



Plasticité 2022 - Toulouse

Colloque
PLASTICITÉ

4 - 6 avril 2022

Programme
Recueil des résumés



Introduction

Le colloque **Plasticité** est depuis plus de 50 ans le rendez-vous annuel de la communauté nationale des chercheurs s'intéressant aux processus physiques gouvernant la déformation plastique des matériaux. Les études présentées concernent tous types de matériaux : les matériaux métalliques (aciers, alliages légers, ...), les matériaux céramiques (semi-conducteurs, verres, ...), mais aussi les nouveaux matériaux (composites, matériaux granulaires, matériaux nano-structurés, polymères, mousses, éco-matériaux, ...). Ce domaine de recherche s'étend également sur de multiples échelles : de l'échelle nanométrique, avec l'étude des mécanismes élémentaires de plasticité, à l'échelle macroscopique, avec les lois de comportement mécanique des matériaux. Ces thématiques sont couvertes aussi bien par des approches expérimentales que numériques.

Les objectifs du colloque sont évidemment de contribuer au partage et à la discussion des concepts et résultats récents autour de la plasticité. C'est pour la communauté des chercheurs s'intéressant à la plasticité une occasion régulière de se rencontrer pour favoriser l'échange d'idées et l'émergence de thématiques innovantes. D'autre part, le colloque Plasticité joue un rôle majeur dans la formation des jeunes chercheurs, dans les échanges entre équipes et dans le renouvellement des équipes nationales. C'est pour les doctorants en fin de thèse une opportunité de se faire connaître et ainsi de préparer l'après thèse.

Les précédentes éditions :

2004	Metz	2005	La Rochelle	2006	Annecy	2007	Poitiers
2008	Nancy	2009	Marseille	2010	Toulouse	2011	Lille
2012	Metz	2013	Paris	2014	Lyon	2015	Autrans
2016	Poitiers	2017	Rennes	2018	Nancy	2019	Lille

Le colloque devait se tenir à Toulouse en 2020, mais a été annulé en raison de la crise sanitaire. Après un colloque entièrement virtuel en 2021 et destiné à la présentation des travaux des doctorants et post-doctorants, c'est avec plaisir que l'édition 2022 renoue avec la normalité et peut enfin se dérouler à Toulouse.

Les comités

Comité scientifique :

Joël Alexis
Daniel Caillard
Alain Couret
Denis Delagne
Joël Douin
Lise Durand
Muriel Hantcherli
Marc Legros
Frédéric Mompiau
Jean-Philippe Monchoux
Florence Pettinari-Sturmel
Bernard Viguier

Comité d'organisation :

Daniel Caillard
Alain Couret
Joël Douin
Lise Durand
Muriel Hantcherli
Marc Legros
Frédéric Mompiau
Jean-Philippe Monchoux
Florence Pettinari-Sturmel

Gestion financière :

Rose-Marie Melendo

Accès

L'édition **Plasticité 2022** se tiendra du 4 au 6 avril à Toulouse : les communications auront lieu dans la **salle de conférence du CEMES**, dans le quartier de Saouzelong, facilement accessible en métro par la ligne B (arrêt Saouzelong) à 5 minutes de marche du CEMES.

L'adresse du CEMES est la suivante :

29 Rue Jeanne Marvig

31055 Toulouse



Voici quelques informations pratiques sur les modalités d'accès au CEMES :

En avion :

L'aéroport de Toulouse-Blagnac est desservi par de nombreuses lignes régulières avec des vols directs depuis Paris, Bordeaux, Lyon, Marseille, Nice, Nantes ou encore Strasbourg.

Depuis l'aéroport pour rejoindre le lieu du colloque, plusieurs options sont possibles :

- prendre le TRAM T2 jusqu'à l'arrêt Palais de Justice, puis le METRO LIGNE B jusqu'à l'arrêt Saouzelong.
- prendre la navette aéroport qui fait la liaison entre l'aéroport de Toulouse-Blagnac et la gare Matabiau en centre ville de Toulouse. La navette assure la correspondance avec le METRO LIGNE B à l'arrêt Compens Cafarelli. il suffit ensuite de prendre le métro jusqu'à la station Saouzelong.

En train :

La gare Toulouse Matabiau se trouve à environ 20 minutes en métro du CEMES. Depuis la gare, prendre le METRO LIGNE A, jusqu'à l'arrêt Jean-Jaurès où s'effectue la correspondance avec le METRO LIGNE B. Ce dernier vous conduira jusqu'à l'arrêt Saouzelong.

En voiture :

Il est conseillé de prendre la sortie 23 en direction du Busca pour rejoindre le CEMES depuis le périphérique toulousain.

Les Sponsors

Fédération de Physique de la Matière Condensée (FPMC)
Réseau National de Métallurgie (RNM)



Le repas de gala

Le repas de gala du mardi soir se déroulera à partir de 20h au restaurant Les Caves de la Maréchale, 3 Rue Jules Chalande.

L'accès se fait facilement au moyen de la ligne A du métro aux arrêts Capitole ou Esquirol.



