un environnement qui présente généralement une forte activité plastique. À l'échelle du micromètre, les modèles pertinents requièrent ainsi de rendre compte des interactions entre des fissures et des dislocations représentées explicitement.

Des modèles efficaces pour rendre compte des couplages fissures / dislocations ont récemment été proposés. Ces modèles reposent notamment sur un couplage entre la dynamique des dislocations discrètes (DDD) et / ou des modèles de champs de phase [1,2]. Ces démarches sont appropriées pour un très grand nombre de problèmes mais elles héritent aussi des limites inhérentes aux modèles initiaux (cadre parfois trop restrictif des petites déformations, introduction de règles et / ou d'observables *ad hoc*, manque de versatilité pour introduire de nouveaux objets physiques, complexité des codes de calcul, etc.).

Fondamentalement, les fissures et les dislocations sont des défauts qui peuvent être décrits comme des discontinuités sur le champ de déplacement. Ce champ est donc *a priori* une observable suffisante pour décrire ces objets. L'alternative explorée dans ce travail consiste ainsi à construire une théorie variationnelle qui repose sur une énergie élastique non linéaire (permettant l'existence des fissures et des dislocations) où le seul degré de liberté est le champ de déplacement.

Dans cette présentation, nous montrerons comment construire un potentiel élastique non linéaire infiniment dégénéré susceptible de rendre compte de la plasticité des cristaux. La démarche reposera sur une procédure mathématique (appelée réduction de Lagrange) permettant d'étendre, par périodisation dans l'espace infini des métriques, un potentiel élastique (éventuellement linéaire) initialement défini sur un domaine borné de cet espace [3]. Nous présenterons l'implémentation numérique de ce modèle et des résultats de simulations qui reproduisent la nucléation et la propagation de dislocations dans un système cristallin potentiellement fissuré.

[1] L. Eon, Thèse de doctorat, université Paris-Saclay (2022).

[2] A. Ruffini et A. Finel, *Acta Mat.*, 92, pp. 197–208 (2015).

[3] R. Baggio, S. Conti, G. Zanzotto et O. Salman, *Phys. Rev. Lett.*, 123 (20), p. 205501 (2019).

# Amorçage de fissures : prise en compte de la plasticité dans le critère couplé

Aurélien Doitrand

Univ Lyon, INSA Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1,  
CNRS, MATEIS, UMR 5510, 69621 Villeurbanne, France  
aurelien.doitrand@insa-lyon.fr

## Résumé pour oral

La mécanique linéaire élastique de la rupture traite de la propagation d'une fissure existante mais ne permet pas de prévoir l'étape d'amorçage de cette fissure. Le critère couplé (CC) a été proposé par Leguillon [1] pour palier à ce manque et fournir un critère d'amorçage de fissure qui a depuis été largement utilisé [2]. Initialement établi dans un cadre linéaire élastique sous l'hypothèse des petites déformations, le CC a été étendu pour étudier l'amorçage de fissures en prenant en compte des non linéarités géométriques [3,4] ou dans le cadre de l'élasticité non linéaire [5,6]. Mis à part les travaux de Leguillon concernant l'amorçage d'une fissure au niveau d'une entaille en V en présence d'une petite zone plastique ou endommagée dans le cadre d'approches asymptotiques raccordées [7], peu d'auteurs se sont intéressés à la prise en compte de la plasticité dans le CC.

L'objectif des présents travaux est l'extension du CC pour prendre en compte l'amorçage d'une fissure dans un matériau élasto-plastique. La modification de l'approche classiquement implémentée sera discutée au travers de l'intégration du comportement non linéaire du matériau pour le calcul des critères en contrainte et en énergie. L'approche sera illustrée sur des exemples tels que l'amorçage de fissure au niveau d'une entaille en V dans des éprouvettes d'acier ou sur la multi-fissuration de films minces.

## Références :

- [1] Leguillon D. 2002. Eur. J. Mech. A/sol. doi:10.1016/S0997-7538(01)01184-6
- [2] Weißgraeber, P. *et al.* 2016. Archive Appl. Mech. doi: 10.1007/s00419-015-1091-7
- [3] Talmon l'Armée, A. *et al.* 2017. Eng Frac Mech doi: 10.1016/j.engfracmech.2017.10.006
- [4] Rosendahl, P. *et al.* 2019. Mat. Des. doi: 10.1016/j.matdes.2019.108057
- [5] Doitrand, A. and Sapora, A. 2020. IJNLM. doi: 10.1016/j.ijnnonlinmec.2019.103245
- [6] Leite, A. *et al.* 2021. TAFMEC. doi: 10.1016/j.tafmec.2021.102931
- [7] Leguillon, D. and Yosibash, Z. 2017 Int. J. Sol. Struct. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2017.05.036

# Durcissement par solution solide dans les alliages à haute entropie cubiques à faces centrées

C. Varvenne<sup>1)\*</sup>, A. Luque<sup>2)</sup>, W. G. Nöhring<sup>2)</sup>, M. Laurent-Brocq<sup>3)</sup>, W. A. Curtin<sup>4)</sup>

- 1 CINaM, Marseille
- 2 LAMMM, EPFL, Lausanne
- 3 ICMPE, Thiais
- 4 Brown University, Providence

\*celine.varvenne@cnrs.fr

## Résumé pour invité

Les alliages à haute entropie (HEAs) sont une classe relativement récente de matériaux métalliques ayant d'excellentes propriétés mécaniques sur une large gamme de température: très haute limite d'élasticité, grande ductilité et résistance à la rupture. Il s'agit d'alliages multicomposants concentrés, et dont certaines compositions peuvent être fabriquées à l'état de solutions solides monophasées de structure cristallographique simple. L'objet de cet exposé sera de décrire les premiers outils conceptuels et de modélisation qui ont permis la compréhension et la prédiction de la haute limite d'élasticité des HEAs de structure cfc.

Dans un premier temps, le concept de potentiel d'alliage moyen pour les alliages aléatoires multi-composants sera introduit. Il permet de calculer rapidement un certain nombre de propriétés de phases massives et de défauts structuraux en fonction de la composition moyenne de l'alliage, de calculer les interactions moyennes entre solutés et défauts structuraux, et enfin d'identifier le rôle joué par les fluctuations locales de composition sur une propriété donnée d'un alliage aléatoire [1].

Dans un second temps, la modélisation du durcissement par solution solide sera traitée comme un problème de ligne élastique dans un désordre gelé, en utilisant le concept de milieu effectif moyen précédemment décrit [2]. Le durcissement peut alors être décrit comme résultant de l'interaction de la dislocation avec les fluctuations locales de composition. Certains aspects du modèle développé sont validés par comparaison directe avec des simulations atomiques en potentiel empiriques sur des systèmes modèles Fe-Ni-Cr. L'utilisation de la théorie de l'élasticité pour décrire les interactions soluté/dislocation nous a permis de proposer une version simplifiée de ce modèle [2,3], et d'identifier les paramètres matériaux régissant le durcissement. L'application de cette version simplifiée du modèle à la prédiction de la limite d'élasticité en fonction de la température et de la vitesse de déformation a montré un bon accord pour une large gamme de HEAs cfc [2,4]. Sa simplicité présente néanmoins des limites qui seront brièvement discutées.

[1] C. Varvenne, A. Luque, W. Nöhring and W. A. Curtin, Phys. Rev. B 93, 104201 (2016)

[2] C. Varvenne, A. Luque, and W. A. Curtin, Acta Mater. 118, 164-176 (2016)

[3] S. Nag, C. Varvenne and W. A. Curtin, MSMSE 28, 025007 (2020)

[4] G. Bracq *et al.*, Acta Mater. 117, 266-279 (2019)

# Interaction between interstitial Frank loops and edge dislocations on an austenitic high entropy alloy (HEA) and a Fe-10Ni-20Cr alloy: Atomic-scale modelling.

Ayobami Daramola<sup>1\*</sup>, Giovanni Bonny<sup>2</sup>, Gilles Adjanor<sup>3</sup>, Ghiath Monnet<sup>3</sup>,  
Anna Fraczkiewicz<sup>1</sup>, Christophe Domain<sup>3\*</sup>

<sup>1</sup>*MINES Saint-Etienne, Université de Lyon, CNRS, UMR 5307 LGF, Centre SMS, 42023, Saint-Etienne, France*

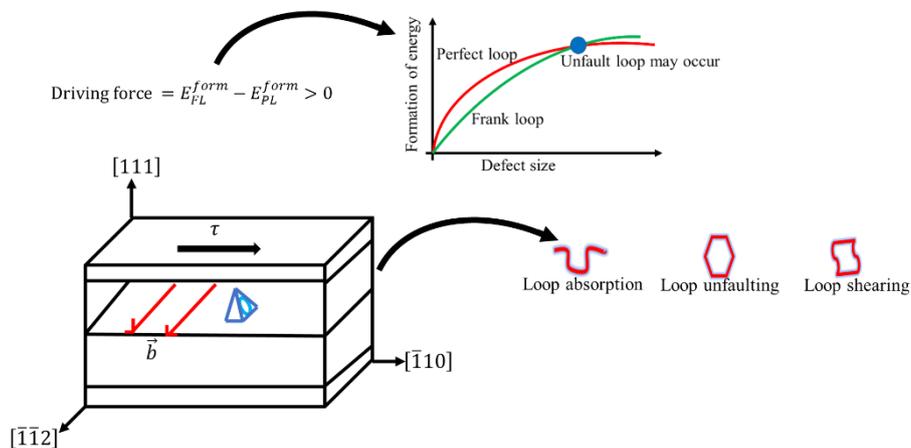
<sup>2</sup>*SCK CEN, Nuclear Materials Science Institute, Boeretang 200, B-2400 Mol, Belgium*

<sup>3</sup>*Electricité de France, EDF LAB, Département Matériaux et Mécanique des Composants, Les Renardières, F-77250 Moret sur Loing, France*

[ayobami.daramola@emse.fr](mailto:ayobami.daramola@emse.fr), [christophe.domain@edf.fr](mailto:christophe.domain@edf.fr).

## Résumé pour oral

The mechanical behaviour of a material used in a structural application is significantly influenced by the interaction between dislocations and radiation-induced defects acting as obstacles when exposed to irradiation conditions. This study uses molecular dynamics simulations to better explain the interaction between dislocations and interstitial Frank loops in an austenitic high entropy alloy (HEA) made of  $\text{Cr}_{15}\text{Fe}_{46}\text{Mn}_{17}\text{Ni}_{22}$ , referred as "Y3-HEA". First, we address the unfauling process of the Frank loop to perfect loop which is not fully understood from an experimental perspective. A simplified continuum and thermodynamical model were used to predict the critical loop size, which is thought to be crucial to the unfauling process. The second part focuses on the various interaction mechanisms seen in the material under study with respect to loop orientations, initial configurations, temperatures, and various loop sizes. Finally, a radiation hardening constitutive model was modified to include a parameter reflecting the average obstacle strength. All results were compared with those of a model alloy for Austenitic Stainless Steel (ASS), whose composition is  $\text{Cr}_{20}\text{Fe}_{70}\text{Ni}_{10}$ .



# Influence of surface roughness on the mechanical behavior of nano-objects

Hugo Iteney<sup>1\*</sup>, Thomas W. Cornelius<sup>1</sup>, Olivier Thomas<sup>1</sup>, Jonathan Amodeo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Aix Marseille Univ, Univ Toulon, CNRS, IM2NP UMR 7334, Marseille, France

\*[hugo.iteney@im2np.fr](mailto:hugo.iteney@im2np.fr)

## Résumé pour un oral

Surface roughness has a fundamental impact on the mechanical properties of materials. It plays a key role in several fields of applications including friction, lubrication, machining and polishing. At the atomic scale, surfaces and surface defects are also known to be at the roots of major physical phenomena as *e.g.*, in the field of catalysis or nanomechanical engineering.

From a general point of view, surfaces can be characterized according to their chemical composition, roughness and height distribution. Mathematical formulations of rough surfaces are widely reported in the literature, drawing a correlation between degrees of roughness and the fractal dimension [1].

In this study, we first present *Pyrough*, a tool we have recently developed to design rough virtual samples for atomistic and finite-element modeling (FEM) simulations based on the classical roughness theory [2]. *Pyrough* is a Python code that constructs 3D virtual objects with the ability to manage surface height distribution of isotropic and Gaussian random surfaces. It produces both rough 3D meshes compatible with most FEM programs and atomistic files as being fully coupled with the atomistic AtomsK library [3].

In the second part of the presentation, we use *Pyrough* and molecular dynamics (MD) simulations to investigate the influence of surface roughness on the mechanical response of metal nanoparticles. Our results show that surface roughness has a major impact on the mechanical properties of nanoparticles and several regimes are identified. Yield stress and Young's modulus variations as a function of roughness parameter are studied by performing statistical analysis on hundreds of MD simulations. Comparisons are made with the mechanical response of nanoparticles generated without any surface roughness. Additional investigations on the role of surface steps on dislocation microstructures evolution during plastic deformation are also carried out and confronted to existing models.

[1] Majumdar, A., and B. Bhushan. "Role of Fractal Geometry in Roughness Characterization and Contact Mechanics of Surfaces." *Journal of Tribology* 112, no. 2 (April 1, 1990): 205–16. <https://doi.org/10.1115/1.2920243>.

[2] Jacobs, Tevis D B, Till Junge, and Lars Pastewka. "Quantitative Characterization of Surface Topography Using Spectral Analysis." *Surface Topography: Metrology and Properties* 5, no. 1 (January 27, 2017): 013001. <https://doi.org/10.1088/2051-672X/aa51f8>.

[3] Pierre Hirel. "AtomsK: A Tool for Manipulating and Converting Atomic Data Files." *Computer Physics Communications* 197 (December 2015): 212–19. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.07.012>.

# Shape controlling mechanical properties in nanoparticles: from atomistic to continuous

Matteo ERBI<sup>1)\*</sup>, Riccardo GATTI<sup>1)</sup>, Hakim AMARA<sup>1)2)</sup>

- 1) LEM – Laboratoire d'Étude des Microstructure, ONERA – CNRS, UMR104, Université Paris-Saclay, Chatillon, 92322, France
- 2) Université de Paris, Laboratoire Matériaux et Phénomènes Quantiques (MPQ), F-75013, Paris, France

\*adresse email : matteo.erbi@onera.fr

## Résumé pour : oral

Physical properties at the nanoscale change as size scales. For instance, it is well known that the electronic properties pass from those of bulk material to those of a potential well. These changes are also seen in mechanical properties. The motto "Smaller is stronger" expresses the increase in strength associated with growing smaller nanostructures. The current contribution aims to study the interplay among shape, size, and composition of nanoparticles (NPs), with the ultimate goal of engineering a new class of nano-objects with targeted mechanical properties. We investigate the elastic and plastic properties of metallic (transition metals: Au, Cu, and Pt) and alloy NPs as a function of different sizes and shapes (fcc single crystalline structure). We use a multi-scale and multi-physical approach combining atomic-scale and continuous methods, Molecular Dynamics (MD), and Finite Elements (FE). From this study, two key results were highlighted. Firstly, thanks to the comparison with MD simulations, we show the validity and the limits (5nm) of the FE solution at the nanoscale (see figure). Secondly, the shape's contribution to elasticity is analyzed both locally and globally: to control the shape means to control the elastic response of the NPs. Finally, size and shape are used to characterize the onset of plasticity (yield stress), and the origin of the size and shape effect is analyzed.

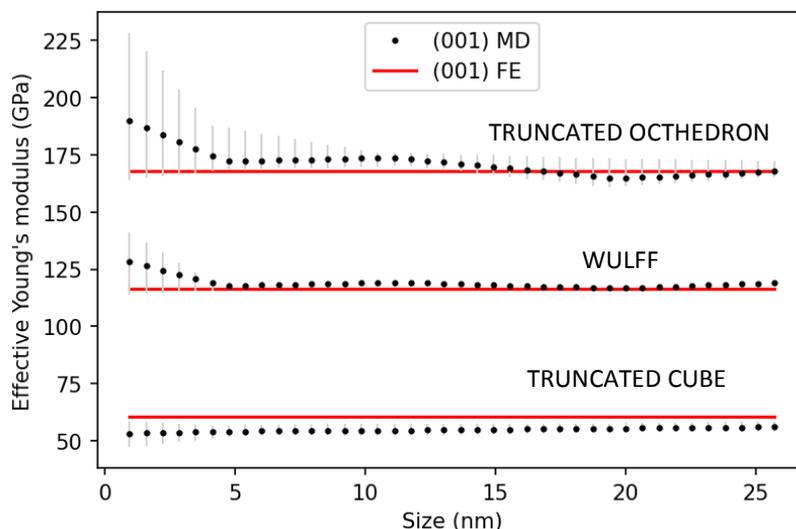


Figure 1. An effective Young's modulus is traced as a size function for different shapes. The FE and MD solution coincide up to 5 nm and the change in shape induce a strong variation in the elastic response.

# Glissement anormal dans les métaux cubiques centrés

Daniel Caillard<sup>1)\*</sup>, Baptiste Bienvenu<sup>2)</sup>, Emmanuel Clouet<sup>2)\*</sup>

- 1) CEMES-CNRS, Toulouse
- 2) SRMP, CEA, Univ. Paris Saclay

\*adresse email: [daniel.caillard@cemes.fr](mailto:daniel.caillard@cemes.fr), [emmanuel.clouet@cea.fr](mailto:emmanuel.clouet@cea.fr)

## Résumé pour : oral

La plasticité des métaux cubiques centrés (CC) se développe à basse température par le glissement de dislocations de vecteurs de Burgers  $1/2 \langle 111 \rangle$ , les dislocations avec une composante coin se déplaçant rapidement tandis que les vis, soumises à une forte friction de réseau, glissent beaucoup plus lentement. Ces dislocations se déplacent normalement dans un plan avec un facteur de Schmid élevé, leur mouvement étant sujet à de nombreux événements de glissement dévié. Cependant, une forte activité plastique dans des systèmes de glissement avec un faible facteur de Schmid est généralement également observée à basse température dans tous les métaux de transition CC à l'exception du fer. Ce glissement anormal se caractérise par un glissement très planaire mettant en jeu deux directions de glissement appartenant au même plan  $\{110\}$ . Bien que le glissement anormal ait été connu depuis 50 ans, aucun mécanisme physique ne permet de véritablement l'expliquer.

Grâce à des essais de traction in situ dans un microscope électronique à transmission (MET) et à des simulations atomiques, nous avons pu mettre en évidence un nouveau mécanisme expliquant ce glissement anormal dans les métaux CC [1]. Les observations MET réalisées à 95 K dans du niobium montrent la formation de multi-jonctions réunissant quatre brins vis de vecteurs de Burgers différents. Ces multi-jonctions sont très mobiles et glissent à des vitesses supérieures de plusieurs ordres de grandeur à celles des vis isolées. Les simulations atomiques confirment cette mobilité importante due à une germination spontanée de décrochement au nœud quadruple de la multi-jonction, permettant ainsi aux quatre dislocations formant la multi-jonction de glisser de façon coordonnée sur une longue distance sans ressentir la friction de réseau dans les systèmes de glissement correspondant au glissement anormal.

Ces multi-jonctions se forment grâce à l'interaction d'une dislocation  $1/2 \langle 111 \rangle$  glissant dans son plan  $\{110\}$  avec une jonction  $\langle 100 \rangle$ . Les simulations atomiques et une analyse élastique montrent qu'à basse température, là où les dislocations  $1/2 \langle 111 \rangle$  ont principalement une orientation vis, la stabilité de ces jonctions  $\langle 100 \rangle$  dépendent fortement du coefficient d'anisotropie élastique de Zener  $A$ . Ces jonctions  $\langle 100 \rangle$  sont très stables dans le niobium ( $A \sim 0.5$ ) et instables dans le fer ( $A \sim 2.4$ ), expliquant ainsi pourquoi le glissement anormal est très présent dans le niobium et absent dans le fer.

[1] D. Caillard, B. Bienvenu, E. Clouet, *Anomalous slip in body-centred cubic metals*, Nature **609**, 936 (2022)

# Etude atomique des propriétés de cœur et de la mobilité des dislocations $\langle 100 \rangle$ dans les métaux de transition cubiques centrés

Baptiste Bienvenu<sup>1,2)\*</sup>, Emmanuel Clouet<sup>1)</sup>

1) Université Paris-Saclay, CEA, Section de Recherches de Métallurgie Physique, 91191, Gif-sur-Yvette

2) Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, 40237, Düsseldorf

\*adresse email : b.bienvenu@mpie.de

## Résumé pour : oral

A basse température, la plasticité des métaux de transition cubiques centrés (CC) est contrôlée par le glissement des dislocations  $1/2 \langle 111 \rangle$  dans les plans  $\{110\}$ . Cependant, en complément des systèmes de glissement  $1/2 \langle 111 \rangle \{110\}$  conventionnels, des expériences dans le chrome [1] et le niobium [2,3] rapportent l'activité de systèmes de glissement  $\langle 100 \rangle \{110\}$ , *i.e.* des dislocations glissant dans les mêmes plans  $\{110\}$ , mais ayant un vecteur de Burgers  $\langle 100 \rangle$ . Bien que ces dislocations aient un vecteur de Burgers de norme plus importante que  $1/2 \langle 111 \rangle$ , donc une énergie élastique plus grande selon la théorie élastique isotrope, l'anisotropie élastique de ces deux métaux fait que les deux dislocations vis ont des énergies élastiques proches. Il est ainsi attendu que ces dislocations  $\langle 100 \rangle$  participent à la plasticité de ces métaux.

De manière à étudier la compétition entre ces systèmes de glissement, nous avons évalué par calculs *ab initio* la barrière de Peierls s'opposant au glissement des deux dislocations vis  $1/2 \langle 111 \rangle$  et  $\langle 100 \rangle$  dans les plans  $\{110\}$ , et ce pour l'ensemble des métaux de transition CC. Nous rapportons une barrière d'énergie comparable pour les deux systèmes de glissement, indiquant *a priori* un mouvement compétitif des deux dislocations vis dans ces plans  $\{110\}$ . A partir des propriétés de cœur et de la barrière de Peierls des deux dislocations vis évaluées *ab initio*, nous avons développé un critère d'écoulement plastique de manière à étudier la compétition entre les deux systèmes de glissement en fonction du chargement mécanique, en supposant que la mobilité des deux systèmes est gouvernée à basse température par l'orientation vis. Nos résultats suggèrent une forte activité des systèmes de glissement  $\langle 100 \rangle \{110\}$  pour des axes de traction/compression proches d'une direction  $\langle 111 \rangle$ , et ce dans la majorité des métaux de transition CC, sauf si une autre orientation de ligne empêche leur mouvement.

Pour explorer cette possibilité, nous avons étudié l'expansion d'une boucle de dislocation sous une contrainte appliquée en simulations atomiques, de manière à trouver l'orientation limitante à basse température. Pour un vecteur  $1/2 \langle 111 \rangle$ , la boucle s'étend en s'allongeant selon l'orientation vis bloquante, menant à la création d'un dipôle. Pour  $\langle 100 \rangle$ , nous montrons un blocage de la boucle dès que la ligne de la dislocation coïncide avec une orientation  $\langle 111 \rangle$ . La friction de réseau s'opposant à cette orientation mixte est ensuite confirmée en utilisant des calculs *ab initio*, montrant une barrière cinq fois plus haute que pour la vis. Ainsi, le mouvement des dislocations  $\langle 100 \rangle$  à basse température apparaît limité par cette orientation mixte, et non la vis comme pour  $1/2 \langle 111 \rangle$ .

[1] C. N. Reid, A. Gilbert, J. Less Common Met. **10**, 77-90 (1966).

[2] R. A. Foxall, M. S. Duesbery, P. B. Hirsch, Can. J. Phys. **45**, 607-629 (1967).

[3] C. N. Reid, A. Gilbert, G. T. Hahn, Acta Metall. **14**, 975-983 (1966).

# Simulation of dislocation unpinning from defects in tungsten using hybrid *ab initio*-machine learning methods

Petr Grigorev<sup>1)\*</sup>, Thomas Swinburne<sup>1)</sup>

1) Aix-Marseille Université, CNRS, CINaM UMR 7325, Campus de Luminy, 13288 Marseille, France

\*adresse email: petr.grigorev@univ-amu.fr

## **Résumé pour (effacer les mentions inutiles): oral**

Understanding and optimizing dislocation behaviour by characterising dislocation interaction with point defects is a central topic in computational metallurgy. For this task, *ab initio* calculations, specifically density functional theory (DFT), are essential to capture dislocation core structures and complex bonding to impurity elements. However, the computational cost of DFT typically scales with the number of atoms as for metallic systems, which limits its direct applicability to the study of extended defects. Lack of *ab initio* data for dislocations means that interatomic potentials governing large scale MD simulations are always used in the extrapolation regime. On top of that, it is extremely challenging to estimate the accuracy and reliability of such simulations since there is no reference data.