Programme

Lundi 4 avril – Après-midi

14:00-14:20 - Ouverture du colloque

14:20-15:00 - [Jonathan Cormier \(invité\)](#)

Factors controlling VHCF life of Ni-based single crystal superalloys

15:00-15:20 - [Lola Lilenstein](#)

Influence de la ségrégation chimique aux défauts de superalliages base nickel sur les propriétés mécaniques

15:20-15:40 - [Damien Texier](#)

Étude des processus de déformation d'un alliage 718 de la température ambiante à 650°C en utilisant la corrélation d'images numériques à haute résolution

15:40-16:00 - [Benoît Mansoz](#)

Comportement de superalliages monocristallins base Nickel testés en traction à 650°C : vers une meilleure compréhension du rôle de la composition chimique dans la déformation plastique

16:00-16:30 - *Pause Café*

16:30-16:50 - [Camille Thenot](#)

Effet de l'oxygène sur les propriétés mécaniques et la fragilisation de l'alliage TiAl

16:50-17:10 - [Hugo Schaal](#)

Élaboration par procédé in-situ L-PBF d'un nouvel alliage de titane β -métastable à consolidation exceptionnelle

17:10-17:30 - [Antoine Guitton](#)

Feature extraction applied to slip trace analysis in β -Ti21S

17:30-17:50 - [Ayda Majoul](#)

Analyse de l'interaction des bandes de glissements et des joints de grains par des mesures topographiques par AFM

17:50-18:30 - *Session Posters*

18:30-19:30 - *Cocktail & Suite de la Session Posters*

Mardi 5 avril - Matin

8:30-9:10 - [Jean-Philippe Couzinié \(invité\)](#)

Plasticité d'alliages réfractaires de composition complexe et de structure cubique centrée

9:10-9:30 - [Ayobami Daramola](#)

Elementary Dislocation Properties Influencing mechanical behaviour of fcc High Entropy Alloys (HEAs) and FeNi10Cr20 alloy: A Comparative Study

9:30-9:50 - [Clémence Tafani](#)

Impact des effets d'alliage sur les mécanismes élémentaires de déformation plastique dans les matériaux

à haute entropie de structure cubique centrée

9:50-10:10 - [Baptiste Bienvenu](#)

Développement d'un critère d'écoulement plastique pour les métaux de transition cubiques centrés à partir de calculs ab initio

.

10:10-10:40 - *Pause Café*

10:40-11:00 - [Erik Bitzek](#)

Crack-Heterogeneity Interactions in NiAl

11:00-11:20 - [Dominique Poquillon](#)

Effet de l'épaisseur d'éprouvettes ultra-minces en Ti6242S sur leur comportement en traction à 450°C sous air et sous argon

11:20-11:40 - [Marco Ezequiel](#)

Étude des paramètres mécaniques contrôlant la fragilisation du laiton Cu-30%Zn par l'eGaIn

11:40-12:00 - [Murugan Siva Prasad](#)

Hydrogen effects on incipient plasticity and hardness near surface in nickel with different crystal orientations using nanoindentation: Experimental approach

12:00-12:20 - [Luis Eon](#)

Modélisation de la propagation d'une fissure courte en matériau ductile par couplage entre champ de phase et dynamique des dislocations

12:20-14:00 - *Repas*

Mardi 5 avril – Après-midi

14:00-14:20 - **Baptiste Joste**

Étude des mécanismes de localisation de la déformation plastique dans les polycristaux :
Simulations DDD
et CPFEM

14:20-14:40 - **Gwenaël Massé**

Étude par dynamique moléculaire de la déformation d'un film ultra fin d'or nanoporeux pour
l'électronique flexible

14:40-15:00 - **Arnaud Allera**

Modélisation atomistique de l'ancrage des dislocations dans Fe-C

15:00-15:20 - **Valentin Delbecq**

Étude numérique des propriétés mécaniques des verres Mg₂SiO₄

15:20-16:30 - *Pause Café & Session Posters*

16:30-17:50 - **Session en hommage à Georges Saada**

16:30-17:00 - **Muriel Veron (invitée)**

17:00-17:30 - **Alphonse Finel (invité)**

17:30-17:50 - **Ronan Madec**

Interaction entre systèmes de glissement : une approche semi analytique

20:00 – *Repas de Gala : restaurant Les Caves de la Maréchale*

Mercredi 6 avril – Matin

8:30-9:10 - **Fabien Onimus (invité)**

Etude des effets de l'irradiation sur la plasticité des alliages de zirconium : du mouvement des dislocation jusqu'au comportement du polycristal

9:10-9:30 - **Marion Borde**

Atomistic simulation of dislocation mobility and irradiation defects in UO₂

9:30-9:50 - **Daphné Da Fonseca**

Etude expérimentale et numérique de l'influence de la contrainte sur les boucles de Frank dans l'aluminium

9:50-10:10 - **Hugo Iteney**

Load versus displacement control nanomechanics : insights from atomistic simulations

10:10-10:40 - *Pause Café*

10:40-11:00 - **Antoine Clément**

Plasticité des laitons-alpha dans une approche EAM : prédiction quantitative des contraintes de Peierls

11:00-11:20 - **Jean Furstoss**

Complexions stables d'un joint de grains dans la forstérite : propriétés et implications

11:20-11:40 - **Yen Fred Woguem**

Simulations atomistiques classique et ab-initio des joints de macle incohérents Σ_3 $[-110](-1-1-2)$ dans l'or : structure et interaction

11:40-12:00 - **Sarah Yehya**

In situ Bragg Coherent X-ray Diffraction Imaging of a Pt nanoparticle during nano-indentation

12:00-12:10 - Clôture du colloque

12:10-14:00 - *Repas*

Présentations orales

Lundi 4 avril - 14:20-15:00

Factors controlling VHCF life of Ni-based single crystal superalloys

A. Cervellon^{a,*}, L. M. Bortoluci Ormastroni^a, S. Utada^a, P. Kürsteiner^b, P. Kontis^b, L. Mataveli Suave^c, S. Hemery^a, P. Villechaise^a, J. Cormier^a

^a Institut PPRIME, CNRS - Université de Poitiers - ENSMA, UPR CNRS 3346, ISAE-ENSMA, BP40109, 1 avenue Clément Ader, 86961 Futuroscope - Chasseneuil, France

^b Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, Max-Planck Straße 1, 40237 Düsseldorf, Germany.

^c SAFRAN Tech, PFX, 171 Boulevard Valmy, 92700 Colombes, France.

*Now at Materials Department, University of California – Santa Barbara, CA, USA

Ni-based single crystal superalloys (SX) are widely used in gas turbine engines for the manufacturing of high pressure turbine blades due to their exceptional mechanical properties at high temperature. Service operations of blades may lead to fatigue controlled failure mechanisms due to the vibrations introduced by the gas flow in addition to the centrifugal forces. These failures are difficult to forecast, as up to 90% of the fatigue life is spent in the crack initiation phase. Typical frequencies of vibrations of airfoils are in between 1 and 10 kHz, requiring specific experimental facilities to achieve the very high cycle fatigue (VHCF) domain at high temperature.

In this presentation, a critical analysis of the VHCF life sensitivity at 1,000°C/20 kHz, $R = -1$ and $R > 0.3$ to the processing parameters (dendritic chemical homogeneity, casting pore size, introduction of a prior plastic deformation and γ/γ' microstructure degradation - i.e. γ' rafting) will be performed. For this, 10 different Ni-based SX alloys have been investigated, with different chemical compositions and/or processing parameters. A special attention will be paid in this presentation on the fine scale crack initiation mechanisms. By varying the casting process or the oxidation resistance among the different alloys studied, a map of crack initiation mechanisms in VHCF will finally be proposed for Ni-based SX alloys.

It will be especially shown/discussed in this presentation how crack initiation mechanisms are related to very localized plasticity. In fact, unusual deformation mechanisms are observed under such conditions compared to well-known operating deformation mechanisms in creep and LCF of this class of materials in this temperature range.

Influence de la ségrégation chimique aux défauts de superalliages base nickel sur les propriétés mécaniques

Lola Lilensten^{1,2*}, Stoichko Antonov², Sammy Tin³, Sylvie Lartigue⁴, Aleksander Kotska⁵, Baptiste Gault², Paraskevas Kontis²

¹IRCP Chimie ParisTech – CNRS, UMR 8247, Paris, France

²Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Max-Planck Straße 1, 40237 Düsseldorf, Germany

³Illinois Institute of Technology, 10 W. 32nd Street, Chicago, IL, 60616, USA

⁴Institut de Chimie et des Matériaux Paris Est, UMR CNRS UPEC 7182, F-94320 Thiais, France

⁵Center for Interface-Dominated High Performance Materials (ZGH), Ruhr-Universität 44801, Bochum, Germany

[*lola.lilensten@chimieparistech.psl.eu](mailto:lola.lilensten@chimieparistech.psl.eu)

La caractérisation, la quantification et la compréhension de l'interaction entre les éléments d'alliages et les défauts de déformation du matériau sont un enjeu majeur pour permettre d'améliorer les propriétés et la tenue des pièces. Dans les superalliages base nickel, utilisés à des températures élevées, où la diffusion est facilitée, des études ont, par exemple, mis en évidence la ségrégation de Co et Cr aux dislocations, modifiant ainsi la composition locale et conduisant possiblement à la dissolution des précipités γ' ou à la formation de phases TCP. Des variations de quelques at.% ont des conséquences majeures sur les propriétés mécaniques, et il est donc crucial d'accéder à une meilleure compréhension de ces phénomènes.