Within this presentation I will describe how hybrid QM/ML methods can be used to study unfeasibly large systems with *ab initio* accuracy. The method is applied to study interaction of screw dislocations with defects in tungsten. The main goal is to directly estimate the unpinning stress of a dislocation from a defect. I will also discuss how this QM/ML data can be used to test and improve modern machine learning interatomic potentials.

# Gibbs energy calculations of kink-pair nucleation mechanism using machine learning force fields

Arnaud Allera<sup>1\*</sup>, Thomas D. Swinburne<sup>2</sup>, Alexandra M. Goryaeva<sup>1</sup>, F. Ribeiro<sup>3</sup>, M. Perez<sup>4</sup>, B. Bienvenu<sup>1</sup>, E. Clouet<sup>1</sup>, L. Ventelon<sup>1</sup>, M-C. Marinica<sup>1</sup>, D. Rodney<sup>5</sup>

1. Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherches de Métallurgie Physique, 91191, Gif-sur-Yvette, France
2. Aix-Marseille Université, CNRS, CINaM UMR 7325, Campus de Luminy, 13288 Marseille, France
3. IRSN/PSN-RES/SEMIA/LSMA Centre d'études de Cadarache, 13115 Saint Paul-lez-Durance, France
4. Université de Lyon, INSA Lyon, UCBL, MATEIS, UMR CNRS 5510 Villeurbanne, France
5. Université de Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, Institut Lumière Matière, F-69622 VILLEURBANNE, France

\*arnaud.allera@cea.fr

## Résumé pour oral

Understanding the plastic deformation of metals has been the subject of extensive modeling effort at different scales over the last decades. Existing models rely on dislocation mobility laws, which can be parameterized on atomistic simulations, although this often comes at the cost of making strong assumptions (harmonicity, constant entropy or empirical Meyer-Neldel law) that cannot be systematically checked. So far, computing the full anharmonic activation Gibbs energy of kink-pair (KP) nucleation in large crystals have remained impractical, due to the limited accuracy of available interatomic potentials and the unfavorable scaling of the computational workload of existing methods. In this work, we demonstrate how the recent development of machine learning force fields (MLFF) [1,2] frameworks and a recent linear-scaling Gibbs energy calculation method [3] allow to overcome these issues. We build a novel MLFF for iron that features unprecedented accuracy on dislocation properties, and show unexpected Meyer-Neldel effects in KP nucleation, as well as a deviation from harmonicity occurring at high temperature, in contradiction with commonly-used assumptions. Interestingly, empirical and newly-developed MLFFs disagree qualitatively on the entropy-enthalpy relation, bringing hope to answer long-standing questions on the temperature and stress dependence of elementary dislocation glide processes by leveraging new close-to-*ab initio* accurate force fields.

[1] A. M. Goryaeva et al. Phys. Rev. Materials, **5**, 103803 (2021).

[2] Machine Learning Dynamics (MiLaDy) 2018-2023, <https://ai-atoms.github.io/milady/>

[3] T. D. Swinburne, M.C. Marinica Phys. Rev. Letters. **120**, 135503 (2018).

# Hydrogen/defects interactions: some implications of fcc plasticity

N. Iskounen<sup>1)\*</sup>, S.P. Murugan<sup>1)</sup>, M. Landeiro Dos Reis<sup>1)</sup>, A. Oudriss<sup>1)</sup>, J. Bouhattate<sup>1)</sup>, X. Feaugas<sup>1)</sup>

1) LaSIE, UMR CNRS 7356, Avenue Michel Crépeau, 17000 La Rochelle, France.

\*nadjib.iskounen@univ-lr.fr

## Résumé pour oral

One of the most important fundamental mechanisms accounting for the hydrogen embrittlement phenomenon is the hydrogen enhances localized plasticity process [1, 2]. The latter is mainly controlled by two different elementary mechanisms that occur at the atomic scale. The first one involves interactions between hydrogen and dislocations, affecting mutual long and short-range dislocation reactions, and the second one appears between hydrogen and vacancies through the promotion of vacancy and vacancy clusters production and stability, which interact also with dislocations. The consequence of hydrogen/defects interactions was found to be reflected either by a softening or a hardening effects, depending on the considered deformation stage [3]. The elastic response may also be affected by hydrogen that was attributed to the produced vacancies.

The aim of this work is to question the mechanisms of hydrogen/defects interactions in nickel oriented single crystals in order to define more pertinent local processes of plasticity. In this framework, atomistic simulations of nano-indentation based on the embedded-atom method have been performed on nickel containing or not vacancies, with or without the presence of hydrogen. One of the key findings of this study consists on the impact of inserted defects on the dislocation configuration upon nucleation as well as dislocation growth and mobility. Hydrogen enhances the generation of the strain-induced vacancy was also highlighted. Thus, the results of hydrogen impact on the elementary mechanisms of plasticity provide relevant elements of understanding to be used in a dislocation-density based crystal plasticity model [4] that allows to describe the effects of hydrogen on the global mechanical response of nickel.

[1] X. Feaugas, D. Delafosse. Chapter 9: hydrogen and crystal defects interactions: effects on plasticity and fracture. In: *Mechanics – Microstructure – Corrosion Coupling*. Elsevier Publisher (2019) 199–222.

[2] I. M. Robertson, P. Sofronis, A. Nagao, M. L. Martin, S. Wang, D. W. Gross, K. E. Nygren. Hydrogen embrittlement understood. *Metall. Mater. Trans. B* 46 (2015) 1085–1103.

[3] I. M. A. Ghermaoui, A. Oudriss, A. Metsue, R. Milet, K. Madani, X. Feaugas. Multiscale analysis of hydrogeninduced softening in f.c.c. nickel single crystals oriented for multiple-slips: elastic screening effect. *Sci. Rep.* (2019) 9:13042.

[4] X. Feaugas, P. Pilvin. A Polycrystalline Approach to the Cyclic Behaviour of f.c.c. Alloys – Intra-Granular Heterogeneity. *Adv. Eng. Mater.* 11 (2009) 703–709.

# SIZE DEPENDENT VISCOPLASTICITY OF HIGHLY CROSS-LINKED THERMOSETS – IMPACT ON COMPOSITE BEHAVIOUR

T. Pardoën<sup>a,\*</sup>, N. Klavzer<sup>a</sup>, S. Gayot<sup>a,b</sup>, J. Chevalier<sup>c</sup>, X. Morelle<sup>d</sup>, M. Abatour<sup>e</sup>, S. Forest<sup>f</sup> Fredrik Van Look<sup>g</sup>, L. Brassart<sup>h</sup>, B. Nysten<sup>b</sup>, C. Bailly<sup>b</sup>

<sup>a</sup> Institute of Mechanics, Materials and Civil Engineering, UCLouvain, 1348 Louvain-la-Neuve, Belgium

<sup>b</sup> Institute of Condensed Matter and Nanosciences, UCLouvain, 1348 Louvain-la-Neuve, Belgium

<sup>c</sup> Material Science Application Center, Solvay, 1120 Brussels, Belgium

<sup>d</sup> Ingénierie des Matériaux Polymères, INSA Lyon, 1, F-69621, Villeurbanne, France

<sup>e</sup> Transvalor S.A., Le Plessis-Robinson, France

<sup>f</sup> MINES ParisTech MAT – Centre des matériaux, PSL Research University, Evry, France

<sup>g</sup> Department of Mechanical Engineering, Polymer Technology, Eindhoven University of Technology, 5600, Eindhoven, MB, The Netherlands

<sup>h</sup> Department of Engineering Science, Parks Road, Oxford OX1 3PJ, United Kingdom

\*adresse email: thomas.pardoën@uclouvain.be

## Résumé pour invité

Advanced constitutive models for polymers have been essentially developed for thermoplastics with relatively limited applications/extensions to thermosets. These constitutive models provide accurate predictions over a wide range of loading configurations, strain rates and temperature, encompassing below and above transition temperature regimes, although at the prize of a very large number of parameters, often larger than 30. Still, these models, mixing phenomenological and micromechanics ingredients, are often not rich enough to capture complex behaviors such as for instance severe non-linearity upon unloading or size effects appearing under large strain gradients.

Based on an extensive experimental test program on the highly cross-linked RTM6 epoxy, the viscoplastic response was found very similar to thermoplastics, with hardening-softening-re-hardening, large back stress upon unloading [1]. However, when a carefully identified phenomenological constitutive model is used to predict the response of UD composites, one significantly underestimates the overall mechanical response. Local nanoindentation data in the matrix pockets as well as nano-DIC measurements performed during in situ compression tests in a SEM indicate size dependent plasticity effects [2]. Also, sub-micron scale shear band patterns and near fiber modified boundary layer effects appear, which cannot be captured by conventional plasticity models. Further, mesh dependency of the finite element models related to the softening behavior complexifies even more the problem. A molecular physics-based model of the deformation process occurring through the activation of nanometer scale shear transformation zones (STZ) has been worked out [3]. The viscoplastic deformation is the result of the cooperative activation of STZ's, sensitive to rate, temperature, stress state and stress level. This model involves only 7 parameters to identify, all with physical meaning. The model quantitatively captures the experimental data, even some complicated effects during unloading, as well as the shear band local patterns. Alternatively, a micromorphic model [4] based on the cumulative plastic strain accurately captures the region and intensity of strain concentration leading to local fibre/matrix interface failure, contrarily to a classical local model. The implication of these results and micromechanical models on composite modelling is major, and will be discussed.

## References

- [1] Morelle, X.P., Chevalier, J, Bailly, C, Pardoën, T, Lani, F., “Mechanical characterization and modeling of the deformation and failure of the highly cross-linked RTM6 resin”, *Mech Time-Dep Mater* 21 (2017) 419-454
- [2] Nathan Klavzer, Sarah Gayot, Michaël Coulombier, Bernard Nysten, Thomas Pardoën, Nanoscale digital image correlation at elementary fibre/matrix level in polymer-based composites, *Composite Part A*, in press
- [3] Chevalier, J., Brassart, L., Lani, F, Bailly, C., Pardoën, T., Morelle, X.P., “Unveiling the heterogeneity-controlled viscoplastic behavior of glassy polymers”, *J Mech Phys Solids* 121 (2018) 432-446
- [4] M. Abatour, S. Forest, K. Ammar, C.O. Rodas, N. Osipov and S. Quilici, *Acta Mechanica*, 2022.

# Transformation-induced plasticity of zirconia-based ceramic composites: effect of the microstructure

S. Fournier<sup>1\*</sup>, G. Baeza<sup>1</sup>, J. Chevalier<sup>1</sup>, T. Douillard<sup>1</sup>, C. Chapat<sup>2</sup>, E. Louradour<sup>2</sup>, H. Reveron<sup>1</sup>

1) Univ Lyon, INSA Lyon, UCBL, CNRS, MATEIS, UMR5510, 69621 Villeurbanne, France

2) 3DCERAM Sinto, 4, rue du Parc de Maison Rouge, ZA Maison Rouge, Bonnac-la-Cote, 87270, France

\*adresse email: [sylvain.fournier@insa-lyon.fr](mailto:sylvain.fournier@insa-lyon.fr)

## Résumé pour (effacer les mentions inutiles): oral

Zirconia ceramics can undergo stress-induced phase transformation similar to TRIP (Transformation Induced Plasticity) effect. Tailoring the cerium doping of zirconia can change zirconia phase stability and thus its transformability. The *Longlife* project [1] developed a composite formulation (called  $\text{ZA}_8\text{Sr}_8\text{Ce}_{11}$  for 84 vol.% Ce-TZP: ( $\text{ZrO}_2$  containing 11 mol.%  $\text{CeO}_2$ ), 8 vol.% of  $\text{Al}_2\text{O}_3$  and 8 vol.% of  $\text{SrAl}_{12}\text{O}_{19}$ ) with excellent strength-toughness properties and resistance to aging at room temperature. In this ameliorated formulation, the presence of alumina fine grains limits Ce-TZP grain growth during sintering in order to increase strength and hardness. On another hand, elongated Sr-aluminate secondary phases are formed during sintering to further increase toughness by bridging/crack-deflection mechanisms.

First development of  $\text{ZA}_8\text{Sr}_8\text{Ce}_{11}$  dense ceramics displayed well-defined equiaxed secondary phases identified as  $\text{SrAl}_{12}\text{O}_{19}$ [2]. In following studies, the powder elaboration process was changed as well as the forming step from slip casting to cold isostatic pressing (CIP) showing a slight morphologic change of Sr-aluminates [3]. In a recent work [4], we reported the processing of dense ceramic composite of the same composition ( $\text{ZA}_8\text{Sr}_8\text{Ce}_{11}$ ) printed by stereolithography (SLA). This additive manufacturing process involved new powder stabilization steps and different thermal cycles enabling reliable parts fabrication. The microstructure of the obtained ceramics was slightly modified, displaying inhomogeneously distributed and larger Sr-aluminate grains that could have a compositional gradient.

Bending tests performed on CIP vs SLA printed samples showed comparable strength but increased maximal strain for the latest. This effect is correlated to a much higher number of transformation bands on tensile surfaces due to a higher stress-induced tetragonal (t) to monoclinic (m) zirconia phase transformation. In SLA ceramics, the Sr-aluminate phase tends to agglomerate in clusters that promote t-m transformation of their neighbouring Ce-TZP grains. As a result, transformation bands are observed along these Sr-aluminate structures. The formation of Sr-aluminate secondary phases may have been favoured in the less constrained environment obtained in printed and therefore non-pressed green parts. The growth process of Sr-aluminate phases involves alumina particles dissolution/migration and therefore reduction of their pinning effect on neighbouring Ce-TZP grains, probably making them more transformable.

[1] <https://cordis.europa.eu/project/id/280741>

[2] P. Palmero, et al., <https://doi.org/10.1016/j.biomaterials.2015.01.018>

[3] A. Liens et al. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2019.10.046>

[4] S. Fournier et al. <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2022.11.006>

# Mesures MET du champ élastique induit par les dislocations dans une phase MAX Cr<sub>2</sub>AlC

Arthur Després<sup>1)\*</sup>, Salomé Parent<sup>2)</sup>, Edgar Rauch<sup>1)</sup>, Anne Joulain<sup>2)</sup>, Christophe Tromas<sup>2)</sup>

- 1) Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMaP, F-38000 Grenoble, France
- 2) Intitut Pprime, Département de Physique et Mécanique des Matériaux, UPR 3346 CNRS - Université de Poitiers – ENSMA, 11 Bd Marie et Pierre Curie, Site du Futuroscope, TSA 41123, Poitiers 86073 CEDEX 9, France

\*adresse email: arthur.despres@grenoble-inp.fr

**Résumé pour (effacer les mentions inutiles): invité / oral / poster**

Récemment, Rottman et Hemcker ont suggéré d'utiliser la technique SPED (scanning precession electron diffraction) dans le MET (microscope électronique à transmission) pour mesurer les déformations élastiques autour de dislocations dans des échantillons métallurgiques [1]. Cette technique repose sur la mesure des distorsions des clichés de diffraction entre une zone non contrainte et une zone contrainte de l'échantillon, avec une résolution spatiale pouvant aller jusqu'à quelques nm. Un outil de mesure a été développé sur ce principe et appliqué à un échantillon de phase MAX Cr<sub>2</sub>AlC déformé plastiquement par compression de nanopilier. Les phases MAX présentent un intérêt particulier pour cette application du fait de leur forte anisotropie (structure hexagonale), et des controverses concernant leur comportement plastique (formation de kink bands, glissement des dislocations restreint aux plans de base, etc.). Autour des dislocations, nous mesurons les dipôles tension-compression prédits par la théorie. Nous mesurons aussi des déformations élastiques à plus grande échelle, probablement issues des contraintes résiduelles consécutives à l'essai mécanique. La présence de ces déformations élastiques à grande échelle est confirmée par des observations conventionnelles MET. Les potentiels axes de développements sont discutés, et notamment l'utilité des mesures de contraintes résiduelles à l'échelle du MET pour la compréhension des mécanismes de plasticité.

[1] P.F. Rottmann, K.J. Hemker, Nanoscale elastic strain mapping of polycrystalline materials, Materials Research Letters. 6 (2018) 249–254. <https://doi.org/10.1080/21663831.2018.1436609>.

# Analyse de la plasticité des verres de composition $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$ par la théorie d'Eshelby

Valentin Delbecq<sup>1\*</sup>, Tristan Albaret<sup>2</sup>, Philippe Carrez<sup>1</sup>, Patrick Cordier<sup>1,3</sup>, David Rodney<sup>2</sup>

<sup>1</sup>UMET, Univ. Lille, F-59000 Lille, France

<sup>2</sup>Institut Lumière Matière, UMR5306 Université Lyon 1-CNRS, Université de Lyon, F-69622 Villeurbanne Cedex, France

<sup>3</sup>Institut Universitaire de France F-75231 Paris, France

\*[valentin.delbecq@univ-lille.fr](mailto:valentin.delbecq@univ-lille.fr)

Récemment, des essais de déformation sur des polycristaux d'olivine ( $\text{Mg, Fe}$ ) $_2\text{SiO}_4$  ont montré que les joints de grains devenaient amorphes sous contrainte [1]. Ces derniers contrôlant la plasticité du polycristal à basse température (autour de 1000 °C), ces observations questionnent sur la rhéologie des verres silicatés de composition proche de celle de l'olivine. Dans le cadre de cette étude, nous proposons d'étudier le comportement mécanique d'un verre de composition  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  par dynamique moléculaire classique.

Plus spécifiquement, nous réalisons des essais de cisaillement simples quasi-statiques. Les courbes contrainte-déformation obtenues se caractérisent par un premier régime linéaire, suivi d'un infléchissement permettant de définir une limite d'élasticité. A plus forte déformation, nous observons un écoulement à contrainte constante, caractérisé par l'apparition d'une bande de cisaillement dans le verre. Un point remarquable de ces essais est la présence de chutes de contraintes, et ce même à faible déformation, conséquences de réarrangements atomiques locaux (Shear Transformation Zone noté STZ) caractéristiques de la déformation plastique des verres. Pour mener une étude quantitative de ces STZ, nous avons choisi de modéliser les événements par des inclusions sphériques d'Eshelby [2,3]. Ainsi, en ajustant les champs de déplacement atomiques au voisinage des STZ aux solutions données par la théorie d'Eshelby pour des inclusions sphériques, nous aboutissons à une caractérisation précise de la distribution des événements plastiques en termes de localisation spatiale, de nombre, de volume effectif et de tenseur de transformation. Enfin, nous montrons que les distributions et les caractéristiques des événements ainsi modélisés sont suffisamment fines pour reproduire l'intégralité de la courbe contrainte-déformation obtenue par statique moléculaire. Dans une approche multi-échelles, ces informations caractérisant les STZ peuvent être utilisées dans un code de simulation mésoscopique de la plasticité des verres [4].

[1] Samae, V. *et al.* Stress-induced amorphization triggers deformation in the lithospheric mantle. *Nature* **591**, 82–86 (2021).

[2] Eshelby, J. D. The Elastic Field Outside an Ellipsoidal Inclusion. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences* **252**, 561–569 (1959).

[3] Albaret, T., Tanguy, A., Boioli, F. & Rodney, D. Mapping between atomistic simulations and Eshelby inclusions in the shear deformation of an amorphous silicon model. *Phys. Rev. E* **93**, 053002 (2016).

[4] Van Loock, F., Brassart, L. & Pardoën, T. Implementation and calibration of a mesoscale model for amorphous plasticity based on shear transformation dynamics. *International Journal of Plasticity* **145**, 103079 (2021).

# Compression de nanoparticules à l'échelle du nanomètre : résistance exacerbée et effets de taille/forme.

Laurent Pizzagalli\*, Julien Godet, Julien Durinck, Sandrine Brochard

Institut Pprime, Dpt Physique et Mécanique des Matériaux, CNRS, Université de Poitiers, France

\*adresse email: laurent.pizzagalli@univ-poitiers.fr

## Résumé pour : oral

Notre connaissance des propriétés mécaniques des matériaux à des échelles allant du micron au nanomètre s'est considérablement enrichie au cours des vingt dernières années. Il est désormais bien établi expérimentalement et par simulations que la résistance tend à augmenter lorsque la taille diminue. Cet effet se vérifie généralement pour des dimensions caractéristiques jusqu'à quelques dizaines de nanomètres. Toutefois, l'incertitude règne pour des échelles plus petites, jusqu'à quelques nanomètres. Plusieurs scénarios ont été proposés [1], mais le manque de données pour les vérifier est criant. Le problème principal est que de telles dimensions sont pour l'instant inaccessibles à l'expérience, en particulier pour accéder au régime de déformation plastique. De plus, les simulations atomistiques basées sur l'utilisation de potentiels interatomiques empiriques ne sont pas suffisamment fiables à ces échelles.

Afin de surmonter cet écueil, nous avons récemment développé une approche permettant d'étudier les propriétés mécaniques de nanoparticules de 1 à 2 nm, basée sur des calculs de dynamique moléculaire *ab initio* [2]. Nous présenterons ici les résultats obtenus pour des nanoparticules Al, Si et SiC. Dans tous les cas, des contraintes de compression très élevées sont obtenues, ce qui montre que la résistance mécanique continue à augmenter jusqu'aux échelles les plus fines. Les contraintes calculées sont également supérieures aux duretés maximales théoriques. Nous montrerons aussi comment l'exposant critique de la variation des contraintes dépend fortement de la forme des nanoparticules. Plusieurs mécanismes de plasticité ont été identifiés, comme la nucléation de dislocation ou l'amorphisation. Ceux-ci seront discutés en relation avec différents facteurs : effets de taille, de surface, confinement quantique, non respect de la loi de Schmid.

[1] J. Amodeo and L. Pizzagalli, Modeling the mechanical properties of nanoparticles: a review, *Comptes Rendus Physique* 22, S3, 35-66 (2021)

[2] L. Pizzagalli, Finite-temperature mechanical properties of nanostructures with first-principles accuracy, *Phys. Rev. B*, 102, 094102 (2020)

# Ladislav P. Kubin: jerky flow and beyond

Claude Fressengeas\*, Mikhail Lebyodkin,

Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3)

Université de Lorraine/CNRS, 7 rue Félix Savart, 57070 Metz, France

\*claude.fressengeas@univ-lorraine.fr

## Résumé pour : invité / oral

Very early in his career, Ladislav became interested in jerky flow, be it arising from low-temperature thermomechanical instabilities or from the Portevin–Le Chatelier (PLC) effect [1]. He very soon realized that jerky flow needed investigations from both a microstructural perspective at dislocation level, and from a macroscopic point of view, due to its sample-scale manifestations, typically stress drops and strain localization bands. Clearly, this implies several scale transitions between the behavior of a single dislocation and the collective behavior of dislocation ensembles under stress, and the mechanical properties of the sample. Particularly rich examples of collective dislocation dynamics arise from the PLC effect. Although his first model for this effect [1] was local, he quickly understood the role of spatial coupling such as double cross slip in the transport of dislocations [2] or long-range stresses between dislocations [3] in these scale transitions and in pattern formation. It was then realized that several non-random dynamic regimes could be characterized in the PLC range of control parameters such as the overall strain-rate and temperature of the experiment, namely deterministic chaos [4] and a scale-invariant self-organized criticality-type regime [3]. Lots of efforts were then devoted to explore the newly-found and unexpected order hidden behind jerky flow [5,6], including through extensometry and acoustic emission, statistical, dynamic and multifractal analyses [6], and finite-element simulations of polycrystal plasticity [7]. The legacy of this long-standing cooperation with Ladislav is a rich trove of experimental methods, time series analysis tools, models and simulation methods at various scales that are now found relevant in the general context of the intermittency of crystal plasticity [8].

[1] L.P. Kubin and Y. Estrin, *Acta Metall.* 33, 397 (1985).

[2] V. Jeanclaude, C. Fressengeas and L.P. Kubin, in *Nonlinear phenomena in materials science II*, Eds G. Martin and L.P. Kubin, 403, Trans Tech Publications, Switzerland (1992).

[3] M.A. Lebyodkin, Y. Bréchet, Y. Estrin and L.P. Kubin, *Phys. Rev. Lett.* 74, 4758 (1995).

[4] G. Ananthakrishna, C. Fressengeas, M. Grosbras, J. Vergnol, C. Engelke, J. Plessing, H. Neuhäuser, E. Bouchaud, J. Planes and L.P. Kubin, *Scripta Metall. Mater.* 32, 1731 (1995).

[5] G. Ananthakrishna, S.J. Noronha, C. Fressengeas and L.P. Kubin, *Phys. Rev. E*, 60, 5455 (1999).