Ceci est illustré tout d'abord par l'évolution de borures aux joints de grain, pendant le fluage. L'ajout de bore dans les superalliages base nickel est souvent effectué, afin de renforcer les joints de grains, où il est retrouvé soit sous sa forme élémentaire (en solution solide), soit sous la forme de borures de la forme M_xB_y . Sous forme de solution solide, il renforcerait la cohésion du joint de grain, renforçant ainsi la ductilité de l'alliage. Dans le cas des borures, la formation de serrations aux joints de grain, en lien avec la présence de ces précipités, pourrait permettre de ralentir la propagation de fissures. Or, une croissance des borures sous l'effet de la température et de l'application d'une contrainte est observée. L'étude de ces borures et de leur structure dans différentes conditions (après traitement thermique avec ou sans l'application d'une charge) permet de mettre en évidence la présence d'une grande densité de fautes d'empilement. Des analyses de sonde atomique tomographique révèlent la présence de plans riches en B, ainsi que de dislocations enrichies en Ni et Co. Ces résultats suggèrent une altération de la composition de la matrice à proximité des borures, ainsi qu'une modification de la microstructure du matériau, pouvant mener à des propriétés mécaniques altérées.

Ensuite, les propriétés en fluage de deux alliages polycristallins base nickel de composition proche sont étudiées. L'étude des microstructures déformées permet de mettre en évidence des changements de mécanismes de déformation (absence/présence de microtwins), et la caractérisation chimique de ces défauts par sonde atomique tomographique montre la présence, dépendante de la composition en Nb, de ségrégation dans des plans fautés. Une corrélation entre composition, précipitation de phases dans les fautes d'empilement, et propriétés de fluage est proposée.

Étude des processus de déformation d'un alliage 718 de la température ambiante à 650°C en utilisant la corrélation d'images numériques à haute résolution

D. Texier¹, J. Milanese², E. Andrieu³, M.A. Charpagne⁴, J.C. Stinville⁴, M. Legros⁵

¹Institut Clement Ader (ICA) ²MIDIVAL

³CIRIMAT

⁴UIUC

⁵CEMES

*damien.texier@mines-albi.fr

L'étude de la localisation de la plasticité à l'échelle de la microstructure est essentielle pour mieux relier les propriétés mécaniques des matériaux polycristallins à leurs microstructures. La localisation de la plasticité en traction d'un superalliage polycristallin à base de nickel, l'alliage In718, est étudiée à différentes températures. Des essais de traction sous atmosphère contrôlée ont été réalisés à température ambiante, 350°C et 650°C. Alors que le glissement transgranulaire était le principal mécanisme de déformation observé à température ambiante et à 350°C, le glissement aux joints de grains participe fortement à la plasticité à 650°C. Cette localisation intense de la déformation à proximité des joints de grains a été observée sans contribution de glissement transgranulaire. La corrélation d'images numériques à haute résolution (CIN-HR) a été utilisée pour mesurer quantitativement et statistiquement la localisation de la plasticité en fonction de la microstructure et des mécanismes de déformation impliqués^[1,2]. De plus, il a été constaté que l'intensité du glissement des joints de grains dans l'alliage In718 était sensible à la vitesse de déformation appliquée et conduisait à une fissuration intergranulaire prématurée à faible vitesse de déformation. Des observations par microscopie électronique à balayage et par microscopie électronique à transmission ont été réalisées pour documenter les structures de dislocations liées aux événements de glissement transgranulaire et intergranulaire.

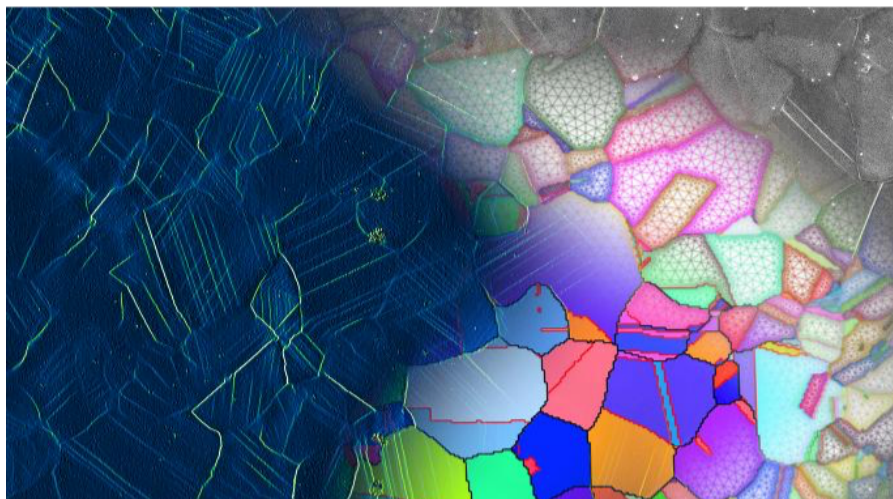


Fig.1 : Combinaison de cartes de déformation (CIN-HR), de cartes EBSD, de maillage par éléments finis et de micrographies pour documenter la distribution des déformations dans l'alliage In718 à 650°C.

[1] J.C. Stinville et al., "Sub-grain scale digital image correlation by electron microscopy for polycrystalline materials during elastic and plastic deformation." *Experimental mechanics*, vol 56(2), 2016, pp. 197-216.

[2] J.C. Stinville et al., "Measurement of strain localization resulting from monotonic and cyclic loading at 650°C in nickel base superalloys." *Experimental Mechanics*, vol 57(8), 2017, pp. 1289-1309.

Comportement de superalliages monocristallins base Nickel testés en traction à 650°C : vers une meilleure compréhension du rôle de la composition chimique dans la déformation plastique

Benoît Mansoz^{1,2*}, Jonathan Cormier², Pierre Caron³, Florence Pettinari-Sturmel¹

¹CEMES, Université de Toulouse

²Institut Pprime, ISAE-ENSMA

³DMAS, ONERA - Retraité

*benoit.mansoz@cemes.fr

La composition chimique des superalliages monocristallins base Nickel est connue pour avoir un rôle important dans leur comportement mécanique à basse température. En effet, des différences importantes de limites d'élasticité ont pu être observées entre des superalliages présentant des compositions chimiques très variées. De plus, certains alliages présentent des taux d'écrouissage très importants. Pour mieux comprendre les effets de composition chimique, 18 superalliages monocristallins différents ont été testés lors d'essais de traction à 650°C (Figure 1.a). Les premiers stades de déformation des alliages PWA 1480 et TROPEA ont été caractérisés grâce à des observations *post mortem* en microscopie électronique à transmission réalisées sur des éprouvettes déformées à 1% de déformation plastique.

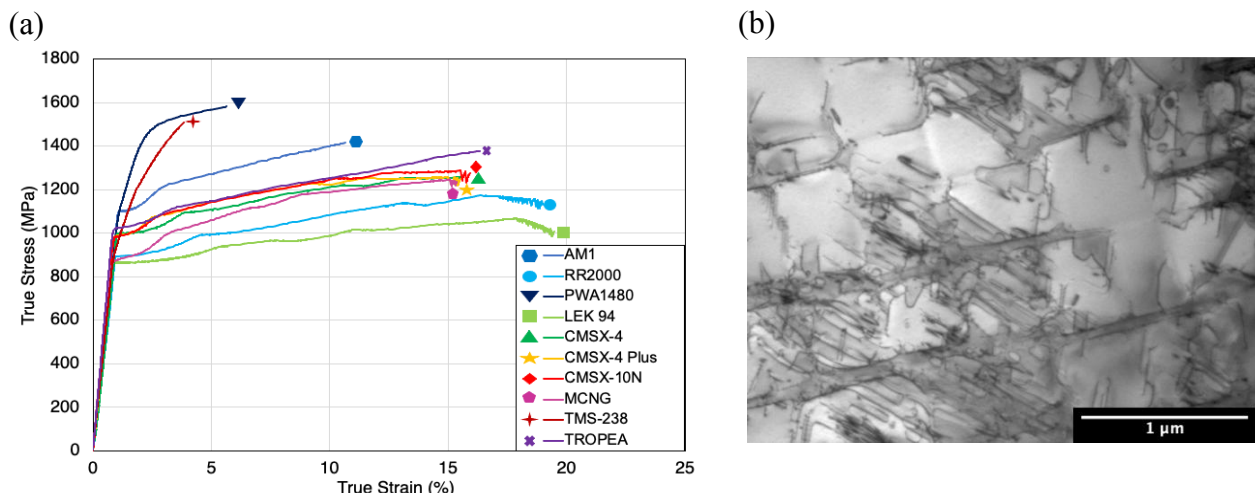


Figure 1. (a) Comportement en traction de quelques superalliages monocristallins base-Ni à 650°C, $\dot{\epsilon} = 5.0 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, (b) dislocations après 1% de déformation plastique à 650°C dans l'alliage TROPEA

Les écarts de limites d'élasticité observés sont principalement attribués à la différence d'énergie de paroi d'antiphase des phases γ' des alliages testés. L'étude des mécanismes de déformation des alliages PWA 1480 et TROPEA montre que les précipités γ' sont principalement cisailés par des superdislocations $a\langle 110 \rangle \{111\}$ (Figure 1.b). Les structures de dislocations des deux alliages apparaissent très différentes et sont à mettre en relation avec leurs comportements mécaniques respectifs (Figure 1.a).

Effet de l'oxygène sur les propriétés mécaniques et la fragilisation de l'alliage TiAl

Camille Thenot^{1,2*}, Jean-Philippe Monchoux¹, Damien Connétable², Pierre Sallot³

¹ CEMES CNRS UPR 8011, Université de Toulouse, 29 Rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse, France

² CIRIMAT CNRS UMR 5085, INP UPS, ENSIACET, allée Emile Monso, 31030 Toulouse, France.

³ Safran Tech, Rue des Jeunes Bois, Châteaufort, 78114 Magny-Les-Hameaux, France.

*camille.thenot@cemes.fr

Les TiAl sont des alliages très intéressants dans le domaine des turbomachines du fait de leur faible densité ($3.8 - 4.2 \text{ g.cm}^{-3}$) et de leur bonne résistance mécanique à haute température. Cependant, la présence d'oxygène dégrade fortement les propriétés mécaniques de ce matériau comme le montre la *Figure 1*.