[6] M.S. Bharathi, M. Lebyodkin, G. Ananthakrishna, C. Fressengeas and L.P. Kubin, *Phys. Rev. Lett.*, 87, 165508-1-4 (2001).

[7] S. Kok, M.S. Bharathi, A.J. Beaudoin, C. Fressengeas, G. Ananthakrishna, L.P. Kubin and M. Lebyodkin, *Acta Mater.*, 51, 3651 (2003).

[8] M. Lebyodkin, N.P. Koblev, Y. Bougherira, D. Entemeyer, C. Fressengeas, V.S. Gornakov, T.A. Lebedkina, I.V. Shashkov, *Acta Mater.*, 60, 844 (2012); 60, 3729 (2012).

# Apports des simulations de DD à la modélisation du stade III des courbes de traction du monocristal CFC

Ronan MADEC<sup>1)</sup>, Benoit DEVINCRE<sup>2)</sup>

1) Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire Matière en Conditions Extrêmes, F-91680 Bruyères-le-Châtel, France & CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

2) Université Paris-Saclay, ONERA, CNRS, Laboratoire d'Étude des Microstructures (LEM), Châtillon, 92322, France

Le développement des simulations de Dynamique des Dislocations (DD) [1] a permis de mieux comprendre l'origine de l'érouissage des cristaux métalliques et plus particulièrement de quantifier précisément la contribution des recombinaisons entre dislocations à l'écoulement plastique [2-5] et au stockage [6,7]. La grande majorité des études a regardé le stade II des courbes de traction des monocristaux CFC qui présente moins de variabilité en fonction du matériau et de la température que les stades I et III. Concernant le stade I, le rôle de défauts, les super-crans colinéaires, a été mis en évidence tant pour expliquer qualitativement les microstructures obtenues que pour estimer la force de l'auto-écrouissage [8]. Concernant le stade III et plus généralement la restauration dynamique, il a été principalement montré que le glissement dévié est à l'origine de l'émergence de microstructures ordonnées [9]. Mais, à l'encontre des idées communément admises, les simulations de DD ont montré qu'un accroissement de l'activité du glissement dévié tout en accélérant l'organisation des microstructures induit également un accroissement du stockage et une faible augmentation de la contrainte d'écoulement. Ces derniers résultats ont souvent été considérés comme sujets à de possibles controverses à cause des faibles volumes et des faibles déformations accessibles par simulations. Durant ses dernières années d'activité au LEM, Ladislav Kubin avait souhaité revisiter la problématique du stade III et de la restauration dynamique, en confrontant plus systématiquement données expérimentales et simulations. Son objectif était de mieux comprendre les rôles respectifs et couplés du glissement dévié et de l'annihilation colinéaire au cours de la déformation plastique. Nous souhaitons, par la présentation de ses derniers travaux, rendre ici hommage à ce chercheur exceptionnel à l'exigence scientifique hors du commun.

[1] L.P. Kubin, G. Canova, M. Condat, B. Devincre, V. Pontikis, Y. Bréchet, *Solid state phenomena* 23, p 455-472, 1992

[2] R. Madec, B. Devincre, L.P. Kubin *Physical review letters* 89, 255508, 2002

[3] R. Madec, B. Devincre, L. Kubin, T. Hoc, D. Rodney, *Science* 301, 1879-1882, 2003

[4] B. Devincre, L. Kubin, T. Hoc, *Scripta materialia* 54, 741-746, 2006

[5] R. Madec, L.P. Kubin, *Acta Materialia* 126, 166-173, 2017

[6] B. Devincre, T. Hoc, L. Kubin, *Science* 320, 1745-1748, 2008

[7] L. Kubin, B. Devincre, T. Hoc, *Acta materialia* 56, 6040-6049, 2008

[8] B. Devincre, L. Kubin, T. Hoc, *Scripta Materialia* 57, 905-908, 2007

[9] R. Madec, B. Devincre, L.P. Kubin, *Scripta materialia* 47, 689-695, 2002

# Hétérogénéités de déformation et recristallisation dynamique. Ce que la glace peut nous en dire.

Maurine Montagnat<sup>1,2</sup>, Thomas Chauve<sup>1</sup>, Fanny Grennerat<sup>1</sup>,  
Andréa Tommasi<sup>3</sup>, Olivier Castelnau<sup>4</sup>

1<sup>er</sup> mars 2023

<sup>1</sup> Univ. Grenoble Alpes, CNRS, IRD, G-INP, IGE, Grenoble, France

<sup>2</sup> Univ. Grenoble Alpes, Université de Toulouse, Météo-France, CNRS, CNRM, Centre d'Etudes de la Neige, Grenoble, France

<sup>3</sup> Géosciences Montpellier, CNRS, Université de Montpellier, Montpellier, France <sup>4</sup> Laboratoire PIMM, Arts et Metiers Institute of Technology, CNRS, CNAM, HESAM University, Paris, France

Les mécanismes de recristallisation dynamiques sont très présents dans la déformation à chaud des minéraux, des métaux et de la glace. Ils modifient drastiquement la microstructure et potentiellement les orientations cristallines (textures), ce qui peut avoir un impact non négligeable sur la réponse mécanique en conditions naturelles, pendant la mise en forme, ou en situation d'usage. Ces mécanismes, que sont la germination de nouveaux grains et la migration des joints de grains au cours de la déformation, sont étudiés depuis de nombreuses années et sont fortement associés aux hétérogénéités de déformation qui se développent dans la plupart des matériaux cristallins.

La glace est un matériau de structure hexagonale, qui a la particularité de posséder une très forte anisotropie viscoplastique, caractérisée par le glissement des dislocations essentiellement sur le plan de base de la structure hexagonale. Cette caractéristique particulière, avec des niveaux d'anisotropie rarement atteints dans les métaux, conduit à de fortes incompatibilités de déformation entre les grains, et l'apparition très précoce d'hétérogénéités de déformation. Dans les conditions de laboratoire ( $T \sim 0.98 \times T_m$ ,  $\sigma \sim 0.2 - 1MPa$ ), la recristallisation dynamique contrôle la réponse mécanique (via l'évolution des microstructures et des textures) dès 1% de déformation.

Dans cette présentation, nous verrons ce que la glace, que l'on peut facilement déformer proche de sa température de fusion, nous permet d'apprendre sur la relation entre les hétérogénéités de déformation et les mécanismes fondamentaux de la recristallisation dynamique. Pour cela, nous nous appuyerons sur des observations de microstructures au MEB-EBSD, et sur des mesures de champs de déformation par corrélation d'images numériques. Une ouverture sera apportée à la modélisation et à son intérêt pour la prise en compte de la recristallisation dans les écoulements à grande échelle.

# Etude in-situ de la recristallisation dynamique dans l'alliage de Magnesium AZ31

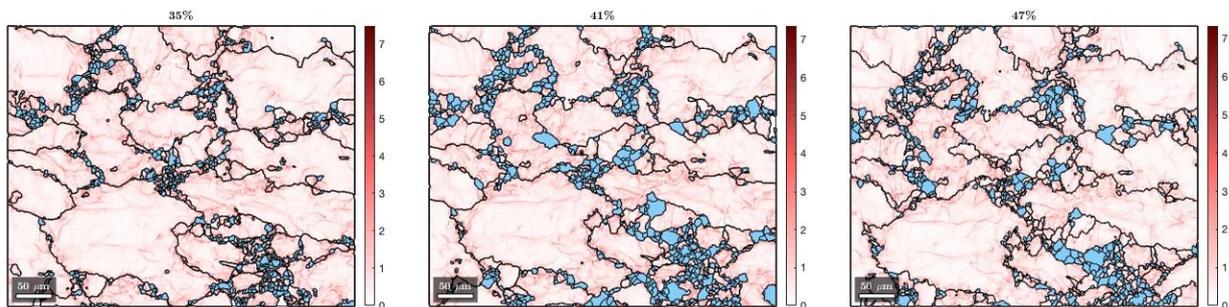
Gaëtan Boissonneau<sup>1)\*</sup>, Fabrice Barou<sup>1)</sup>, Maurine Montagnat<sup>2)</sup>, Andréa Tommasi<sup>1)</sup>

- 1) Géosciences Montpellier, CNRS & Université de Montpellier, France
- 2) Institut des Géosciences de l'Environnement, CNRS & Université Grenoble Alpes, France

\*adresse email: gaetan.boissonneau@umontpellier.fr

## Résumé pour : oral

Pour imager la recristallisation dynamique dans l'alliage de magnésium AZ31 (3 % Al, 1 % Zn), nous avons réalisé des essais de traction à 250°C et des taux de déformation de  $10^{-5} \text{ s}^{-1}$  sous MEB avec des cartographies EBSD (electron backscatter diffraction) à des intervalles fixes de déformation, sur une plage totale de 47 % de déformation. Cette approche quasi-in-situ permet l'imagerie d'une même zone sur plusieurs pas de déformation et donc, un suivi de la recristallisation tout au long de la déformation. Cette étude permet d'imager les divers processus impliqués dans la recristallisation dynamique, tel que la formation de sous-joints et la migration de joints de grains dans la nucléation, la croissance des grains recristallisés et d'analyser leurs cinétiques et les interactions entre processus. Ainsi, nous observons trois phases au cours de la déformation. La première phase, pendant les vingt premiers pourcents de déformation, est caractérisée par une déformation interne des grains et une organisation de la sous-structure de dislocations. La seconde phase se distingue par la formation de noyaux de recristallisation le long des joints de grains, avec une distribution spatiale hétérogène à l'échelle du polycristal. La dernière phase est marquée par une croissance rapide de certains des grains recristallisés et leur re-déformation.



Cartes de KAM (en rouge), représentant la désorientation entre un pixel et ses proches voisins en degrés. Superposés en bleu, les grains recristallisés, filtrés sur un critère de désorientation interne (inférieur à 2°)

# Novel thin film high entropy alloys with tunable microstructure and enhanced mechanical properties

Davide Vacirca<sup>1)\*</sup>, Francesco Bignoli<sup>1,2)</sup>, Andrea Li Bassi<sup>2)</sup>, Yuting Dai<sup>3)</sup>, Christian Kubel<sup>3)</sup>, Fatiha Challali<sup>1)</sup>, Damien Faurie<sup>1)</sup>, Philippe Djemia<sup>1)</sup>, Matteo Ghidelli<sup>1)</sup>

- 1) LSPM-CNRS, Villetaneuse, France.
- 2) NanoLab, Politecnico di Milano, Milan, Italy.
- 3) INT-KIT, Karlsruhe Institute of Technology, Karlsruhe, Germany

\*adresse email: [davide.vacirca@lspm.cnrs.fr](mailto:davide.vacirca@lspm.cnrs.fr)

Résumé pour: oral

In recent years, research on thin film high entropy alloys (TF-HEAs) has gained increasing interest due to the activation of mechanical size effects involving a combination of high ductility and yield strength (up to 30% and 10 GPa for NbMoTaW) [1]. One of the current challenges is to develop advanced techniques for synthesis of nanostructured TF-HEAs, while implementing nanoengineering design strategies such as multilayered systems, which are known to improve the mechanical properties by blocking the propagation of dislocations [2].

CoCrCuFeNi is one of the first HEAs discovered, with an FCC structure and promising properties. It reports yield strength in compression of 450 MPa and 60% ductility [3], however very few studies focus on this alloy in thin film form. Here, we synthesized CoCrCuFeNi TF-HEAs and Al-CoCrCuFeNi multilayers by pulsed laser deposition (PLD), exploiting its large versatility providing different microstructures (i.e. compact and nanogranular) by simply varying the background gas pressure [2]. Our films show a transition from compact to nanogranular at ~1 Pa of He (*Fig.1*), as well as a loss of crystallographic texturing shown in SAED-TEM. Nanoindentation shows increased hardness in CoCrCuFeNi TF-HEAs from PLD (11 GPa) compared to magnetron sputtering (8 GPa), as a result of smaller domain size (7 nm) and compressive residual stresses. Nanogranular films report ~10% reduction of density and elastic constants due to the low energy of the ablated species. Tensile tests on Kapton® show exceptional ductility of compact and nanogranular CoCrCuFeNi films, with an onset of crack formation of 3.4% (vs ~2% from magnetron sputtering [4]). STEM-EDX of Al-CoCrCuFeNi multilayers (*Fig.2*) shows local chemical enrichments with ~2 nm Al layers separated by ~5 nm of the HEA with very little diffusion at the interfaces, showing good mechanical properties ( $H=9$  GPa,  $E=157$  GPa). Our results show that PLD is a powerful technique that enables a single step synthesis of advanced TF-HEAs with tunable microstructure and multilayering, leading to tunable mechanical properties with potential applications in microelectronics, MEMS or high performance coatings.

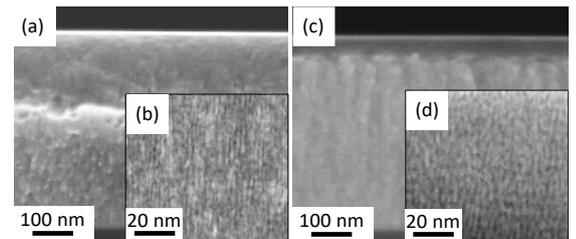


Figure 1 - SEM and STEM cross sections of compact (a,b) and nanogranular (c,d) CoCrCuFeNi films.

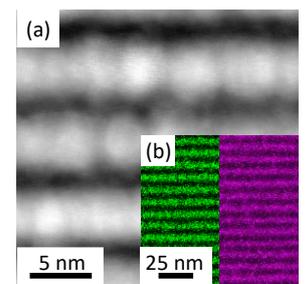


Figure 2 – (a) STEM of Al-CoCrCuFeNi film. (b) STEM-EDX of CoCrCuFeNi (green) and Al (purple)

# Strain rate sensitivity of a thickness controlled copper thin film

Szilvia Kalácska<sup>1,2)\*</sup>, László Pethő<sup>2)</sup>, Guillaume Kermouche<sup>1)</sup>, Johann Michler<sup>2)</sup>, Péter D. Ispánovity<sup>3)</sup>

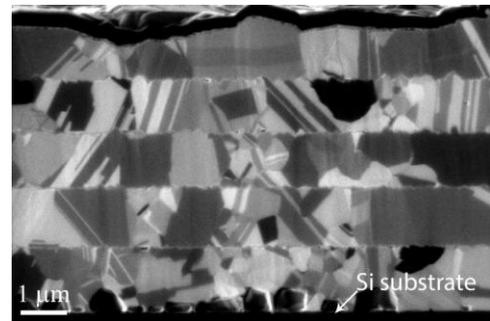
- 1) Mines Saint-Etienne, Univ Lyon, CNRS, UMR 5307 LGF, Centre SMS, 158 cours Fauriel 42023, Saint-Étienne, France
- 2) Empa Swiss Federal Labs for Materials Science, Feuerwerkerstrasse 39, 3602 Thun, Switzerland
- 3) Eötvös Loránd University, Dept. of Materials Physics, Pázmány P. stny. 1/a, 1117 Budapest, Hungary

\*adresse email: szilvia.kalacska@cnr.fr

## Résumé pour: oral

Creating multi-layered thin films with alternating dissimilar sublayers is proposing unusual (electric, thermal, optical, etc.) properties to be experimentally investigated. In such a system where grain size and texture can be controlled by the deposition/annealing process represents a unique opportunity to focus on some aspects of the deformation processes driven by the collective behaviour of dislocation. Our aim was to create a system with large enough grains (500-800 nm in diameter) and engineer flat grain boundaries to study plastic deformation modified by the presence of barriers.

A hybrid thin film deposition system was used (Swiss Cluster) to create the samples by combining atomic layer deposition (ALD) and physical vapour deposition (PVD) [1]. Sequential deposition of  $\sim 1 \mu\text{m}$  thick Cu multilayers were separated by 10 nm thick  $\text{Al}_2\text{O}_3$  interlayers. The initial 100-250 nm grain size was increased by extensive heat treatment (see in the figure).



Afterwards, micropillars were fabricated using focused ion beam (FIB) milling close to the edge of the bulk sample. These micropillars were then compressed at various strain rates using a nanodeformation setup (Alemnis AG). High (angular) resolution electron backscatter diffraction (HR-EBSD) was applied to study the geometrically necessary dislocation (GND) density distribution after low and high strain rate deformations. Sequential FIB-slicing [2] was applied to create 3D reconstructions of the deformed volumes.

### References:

- [1] T. Xie, T.E.J. Edwards, N.M. della Ventura, D. Casari, E. Huszár, L. Fu, L. Zhou, X. Maeder, J.J. Schwiedrzik, I. Utke, J. Michler, L. Pethő, *Thin Film Solids*, 711 (2022) 138287.
- [2] S. Kalácska, J. Ast, P.D. Ispánovity, J. Michler, X. Maeder, *Acta Materialia*, 200 (2020) 211-222.

# Etude du comportement micromécanique des matériaux : effet de taille et sensibilité à la vitesse de déformation du cuivre

Benedicte ADOGOU<sup>1\*</sup>, Szilvia KALACSKA<sup>1</sup>, Gaylord GUILLONNEAU<sup>2</sup>, Marc FIVEL<sup>3</sup>,  
Guillaume KERMOUCHE<sup>1</sup>

- 1) Mines Saint-Etienne, Laboratoire Georges Friedel, CNRS UMR 5307, Saint-Etienne – France
- 2) Ecole Centrale de Lyon, LTDS, CNRS UMR 5313, Ecully – France
- 3) Université Grenoble Alpes, SIMaP-GPM2 CNRS UMR 5266, Grenoble – France

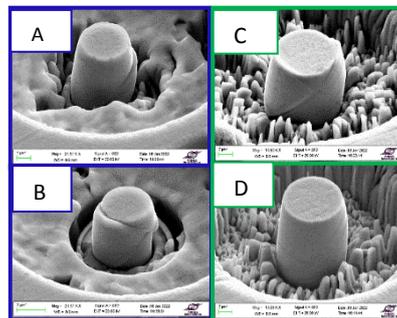
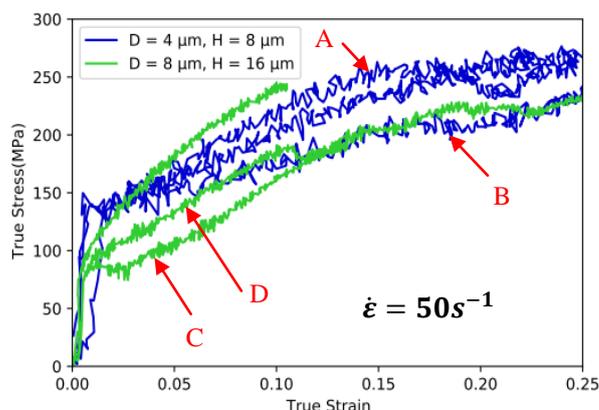
\*adresse email: benedicte.adogou@emse.fr

## Résumé pour : oral

Le comportement micromécanique des matériaux a suscité un grand intérêt ces dernières années. La micro-compression de piliers a révélé pour plusieurs matériaux, en particulier le cuivre, un effet de taille et une sensibilité à la vitesse de déformation dépendante de l'orientation cristalline [1] qui doit encore être bien compris.

Comme nous le savons, l'activité des dislocations est à l'origine de la déformation plastique des métaux. À cet effet, la simulation de la Dynamique Discrète des Dislocations (DDD) peut fournir un aperçu du comportement mécanique des matériaux sur un large panel de vitesses de déformation et peut aider à dévoiler le comportement des dislocations qui engendre l'effet de taille et la sensibilité aux vitesses de déformation observée expérimentalement.

Dans ce travail, des essais de compression à différentes vitesses de déformation (du quasi-statique jusqu'à  $500 \text{ s}^{-1}$ ) ont été réalisés sur des micro-piliers de cuivre. Parallèlement, ces essais ont été reproduits par la simulation numérique 3D DDD. La combinaison de ces deux méthodes apporte de nouvelles connaissances sur l'effet de taille et la sensibilité à la vitesse de déformation du cuivre.



## Mots clés

Compression de micro-piliers ; sensibilité à la vitesse de déformation ; effet de taille.

## Références

[1] Breumier S., Sao-Joao S., Villani A., Lévesque M., Kermouche G. High strain rate micro-compression for crystal plasticity constitutive law parameters identification. Materials and Design 2020, 193, 108789.

# **Influence du métal liquide sur la déformation plastique et sur la rupture d'alliages métalliques : cas de laitons $\alpha$ en présence de l'eutectique In-Ga.**

Ingrid Proriot Serre<sup>1)\*</sup>, Marco Ezequiel<sup>1)</sup>, Marwa Moula<sup>1)</sup>, Thierry Auger<sup>2)</sup>, Eva Héripé<sup>2,4)</sup>, Zéhoua Hadjem-Hamouche<sup>2)</sup>, Antoine Clément<sup>2)</sup>, Eric Leroy<sup>3)</sup>, Julie Bourgeon<sup>3)</sup>, Loic Perriere<sup>3)</sup>, Maxime Vallet<sup>4)</sup>

- 1) Univ. Lille, CNRS, INRAE, Centrale Lille, UMR 8207 - UMET - Unité Matériaux et Transformations, F-59000 Lille, France
- 2) PIMM/Arts et Métiers Technology Institute, CNRS, CNAM, 151 Bd de l'hôpital 75013 Paris, France
- 3) ICMPE - UMR 7182 2/8, rue Henri Dunant 94320 Thiais, France
- 4) Université Paris-Saclay, CentraleSupélec, ENS Paris-Saclay, CNRS, LMPS - Laboratoire de Mécanique Paris-Saclay, 91190, Gif-sur-Yvette, France

\*adresse email: [ingrid.proriot-serre@univ-lille.fr](mailto:ingrid.proriot-serre@univ-lille.fr)

## **Résumé pour oral**

Lorsqu'il est en présence de métal liquide, un alliage métallique ductile à l'air peut être sensible à la fragilisation par les métaux liquides (FML), ce qui se traduit par une perte de ductilité pouvant provoquer une rupture fragile. La sensibilité à la FML dépend de différentes conditions (matériaux, chimie du métal liquide, vitesse, température, microstructure). De plus, les mécanismes menant à la FML sont encore mal connus ; en effet différents modèles existent mais leur validité n'est vérifiée que pour des cas très spécifiques sans que des observations notamment aux échelles microscopique et nanoscopiques puissent les expliciter. Afin d'avancer sur la compréhension et la prédiction des phénomènes de FML, nous avons étudié en détail la sensibilité à la FML de laitons  $\alpha$  en présence de l'eutectique In-Ga (EGaIn), non seulement les conditions de sensibilité à la FML, mais aussi l'étude des mécanismes aux échelles macroscopiques et microscopiques par des observations *in-situ*, et la modélisation des phénomènes. La sensibilité à la FML du cuivre et de laitons contenant 15, 20, 25 et 30 % dépend de la microstructure, la dureté, la composition en zinc et la vitesse de déformation. Le facteur le plus important semble la composition de l'alliage du cuivre, et donc à travers cela les mécanismes de plasticité du matériau solide. Dans les cas menant à la FML, pour des essais macroscopiques, la rupture est ductile puis fragile de type intergranulaire ce qui s'explique par la formation de l'intermétallique  $\text{CuGa}_2$  et une déformation plastique nécessaire pour amorcer la FML. Les essais avec observations *in situ* au MEB et MET confirment la rupture fragile aux interfaces après une déformation plastique du matériau. La corrélation entre micro-essais de flexion et simulations par éléments finis a permis d'évaluer une ténacité en présence de métal liquide pour le  $\text{Cu30\%Zn}$ , cohérente avec celle obtenue à partir de simulations à l'échelle atomique.

Ce travail a été financé par l'ANR à travers le projet ANR GauguIn (N° ANR-18-CE08-0009-01).

# In-situ Studies of Strain Localization in Polycrystals by Electron Microscopy Techniques

Muhammad Fakhry Hatta<sup>1)\*</sup>, Bouzid Kedjar<sup>1)</sup>, Ludovic Thilly<sup>1)</sup>

<sup>1)</sup>Institut Pprime, CNRS – ENSMA – Université de Poitiers, Département Physique et Mécanique des Matériaux, 86961 Futuroscope, France

\* [muhammad.fakhry.hatta@univ-poitiers.fr](mailto:muhammad.fakhry.hatta@univ-poitiers.fr)

## Résumé pour : oral

In some polycrystalline metals, the incipient plasticity is marked by the presence of strain localization in slip bands; this mechanism and the propagation of plasticity through the polycrystalline aggregate are not fully understood yet [1]. Furthermore, the onset of plasticity is a multi-scale phenomenon. Therefore, the 3DiPolyPlast (3D Incipient Polycrystals Plasticity) project (in cooperation with Wolfgang Ludwig, MATEIS - ESRF, Henry Proudhon, MINES ParisTech, and Benoit Devincere, CNRS – ONERA) aims at studying these mechanisms by a series of multi-scale characterization techniques (surface and bulk studies based on electron microscopy and synchrotron techniques) and by Discrete Dislocations simulations, covering all relevant scales from 50 nm to 500  $\mu\text{m}$ .