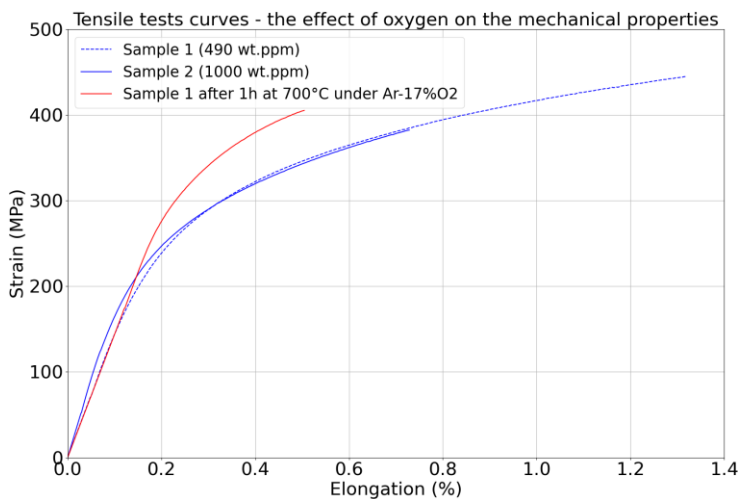


Figure 1: Courbes des essais des traction réalisés sous air à température ambiante

Une augmentation de la limite d'élasticité, ainsi qu'une diminution de la ductilité, sont ainsi constatées après exposition sous air (même pour des durées aussi courtes qu'une heure). Cependant, cela ne semble pas entraîner d'évolution microstructurale particulières dans l'alliage. Par ailleurs, la détection d'un gradient de concentration d'oxygène depuis la surface par SIMS s'avère délicate. Même si l'augmentation de la limite d'élasticité ne peut dépendre que de la diffusion volumique de l'oxygène, une telle pénétration de l'oxygène n'a pas été clairement mise en évidence.

Dans ce travail, nous étudions donc l'effet durcissant de l'oxygène de manière indirecte en nous concentrant sur l'effet d'une augmentation de la concentration d'oxygène sur la morphologie et la dynamique des dislocations : épinglage sur des défauts extrinsèques (Figure 2), glissement dévié et longueur de sauts.

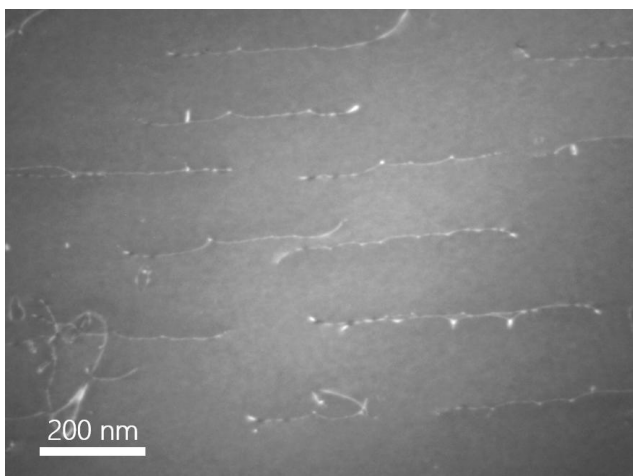


Figure 2 : Photographie prise par MET mettant en évidence la présence de dislocations épinglées

De plus, nous avons réalisé des calculs de coefficients de diffusion de l'oxygène dans TiAl en DFT. Les résultats montrent que l'oxygène diffuse très vite malgré les défauts intrinsèques et les éléments d'addition présents dans l'alliage. Ces résultats suggèrent une pénétration de l'oxygène en profondeur dans le matériau, qui pourrait être à l'origine de la perte de ductilité et de l'augmentation de limite d'élasticité.

Élaboration par procédé in-situ L-PBF d'un nouvel alliage de titane β -métastable à consolidation exceptionnelle

Hugo SCHAAL^{1,2*}, Philippe CASTANY¹, Axel DUBOIS², Thierry GLORANT¹

¹ INSA de Rennes, Institut des Sciences Chimiques de Rennes, UMR CNRS 6226, 35000 Rennes, FRANCE

² SLS France, 32 Boulevard de la Haie des Cognets, 35136 Saint-Jacques-de-la-Lande, FRANCE

*hugo.schaal@insa-rennes.fr

Les alliages de titane, et plus particulièrement les alliages β , sont considérés comme des candidats au fort potentiel pour les applications biomédicales, comme l'implantologie, ou la chirurgie cardio-vasculaire. En effet, la stabilisation de la phase β permet d'obtenir des alliages métalliques à faible rigidité par le biais d'éléments au caractère biocompatible (Ta, Mo, Nb, Zr, Sn), permettant d'assurer une implantation à long terme au contact des tissus biologiques.