Pure polycrystalline nickel (99.99%) has been selected as a model material and in-situ tensile test specimens are prepared by a specific thermomechanical procedure to obtain a microstructure compatible with all the used characterization techniques. The samples are interrupted in-situ tensile strained following two routes, namely:

First, the samples are strained in the FIB-SEM chamber. At each load state, HR-SEM and HR-EBSD maps are acquired to study the appearance of strain localization. Collected information on the local strain and lattice rotation aims at identifying the conditions for strain localization and propagation from grain to grain. Additional TEM studies on foils extracted from specific locations (via FIB-based lift-out technique) enable to further examine the fine structure of slip bands and grain boundaries.

Second, the samples are characterized by Diffraction Contrast Tomography (DCT) at ID11 Beamline, ESRF, to reconstruct their 3D microstructure [2]. Then, the sample are strained in the Nanox mechanical stress rig [3]. Grains of interest (GoI) are selected from the DCT reconstructed volume and are characterized by Topo-Tomography (TT) technique [4] on the same instrument. The GoI are then further studied via HR-SEM and HR-EBSD maps. 3D-EBSD is applied by serial polishing method to gain insight into the sub-surface characteristics. Finally, TEM studies are conducted on the GoI to study the strain localization which is observed in the TT reconstruction.

All the experimental results are compared and further confronted to simulation results to gain insight into the mechanisms at the origin of strain localization.

*Keywords: Strain localization, slip bands, incipient plasticity, in-situ tensile testing, electron microscopy, synchrotron-based tomography.*

## References:

- [1] Antolovich, S.D, Plastic localization in metals:origins and consequences, Progress in Materials Science, 59, 2014, 1-160.
- [2] Ludwig, W. et. al, Three-dimensional grain mapping by X-ray diffraction contrast tomography and the use of the Friedel pairs in diffraction data analysis, The Review of Scientific Instruments, 80, 2009
- [3] Gueninchault, N. et.al., Nanox: a miniature mechanical stress rig designed for near-field X-ray diffraction imaging techniques, Journal of Synchrotron Radiation, 23, 2016, 1474-1483
- [4] Ludwig, W. et. al, Three-dimensional imaging of crystal defects by ‘topo-tomography’, Journal of Applied Crystallography, 34, 2001, 602-607

# Characterization of Plastic Strain Localization in Polycrystalline Ni by means of 3D X-ray Diffraction Imaging Techniques

Zheheng LIU<sup>1), 2)\*</sup>, Nicola VIGANO<sup>2)</sup>, Wolfgang LUDWIG<sup>1), 2)</sup>

1) MATEIS, INSA Lyon, UMR5510 CNRS, 69621 Villeurbanne

2) ESRF, Grenoble

\*adresse email: zheheng.liu@esrf.fr

Plastic strains are known to localize in the form of slip bands. ANR project 3DiPolyPlast, a cooperation of the groups from MATEIS, institute P' and CdM/LEM, studies the strain localization in polycrystalline Ni by observing the slip bands and simulating Discrete Dislocation Dynamics.

In this study, miniature tensile samples with a cross-section of 400×400 μm are extracted and subsequently annealed to produce a fully recrystallized grain microstructure. Diffraction Contrast Tomography (DCT)<sup>[1]</sup> and Topotomography (TT)<sup>[2]</sup> have been performed at increasing levels of applied strain in order to observe the onset of plasticity in the bulk of the material.

DCT is a near-field diffraction imaging technique to characterize the 3D shape and crystallographic orientation of grains within polycrystalline samples. The presence of Twin Related Domains (TRD)<sup>[3]</sup> leads to systematic diffraction spot overlap. Therefore, automated recognition of such TRDs, which will be subsequently reconstructed in a joint optimization problem<sup>[4]</sup>, are introduced to improve the reconstruction quality and to observe the formation of slip bands. The cost function weights are introduced into 6D reconstruction<sup>[5]</sup> to take advantage of noise variances of the spot pixels and pixel-wisely disable the low-quality measurement data.

Topo-tomography is used to scan the grain of interest in the same sample with higher spatial resolution. The joint TT+DCT reconstruction is performed to reveal intragranular orientation gradients related to plastic strain localization at the onset of plastic deformation in this type of materials. And the results obtained by the different imaging modalities will be compared to each other.

## Reference

[1] Ludwig W, Reischig P, King A, Herbig M, Lauridsen E, Johnson G, Marrow T and Buffiere J Y 2009 *Rev. Sci. Instrum.* **80** 033905

[2] Ludwig W, Lauridsen E M, Schmidt S, Poulsen H F and Baruchel J 2007 *J. Appl. Crystallogr.* **40** 905-11.

[3] Cayron C 2007 *Acta Crystallogr. A* **63** 11-29.

[4] Vigano N, Nervo L, Valzania L, Singh G, Preuss M, Batenburg K J and Ludwig W 2016 *J. Appl. Crystallogr.* **49** 544-55

[5] Vigano N, Ludwig W and Batenburg K J 2014 *J. Appl. Crystallogr.* **47** 1826-40

# Détermination de pics de diffraction aux faibles angles par FFT pour des microstructures cuboïdales de superalliages à base Nickel obtenues par la méthode de champ de phase

Ablam Massa<sup>1,2,3)\*</sup>, Stéphane Berbenni<sup>1,3)</sup>, Thomas Schenk<sup>2,3)</sup>

- 1) Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers ParisTech, LEM3, F-57000 Metz, France
- 2) Institut Jean Lamour, 2 rue André Guinier, 54011 Nancy Cedex, France
- 3) LABORatoire d'EXcellence DAMAS, Université de Lorraine, F-57000, Metz

\*Email : ablam.massa@univ-lorraine.fr

## Résumé pour : Poster

Les superalliages monocristallins à base nickel sont des alliages constitués de deux phases : les précipités de forme cuboïdale  $\square'$  ( $\text{Ni}_3\text{Al}$  de structure  $L1_2$ ) qui sont distribués dans la matrice  $\square$  (Ni) de structure cubique. Les paramètres de maille des deux phases à température ambiante sont légèrement différents permettant de calculer le désaccord paramétrique (misfit)  $\delta$  défini par  $\delta = 2(a_{\gamma'} - a_{\gamma}) / (a_{\gamma'} + a_{\gamma})$  [1]. Lorsqu'ils sont sollicités à haute température, les phénomènes de diffusion des éléments d'alliage entre les deux phases entraînent une variation du misfit modifiant la morphologie des précipités. L'enregistrement in-situ des pics de diffraction permet de suivre l'évolution de l'état des contraintes et de déformation dans les deux phases. Toutefois la diffraction aux petits angles (SAXS ou SANS) permet d'avoir les informations liées à la forme des précipités et leurs distributions dans la matrice. Ces informations peuvent être obtenues également par simulation en se basant sur une modélisation efficace de la microstructure suivie de la simulation des pics. Afin de construire un modèle efficace pour calculer les pics de type SAXS (pic « (0,0,0) ») sur une microstructure dont le volume Élémentaire Représentatif est de  $(2\mu\text{m})^3$ , la méthode de champ de phase est appliquée [2]. Celle-ci permet de générer efficacement des microstructures de forme cuboïdale réalistes avec prise en compte de  $\delta$ . La méthode de champ de phase est ici combinée avec la méthode basée sur la Transformée Rapide de Fourier (FFT) [3] pour simuler les pics (profils 1D) et tâches (2D) de diffraction [1]. L'amplitude de diffraction au voisinage du vecteur du réseau réciproque  $\mathbf{G}$  est calculée par la méthode FFT de  $\exp[2i\pi\mathbf{G}\cdot\mathbf{u}(\mathbf{r})]$  où  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$  représente le champ de déplacement. Des résultats de calcul avec  $\mathbf{G}(0,0,0)$  pour obtenir des tâches de diffraction aux petits angles sont effectués, et sont discutés en fonction de la morphologie et la distribution spatiale des précipités.

**Mots clés :** diffraction, méthode FFT, modèle de champ de phase, superalliages à base Ni

## Références :

- [1] Jacques, A. (2016).. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 47(12), 5783- 5797.
- [2] Zhu, J. Z., Wang, T., Ardell, A. J., Zhou, S. H., Liu, Z. K., & Chen, L. Q. (2004).. *Acta Materialia*, 52(9), 2837- 2845.
- [3] Elo, K. S., Jacques, A., & Berbenni, S. (2019).. *International Journal of Plasticity*, 116, 1- 23.

# Deformation mechanism of cerium oxide nanocubes - an *in situ* transmission electron microscopy study

L. Joly-Pottuz<sup>1)\*</sup>, R. Zhang<sup>1)</sup>, G. Laurens<sup>2)</sup>, T. Albaret<sup>2)</sup>, K. Masenelli-Varlot<sup>1)</sup>

1) Univ Lyon, INSA-Lyon, MATEIS CNRS UMR5510, 69621 Villeurbanne, France

2) Univ Lyon, UCB Lyon 1, ILM UMR 5306, 69621 Villeurbanne, France

\*adresse email: lucile.joly-pottuz@insa-lyon.fr

## Résumé pour (effacer les mentions inutiles): invité / oral / poster

Cerium oxide nanoparticles are used in many industrial products, such as in solid oxide fuel cell electrodes, catalysis, or as superior abrasive particles in chemical mechanical planarization. However, their mechanical properties are rarely taken into account and few studies dealt with the determination of their deformation mechanism [1, 2].

This study deals with the determination of the deformation mechanism in cerium oxide monocrystalline nanocubes. Cerium oxides nanocubes (20-130 nm in size) are compressed using a dedicated Hysitron PI 95 sample holder in an environmental transmission electron microscope (ETEM). Plastic deformation of the nanocubes is analyzed using live High-Resolution TEM imaging. Two main phases of cerium oxides are investigated in this study: CeO<sub>x</sub> has a fluorite structure (space group Fm-3m) when x ranges between around 1.75 and 2, while a bixbyite structure is obtained (space group Ia-3) when x is less than about 1.75. The oxygen content and the corresponding space group can be monitored *in situ* by changing either the gaseous environment (high vacuum or air) or the electron dose rate conditions (high or low dose rate).

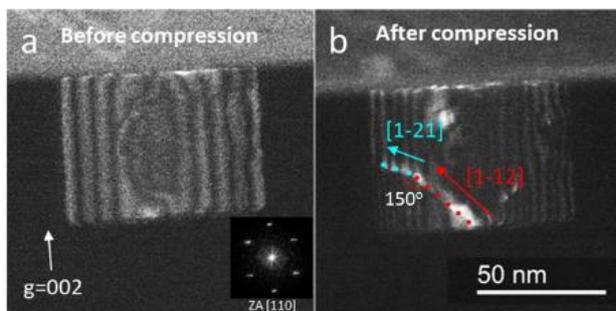


Figure 1 – Dark-field TEM images of CeO<sub>2</sub> nanocubes (a) before and (b) after compression along [001], with zone axis [110]

We will first present dislocation indexation during *in situ* tests, through the analysis of dislocation movements in fluorite nanocubes during compression. Dark Field images acquired on nanocubes before and after compression, with different orientations (see Figure 1), are also used to further determine the dislocation vector. With both methods, we will show that {110}{111} are the main slip systems determined in fluorite CeO<sub>x</sub>.

Moreover, we will show results obtained on tests performed on cubes irradiated using a high dose rate. Many stacking faults are formed under compression in the bixbyite structure. This occurs with a significant decrease of the yield stress. A dissociation of dislocation into partials is also observed which can be attributed to the presence of oxygen vacancies in the {111} planes. According to the evolution of defects and yield stress changes, the deformation mechanism in fluorite and bixbyite phases appears to be different and will be discussed.

[1] T;X.T. Sayle et al., *Nanoscale* 3 (2011) 1823.

[2] Y. Ding et al., *J. Appl. Phys.* 120 (2016) 214302.

Acknowledgement: This work was funded by ANR (projet ANR-18-CE42-0009) and CSC. Acknowledged to CLYM for microscope access and D.D. Stauffer (Bruker) for his help

**Présentations posters  
(par ordre alphabétique)**

# **Maclage de déformation et glissement basal dans la phase MAX Cr<sub>2</sub>AlC : étude par nanoindentation sphérique**

Mohamed AKOU<sup>1)\*</sup>, Christophe TROMAS<sup>1)</sup>, Anne JOULAIN<sup>1)</sup>

1) Institut Pprime-DPMM, Université de Poitiers

\*adresse email: mohamed.akou@univ-poitiers.fr

## **Résumé pour : poster**

Les phases MAX sont des matériaux nanolamellaires combinant avantageusement certaines propriétés des métaux et des céramiques, ce qui leur confère un fort potentiel d'applications technologiques. Même si les phases MAX présentent une remarquable usinabilité, elles restent fragiles à température ambiante, et la compréhension des mécanismes de déformation dans ces matériaux reste un point crucial pour pouvoir les envisager comme matériaux de structure. Une récente étude menée à l'Institut Pprime [1] a mis en évidence, grâce à des essais de nanoindentation et de compression de micro-piliers in situ sous MEB, un mécanisme de déformation par maclage dans les phases MAX Ti<sub>2</sub>AlN et Cr<sub>2</sub>AlC. Ces mécanismes, qui avaient été jusqu'à présent exclus du débat dans les phases MAX, nécessitent une relecture complète des propriétés mécaniques et des mécanismes élémentaires de déformation de ces matériaux.

Dans cette étude, nous nous proposons d'étudier les mécanismes de maclages de déformation dans les phases MAX par le biais d'essais de nanoindentation. La déformation plastique est ainsi limitée à ses premiers stades, et les zones d'intérêts sont analysées à travers plusieurs techniques de caractérisation : microscopie à force atomique (AFM), microscopie électronique à balayage (MEB), EBSD, microscopie électronique en transmission. L'étude est menée sur des échantillons de Cr<sub>2</sub>AlC, synthétisés sous forme de plaquettes monocristallines au laboratoire LMGP (Grenoble). Les objectifs sont de comprendre les mécanismes de développement des macles de déformation dans les phases MAX, et surtout de comprendre comment maclage et glissement basal interagissent lors de la déformation plastique de ces matériaux.

[1] C. Tromas, S. Parent, W. Sylvain, L. Thilly, G. Renou, C. Zehnder, S. Schröders, S. Korte-Kerzel, A. Joulain, Nanoindentation-induced deformation twinning in MAX phase Ti<sub>2</sub>AlN, Acta Materialia. 227 (2022) 117665.

# El-Numodis, a new tool to model dislocation versus surface interactions: application to nanoparticle mechanics

J. Gonzalez<sup>1)</sup>, L. Dupuy<sup>2)</sup>, P. Råback<sup>3)</sup>, M. Perez<sup>1)</sup> and J. Amodeo<sup>4)</sup>

1) INSA-Lyon, CNRS, MATEIS, F-69621 Villeurbanne, France

2) DCEA, DEN, SRMA, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

3) CSC-IT Center of Science, P.O. Box 405, FI-02101 Espoo, Finland

4) Aix-Marseille Univ., Université de Toulon, CNRS, IM2NP, Marseille France

\*adresse email: jonathan.amodeo@cnrs.fr

## Résumé pour (effacer les mentions inutiles): poster

The study of nanoparticles (NPs) deformation has proved to be of major importance to understand elementary processes at small-scale, with several applications in the fields of catalysis, nanomaterial engineering and medical imaging. Indeed, NPs are characterized by high yield stress and ductility when compared to their bulk counterpart that are mostly attributed to a transition from dislocation multiplication to dislocation nucleation. Usually, the two experimental techniques used to investigate NPs mechanics are microscopy-assisted compression tests and Molecular Dynamics (MD) simulations. While *in situ* experimental tests remain complex to carry and expensive, MD has severe drawbacks, especially regarding the sample size and strain rate.

In this study, we revisit the superposition method [1] that relies on coupling discrete dislocation dynamics (DDD) and Finite-Element Modeling (FEM) to solve a boundary problem when applied to nano-objects. Here we use the Numodis DDD nodal code with the Elmer elastic solver to deal with the interaction between dislocations and physical boundaries. Among others, El-Numodis accounts for the interactions between dislocations and free surfaces using the method developed by Weygand *et al.* [2] and uses a Kinetic Monte Carlo algorithm to statistically model the dislocation nucleation process from the surfaces. Load and displacement-controlled feedback loops are implemented to mimic regular experimental tests. Methodology, benchmarking and applications to MgO NPs under compression for which surface dislocation nucleation energy barriers were recently computed using the Nudged-Elastic Band method (NEB) method [3] are presented.

[1] Van der Giessen, E. & Needleman, A. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 3, 689–735 (1995).

[2] Weygand, D., Friedman, L., Van der Giessen, E. & Needleman, A. Aspects of boundary-value problem solutions with three-dimensional dislocation dynamics. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 10, 437–468 (2002).

[3] Amodeo, J., Maras, E. & Rodney, D. Site dependence of surface dislocation nucleation in ceramic nanoparticles. *NPJ Comput Mater* 7, 60 (2021).

## Mechanical degradation and fatigue life of amorphous polymers

Thierry Barriere <sup>a</sup>, Sami Holopainen <sup>b</sup>

<sup>a</sup> FEMTO-ST Institute, Applied Mechanics Department, 24 Rue de l'Épitaphe, 25000 Besançon, France

<sup>b</sup> Tampere University of Technology, Department of Civil Engineering, P.O. Box 600, FI-33101 Tampere, Finland

### **Résumé pour : oral**

#### Abstract

Due to favourable properties (cheap price, preeminent combination of toughness and strength, clearness, recyclability etc.), amorphous polymers are widely used in windows, sporting goods, vehicles, aeronautic equipment, health technology, and electronic devices. However, their applications may suffer from fatigue, when material fails at significantly lower stress levels than under monotonic loading conditions; fatigue loads result in polymer degradation which can affect horrific accidents (e.g., the air disaster of China Airlines Flight 611) and tremendous financial losses. Despite this motivation, fatigue behaviour of amorphous polymers has been scarcely investigated so far. In this study, micro-mechanical characteristics of amorphous structure and its influence on macroscopic deformation behaviour (ratcheting) are investigated. It was found (SEM results) that polymer degradation is the process of damage (shear banding affecting micro-cracking and fracture) causing finally breakdown of polymer network. The degradation process was very rate sensitive, and the crack initiation phase before rapid rupture of the material encompassed the majority (even 95%) of the total fatigue life. The vein-like and rippled patterns of Sbs and subsequent fracture surfaces increased fatigue resistance and life.

Keywords: Fatigue, Polymers, Cyclic viscoplasticity, Ratcheting

# Effets des longueurs internes microstructurales sur le comportement mécanique des aciers ferritiques : caractérisations expérimentales et modélisation micromécanique

Loyal Chamma<sup>1,2)</sup>, Jean-Marc Pipard<sup>1)</sup>, Artem Arlazarov<sup>1)</sup>,  
Thiebaud Richeton<sup>2)</sup>, Stéphane Berbenni<sup>2)\*</sup>

- 1) ArcelorMittal Maizières Research SA, Voie Romaine - BP30320, 57283 Maizières-les-Metz, France
  - 2) Université de Lorraine, Arts et Métiers, CNRS, LEM3, Metz, F-57000, France
- \*adresse email: [stephane.berbenni@univ-lorraine.fr](mailto:stephane.berbenni@univ-lorraine.fr)

## Résumé pour : oral

Les longueurs internes microstructurales jouent un rôle important sur le comportement mécanique local et macroscopique des aciers. Ces longueurs internes correspondent notamment à la taille de grains et à une couche d'épaisseur finie  $\lambda$  de densités de "dislocations géométriquement nécessaires" (GND) accumulées autour des joints de grains, au cours de la déformation plastique en raison des incompatibilités de réseau cristallin. Dans cette étude, un acier ferritique polycristallin monophasé à faible teneur en carbone (Al-k) produit par ArcelorMittal a été étudié, en considérant des échantillons non déformés et prédéformés en traction. La densité de GND a été estimée à partir de cartes EBSD bidimensionnelles en considérant les cinq composantes du tenseur de Nye disponibles et calculées à partir des courbures du réseau. Des essais de nanoindentation instrumentée ont ensuite été réalisés avec une pointe Berkovich dans un nanoindenteur de type UNHT. La densité totale de dislocations a été estimée à l'aide d'un modèle mécanistique basé sur les mesures de nanodureté. Une étude combinée utilisant à la fois l'EBSD-2D et la nanoindentation a alors été proposée afin de quantifier l'existence et l'évolution de la longueur interne  $\lambda$ . Une première approche locale a permis de caractériser directement les auto-organisations spatiales de densités de dislocations au voisinage des joints de grains dans certains grains bien choisis. Une analyse statistique basée sur toutes les données obtenues par EBSD-2D et par nanoindentation a permis de démontrer l'existence statistique d'un gradient de densités de dislocations aux joints de grains et d'estimer la valeur de  $\lambda$  en fonction du niveau de prédéformation plastique. A partir de ces données expérimentales, une approche micromécanique à champs moyens intégrant les effets de longueurs internes microstructurales (ACMLI) a été améliorée. Celle-ci intègre l'évolution de  $\lambda$  extraite de l'analyse statistique et la taille de grains moyenne de l'acier. En plus de simuler le comportement macroscopique de l'acier, les prédictions des densités de dislocations à plusieurs niveaux de déformation plastique sont discutées par rapport aux mesures expérimentales.

# Atomistic Modelling of Dislocation – Vacancy Interactions and Dislocation Climb

Erik Bitzek<sup>1,2)\*</sup>, Frédéric Houllé<sup>2)</sup>, Daria Smirnova<sup>1)</sup>

- 1) Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, Düsseldorf
- 2) Department of Materials Science and Engineering, Institute I  
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU)

\*adresse email: e.bitzek@mpie.de

## Résumé pour oral

Understanding and influencing the interaction between vacancies and dislocations, e.g., the diffusion of vacancies towards or along dislocations as well as during dislocation climb, is of fundamental importance for improving the high-temperature mechanical properties of materials. Modelling diffusion in a quantitatively predictive way requires information about the underlying atomic-scale processes and corresponding activation energies. While various atomic-scale simulation approaches are routinely employed to study diffusion in homogeneous environments, the presence of strain gradients and defects still poses significant challenges to predictive atomic-scale models. Due to the limited time scale attainable in molecular dynamics (MD) simulations, approaches such as (adaptive) kinetic Monte Carlo ((a)KMC) and diffusive molecular dynamics (DMD) [1] are often used. These approaches, however, are based on static dislocation configurations, neglecting the motion of the dislocation at high temperatures due to their interactions with phonons.

Here we present the results of direct, high-temperature MD simulations of dislocation-vacancy interactions and dislocation climb in face-centred cubic metals. The MD simulations of vacancy diffusion at an edge dislocation are compared to KMC and DMD runs based on the identical initial dislocation configuration. The mechanisms of dislocation climb are analyzed in detail and compared to DMD simulations [2] as well as analytical theories. The results are furthermore discussed in the context of mesoscale models of dislocation climb.

[1] J.J. Li, S. Sarkar, W.T.W.T. Cox, T.J.T.J. Lenosky, E. Bitzek, Y. Wang, Diffusive molecular dynamics and its application to nanoindentation and sintering, *Phys. Rev. B.* 84 (2011) 1–8. doi:10.1103/PhysRevB.84.054103.

[2] S. Sarkar, J.J. Li, W.T.W.T. Cox, E. Bitzek, T.J.T.J. Lenosky, Y. Wang, Finding activation pathway of coupled displacive-diffusional defect processes in atomistics: Dislocation climb in fcc copper, *Phys. Rev. B.* 86 (2012) 1–7. doi:10.1103/PhysRevB.86.014115.

# Ajustement de la réversibilité de la transformation martensitique sous contrainte d'un alliage de titane $\beta$ -métastable

Philippe Castany<sup>1)\*</sup>, Gaëtan Cabon<sup>1)</sup>, Doïna-Margareta Gordin<sup>1)</sup>, Thierry Gloriant<sup>1)</sup>

1) INSA Rennes, CNRS, ISCR UMR 6226, 35000 Rennes, France

\*adresse email: philippe.castany@insa-rennes.fr

## Résumé pour oral

Les alliages de titane  $\beta$ -métastable sont des candidats très prometteurs pour la réalisation de dispositifs médicaux sans nickel afin de remplacer les alliages NiTi actuellement utilisés. En effet, le nickel présente un caractère allergène avéré et une cytotoxicité fortement présumée. Cette problématique concerne de nombreux dispositifs nécessitant des propriétés de superélasticité ou de mémoire de forme comme les stents cardio-vasculaires, les agrafes d'ostéosynthèse, les arcs orthodontiques, les guides de cathéters, ... Ces deux effets sont dus à une transformation martensitique thermoélastique opérant dans ces alliages.

L'effet mémoire de forme est obtenu à partir d'une microstructure initiale composée exclusivement de martensite qui s'auto-arrange dans les ex-grains d'austénite. Lors d'une sollicitation mécanique, les variantes de martensite se réorientent pour accommoder la déformation. Ce processus est irréversible lorsque la sollicitation s'arrête, mais la forme initiale du matériau, et la microstructure initiale, peuvent être retrouvées par un chauffage du matériau. Au contraire, l'effet superélastique est obtenu à partir d'une microstructure initiale complètement austénitique. Une transformation martensitique sous contrainte a alors lieu lorsqu'une déformation est appliquée. Mais celle-ci présente un caractère réversible lorsque toute sollicitation est retirée, permettant ainsi de revenir à la forme initiale du matériau.

Nous présenterons l'étude d'un alliage quaternaire Ti-Zr-Nb-Sn présentant un effet mémoire de forme atypique à partir d'une microstructure initiale austénitique (phase  $\beta$  du titane, bcc). Une transformation martensitique sous contrainte a bien lieu lorsqu'une déformation est appliquée, mais celle-ci n'est étonnamment pas réversible. Par contre, un chauffage des éprouvettes après déformation permet bien de retrouver leur forme initiale.

Un traitement thermique à basse température permet cependant d'obtenir un effet superélastique, c'est-à-dire toujours la même transformation martensitique mais cette fois réversible. Mais aucune modification de microstructure initiale pouvant expliquer ce changement n'est mise en évidence. Une investigation plus poussée en microscopie électronique en transmission montrera un changement au niveau de la précipitation de phases nanométriques qui semble être la cause de ce changement de réversibilité de la transformation. Le contrôle de cette précipitation peut ainsi permettre, à partir d'un même alliage, d'obtenir un effet superélastique ou en effet mémoire de forme en ajustant la réversibilité de la transformation martensitique induite sous contrainte.

# Activation des systèmes de glissement dans les monocristaux FCC et BCC

Jean-Lin Dequiedt<sup>1,2)\*</sup>

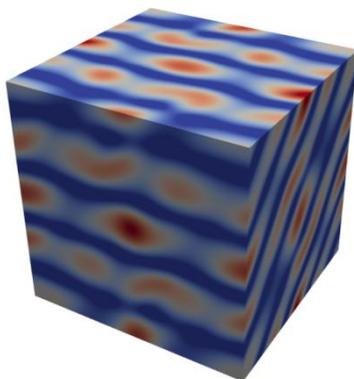
1) CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

2) Université Paris-Saclay, CEA, LMCE, F-91680 Bruyères-le-Chatel, France

\*adresse email: jean-lin.dequiedt@cea.fr

## Résumé pour : oral

Les structures cristallines cubiques (FCC et BCC) possèdent un nombre de systèmes de glissement tel qu'il existe plusieurs combinaisons de systèmes en mesure d'accommoder une déformation imposée donnée. De ce fait, un monocristal tend à sélectionner celle qui minimise le travail mécanique nécessaire i.e., dans le régime athermique, celle qui limite la coexistence de systèmes dont l'interaction (l'écroissage latent) est forte. En particulier, pour des déformations selon des directions de symétrie de la maille cristalline, une bifurcation du trajet de chargement qui désactive certains systèmes redondants est observée : un rôle crucial est joué par l'interaction colinéaire qui est beaucoup plus forte que les jonctions [1] et par la possibilité d'activer les systèmes  $\{112\}$  dans le cas de la structure BCC. Un autre moyen pour le monocristal de se déformer « à moindre coût » est de développer des modes de déformation hétérogènes liés à l'activation des systèmes dans des zones disjointes. L'apparition de structures de ce type peut être prédite par une analyse de stabilité qui met en évidence la sensibilité du processus aux différents coefficients d'écroissage latent [2]. En revanche, dans le régime d'activation thermique qui est étendu pour les métaux BCC du fait du niveau de la contrainte de Peierls, l'effet de l'écroissage latent est fortement atténué et le cristal tend à activer simultanément un plus grand nombre de systèmes indépendamment de la force de leurs interactions.



Déformation hétérogène d'un monocristal BCC en régime athermique liée à la dissociation de trois systèmes  $\{112\}$  formant des jonctions fortes

[1] Madec R., Kubin, L., 2017. Acta Mater., 126, 166-173.

[2] Dequiedt, J.L., Denoual, C., Madec, R., 2015. J. Mech. Phys. Solids, Vol. 83, 301-318.

# Interactions entre dislocations et boucles induites par l'irradiation dans le zirconium : passage d'information entre DM et DD

Laurent DUPUY <sup>\*, 1)</sup>, Wassim Kassem <sup>1)</sup>, Emmanuel Clouet <sup>2)</sup> et Fabien ONIMUS <sup>1)</sup>

1) SRMA, CEA-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

2) SRMP, CEA-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

\*[laurent.dupuy@cea.fr](mailto:laurent.dupuy@cea.fr)

## Résumé pour poster

La modélisation physique du vieillissement des gaines en alliages de zirconium des crayons combustibles des réacteurs à eau pressurisée nécessite une approche intrinsèquement multi-physiques et multi-échelles [1]. Elle vise notamment à comprendre les mécanismes par lesquels les défauts nanométriques induits par l'irradiation modifient le comportement plastique macroscopique du matériau.

Différents outils de simulation sont ainsi mobilisés, dont la dynamique moléculaire (pour l'étude des interactions élémentaires) et la dynamique des dislocations (pour l'étude de la plasticité à l'échelle du grain). Dans l'optique d'une remontée d'échelles, il est important de s'assurer que l'ensemble des mécanismes et paramètres pertinents soient convenablement transmis d'une échelle à l'autre.

Notre objectif est ainsi de bâtir le modèle de dynamique des dislocations minimal permettant de reproduire les interactions élémentaires entre dislocations et des boucles prismatiques <a> induites par l'irradiation aux mêmes échelles d'espace et de temps.

Cette démarche nous conduit à extraire différents paramètres d'élasticité, de viscosité ou d'énergies de simulations atomiques élémentaires, mais également à enrichir les modèles constitutifs de la dynamique des dislocations en termes de mobilité, de glissement dévié ou de formation de jonctions [2].

Ces éléments sont finalement validés sur l'ensemble des interactions élémentaires possibles [3]. Ils ouvrent la voie à des simulations de dynamique des dislocations plus ambitieuses permettant de comprendre les mécanismes de déformation du zirconium irradié à l'échelle du grain.

[1] F. Onimus, « Mécanismes de déformation et effets d'irradiation dans les alliages de zirconium. Une étude multi-échelle », HDR, juin 2015.

[2] L. Dupuy, W. Kassem, E. Clouet et F. Onimus, « Simulation of the interactions between dislocations and radiation-induced loops in zirconium: atomistically informed Dislocation Dynamics simulations » (*en préparation*).

[3] A. Serra et D.J. Bacon, « Atomic-level computer simulation of the interaction between dislocations and interstitial loops in  $\alpha$ -zirconium », *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* 21, 045007, 2013

# Full Field model to predict microstructures in precipitate strengthened alloys

Mathilde Eymann<sup>1)\*</sup>, Michel Perez<sup>1)</sup>, Thomas Elguedj<sup>2)</sup>, Thibaut Chaise<sup>2)</sup>,  
Pierre-Antoine Geslin<sup>1)</sup>

1) Univ Lyon, INSA Lyon, CNRS, Mateis, UMR5510, 69621 Villeurbanne, France

2) Univ Lyon, INSA Lyon, CNRS, LaMCoS, UMR5259, 69621 Villeurbanne, France

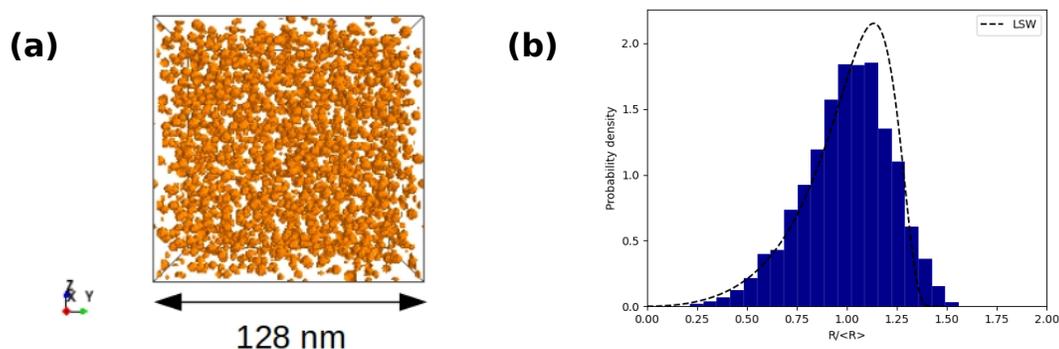
\*adresse email: mathilde.eymann@insa-lyon.fr

## Résumé pour : poster

The precipitation of a secondary phase in an alloy can lead to significant strengthening, especially in aluminum and nickel alloys, widely used in the transport industry. It is therefore essential to predict the precipitation state of these alloys and its influence on the mechanical properties, as function of their thermal history which can be complex in the case of specific processes such as additive manufacturing or welding. In this framework we develop a numerical approach modeling the microstructural evolution of precipitate strengthened alloys such as Al-Sc and Inconel 718. It is a full field model where precipitates are represented with shape function (see Fig.1.a). It is based on the following ingredients: (i) the classical nucleation theory to nucleate new precipitates, (ii) Gibbs-Thomson condition imposed at the interface of the precipitates, (iii) spatio-temporal integration of the non-stationary diffusion equation, (iv) a mass balance at the surface of precipitates to compute their growth rate.

This model relies on two different description for the precipitates: continuous and discrete on the numerical grid. A special care has been brought to ensure mass conservation of solutes while using this dual description. This approach allows to overcome the limitations of mean field model for precipitation by including spatial representation of precipitates and a non-stationary evolution of the solute field. Moreover this model does not rely on a diffuse description of the interfaces and is thus numerically more efficient than phase field approaches, allowing to simulate more significant volumes containing ~10000 precipitates (see Fig.1.a).

Eventually, the microstructures obtained with the simulations will be used in a dislocation dynamics code to model the interactions between dislocations and precipitates. This model will allow us to deduce the elastic limit from a non idealized microstructure.



**Figure 1.** Microstructure (a) and size distribution (b) obtained after a full field simulation for an Al-Sc alloy, with initial concentration at 1 at% in Sc, at 700K.

# Essais micromécaniques avec observations *in-situ* pour la mesure de la ténacité du laitton Cu-30%Zn en contact avec l'alliage liquide EGaIn.

Marco Ezequiel<sup>1)</sup> \*, Ingrid Proriol Serre<sup>1)</sup>, Thierry Auger<sup>2)</sup>, Eva Héripé<sup>2)</sup>

- 1) Univ. Lille, CNRS, INRAE, Centrale Lille, UMR 8207 - UMET - Unité Matériaux et Transformations, F-59000 Lille, France
- 2) PIMM/Arts et Métiers Technology Institute, CNRS, CNAM, 151 Bd de l'hôpital 75013 Paris, France

\*adresse email: marco-alejandro.ezequiel-alvarado@univ-lille.fr

## Résumé pour poster

Lorsqu'un métal solide ductile est mis sous contrainte mécanique en contact avec un métal liquide, le solide peut rompre de façon fragile. Ce phénomène est nommé fragilisation par les métaux liquides (FML) et il peut être quantifié par la réduction de la déformation plastique à la rupture du solide et par la réduction de sa ténacité. Malgré de nombreuses études, il n'y a pas de consensus sur les mécanismes expliquant la FML pour les couples solide/liquide possibles.

Une des limitations dans une généralisation des mécanismes est le manque d'essais avec observations *in-situ* de la FML. Ceci est lié aux conditions expérimentales d'obtention du métal liquide : liquide le plus souvent à haute température, éventuelle toxicité et des pressions de vapeur assez importantes. Pour éviter ces complexités, nous avons étudié le laitton Cu-30%Zn en contact avec l'EGaIn, qui est liquide à température ambiante, ne présente pas de toxicité et a une faible pression de vapeur. Une approche macroscopique de la sensibilité à la FML de ce laitton en présence de l'EGaIn a montré que ce couple est sensible à la FML.

Pour mesurer la ténacité du laitton en contact avec l'EGaIn à l'échelle micrométrique, nous avons développé des essais de flexion avec observations *in-situ*. Les essais ont été effectués dans un Helios Nanolab 660 où nous avons fabriqué les échantillons de taille micrométrique à l'aide d'un faisceau ionique, en faisant des observations avec un faisceau électronique. De plus, le micromanipulateur incorporé dans cette machine a été utilisé pour mettre en contact l'EGaIn liquide avec l'échantillon de laitton. Une presse miniature spécialement conçue pour conduire des essais micromécaniques avec observations *in-situ* a été utilisée pour appliquer la force de façon contrôlée et mesurer sa valeur. Les résultats des essais micromécaniques avec observations *in-situ* ont été utilisés pour estimer le facteur d'intensité de contraintes critique à l'amorçage en passant par le calcul de l'intégral J à l'aide d'une simulation par éléments finis (par deux approches : mécanique des milieux continus et plasticité cristalline). Les résultats des mesures aux petites échelles sont du même ordre de grandeur que les estimations par la simulation numérique et permettent d'envisager l'exploration des mécanismes de la FML par une approche en mécanique de la rupture.

Ce travail a été financé par l'ANR à travers le projet ANR GauguIn (N° ANR-18-CE08-0009-01).

# Impact des degrés de liberté microscopiques sur les joints de grains dans la forstérite

Jean Furstoss<sup>1)\*</sup>, Pierre Hirel<sup>1)</sup>, Philippe Carrez<sup>1)</sup>, Patrick Cordier<sup>1)</sup>

1) Unité Matériaux et Transformation – UMR 8207, Villeneuve d'Ascq

\*adresse email: jean.furstoss@univ-lille.fr

## Résumé pour : poster

Dans les roches du manteau supérieur terrestre, les joints de grains forstérite/forstérite sont suspectés d'accommoder une part importante de la déformation. De plus, le mode de déformation de la roche dépend fortement de la taille de grain qui dépend elle-même de la capacité des joints de grains à se mouvoir dans la microstructure. Ainsi, la compréhension des facteurs impactant la structure des joints de grains dans la forstérite, leur dynamique et leurs propriétés permettrait de mieux appréhender les phénomènes liés à la déformation du manteau supérieur comme la tectonique des plaques.

En étudiant par des méthodes de simulation atomistique une série de joints de grains de torsion ainsi qu'une variation dans l'inclinaison du plan de joint de grains, on montre un impact prépondérant des degrés de liberté microscopiques (décalage entre les cristaux, stœchiométrie, etc.) par rapport aux degrés de liberté macroscopiques (désorientation et plan) sur l'énergie et la structure des joints de grains. Ceci questionne l'importance de la bicristallographie et la pertinence des approches basées sur les disconnections pour décrire la dynamique des joints de grains dans ce type de matériau (large paramètre de maille, liaisons covalentes fortes, motif composé de nombreux atomes).

On montre également qu'un cisaillement appliqué à différents joints de grains ne génère pas de migration de ce dernier mais un glissement des grains associé à un changement de structure et un élargissement du joint de grain. Des systèmes contenant un dipôle de disconnections théoriquement glissiles pré-existant ne semblent également pas interagir avec le cisaillement et ce même en température. Les mécanismes élémentaires de la migration de joints de grains dans ce matériau restent donc inconnus.

# Effet du chargement sur la fissuration de films minces de Nickel de différentes épaisseurs

P. Godard<sup>1)\*</sup>, F. Zighem<sup>2)</sup>, D. Thiaudière<sup>3)</sup>, D. Faurie<sup>2)</sup> and P.O. Renault<sup>1)</sup>

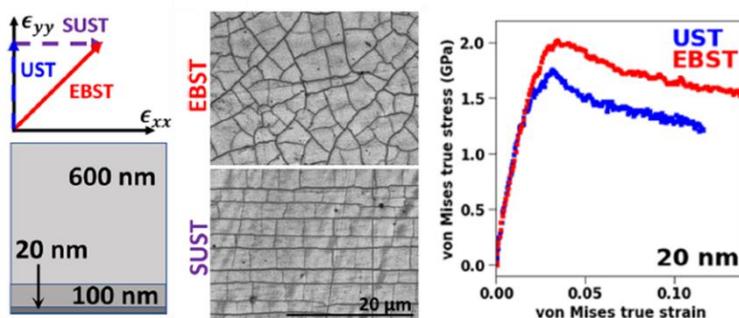
- 1) Université de Poitiers, Institut Pprime - CNRS, Futuroscope Chasseneuil, France
- 2) Université Sorbonne Paris Cité, LSPM - CNRS, Villetaneuse, France
- 3) Synchrotron SOLEIL, L'Orme des Merisiers, Saint-Aubin, France

\*adresse email: pierre.godard@univ-poitiers.fr

## Résumé pour poster

Nous nous intéressons à la fissuration de films minces de nickel déposés sur des substrats souples. Nous avons en particulier illustré qu'un chargement équibiaxial mène à un motif isotrope (dit en « boue séchée), alors que si l'on tire d'abord dans une direction, puis dans la direction perpendiculaire, l'ensemble des fissures forme un réseau rectangulaire. On peut donc arriver au même point ( $\epsilon_{11}, \epsilon_{22}$ ) de déformation appliquée en ayant différents motifs de fissuration [1]. Cette étude est complétée par l'effet d'épaisseur, avec des films de 20, 100 ou 600 nm [2].

Nous couplons la microscopie optique à de la corrélation d'images numériques pour connaître la déformation appliquée, et à la diffraction des rayons X afin de mesurer les contraintes dans le film. D'abord, des effets bien connus sont retrouvés : par exemple, plus un film est mince, plus grande est sa résistance mécanique, ou le fait que la nucléation des fissures apparaît à des déformations de plus en plus grandes à mesure que l'épaisseur du film diminue.



Nous avons également montré que la résistance mécanique, la limite d'élasticité et la limite de fissuration dépendent du chemin de chargement. Cependant, l'espacement moyen entre deux fissures, sur ces trois essais, est très bien approximé par  $125h$ , où  $h$  est l'épaisseur du film.

[1] D. Faurie et al, *In situ x-ray diffraction analysis of 2D crack patterning in thin films*, Acta Mater., 177-182, 165, (2019)

[2] P. Godard et al, *Strain ratio and thickness effects on plasticity and crack patterns of Nickel thin films*, Scr. Mater., 114638, 213, (2022)

# Experimental characterization of microstructure and topology of nanoporous gold ultrathin film for sourcing numerical models

Julien Godet<sup>1)\*</sup>, Gwénaél Massé<sup>1)</sup>, Florian Bouard<sup>1)</sup>, Laurent Pizzagalli<sup>1)</sup>, Lorraine Vernisse<sup>1)</sup>, Hadi Bahsoun<sup>1)</sup>, Maryline le Granvalet<sup>2)</sup>, Issraa Shahine<sup>2)</sup>, Quentin Hatte<sup>2)</sup>, Pierre-Yves Tessier<sup>2)</sup>

- 1) Institut Pprime, dept. of Physics and Mechanics of Materials, UPR 3346 CNRS - University of Poitiers, SP2MI, BP 30179, 11 Boulevard Marie et Pierre Curie, 86962 Chasseneuil Futuroscope Cedex, FRANCE
- 2) Institut des Matériaux Jean Rouxel, IMN, Université de Nantes, CNRS, 2 rue de la Houssinière B.P. 32229, 44322 Nantes cedex 3, FRANCE

\*adresse email: [julien.godet@univ-poitiers.fr](mailto:julien.godet@univ-poitiers.fr)

## Résumé pour : poster

Nanoporous gold ultra thin film is an interesting material due to its specific morphology [1]. Its large surface-to-volume ratio, large transmittance and electronic conductivity lead to potential applications in catalysis and flexible electronics. For the latter, gold nanomesh should support large deformations without failure under bending. Yet only a few studies of mechanical properties were done. In order to investigate the elementary mechanisms of plasticity by molecular dynamics simulations, we first performed experimental characterizations to source our numerical models.

Here, a combination of STEM, SEM, AFM, and EBSD experiments will be presented. While the geometry and topology can be deeply understood through skeletonization of experimental images, the microstructure characterization is only partially resolved. The extremely small diameters of the ligaments 10 to 30 nm on large areas of about square centimetres make the analysis challenging. Different methods will be compared. The skeleton analysis shows that ligament diameters are very similar over large areas confirming a strong control of the elaboration. Also the density of ligaments at large scale is relatively homogeneous, despite their inhomogeneity at lower scale. Realistic systems can be built but still include too many atoms, which requires a down scaling of the system to ligaments diameters around 3 nm. We will discuss the potential scaling effect on the mechanical properties.

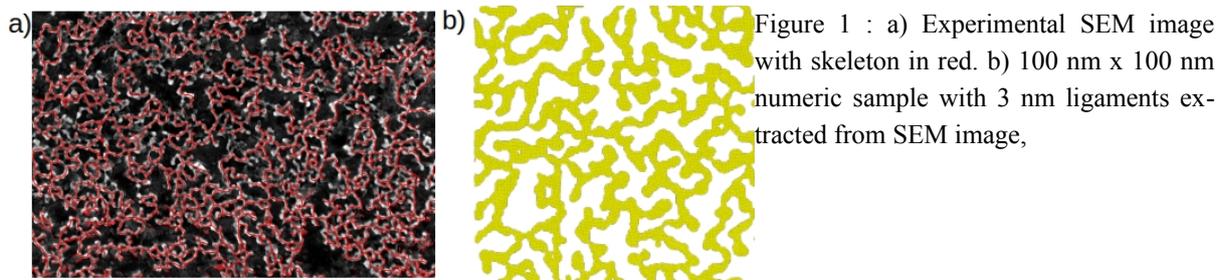


Figure 1 : a) Experimental SEM image with skeleton in red. b) 100 nm x 100 nm numeric sample with 3 nm ligaments extracted from SEM image,

# Développement d'une nouvelle méthode de mesure de propriétés mécaniques de surfaces par micro cisaillement

Gaylord Guillonneau<sup>1)\*</sup>, Fadlallah Abouhadid<sup>1)</sup>, Sergio Sao-Joao<sup>2)</sup>, Bénédicte Adogou<sup>2)</sup>, Guillaume Kermouche<sup>2)</sup>.

1) LTDS UMR CNRS 5513, Ecole Centrale de Lyon, Lyon

2) LGF CNRS UMR 5307, Mines de Saint-Etienne - Centre SMS, Saint-Etienne

\*adresse email: [gaylord.guillonnet@ec-lyon.fr](mailto:gaylord.guillonnet@ec-lyon.fr)

## Résumé pour: oral

Les systèmes industriels impliquent des contacts tribologiques entre les surfaces et donc des mécanismes de frottement et/ou d'usure à l'interface. La compréhension du comportement tribologique de ces surfaces est étroitement liée à la déformation par cisaillement ayant lieu entre les deux surfaces, qui peut être multi échelle. Ainsi, il devient primordial de pouvoir caractériser les surfaces par micro cisaillement.

Ainsi, une nouvelle méthode de mesure des propriétés mécaniques de surfaces par micro cisaillement a été développée, basée sur une géométrie d'éprouvette spécifique appelée « Shear Compression Specimen » [1], possédant la géométrie d'un micro pilier cylindrique possédant deux entailles orientées à 45° par rapport à l'axe du pilier. Cette méthode a été validée sur de la silice fondue et elle a de plus démontré qu'il est possible d'atteindre des niveaux de vitesses de déformations plus élevés que par micro compression de piliers du fait de la géométrie spécifique de l'éprouvette. Cependant, les simulations numériques de cet essai ont montré un écart avec les courbes expérimentales, notamment au niveau de la partie plastique. Pour mieux comprendre cette différence, une étude paramétrique par simulation numérique par éléments finis a été menée et sera présentée. Elle a révélé que le frottement entre le poinçon et l'éprouvette semble être le paramètre clé expliquant cette différence. Afin de rendre l'essai de micro cisaillement indépendant du frottement, deux nouvelles méthodes sont en cours de développement et seront présentées. La première à comprimer de façon cyclique le « Shear Compression Specimen », minimisant ainsi le frottement entre le poinçon et l'éprouvette, et la seconde consiste à réaliser une double rainure en croix, permettant ainsi théoriquement un frottement nul entre le poinçon et l'échantillon.