L'essor des technologies de fabrication additive a vu se développer un certain nombre de travaux cherchant à transposer l'élaboration des alliages de titane β par ces nouveaux procédés de mise en forme particulièrement intéressants dans le domaine du médical, donnant la possibilité d'élaborer des dispositifs sur-mesure. Malgré les efforts de recherche dans ce secteur, les poudres constituants la matière première pour la fabrication se font assez discrètes en dehors des nuances commerciales, poussant à développer de nouveaux types de solutions pour l'élaboration. De fait, la méthode de fabrication « in-situ » constitue une alternative intéressante, les alliages étant fabriqués à partir d'un mélange de poudres élémentaires, permettant une plus grande flexibilité et adaptativité à la prospection de compositions chimiques inédites.

Au cours de cette présentation, un nouvel alliage de titane β -métastable Ti-xNb sera élaboré par la méthode de fusion laser sur lit de poudre en utilisant le procédé in-situ. Malgré la présence de niobium dans la composition (dont la température de fusion est de plus de 800°C supérieure à celle du titane), il sera montré comment l'optimisation des paramètres de fabrication permettra de contrôler ces quantités pour assurer une homogénéité chimique macroscopique.

Notre alliage présentant une transformation martensitique sous la contrainte (transformation SIM de la phase β vers la phase α'), une caractérisation des propriétés microstructurales et mécaniques sera proposée par le biais des techniques de microscopie électronique et par sollicitation mécanique de traction. L'étude de l'état déformé permettra de mettre en évidence les relations entre les propriétés microstructurales des échantillons déformés et leurs propriétés mécaniques. Du fait de cette transformation SIM, ces alliages présentent un comportement TRIP (TRAnformation Induced Plasticity) avec une aptitude à la consolidation particulièrement élevée (taux d'écroutissage nominal d'environ 15 GPa), caractérisée par une différence entre la limite d'élasticité et la résistance maximale en traction de 749 MPa.

Feature extraction applied to slip trace analysis in β -Ti21S

Kaustubh VENKATRAMAN^{1,2}, Vincent TAUPIN^{1,2}, Antoine GUITTON^{1,2,*}

¹Université de Lorraine – CNRS – Arts et Métiers – LEM3, France

²Labex Damas – Université de Lorraine, France

*antoine.guitton@univ-lorraine.fr

Surface based slip trace analysis provides statistical insights into the synergistic coupling between different mechanisms occurring at the meso and microscopic length scales during the deformation of polycrystalline metals. Advancements in microscopy related techniques such as accurate electron channelling contrast imaging (A-ECCI) [1]–[3] and high-resolution electron back scattered diffraction (HR-EBSD) [4] data has provided access to multi-length scale datasets that can be treated via feature engineering algorithms. In particular, the enhanced contrast and resolution offered by these methodologies enable the application of automated feature extraction algorithms to extract useful information about the slip system activity distribution [5] and distributions for angular variables engaged in slip-transfer at grain boundaries [6]. The present talk focusses on how this information can be combined with principal component analysis to differentiate slip-transfer regimes and to tune yield parameters used in full-field crystal plasticity models. Such an approach is statistically relevant and versatile enough to account for strain fields measured by digital image correlation and surface topography obtained from optical profilometry or atomic force microscopy.

References

- [1] H. Kriaa, A. Guitton, and N. Maloufi, “Modeling Dislocation Contrasts Obtained by Accurate-Electron Channeling Contrast Imaging for Characterizing Deformation Mechanisms in Bulk Materials,” *Materials (Basel)*, vol. 12, no. 10, p. 1587, May 2019, doi: 10.3390/ma12101587.
- [2] J. Guyon, H. Mansour, N. Gey, M. A. Crimp, S. Chalal, and N. Maloufi, “Sub-micron resolution selected area electron channeling patterns,” *Ultramicroscopy*, vol. 149, pp. 34–44, Feb. 2015, doi: 10.1016/j.ultramic.2014.11.004.
- [3] M. Ben Haj Slama, N. Maloufi, J. Guyon, S. Bahi, L. Weiss, and A. Guitton, “In Situ Macroscopic Tensile Testing in SEM and Electron Channeling Contrast Imaging: Pencil Glide Evidenced in a Bulk β -Ti21S Polycrystal,” *Materials (Basel)*, vol. 12, no. 15, p. 2479, Aug. 2019, doi: 10.3390/ma12152479.
- [4] C. Ernould, B. Beausir, J.-J. Fundenberger, V. Taupin, and E. Bouzy, “Global DIC approach guided by a cross-correlation based initial guess for HR-EBSD and on-axis HR-TKD,” *Acta Mater.*, vol. 191, pp. 131–148, Jun. 2020, doi: 10.1016/j.actamat.2020.03.026.
- [5] K. Venkatraman, M. Ben Haj Slama, V. Taupin, N. Maloufi, and A. Guitton, “Tuning critical resolved shear stress ratios for bcc-titanium Ti21S via an automated data analysis approach,” *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 29, no. 5, p. 055014, Jul. 2021, doi: 10.1088/1361-651X/abfeb0.
- [6] K. Venkatraman, V. Taupin, and A. Guitton, “Dimensionality reduction using principal component analysis to classify different grain boundary slip transfer regimes in BCC-Titanium Ti21S: A feature engineering-based approach,” Under review