## Référence

[1] G. Guillonnet, S. Sao Joao, B. Adogou, S. Breumier, G. Kermouche, Plastic Flow Under Shear-Compression at the Micron Scale-Application on Amorphous Silica at High Strain Rate, JOM. (2022). <https://doi.org/10.1007/s11837-021-05142-7>

## ENVIRONMENT EFFECT ON INTERNAL FATIGUE CRACK PROPAGATION STUDIED WITH IN-SITU X-RAY MICROTOMOGRAPHY

Louis Hébrard<sup>1)\*</sup>, Jean-Yves Buffiere<sup>1)</sup>, Thierry Palin-Luc<sup>2)</sup>, Nicolas Ranc<sup>3)</sup>, Matthieu Bonneric<sup>2)</sup>, Yves Nadot<sup>4)</sup>, Nicolas Saintier<sup>2)</sup>

- 1) Université de Lyon, INSA-Lyon, MATEIS, CNRS UMR 5510, Villeurbanne
- 2) Arts & Metiers Sc. & Tech. - CNRS - Uni. de Bordeaux, I2M Bordeaux, Talence
- 3) PIMM, Arts & Metiers Inst. of Tech. - CNRS, Cnam, HESAM University, Paris
- 4) Institut Pprime, ISAE-ENSMA, CNRS, Université de Poitiers, Futuroscope

\*adresse email: louis.hebrard@insa-lyon.fr

### Résumé pour poster

Contrary to High Cycle Fatigue where fatigue cracks initiate from the surface, in the Very High Cycle Fatigue regime (low-stress amplitudes and N failure  $\sim 10^8 - 10^{10}$  cycles), cracks tend to initiate in the bulk of the materials. But there are few studies in the literature about in-situ monitoring of such internal cracks (Nakamura et al., 2016).

The important difference in fatigue life between surface and internal cracks is frequently explained by the impact of the environment on the crack propagation (adsorption-induced dislocation emission (Lynch, 1988), hydrogen enhanced localized plasticity (Birnbaum et al., 1994), etc.). To study the environment effect, an artificial internal notch has been inserted (Junet et al., 2019) in ultrasonic fatigue samples which are divided in two batches. Samples from the first batch contain a path which brings air from the surface to the internal notch whereas the notches in the samples from the second batch are not linked to the surface. Consequently, the crack shapes for the two cases will be comparable.

These notched samples are cycled with an ultrasonic fatigue machine which has been developed in a previous study (Messenger et al., 2019). It allows to cycle samples at 20 kHz and to detect the initiation of internal cracks by using a laser vibrometer and a real-time FFT analysis. Then, synchrotron X-ray microtomography is used to image the detected internal crack and to monitor its propagation. Furthermore, the machine allows to impose a static loading on the samples in order to open the internal crack and facilitate the tomographic observation. Hence, the 3D shape of gigacycle fatigue cracks have been obtained during their propagation in a Ti-64 alloy.

With this experimental method, the obtained data will allow to compare the number of cycles to failure, the internal crack growth rate and the fractography of internal cracks which propagated either under air condition or in the core of the alloy (i.e. under vacuum environment) in order to point out the different fatigue crack propagation mechanisms.

### **REFERENCES**

- Birnbaum et al. - Materials Science and Engineering : A, vol. 176, no 1, p. 191–202 (1994).  
Junet et al. - Scripta Materialia, 171:87–91 (2019).  
Lynch - Acta Metallurgica, vol. 36, no 10, p. 2639–2661 (1988).  
Messenger et al. - FFEMS, 1-10 (2019).  
Nakamura et al. - Mech. Eng. Letters, Vol 2, 16–00233 (2016).

# Complexions de joints de grains dans MgO

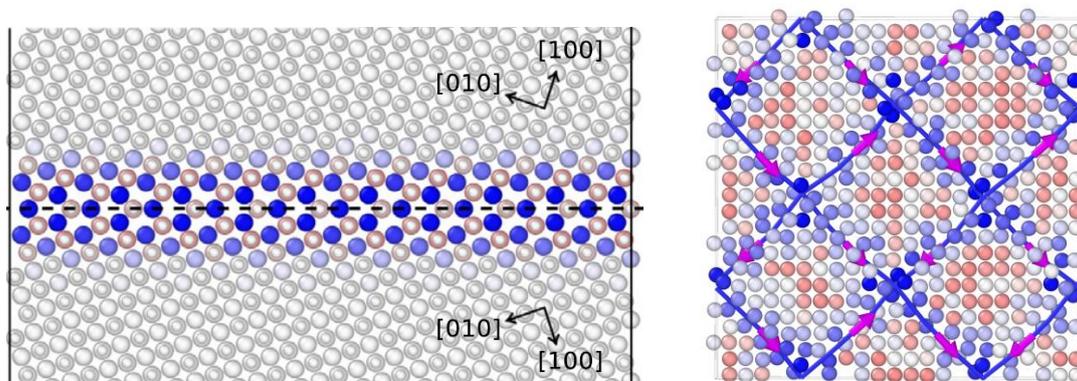
Pierre Hirel<sup>1)\*</sup>, Philippe Carrez<sup>1)</sup>, Patrick Cordier<sup>1,2)</sup>

1) Univ. Lille, CNRS, INRAE, Centrale Lille, UMR 8207 – UMET - Unité Matériaux et Transformations, F-59000 Lille, France

2) Institut Universitaire de France, Paris, France

\*adresse email: pierre.hirel@univ-lille.fr

Les matériaux céramiques existent souvent sous forme polycristalline, aussi les joints de grains jouent-ils un rôle prépondérant dans leurs propriétés mécaniques. Contrairement aux systèmes métalliques, dans les matériaux ioniques les interactions électrostatiques dominent la structure et les propriétés des interfaces. Nous présentons des simulations à l'échelle atomique de joints de flexion et de torsion dans l'oxyde de magnésium (MgO). En plus des neuf degrés de liberté habituels (désorientation entre les grains, plan de contact, translation), nous considérons des variations de la fraction atomique, c'est-à-dire le nombre et l'arrangement des paires d'ions Mg-O à l'interface. Nous montrons que même en considérant des joints stœchiométriques, différentes configurations peuvent être obtenues pour une même désorientation donnée. Ces résultats ont un impact sur les propriétés physiques des joints de grains, comme leur mobilité ou la diffusion.



**Fig. 1** – Carte d'énergie de ségrégation de paires de lacunes MgO dans un joint de flexion (à gauche) et dans un joint de torsion (à droite), de bleu (ségrégation favorable) à rouge (défavorable). À droite, les lignes bleues sont des dislocations vis dans le joint de torsion.

# Transformation-induced plasticity of zirconia-based ceramics: A numerical and experimental study

Gael HUYNH<sup>1\*</sup>, Marcelo D. MAGALHAES<sup>2\*\*</sup>, Tristan ALBARET<sup>1</sup>, David RODNEY<sup>1</sup>, Thierry DOUILLARD<sup>2</sup>, Helen REVERON<sup>2</sup>, Sylvain MEILLE<sup>2</sup>, Jérôme CHEVALIER<sup>2</sup>, Michael TEXIER<sup>3</sup>, Solène COMBY-DASSONNEVILLE<sup>3</sup>, Thomas W. CORNELIUS<sup>3</sup>, Olivier THOMAS<sup>3</sup>, Jonathan AMODEO<sup>3</sup>

1. Univ Lyon 1, ILM UMR CNRS 5306, Villeurbanne, F-69622, France
2. Univ Lyon, INSA Lyon, UCBL, MATEIS UMR CNRS 5510, Villeurbanne, F-69621, France
3. Aix Marseille Univ, Univ Toulon, IM2NP UMR CNRS 7334, Marseille, F-13397, France

\*email address: [gael.huynh@univ-lyon1.fr](mailto:gael.huynh@univ-lyon1.fr)

\*\*email address: [marcelo.demetrio-de-magalhaes@insa-lyon.fr](mailto:marcelo.demetrio-de-magalhaes@insa-lyon.fr)

## Abstract for : poster

Zirconia-based ceramics can exhibit plasticity at room temperature thanks to a stress-induced martensitic phase transformation from a tetragonal to a monoclinic phase. This process is similar to the TRIP (Transformation Induced Plasticity) effect of shape memory alloys and can be triggered by stress and/or temperature. In zirconia doped with cerium oxide, the transformation leads to a plastic deformation on the order of one percent before rupture, resulting in high toughness (relatively to ceramics). The present work intends to discuss the transformation in zirconia-based ceramics, by combining numerical and experimental works.

To that end, monocrystalline micropillars composed of 12 mol% ceria-doped zirconia were compressed in-situ at ESRF-BM32 using a nanoindenter equipped with a diamond flat punch and combined with Laue microdiffraction. This method allows to monitor the phase change from tetragonal to monoclinic, and allows identifying the different transformation variants i.e., the alignment between the parent (tetragonal) and product (monoclinic) phase.

For a comprehensive review of the material behavior, atomistic simulations of quasi-static nanoindentations of a quasi 2d tetragonal zirconia crystal were carried out. The interactions are defined by a deep neural-network based interatomic potential trained with ab initio data, which was created in order to reproduce accurately the relative phase stability at low temperature in zirconia. The load-displacement curve, deformation process and cell variant were investigated.

By combining both experimental observations and atomistic simulations, a detailed understanding of transformation-induced plasticity in zirconia is obtained. In particular, we determined the dependence of the variant selection with the crystal orientation, akin to slip system selection in uniaxial deformation of single metallic crystals.

# ***Pyrough* : a new tool to model rough samples in atomistic and finite element simulations**

Hugo Iteney<sup>1\*</sup>, Javier Gonzalez<sup>2</sup>, Christophe Le Boulrot<sup>2</sup>, Thomas W. Cornelius<sup>1</sup>, Olivier Thomas<sup>1</sup>, Jonathan Amodeo<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Aix Marseille Univ, Univ Toulon, CNRS, IM2NP UMR 7334, Marseille, France

<sup>2</sup>MATEIS, Université Lyon 1 CNRS INSA-Lyon, F-69621 Villeurbanne, France

\*[hugo.iteney@im2np.fr](mailto:hugo.iteney@im2np.fr)

Surface roughness has a fundamental impact on the mechanical properties of materials. It plays a key role in several fields of applications including friction, lubrication, machining and polishing. At the atomic scale, surfaces and surface defects are also known to be at the roots of major physical phenomena as e.g., in the field of catalysis or nanomechanical engineering.

From a general point of view, surfaces can be characterized according to their chemical composition, roughness and height distribution. Mathematical formulations of rough surfaces are widely reported in the literature, drawing a correlation between degrees of roughness and the fractal dimension [1].

In this study, we introduce a new numerical tool called *Pyrough* developed to design rough virtual samples for atomistic (MD, DFT) simulations and finite-element modeling (FEM). *Pyrough* is a Python code that constructs 3D objects with the ability to manage surface height distribution of isotropic and Gaussian random surfaces. Fed by a parameter file that includes the main aspects of the targeted 3D sample (material, shape, dimensions, orientations, crystal structure, etc.), a 3D perfect mesh is first generated using the coupled Gmsh library and then roughened based on the classical roughness theory [2]. This first outcome is available via various classical mesh formats (.msh, .stl, etc.) compatible with most FEM programs. Then, *Pyrough* fills the sample mesh with atoms as being fully coupled with the atomistic Atomsk library [3] providing a sample with rough surfaces designed for atomistic simulations with again a large set of supported output formats (.imp, .xyz, .cfg, etc.). Several 3D shapes are currently available in *Pyrough* including classical particle shapes (cubes, spheres, Wulff shapes), cylindrical or faceted wires as well as plates or thin films. Additional ones might easily be implemented by the user thanks to *Pyrough*'s modular construction.

Examples of *Pyrough*'s applications in which we investigate the influence of surface roughness on the mechanical properties of metal nanoparticles are also presented.

[1] Majumdar, A., and B. Bhushan. "Role of Fractal Geometry in Roughness Characterization and Contact Mechanics of Surfaces." *Journal of Tribology* 112, no. 2 (April 1, 1990): 205–16. <https://doi.org/10.1115/1.2920243>.

[2] Jacobs, Tevis D B, Till Junge, and Lars Pastewka. "Quantitative Characterization of Surface Topography Using Spectral Analysis." *Surface Topography: Metrology and Properties* 5, no. 1 (January 27, 2017): 013001. <https://doi.org/10.1088/2051-672X/aa51f8>

[3] Pierre Hirel. "Atomsk: A Tool for Manipulating and Converting Atomic Data Files." *Computer Physics Communications* 197 (December 2015): 212–19. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.07.012>.

# **Influence des éléments d'addition sur les mécanismes de déformation d'alliages de titane de structure cubique centrée.**

Nicolas Jobit<sup>1,2)\*</sup>, Philippe Castany<sup>1)</sup>, Fan Sun<sup>2)</sup>, Frédéric Prima<sup>2)</sup>, Thierry Gloriant<sup>1)</sup>.

1) Univ Rennes, INSA Rennes, CNRS, ISCR UMR 6226, 35000 Rennes, France

2) PSL Research University, Chimie ParisTech-CNRS, Institut de Recherche de Chimie Paris, 75005 Paris France

\*adresse email: nicolas.jobit@insa-rennes.fr

## **Résumé pour poster**

Les alliages de titane sont étudiés depuis plusieurs décennies puisqu'ils associent d'excellentes propriétés mécaniques à une densité faible. Pour cette raison, ils sont utilisés dans de nombreux domaines industriels, comme l'aéronautique ou le biomédical. Parmi eux, les alliages  $\beta$ -méta-stable occupent une place unique, puisqu'ils combinent un module d'Young faible et une ductilité exceptionnelle grâce à la combinaison d'effets TRIP (TRansformation Induced Plasticity) et TWIP (TWinning Induced Plasticity) ainsi que le glissement de dislocations. Ces matériaux se révèlent donc très prometteurs pour supplanter par exemple les alliages de type Nickel-Titane ou Cobalt-Chrome, très répandus dans le domaine biomédical et qui posent aujourd'hui des problèmes de biocompatibilité.

Bien que les effets TRIP/TWIP aient été largement étudiés dans les aciers, ils restent encore mal compris dans alliages de titane, et en particulier l'effet des éléments d'additions sur l'activation des deux mécanismes cités précédemment, à savoir la transformation martensitique sous contrainte et le maclage. Ce travail porte donc sur l'étude d'alliages binaires modèles de type Ti-X, permettant ainsi de faire varier le type ou la teneur en élément d'addition et donc d'en connaître l'influence sur les mécanismes de déformation déclenchés et sur les propriétés résultantes.

Dans ce but, plusieurs alliages binaires ont été élaborés. Des caractérisations mécaniques à température ambiante ont été menées afin de connaître leurs propriétés mécaniques. Ces essais ont été complétés par des caractérisations microstructurales en EBSD et au microscope électronique en transmission permettant d'attribuer plus précisément les propriétés mécaniques observées à un ou plusieurs mécanismes de déformation.

# Investigation des mécanismes d'initiation et de persistance d'une bande de glissement dans les polycristaux CFC

Baptiste Joste<sup>1,2\*</sup>, Benoit Devincré<sup>2</sup>, Riccardo Gatti<sup>2</sup>, Henry Proudhon<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*MINES ParisTech, Centre des Matériaux, CNRS UMR 7633  
BP 87, F-91003 Evry Cedex, France.*

<sup>2</sup>*CNRS-ONERA, Laboratoire d'Etude des Microstructures, CNRS UMR 104  
BP 72, 92322 Chatillon Cedex, France.*

*\*[baptiste.joste@mines-paristech.fr](mailto:baptiste.joste@mines-paristech.fr)*

## Résumé pour : oral / poster

La compréhension des mécanismes de déformation des matériaux polycristallins est un enjeu majeur en sciences des matériaux, notamment en ce qui concerne la localisation de la déformation plastique intragranulaire en bandes de glissement et la propagation de ces dernières dans le polycristal. De nombreuses questions sur les mécanismes élémentaires contrôlant ces phénomènes critiques sont toujours en suspens. Des premières simulations via la Méthode des Eléments Finis (MEF), ont été réalisées sur des agrégats modèles de type réseau de Voronoi. Ces simulations ont permis une étude systématique des mécanismes élastiques favorisant l'émergence d'une localisation de la déformation plastique, aux premiers stades de la déformation. Ces calculs en bons accords avec des observations expérimentales récentes [1], mettent en évidence l'importance des incompatibilités de déformation élastique entre grains, à l'origine de concentration de contrainte dans des zones très localisées des polycristaux.

L'utilisation du principe de superposition [2], a permis l'étude via la DDD de l'effet des conditions de chargement élastique sur le comportement plastique intragranulaire. Les résultats de ces simulations, ont permis de montrer le rôle clé des mécanismes de glissement dévié et d'annihilation colinéaire quant à l'initiation d'une bande glissement au cours de la déformation. Néanmoins, ces deux mécanismes ne permettent pas d'expliquer la persistance d'une bande de glissement car aucune réduction de l'écrouissage cinématique sur les plans de glissement n'est observée lors de leurs activations. Le développement d'une règle locale sur la base du modèle unidimensionnel de l'empilement [3], permettant de traiter dans le code de DDD les phénomènes de transmission/absorption des dislocations aux joints de grain ouvre la voie à un scénario possible.

[1] M. Charpagne, J. Hestroffer, A. Polonsky, M. Echlin, D. Texier, V. Valle, I. Beyerlein, T. Pollock, and J. Stinville. Slip localization in inconel 718: a three-dimensional and statistical perspective. *Acta Materialia*, 215 :117037, 2021

[2] M. Fivel, T. Gosling et G. Canova, Implementing image stresses in a 3D dislocation simulation, *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 4 (6), p. 581 (1996).

[3] John Price Hirth, Jens Lothe, and T Mura. Theory of dislocations. *Journal of Applied Mechanics*, 50(2):476, 1983

# Effet de l'irradiation électronique sur la plasticité des verres d'oxyde lors d'essais micromécaniques in-situ.

Guillaume Kermouche<sup>1)\*</sup>, Etienne Barthel<sup>2)</sup>, Gustavo Rosales<sup>3)</sup>, S. Sao-Joao<sup>1)</sup>..

- 1) Mines Saint-Etienne, Laboratoire Georges Friedel, CNRS UMR 5307, 158 Saint-Etienne - France
- 2) École Supérieure de Physique et de Chimie Industrielles de la Ville de Paris (ESPCI) ParisTech, Sciences et Ingénierie de la matière Molle, CNRS UMR 7615, Paris - France
- 3) Nippon Electric Glass, 7-1, Seiran 2-Chome, Otsu, Shiga 520-8639, Japan

\*kermouche@emse.fr

## Résumé pour oral

Les verres d'oxyde sont l'archétypes des matériaux amorphes fragiles. A l'échelle du micron, ils peuvent s'écouler plastiquement et ainsi présenter une ductilité similaire à celle des métaux les plus mous. Il semble cependant exister un lien entre cette plasticité microscopique et la fragilité macroscopique, ce qui nécessite donc de mieux comprendre les spécificités de cet écoulement plastique local. Contrairement aux métaux, Ils ne semblent pas présenter un seuil défini de plasticité, mais plutôt un comportement viscoplastique sans seuil avec toutefois une sensibilité à la vitesse de déformation relativement faible à température ambiante. Pour étudier la (visco)plasticité, il est donc nécessaire de recourir à des essais mécaniques permettant de solliciter ces matériaux à la bonne échelle, c'est-à-dire à l'échelle de quelques microns, voire de quelques dizaines de nanomètres. Nous présentons dans un premier-temps les progrès réalisés dans ce domaine grâce aux essais micromécaniques in situ dans les microscopes électroniques à balayage. Nous montrons cependant que ces essais ne sont pas complètement neutres puisque à la fois les conditions environnementales (vide partiel) et l'irradiation électronique semblent affecter le comportement de ces matériaux en favorisant un écoulement viscoplastique. A partir d'essais micromécaniques mêlant indentation / compression / relaxation, nous montrons que l'irradiation joue un rôle équivalent à la température sur la viscosité du matériau, avec à la clé une potentielle équivalence temps-irradiation similaire à la « bien connue » équivalence temps-température. A terme, ces essais devraient nous permettre de mieux comprendre le comportement de ces matériaux à haute température ... mais tout en réalisant des essais micromécaniques à température ambiante.

# Mesures continues pour l'analyse in-situ de la plasticité cristalline et du maclage à l'échelle atomique

Paul Lafourcade<sup>1, 2)\*</sup>, Guillaume Ewald<sup>3)</sup>, Christophe Denoual<sup>1, 2)</sup>

- 1) CEA DAM DIF, Bruyères-le-Châtel, 91297 Arpajon Cedex, France
- 2) LMCE, Université Paris-Saclay, 91280 Bruyères-le-Châtel, France
- 3) Ecole Nationale des Ponts et Chaussées, 77429 Champs-sur-Marne, France

\*adresse email: paul.lafourcade@cea.fr

## Résumé pour: oral

La définition de lois de comportement multiéchelles pour les métaux dans des conditions extrêmes nécessite une compréhension détaillée des mécanismes de déformation irréversible, tels que la mobilité et l'interaction des dislocations, le maclage, etc. Afin de pallier le manque de données expérimentales à l'échelle atomique sur ces mécanismes, nous utilisons des simulations de dynamique moléculaire classique avec des mesures lagrangiennes pour extraire la signature de la plasticité cristalline et du maclage. Grâce au calcul des vecteurs propres du tenseur gradient de la déformation, nous sommes en mesure de distinguer, par exemple, les directions de glissement/maclage ainsi que les plans correspondants.

Les outils développés dans ce travail permettent l'extraction d'informations cruciales si l'on veut identifier des statistiques de champs mécaniques à partir de simulations de DM et construire des lois de comportement à l'échelle mésoscopique dans une approche bottom-up. L'efficacité de la méthode présentée est démontrée en premier lieu pour l'analyse des mécanismes de déformation causés par la compression uniaxiale dynamique de monocristaux de Cuivre et de Tantale contenant une cavité. Dans une deuxième étude, nous examinons la sensibilité à la vitesse de déformation de la compétition entre le maclage et la plasticité cristalline pour un monocristal de Tantale sous cisaillement dynamique.

# Etude des propriétés mécaniques par Punch Test du TA6V issu de fabrication additive

Mathieu Lalé\*, Benaïssa Malek, Bernard Viguière

1) CIRIMAT, ENSIACET INP Université de Toulouse, 4 Allée Emile Monso, 31030 TOULOUSE

\*adresse email: mathieu.lale@toulouse-inp.fr

## Résumé pour : poster

Nous utilisons l'essai d'enfonçage (Small Punch Test) afin de caractériser les propriétés mécaniques de l'alliage TA6V obtenu par fabrication additive. Ce type d'essai, originellement développé au cours des années 1980 par l'industrie du nucléaire, utilise des échantillons simples et de petite taille (disque de 10 mm de diamètre et 0,5 mm d'épaisseur). On peut utiliser ces essais pour estimer les propriétés normalement obtenues par un essai de traction uniaxiale à vitesse imposée (essais notés SPT) ainsi que par un essai de fluage uniaxial (Small Punch Creep Test ou SPCT) [1]. Dans le cas de la fabrication additive, ces essais permettent de comparer les propriétés mécaniques en fonction de l'orientation par rapport à la direction de construction mais également d'étudier des effets de massivité.

Nous présentons l'évolution de la limite d'élasticité, telle que mesurée par SPT, en fonction de la température et de la vitesse de sollicitation (Fig a). Les propriétés mécaniques de l'alliage obtenu par FA et de celui de forge seront comparées. Des domaines de sensibilité négative à la vitesse de déformation ont pu être identifiés. L'état mécanique au sein des échantillons SPT n'est pas homogène et nécessite d'être simulé par éléments finis (Fig. b). Ces simulations permettent ainsi de valider les valeurs expérimentales macroscopique (limite d'élasticité,  $R_m$ ) mais aussi de déterminer les états mécaniques locaux (contrainte, déformation plastique et vitesse de déformation).

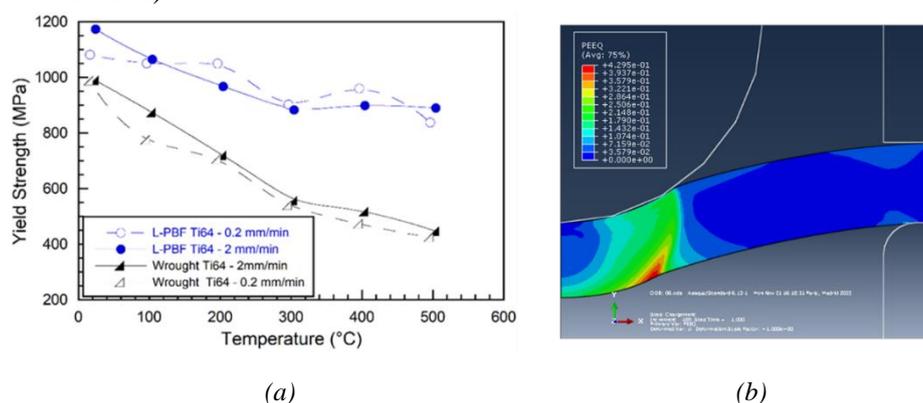


Figure : (a) Evolution de la limite d'élasticité pour deux méthodes d'élaboration (b) Champ de déformation plastique équivalente pour un déplacement de 0,5 mm de l'indenteur à température ambiante

## Références:

- [1] ASTM International, Standard Test Method for Small Punch Testing of Metallic Materials, 2020.

# Etude *ab initio* de l'interaction soluté-dislocation vis dans un HEA

Thomas Leveau<sup>1)</sup> \*, Lisa Ventelon<sup>1)</sup>, Emmanuel Clouet<sup>1)</sup>

1) Section de Recherche en Métallurgie Physique (SRMP) – CEA Saclay

\*adresse email: thomas.leveaut@cea.fr

## Résumé pour poster

Cette étude *ab initio* porte sur la caractérisation de l'interaction entre dislocation vis et soluté dans l'alliage à haute entropie équimolaire quinaire HfNbTaTiZr. Cet alliage est une solution solide homogène monophasée cubique centrée. Il est particulièrement intéressant pour ces bonnes propriétés mécaniques telles que sa limite élastique ou sa ductilité.

Les récentes observations MET de l'alliage HfNbTaTiZr ont montré l'existence d'un vieillissement dynamique [1] provenant de l'interaction des dislocations avec une impureté, a priori l'oxygène. L'étude du comportement plastique dans ces métaux passe par la caractérisation des cœurs de dislocations vis  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ . Les précédentes études [2] dans des métaux purs de même structure cubique centrée ont montré que la présence de solutés interstitiels peut conduire à une reconstruction des cœurs de dislocation vis associée à une forte attractivité.

Afin de modéliser les dislocations vis, une approche *ab initio* est utilisée [3], permettant une étude énergétique. Deux dislocations sont introduites à l'aide d'un modèle élastique dans une super-cellule contenant 540 atomes. Cette hauteur permet, pour un temps de calcul raisonnable, de conserver un certain désordre chimique le long de la dislocation, tout en imposant un environnement chimique identique pour les deux cœurs de dislocation. De manière symétrique, un atome de soluté interstitiel a été ajouté dans les deux cœurs de dislocation en position octaédrique premier voisin du cœur.

Les positions relaxées des atomes indiquent que la configuration des cœurs des dislocations n'est pas compacte même après ajout du soluté contrairement aux reconstructions de cœur compact qui ont pu être observées dans les métaux purs cubiques centrés [3].

En connaissant l'énergie des cellules relaxées, il est possible de calculer les énergies de cœurs de dislocations ainsi que l'énergie d'interaction entre la dislocation et le soluté. Trois solutés différents ont été étudiés : l'oxygène, l'azote et le carbone. Plusieurs configurations chimiques de la super-cellule ont été générées pour calculer ces énergies. Les énergies d'interactions calculées montrent que l'interaction entre la dislocation et du soluté est attractive, comprise entre -0,5 et -3,5 eV, et qu'elle varie en fonction de l'environnement chimique du soluté. L'attraction est plus importante pour l'oxygène que pour le carbone et l'azote.

[1] C. Tafani, Thèse Univ. Paris Est Créteil (2022)

[2] B. Luthi, Thèse Univ. Lyon (2017)

[3] D. Rodney, L. Ventelon, E. Clouet, L. Pizzagalli, F. Willaime, Acta Mater. 124, 633 (2017)

# Mécanismes élémentaires d'interaction de l'hydrogène avec une dislocation vis dans le fer- $\alpha$

M. Lucas<sup>1)\*</sup>, M. Landeiro Dos Reis<sup>1)</sup>, S. Queyreau<sup>2)</sup>, X. Feaugas<sup>1)</sup>

1) LaSIE, UMR CNRS 7356, Avenue Michel Crépeau, 17000 La Rochelle, France.

\*margot.lucas@univ-lr.fr

2) LSPM, CNRS-ONERA, 29 Avenue de la Division Leclerc, BP 72, 92322 Chatillon Cedex, France

## Résumé pour poster

L'hydrogène pénètre facilement dans les métaux et alliages et peut modifier leurs propriétés physiques [3]. Il possède une faible solubilité dans le Fer- $\alpha$ , cependant diffuse aisément dans le réseau cristallin [8] et interagit fortement avec les défauts (lacunes, joints de grains, dislocations...). Cela peut induire des phénomènes de fragilisation par l'hydrogène. Nous nous focaliserons sur l'interaction entre l'hydrogène et les dislocations vis, défaut cristallin affectant la déformation plastique.

Dans le fer- $\alpha$  la mobilité des dislocations vis pilote les mécanismes de déformation sur une grande gamme de températures, leurs densités plus importantes que les dislocations coin auront notamment une plus grande influence sur le comportement du matériau sous déformation [6]. L'effet de l'hydrogène sur la mobilité des dislocations reste mal connu et dépend de nombreux facteurs, tels que la vitesse de déformation, la température, l'état de contrainte, etc., qui peuvent engendrer des effets antagonistes sur les dislocations. Le premier effet, est le phénomène de piégeage d'hydrogène par le cœur de la dislocation. Les atomes d'hydrogène ainsi piégés vont ralentir le glissement ce qui impacte la déformation du matériau [4, 2, 1]. Un second effet est que la présence d'hydrogène dans le cœur des dislocations vis réduit potentiellement de la densité électronique locale ce qui favorise la nucléation des doubles décrochements en abaissant l'enthalpie de formation [7, 11]. La dynamique des processus reste cependant à préciser.

L'objectif principal de nos travaux est de capturer le paysage énergétique de l'hydrogène interagissant avec une dislocation vis afin d'alimenter plus tard des simulations de Monte Carlo Cinétique (KMC) à plus grande échelle.

Pour ce faire, nous avons effectué des simulations de statique moléculaire en utilisant et comparant des champs de forces dérivant de potentiels interatomiques de type EAM (Embedded Atom Method) [12], MEAM (Modified Embedded Atom Method) [9] et NNIP (Neural Network Interatomic Potential) [10], qui sont tous de bons candidats pour décrire les interactions H-Fe.

Dans un premier temps, nous avons cartographié l'énergie d'interaction de l'H autour de la dislocation. Cela nous a permis d'identifier les sites de piégeage les plus probables. Nous avons également quantifié les énergies de migration par la méthode NEB [5] des divers chemins de migration de l'H autour du cœur de la dislocation. L'H diffuse de sites tétraédriques (les plus stables) vers des sites octaédrique (métastables) ou bien vers d'autres sites tétraé-

driques. L'ensemble de ces résultats de simulations constitue une base de données de référence pour nos futures simulations, et ont été confrontés à la théorie de l'élasticité en considérant l'anisotropie, permettant de dessiner les contours de son domaine de validité, et d'ouvrir la voie à des modélisations prédictives.

[1] Daniel N Blaschke et Darby J Luscher. « Dislocation drag and its influence on elastic precursor decay ». In : *International Journal of Plasticity* 144 (2021), p. 103030.

[2] J Chêne. « L'hydrogène dans les matériaux métalliques en relation avec les interactions plasticité-environnement ». In : *PlastOx 2007-Mécanismes et Mécanique des Interactions Plasticité-Environnement 2007* (2009), p. 131-145.

[3] Peter Ferrin et al. « Hydrogen adsorption, absorption and diffusion on and in transition metal surfaces : A DFT study ». In : *Surface science* 606.7-8 (2012), p. 679-689.

[4] Vincent Gaspard. « Interactions Hydrogène-Plasticité dans les Alliages Ferritiques ». Thèse de doct. Ecole Nationale Supérieure des Mines de Saint-Etienne, 2014.

[5] Graeme Henkelman, Blas P Uberuaga et Hannes Jónsson. « A climbing image nudged elastic band method for finding saddle points and minimum energy paths ». In : *The Journal of chemical physics* 113.22 (2000), p. 9901-9904.

[6] John Price Hirth, Jens Lothe et T Mura. « Theory of dislocations ». In : *Journal of Applied Mechanics* 50.2 (1983), p. 476.

[7] M Itakura et al. « The effect of hydrogen atoms on the screw dislocation mobility in bcc iron : A first-principles study ». In : *Acta Materialia* 61.18 (2013), p. 6857-6867.

[8] DE Jiang et Emily A Carter. « Diffusion of interstitial hydrogen into and through bcc Fe from first principles ». In : *Physical Review B* 70.6 (2004), p. 064102.

[9] Byeong-Joo Lee et Je-Wook Jang. « A modified embedded-atom method interatomic potential for the Fe-H system ». In : *Acta Materialia* 55.20 (2007), p. 6779-6788.

[10] Fan-Shun Meng et al. « General-purpose neural network interatomic potential for the  $\alpha$ -iron and hydrogen binary system : Toward atomic-scale understanding of hydrogen embrittlement ». In : *Physical Review Materials* 5.11 (2021), p. 113606.

[11] M Wen, S Fukuyama et K Yokogawa. « Atomistic simulations of effect of hydrogen on kink-pair energetics of screw dislocations in bcc iron ». In : *Acta materialia* 51.6 (2003), p. 1767-1773.

[12] Mao Wen. « A new interatomic potential describing Fe-H and HH interactions in bcc iron ». In : *Computational Materials Science* 197 (2021), p. 110640.

# Caractérisation de dislocations zonales dans la phase MAX $Ti_2AlC$

Alexandre MUSSI<sup>1)\*</sup>, Adrien HEINZELMEIER<sup>2)</sup>, Timmo WEIDNER<sup>1)</sup>, Marc NOVELLI<sup>2),3)</sup>,  
Wenbo YU<sup>4)</sup>, Fabien CUVILLY<sup>5)</sup>, Thierry GROSDIDIER<sup>2),3)</sup>, Antoine GUITTON<sup>2),3)</sup>

- 1) Univ. Lille, CNRS, INRAE, Centrale Lille, UMR 8207 - UMET - Unité Matériaux et Transformations, F-59000 Lille, France
- 2) Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers, LEM3, Metz, 57070, France
- 3) LabEx DAMAS, Université de Lorraine, Metz, 57070, France
- 4) Center of Materials Science and Engineering, School of Mechanical and Electronic Control Engineering, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China
- 5) Groupe de Physique des Matériaux, Normandie Université, UNIROUEN, INSA Rouen, CNRS, 76000 Rouen, France

\*adresse email: alexandre.mussi@univ-lille.fr

## Résumé pour : poster

La maîtrise de nanostructures complexes est l'une des stratégies les plus prometteuses pour concevoir des matériaux aux propriétés personnalisées. Les phases  $M_{n+1}AX_n$  (M: métal de transition; A: élément du groupe A; X: C ou N et n, entier = 1,2 ou 3) ont des propriétés remarquables telles que une faible densité, un module élevé, une bonne conductivité métallique, des propriétés auto-lubrifiantes et des comportements mécaniques uniques à la température ambiante et à haute température. Les microstructures de dislocations de la phase MAX  $Ti_2AlC$ , sollicitée en déformation plastique sévère par grenailage ultrasonore, sont analysées avec soin par microscopie électronique en transmission, associée à une analyse précise de contraste en faisceau faible champ sombre. Nous avons mis en évidence et caractérisé des dislocations en interaction dipolaires, mais en particulier des dislocations  $\langle a \rangle$  dissociées suivant la réaction  $1/3 \langle 2-1-10 \rangle \rightleftharpoons 1/3 \langle 1-100 \rangle + 1/3 \langle 10-10 \rangle$ , dans le plan de base, avec une distance de dissociation d'environ 20 nm. Des dislocations zonales, récemment identifiées dans les phases MAX par simulation numérique, mais encore jamais observées expérimentalement, ont été mises en évidence dans cette étude.

# Etude de l'évolution des dislocations sous irradiation électronique par tomographie électronique des dislocations 4D dans MgO

Alexandre MUSSI<sup>1)\*</sup>, Philippe CARREZ<sup>1)</sup>, Karine GOURIET<sup>1)</sup>, Benoit HUE<sup>1)</sup>, Patrick CORDIER<sup>1)</sup>

1) Univ. Lille, CNRS, INRAE, Centrale Lille, UMR 8207 - UMET - Unité Matériaux et Transformations, F-59000 Lille, France

\*adresse email: alexandre.mussi@univ-lille.fr

## Résumé pour : oral

L'étude des mécanismes fondamentaux de déformation plastique des matériaux cristallins nécessite des caractérisations détaillées des défauts cristallins. En ce qui concerne les dislocations, il faut déterminer à la fois les vecteurs de Burgers et les plans d'habitats. Plusieurs techniques de caractérisation des vecteurs de Burgers sont accessibles et bien maîtrisées (le critère d'extinction, la méthode des franges d'égalles épaisseurs et la diffraction électronique en faisceau convergent à grand angle), mais les caractérisations géométriques, comme les plans d'habitats, sont plus complexes à déterminer. Généralement, pour obtenir des informations 3D, des expériences de pivotement d'échantillons sont réalisées en microscopie conventionnelle, mais de fortes restrictions existent. La méthode de projection stéréographique permet de dépasser ces obstacles mais reste chronophage et laborieuse. Nous avons développé la tomographie électronique des dislocations à Lille [1] dans l'objectif de faciliter les indexations des plans d'habitat. La principale difficulté consiste à conserver le contraste des dislocations au cours de la phase d'acquisition. Pour aller plus loin, notamment en ce qui concerne les applications aux matériaux sensibles aux faisceaux d'électrons, nous avons développé la tomographie électronique des dislocations à nombre réduit d'images projetées. Ce développement nous a permis de saisir les évolutions des microstructures de dislocations avec le temps, en d'autres termes faire de la 4D en tomographie électronique des dislocations [2]. Des mécanismes difficiles voire impossibles à décrypter par les méthodes conventionnelles, ont pu être caractérisés grâce à ces développements, comme les interactions colinéaires, le glissement dévié, le double glissement dévié, la détermination de plans de glissement spécifiques, l'obtention de systèmes de glissement préférentiels, la caractérisation de plans de montée mixtes préférentiels, entre autres ...

Références :

[1] A. Mussi, P. Cordier, S. Demouchy, and C. Vanmansart, *Characterization of the glide planes of the [0 0 1] screw dislocations in olivine using electron tomography*, Phys. Chem. Miner. 41 (2014), pp. 537–545.

[2] A. Mussi, P. Carrez, K. Gouriet, B. Hue, and P. Cordier, *4D electron tomography of dislocations undergoing electron irradiation*, C. R. Phys. 22; S3, 1-15 (2021), pp. 67-81.

# Mécanismes de déformation dans des alliages de zirconium: Traction in situ en MET et dynamique des dislocations.

Pascal NOIROT <sup>1), 2)</sup> \*, Frédéric MOMPIOU <sup>2)</sup>, Laurent DUPUY<sup>1)</sup>, Fabien ONIMUS <sup>1)</sup>

1) SRMA, CEA-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

2) CEMES, 29 rue Jeanne Marvig - 31055 Toulouse Cedex 4, France

\*[pascal.noirotd@cea.fr](mailto:pascal.noirotd@cea.fr)

## Résumé pour poster

Les gaines des crayons combustibles des Réacteurs à Eau Pressurisée, fabriquées en alliages de zirconium, constituent la première barrière de confinement du combustible nucléaire. Il est donc essentiel de garantir l'intégrité mécanique de la gaine dans toutes les conditions de fonctionnement. La gaine évoluant dans un environnement particulièrement agressif (irradiations, température, corrosion, sollicitations mécaniques) elle subit en réacteur des modifications importantes de sa microstructure et donc de son comportement mécanique [1].

En vue de mieux comprendre les effets de l'irradiation sur le comportement du matériau, des échantillons en alliages de zirconium contenant 1 % de niobium ont été irradiés aux ions  $Zr^{2+}$  sur la plateforme JANNUS Orsay. Ces échantillons ont ensuite été observés au MET puis tractionnés in-situ. Afin de mieux comprendre l'influence de l'irradiation, des expériences de traction in-situ en MET ont également été menées sur matériau non irradié. Par ailleurs, des simulations de dynamique des dislocations grâce au code Numodis ont été réalisées pour reproduire certaines séquences observées au MET et ainsi mieux comprendre les phénomènes [2].

Durant les expériences menées sur matériau non irradié, plusieurs mécanismes ont été étudiés : le glissement dévié des dislocations ainsi que l'interaction entre les dislocations et les précipités de niobium. Sur matériau irradié, ce sont les interactions entre dislocations et défauts d'irradiation qui ont été étudiées.

A terme, cette étude permettra d'alimenter une compréhension des mécanismes de déformation afin de pouvoir mieux prédire le comportement mécanique à plus grandes échelles.

[1] F. Onimus, « Mécanismes de déformation et effets d'irradiation dans les alliages de zirconium. Une étude multi-échelle », HDR, juin 2015.

[2] J. Drouet, L. Dupuy, F. Onimus, et F. Mompiou, « A direct comparison between in-situ transmission electron microscopy observations and Dislocation Dynamics simulations of interaction between dislocation and irradiation induced loop in a zirconium alloy », *Scr. Mater.*, vol. 119, p. 71- 75, juill. 2016, doi: 10.1016/j.scriptamat.2016.03.029.

# Mesure de la déformation plastique en surface d'un acier Eurofer97 soumis à un essai de traction

Antoine OLLIVIER<sup>1)\*</sup>, Antonio PEREIRA<sup>2)</sup>, Nicholas BLANCHARD<sup>3)</sup>, Loïc VANEL<sup>4)</sup> et Dôme TANGUY<sup>5)</sup>

1, 2, 3, 4, 5) Institut Lumière Matière, UMR 5306, Université Lyon 1-CNRS, Université de Lyon, 69622 Villeurbanne France

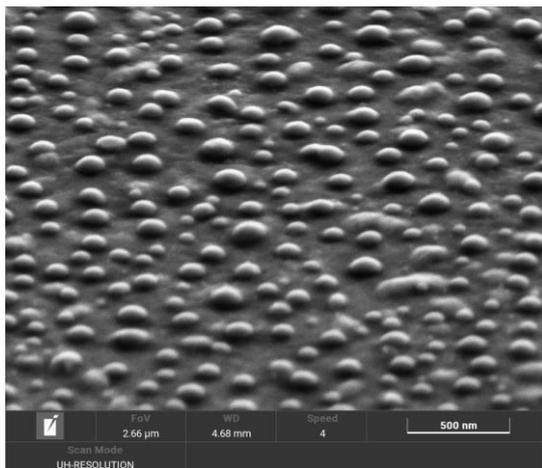
\*adresse email: antoine.ollivier@univ-lyon1.fr

## Résumé pour poster

Nous avons développé une méthode qui permet de mesurer des champs de déformations en surface avec une résolution de 50 nm et une précision de 1 nm. Elle réside dans le suivi, d'images en images, de nanoparticules d'or au cours de la déformation.

Pour former des nanoparticules d'or à la surface de l'acier, nous avons dans un premier temps déposé un nanofilm par pulvérisation cathodique sur la surface d'Eurofer97 préalablement polie. Ce film a ensuite été « démouillé ». Ce « démouillage » consiste à chauffer très brièvement le film par des impulsions laser nanoseconde avec un laser à 248 nm. Le film d'or devient liquide et se met spontanément à former des nano-gouttes, de la même manière que de l'eau sur une poêle en téflon. Cette méthode pour former des marqueurs présente de nombreux atouts. La taille et la densité des nanogouttes peuvent être contrôlées avec l'épaisseur du film de départ. Le démouillage pulsé provoqué par le laser nous assure de ne pas modifier la structure du métal en chauffant. Des modèles théoriques montrent en effet que la chaleur provoquée par l'impulsion laser diminue rapidement lorsque l'on s'éloigne de la surface (distance caractéristique d'une centaine de nanomètre). L'or a été choisi car ce métal offre un bon contraste au microscope électronique à balayage (MEB), qui sert à visualiser les nanoparticules.

À terme, notre méthode servirait à étudier des échantillons d'Eurofer97 soumis à des essais de traction. Cet alliage de structure martensitique constituera des pièces de structure de la paroi du futur réacteur à fusion nucléaire (ITER). Il est également retenu pour des pièces de nouvelles centrales nucléaires. Irradié, il rompt de façon prématurée. Le faciès reste toujours ductile. L'apparition de « canaux clairs », zone où se concentre la plasticité pourrait expliquer cette rupture mais certains points du mécanisme restent à éclaircir. Pour l'instant, nous avons appliqué cette méthode sur un échantillon non irradié, ce qui nous a permis d'observer des discontinuités dans le champ de déplacement.



*Nanoparticules d'or sur l'Eurofer97 visualisées au MEB incliné à 65°*

# Shock-driven dislocation nucleation in the dynamical Peierls model

Yves-Patrick Pellegrini<sup>1)\*</sup>, Marc Josien<sup>2)</sup>

1) Université Paris-Saclay, CEA, LMCE, F-91680 Bruyères-le-Châtel, France

2) CEA, DES, IRESNE, DEC, Cadarache, F-13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

\*adresse email: yves-patrick.pellegrini@cea.fr

## Résumé pour : oral

Understanding dislocation nucleation and motion of a shock front, which are responsible for the occurrence of a plastic wave and shock-induced plastic deformation, is an important issue to devising dislocation-based constitutive laws for shock-loaded solids. Atomistic simulations [1] as well as elastodynamic simulations indicate that homogeneous nucleation may be the dominant mechanism for dislocation production in shocks. However, few models are available to explore this issue, and role of supersonic dislocations in the process remains unsettled [2].

In this work, the problem is approached by solving numerically [3] the one-dimensional elastodynamical extension of the Peierls-Nabarro equation [4], for applied stress levels above the nucleation threshold. The applied stress profile consists of a stressed zone that expands laterally with 'shock' speed  $V$ . To allow for a detailed analysis, and unlike in real shocks, the maximum stress level in the zone and  $V$  are assumed to be independent variables. Calculations are carried out for screw and edge dislocations, for stresses up to twice the nucleation threshold, and values of  $V$  from subsonic up to well above the longitudinal wave speed.

The system spontaneously and repeatedly nucleates dislocations pairs to accommodate the shock advance, developing complexity even though the equation solved is deterministic. A fraction of the dislocations is expelled out of the stressed zone as dislocation trains ahead of the shock, which leads one to distinguishing between bulk (loaded) and front (unloaded) zones of the process. Mean dislocation speeds and steady-state densities are measured in each zone as a function of  $V$  for various applied stress, and a scaling of the density with the latter is proposed. Supersonic dislocations are shown to play an important role in this nucleation-based 1D system. Although the *single-dislocation* steady-state stress-velocity law of the model does not admit stresses above the nucleation stress, and a maximal speed  $c_S$  for screws and  $c_L$  for edges (the shear and longitudinal wavespeeds, respectively), consideration of collective dynamics allows for well-defined steady-state average dislocation speeds larger than the latter.

## References

[1] B.L. Holian and P.S. Lomdahl, Science 280, 2085 (1998) ; B. Gurrutxaga-Lerma et al., J. Mech. Phys. Solids 84, 273 (2015).

[2] C.S. Smith, Trans. Met. Soc. AIME 212, 574 (1958) ; E. Hornbogen, Acta Metall. 10, 978 (1962) ; M.A. Meyers, Scripta Metall. 12,21 (1978).

[3] [M. Josien, thèse](#) (École des Ponts ParisTech , 2018).

[4] Y.-P. Pellegrini, Phys. Rev. B 81, 024101 (2010) ; Phys. Rev. B 90, 054120 (2014) .

# Modélisations micromécaniques et simulations atomistiques de la ségrégation des atomes de soluté aux joints de grains

J. Petrazoller<sup>1)\*</sup>, T. Richeton<sup>1)</sup>, J. Guenole<sup>1)</sup>, S. Berbenni<sup>1)</sup>

1) Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers, LEM3, F-57000 Metz, France

\* adresse email: joe.petrazoller@univ-lorraine.fr

## Résumé pour poster

Le mécanisme de ségrégation des atomes de solutés aux joints de grains affecte les propriétés mécaniques des métaux, en particulier leur résistance intergranulaire ou leur capacité à recristalliser. White et Coghlan<sup>1</sup> ont développé un modèle micromécanique de ségrégation des atomes de soluté à un joint de grains, étendant la théorie thermodynamique de McLean<sup>2</sup>. L'énergie de ségrégation est discrétisée spatialement selon un spectre de sites le long du joint de grains. Les interactions entre l'atome de soluté, supposé engendré une dilatation libre de contrainte et un changement de modules élastiques du milieu et le joint de grains, modélisé comme un mur infini de dislocations coins (joint de flexion de faibles angles de désorientations), sont considérées dans un milieu élastique isotrope sur la base des travaux d'Eshelby<sup>3</sup>.

Nous souhaitons d'abord étendre ce modèle à différents types de joints de grains (à faibles et fortes désorientations), construits sur la base d'unités structurales de désinclinations<sup>4</sup>. Une autre approche consiste à construire le joint de grain par statique moléculaire et à transférer les champs de contrainte discrets du joint au modèle continu. La déformation libre de contrainte du soluté (ou dipôle élastique) sera évaluée par simulation atomistique<sup>5</sup>. Enfin, nous voulons également étendre le modèle de White et Coghlan à l'élasticité anisotrope hétérogène en implémentant les fonctions de Green tridimensionnelles d'un bi-matériau anisotrope<sup>6</sup> afin de considérer l'effet des forces images sur la ségrégation.

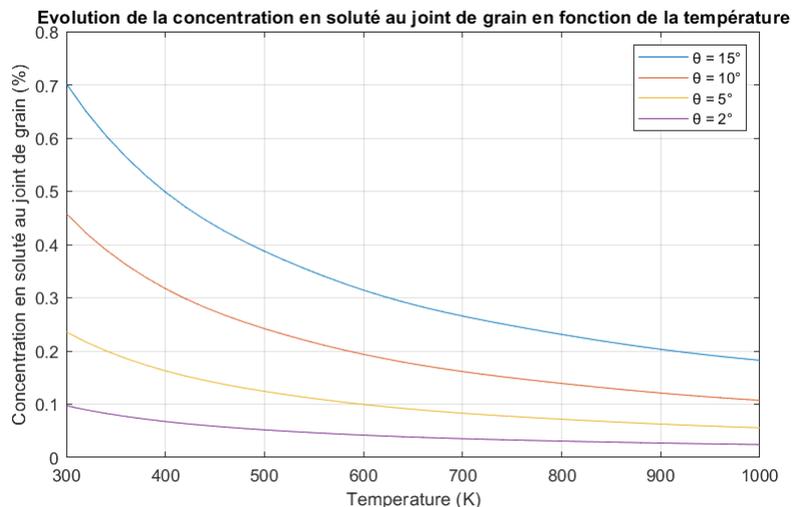


Figure 1 : Evolution de la concentration en atomes de cuivre au joint de grain dans du nickel en fonction de la température, pour différents angles de désorientation  $\theta$  d'un joint de grain de flexion symétrique par la méthode de White et Coghlan<sup>1</sup>.

Refs :

- (1) White, C. L.; Coghlan, W. A., *Metall. Trans. A* **1977**, 8
- (2) McLean, D.; Maradudin, *Phys. Today* **1958**, 11
- (3) Eshelby J.D., *Proc. R. Soc. Lond. Ser. Math. Phys. Sci.* **1957**, 241
- (4) Dingreville, R.; Berbenni, S., *Acta Mater.* **2016**, 104
- (5) Clouet, E.; Varvenne, C., *Comput. Mater. Sci.* **2018**, 147
- (6) E. Pan and F.G. Yuan, *International Journal of Solids and Structures*, **2000**, 37

# DVC analysis of uniaxial loading of IN718 at high temperature

Pedro Damas Resende<sup>1)\*</sup>, Didier Bardel<sup>2)</sup>, Julien Réthoré<sup>3)</sup>, Wolfgang Ludwig<sup>4)</sup>

- 1) ESRF / Mateis – INSA Lyon
- 2) Framatome Lyon
- 3) GEM – École Centrale de Nantes
- 4) ESRF / Mateis – INSA Lyon

\*adresse email: pedro.damas-resende@esrf.fr

## Résumé pour: poster

The use of Ni-based superalloys is well established in the manufacturing of components for conditions such as high temperature, pressure and corrosive media. Even though resistant, these materials can undergo degradation over the time of its application. Leonard *et al.*<sup>1</sup> presented the case of a leaf-spring that suffered from stress corrosion cracking (SCC) after exposure to a commercial nuclear reactor. SCC is a concern to the application of Ni superalloys at higher temperatures, corrosive environment and under mechanical loads. Typically, it is studied in *post-mortem* samples, subjected to techniques that involve cross-section analysis. The *in-situ* characterization of these materials proves to be a challenge due to slow kinetics of SCC. An alternative way to replicate SCC is stress assisted grain boundary oxidation (SAGBO) at high temperature and adequate strain rate, as previously described by Andrieu, Max and Viguier.<sup>2</sup> The aim of the present work is to assess the displacement fields within a IN718 sample during *in-situ* loading at SAGBO conditions using Digital Volume Correlation (DVC).

The experiment was carried out at ID11/ESRF, where the sample was mounted in a tensile rig capable of maintaining a constant load rate while allowing rotation over 360°. The previously grain mapped sample (DCT) was loaded at a temperature of 650 °C and a strain rate of  $\sim 10^{-5} \text{ s}^{-1}$  while it was continuously scanned. The beam energy was set to 65.35 keV, and a sample/detector propagation distance of  $\sim 100 \text{ mm}$  was used together with an effective pixel size of 0.63  $\mu\text{m}$  to allow the reconstruction of phase contrast tomography. The microstructure of the sample was chosen to optimize the internal contrast within the sample to provide a speckle to run DVC using UFreckles.<sup>3</sup>

The reconstructed images allow to identify the presence of a second phase in the grain boundaries of the matrix, as well as across the grains. It can be seen that the shape changes of the sample correlate well with the measured load from the tensile rig. The calculated displacement fields agree with what was expected from the nominal load and highlight the nature of the stress localization within the microstructure.

1. Leonard, K. J., Gussev, M. N., Stevens, J. N. & Busby, J. T. Analysis of stress corrosion cracking in alloy 718 following commercial reactor exposure. *J. Nucl. Mater.* **466**, 443–459 (2015).
2. Andrieu, E., Max, B. & Viguier, B. Oxidation Assisted Intergranular Cracking in Alloy 718: Effects of Strain Rate and Temperature. *AerospaceLab J.* **9**, 1–7 (2015).

3. Réthoré, J. UFreckles. (2018) doi:10.5281/zenodo.1433776.

# An elastic model of lattice distortions in high entropy alloys

Bassem Sboui<sup>1,2)\*</sup>, David Rodney<sup>1)</sup>, Pierre-Antoine Geslin<sup>2)</sup>

1) Institut Lumière Matière - UCBL, 69622 Villeurbanne, France

2) Laboratoire MATEIS - INSA Lyon, 69621 Villeurbanne, France

\*adresse email: bassem.sboui@insa-lyon.fr

## Résumé pour: poster

Solid solution strengthening is a well-known mechanism by which solutes of different sizes create lattice distortions and form obstacles to dislocation motion, therefore increasing the yield stress of the alloy. In particular, high entropy alloys (HEA) take great advantage of this strengthening mechanism. In such concentrated alloys, the interactions between atoms of different sizes lead to ubiquitous lattice distortions, that can be characterized by their mean square atomic displacement (MSAD). This quantity has been found to correlate well with the yield stress of the alloy [1]. In addition, it can be measured experimentally by XRD [1] and is easily estimated by atomistic calculations

The objective of this work is to establish an elastic model able to predict the amplitude of the MSAD and relate this quantity to the strength of the alloy. Such a model can be very useful in high-throughput explorations of new alloys.

We first develop an elastic model of the HEA by considering each atom as an Eshelby inclusion embedded in an elastic continuous medium [2]. If a single diagonal eigenstrain tensor (i.e. an average misfit volume) is used for each species, the model turns out to be valid only for a limited number of alloys. To widen the applicability of the model, we consider that each atom is characterized by a non-diagonal eigenstrain tensor, the components of which are random variables that depend on the local atomic environment. We propose a method to probe the statistical distributions of these eigenstrains tensors. This improved version compares well with direct atomistic calculations for various systems, such as Fe-Ni-Cr alloys.

As a second step, we use this elastic model to derive the shear stress field and use it in a dislocation dynamics model to study the yield stress as a function of the alloy properties [3].

References:

[1] NL Okamoto, K. Yuge, K. Tanaka, et al. Atomic displacement in the CrMnFeCoNi high-entropy alloy – a scaling factor to predict solid solution strengthening. *AIP Advances*, 6(12) (2016), 125008

[2] P-A Geslin, D. Rodney. Microelasticity model of random alloys. Part I: mean square displacements and stresses. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 153 (2021), 104479. P-A Geslin, A. Rida, and D. Rodney. Microelasticity model of random alloys. Part II: displacement and stress correlations. 153 (2021), 104480.

[3] A. Rida, E. Martinez, D. Rodney, P.A. Geslin. Influence of stress correlations on dislocation glide in random alloys. *Physical Review Materials*, 6 (2022), 033605.

# Thermomechanical behaviour of CuZr metallic glasses under cyclic shear

Matias Sepulveda-Macias<sup>1)\*</sup>, Anne Tanguy<sup>1)</sup>, Gergely Molnar<sup>1)</sup>, Konstantinos Termentzidis<sup>2)</sup>

- 1) Univ. Lyon, INSA Lyon, CNRS, LaMCoS, UMR 5259, 69621 Villeurbanne, France
- 2) Univ. Lyon, INSA-Lyon, CETHIL CNRS-UMR5008, F-69621, Villeurbanne, France

\*adresse email: matias.sepulveda@insa-lyon.fr

## Résumé pour: poster

We perform molecular dynamics simulations of Zr50Cu50 metallic glass samples submitted to mechanical deformation. The model consists of two samples of 4800 and 145200 atoms with dimensions of  $80 \times 41 \times 24 \text{ \AA}^3$  and  $427 \times 226 \times 24 \text{ \AA}^3$  respectively. All simulations were carried out using LAMMPS software and particles interact via the modified embedded-atom method potential. Three target temperatures were considered 10, 100 and 300 K and three global strain rates of  $10^8$ ,  $10^9$  and  $10^{10} \text{ s}^{-1}$  were applied to perform successive deformation cycles.

The simultaneous measurements of the stress-strain curve, and of the temperature evolution during the cyclic mechanical load, are used to determine the thermo-mechanical constitutive laws at the continuum scale. It is shown that a finite strain rate induces simultaneous irreversible rearrangements and collective effects at the atomic scale, giving rise to memory effects in temperature rises that can reach few tens of degrees in plastic zones. Finally, the macroscopic parameters obtained at the continuum scale are compared to local measurements.

Taille limite: 1 page images et références comprises en Times New Roman 12 (ne pas modifier la mise en page svp).

# Etude de l'évolution de la microstructure sous irradiation des alliages de zirconium pour une meilleure compréhension du phénomène de croissance

Amélie SOUKSAVAT<sup>1</sup>\*, Isabelle MOUTON<sup>1</sup>, Sylvie DORIOT<sup>1</sup>, Fabien ONIMUS<sup>1</sup>

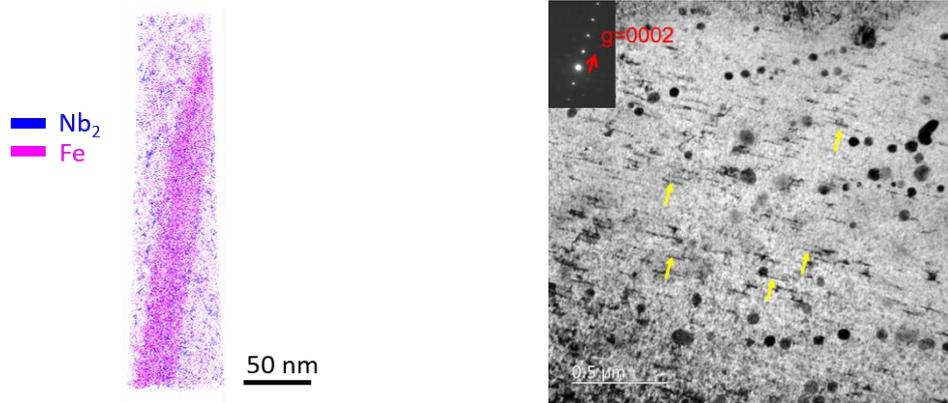
1) Université Paris-Saclay, CEA, SRMA, 91191 Gif-sur-Yvette, France

\* [amelie.souksavat@cea.fr](mailto:amelie.souksavat@cea.fr)

## Résumé pour poster

Dans le domaine du nucléaire, les alliages base zirconium sont largement utilisés comme matériau de gainage du combustible dans les réacteurs à eau pressurisée (REP), notamment grâce à leur faible absorption des neutrons. Durant leur exploitation, les gaines sont soumises au phénomène de « croissance » qui contribue à leur allongement. Cette « croissance » se manifeste sous irradiation et s'accélère à forte dose [1]. Or ce changement de comportement est lié à la présence d'un certain type de défaut structural : les boucles de dislocation, notamment celles à composante  $\langle c \rangle$  [2]. Le mécanisme inhérent à ce phénomène ainsi que le lien avec les défauts d'irradiation sont encore mal compris, de même que le rôle des éléments d'alliage et leur répartition dans le matériau sous irradiation [3].

Ainsi, le but de cette étude est de mieux comprendre les causes de l'accélération de croissance et de la relier à l'évolution de la microstructure sous irradiation. Pour cela, des doses élevées d'irradiation aux ions ont été appliquées à différentes températures, sur des alliages de zirconium utilisés dans les REP, afin de pouvoir observer la nucléation des boucles  $\langle c \rangle$ . La combinaison de deux outils de caractérisation que sont le Microscope Electronique en Transmission (MET) et la Sonde Atomique Tomographique (SAT) a permis une analyse complémentaire du matériau, avec des informations à la fois sur sa microstructure et sa microchimie.



a) Reconstruction SAT d'un alliage de Zr irradié aux protons; b) Micrographie MET de l'alliage irradié aux protons selon  $g=0002$  montrant la présence de défauts d'irradiation (flèches jaunes) et de précipités sphériques de  $\beta$ -Nb.

[1] V. Fidleris, *J. Nucl. Mater.*, vol. 159, p. 22- 42, oct. 1988

[2] F. Onimus et al., in *Comprehensive Nuclear Materials*, Elsevier, 2020, p. 1- 56.

[3] S. Doriot et al., *J. Nucl. Mater.*, vol. 494, p. 398- 410, oct. 2017

# **Couplage tomographie 3D des dislocations et mécanique des champs de dislocations : application à l'olivine**

Timmo Weidner<sup>1)</sup>, Karine Gouriet<sup>1)</sup>, Alexandre Mussi<sup>1)</sup>, Patrick Cordier<sup>1)</sup>, Vincent Taupin<sup>2)\*</sup>, Antoine Guitton<sup>2)</sup>, Nabila Maloufi<sup>2)</sup>

1) Univ. Lille, CNRS, INRAE, Centrale Lille, UMR 8207 - UMET - Unité Matériaux et Transformations, F-59000 Lille, France

2) Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers, LEM3, Metz, 57070, France

\*adresse email: [vincent.taupin@cnrs.fr](mailto:vincent.taupin@cnrs.fr)

## **Résumé pour : poster**

Nous présentons l'application d'un modèle de mécanique des champs de dislocations aux structures tridimensionnelles de dislocations obtenues par tomographie dans un microscope électronique en transmission. Les lignes de dislocations discrètes observées par tomographie sont transformées en une distribution spatiale et continue d'un tenseur de densité de dislocation (Nye) dans une partie du volume de la lame mince. Le modèle permet ensuite d'obtenir la distribution des champs élastiques associés (déformations, rotations, contraintes) dans un cadre élastique anisotrope. L'analyse des champs obtenus (densités de dislocations, champs mécaniques) offre une description plus détaillée des structures de dislocations. La méthode peut être appliquée à des données de tomographie 4D (3D + évolution temporelle) et est complémentaire aux simulations de dynamique des dislocations discrètes. Nous montrons des premières applications dans l'olivine.

# Mise en évidence du maillage de déformation dans la phase MAX $\text{Cr}_2\text{AlC}$ par essais nano-mécaniques

Christophe TROMAS<sup>1)\*</sup>, Salomé PARENT<sup>1)</sup>, Hadi BAHSOUN<sup>1)</sup>, Anne JOULAIN<sup>1)</sup>

1) Institut Pprime-DPMM, Université de Poitiers

\*adresse email: christophe.tromas@univ-poitiers.fr

## Résumé pour : oral

Cette étude rapporte l'observation de maillage de déformation dans la phase MAX  $\text{Cr}_2\text{AlC}$  déformée à température ambiante par nanoindentation sphérique et par essais de compression de micropiliers. L'échantillon, monocristallin, a été orienté plan de base debout de façon à inhiber le glissement des dislocations du plan de base et à exacerber l'activation du maillage. La microstructure de déformation a été analysée en combinant

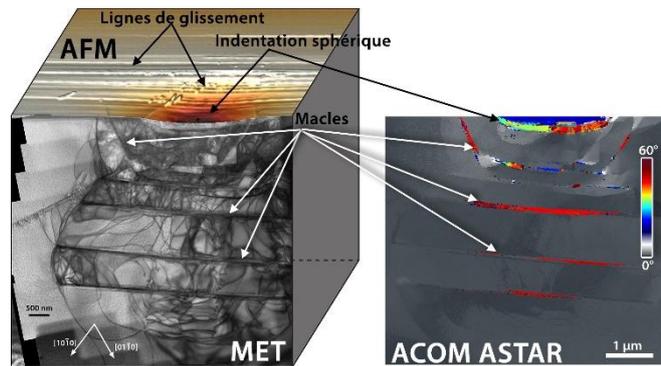


Fig. 1: Indentation sphérique dans  $\text{Cr}_2\text{AlC}$  observée par AFM et MET (à gauche) et cartographie de désorientation correspondante obtenue par technique ACOM-ASTAR (à droite) révélant des macles de déformation de type  $\{11\bar{2}4\}$ .

les observations de surface par microscopie à force atomique (AFM) et les observations en volume par microscopie électronique en transmission (MET) sur les lames minces préparée par faisceaux d'ions focalisé (FIB) en coupe transverse sur les empreintes. (cf. fig 1). Des macles de déformation de type  $\{11\bar{2}4\}$  ont pu être identifiées et caractérisées grâce aux cartographies d'orientation cristallographique locale obtenue sous MET sur les mêmes lames par la technique ACOM-ASTAR. La combinaison des observations par AFM, MET et ACOM-ASTAR sur une même région a ainsi fourni une caractérisation tridimensionnelle complète de ces macles. Ces résultats ont été confirmés par les essais de compression de micropiliers menés in situ sous microscope électronique à balayage (MEB) et complétés par une analyse EBSD des désorientations cristallographiques locales générées par la formation des macles (cf. fig 2) ainsi que par une analyse MET des lames minces extraites des piliers déformés.

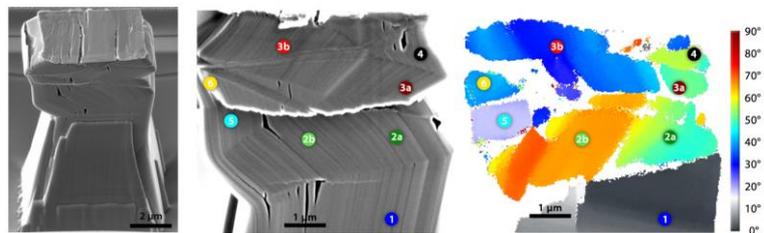


Fig. 2: Micropilier de  $\text{Cr}_2\text{AlC}$  après compression de et cartographie de désorientation cristallographique (EBSD).

Ces résultats ont apporté un éclairage nouveau sur les mécanismes de déformation des phases MAX dans la mesure où il était jusqu'à présent admis que la déformation plastique dans ces matériaux à structure hexagonale était uniquement gouvernée par du glissement basal, en particulier à travers le mécanisme de « kink bands ».

# Atténuation de la croissance de whiskers dans des connecteurs électriques Press fit : tests accélérés et conception

Hélène VIVES<sup>1)</sup>, Marc VERDIER<sup>1)</sup>, Fabien VOLPI<sup>1)</sup>, Muriel VERON<sup>1)</sup>, Philippe GENDRE<sup>2)</sup>

1) Univ. Grenoble Alpes, CNRS, Grenoble INP, SIMAP, F-38000 Grenoble

2) PEM, Siaugues Saint Romain, 43300 Siaugues Sainte Marie, France

\* helene.vives@grenoble-inp.fr

## Résumé pour (effacer les mentions inutiles): poster

Le niveau élevé de toxicité du plomb et son impact environnemental ont poussé l'Union Européenne à légiférer en 2006 la directive RoHS [1]. L'ensemble des acteurs industriels du secteur ont été contraints de retirer le Pb de la fabrication de circuits imprimés (soudures à base d'étain). Sur les couches minces d'étain sans Pb, on observe la croissance de microfilaments d'étain (whiskers). Ces derniers peuvent engendrer un contact électrique entre différents composants, entraînant alors un court-circuit endommageant les équipements électroniques. Les travaux de thèse s'appuient sur la compréhension du lien entre la microstructure de la couche d'étain et la formation de whiskers. L'objectif est d'entreprendre des études micro-structurales fines couplées à des sollicitations physiques contrôlées. En particulier, notre étude s'intéresse aux couches d'étain électrodéposées industrielles soudées à froid par déformation plastique et non par fusion. Ce procédé de soudure est appelé Press-fit. La PME ACS [2] conçoit et élabore ces connecteurs Press-fit. Bien que le processus soit largement utilisé en électronique, peu de recherches ont été menées sur son effet sur la germination et la croissance des whiskers. Les vieillissements accélérés via un dispositif de compression [3] devraient permettre de caractériser les mécanismes physiques dans les couches minces d'étain industriels pour les lier aux aspects microstructuraux de la croissance de whiskers. Un dispositif sous contrainte miniature a été élaboré pour suivre la croissance des whiskers en appliquant une contrainte externe constante lors d'analyse MEB et mesure locale de contraintes [4] par microdiffraction de Laue au synchrotron (ESRF).

[1] Dr M Warwick. Implementing Lead Free Soldering - European Consortium Researchsmta. j.surf. mount tech. 12(4) :1-12, 1999.

[2] <https://www.acs-alpes.com/>.

[3] Piyush Jagtap, Nupur Jain, and Eric Chason. Whisker growth under a controlled driving force : Pressure induced whisker nucleation and growth. Scripta Materialia, 182 :43-47, 2020.

[4] Pei, Fei & Jadhav, Nitin & Buchovecky, Eric & Bower, Allan & Chason, Eric & Liu, Wenjun & Tischler, Jonathan & Ice, Gene & Xu, Ruqing. (2016). In-situ synchrotron micro-diffraction study of surface, interface, grain structure, and strain/stress evolution during Sn whisker/hillock formation. Journal of Applied Physics. 119. 105302. 10.1063/1.4942920.

# Champs de déformation dans l'or nanomaculé

Yen Fred WOGUEM\*, Julien DURINCK, Pierre GODARD, Sandrine BROCHARD

Université de Poitiers, Institut Pprime, France.

\*adresse email : [yen.fred.woguem@univ-poitiers.fr](mailto:yen.fred.woguem@univ-poitiers.fr)

## Résumé pour poster

Les matériaux nanomaculés font l'objet de nombreuses recherches parce qu'ils possèdent deux propriétés habituellement antagonistes, à savoir une grande limite d'élasticité et une bonne ductilité [1]. Nous avons étudié par des simulations atomistiques les interactions entre des joints de macle cohérents (CTBs)  $\Sigma 3$   $[\bar{1}10](111)$  d'une part et entre des joints de macle incohérents (ITBs)  $\Sigma 3$   $[\bar{1}10](\bar{1}\bar{1}2)$  d'autre part. Les champs de déplacement estimés par deux potentiels interatomiques pour l'or donnent les portées des interactions entre joints qui sont de 6 et 48 plans atomiques respectivement pour le CTB et pour l'ITB. Nous nous sommes intéressés à un système périodique (contraint) et à un système avec des surfaces (suivant la normale au joint de macle) qui permettent de relaxer le volume d'excès produit par les joints de macle. Les contraintes résiduelles introduites par les joints de macle dans le système contraint, ainsi que l'énergie élastique associée, se déduisent des volumes d'excès qui ont été déterminés au préalable dans le cas de joints isolés [2]. Nos résultats montrent l'importance des contraintes résiduelles créées dans le système contraint, en particulier quand on compare les énergies mises en jeu dans ce système avec celles dans le système relaxé pour lequel il n'y a aucune contrainte résiduelle.

[1] L. Lu et al. « Revealing the maximum strength in nanotwinned copper ». Science 323, 5914 (2009), [doi : 10.1126/science.116764](https://doi.org/10.1126/science.116764).

[2] Y. F. Woguem et al. « Atomic scale simulations of symmetric incoherent twin boundaries in gold ». Mater. 27, 101678 (2023), [doi : 10.1016/j.mtla.2023.101678](https://doi.org/10.1016/j.mtla.2023.101678).