Analyse de l'interaction des bandes de glissements et des joints de grains par des mesures topographiques par AFM

Ayda MAJOU¹, Ghiath MONNET², Charlie KAHLOUN³

¹ LSPM-CNRS : 99 Avenue Jean Baptiste Clément, 93430 Villetaneuse; ayda.majoul@lspm.cnrs.fr

² EDF-R&D : Avenue des Renardières, 77250 Écuelles; ghiathmonnet@yahoo.fr

³ LSPM-CNRS : 99 Avenue Jean Baptiste Clément, 93430 Villetaneuse; charlie.kahloun@lspm.cnrs.fr

Les joints de grains jouent un rôle majeur dans le comportement plastique des polycristaux. De plus, l'endommagement de ces polycristaux se localise fréquemment au joint de grain. La déformation plastique dans les cristaux est due au mouvement des dislocations à l'intérieur de bandes de glissement localisées. Ces bandes de glissement sont stoppées au joint où se concentrent les contraintes résiduelles, Figure 1a.

La présente étude propose de caractériser qualitativement et quantitativement l'interaction entre bandes de glissement et les joints de grains. Dans ce but, nous utilisons deux techniques expérimentales, L'EBS (la diffraction d'électrons rétrodiffusés avec un microscope électronique à balayage) qui permet de mesurer l'orientation des grains et l'AFM (le microscope à force atomique) qui permet d'obtenir la topographie des bandes de glissement. Les mesures topographiques ont été faites lors d'un essai de traction in-situ sous AFM sur une éprouvette en acier 316L (utilisé pour les éléments internes des réacteurs nucléaires). Nous montrons que les mesures topographiques permettent d'obtenir la composante trois du champ de déplacement plastique dans le repère de l'éprouvette. Et dans l'hypothèse d'un glissement simple de la bande et grâce aux mesures d'orientation, on obtient le champ de déplacement plastique dans le repère associé au système de glissement et son gradient le tenseur de distorsion plastique [1-2]. Pour procéder à la dérivation, nous décrivons la bande par une fonction analytique optimisée à partir des mesures topographiques, Figures 1c-d. Nous pouvons alors dériver le champ de déplacement et étudier par conséquent l'évolution du cisaillement plastique au voisinage du joint afin d'évaluer l'interaction joint-bande. La suite logique de cette étude consistera à dériver la distorsion plastique afin d'obtenir le tenseur de Nye et le champ de densité des GND (dislocations géométriquement nécessaires).

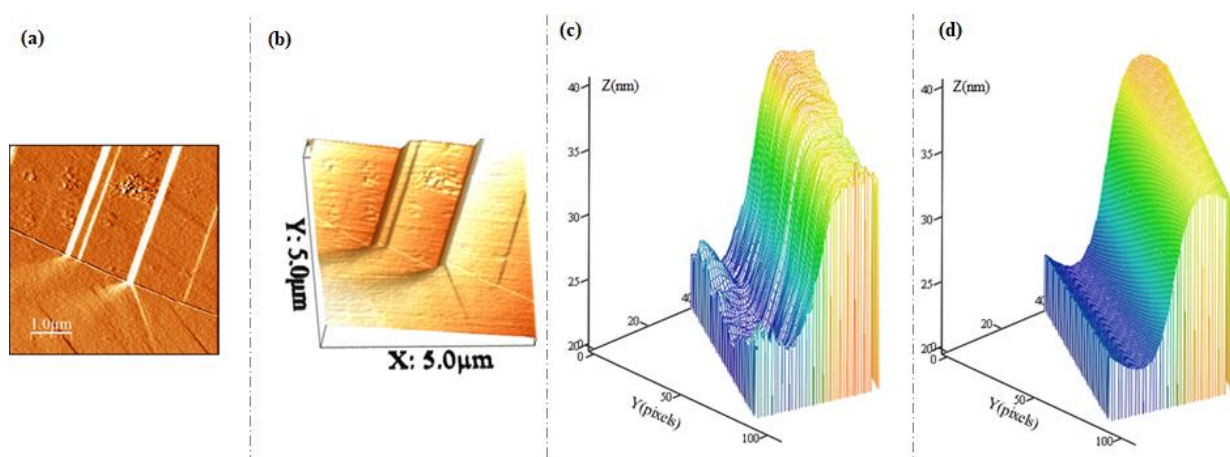


Figure 1: (a) Image dérivée de la topographie mesurée par AFM, (b) Image en 3D de la topographie (c) Profil mesuré d'une bande de glissement, (d) Profil modélisé d'une bande de glissement

[1] C. Kahloun, G. Monnet, S. Queyreau, L.T. Le, P. Franciosi, " A comparison of collective dislocation motion from single slip quantitative topographic analysis during in-situ AFM room temperature tensile tests on Cu and Fea crystals ",(2016).

[2] C. Kahloun, L.T. Le, G. Monnet, M.-H. Chavanne, E. Ait, P. Franciosi, " Topological analysis of {1 1 0} slip in an a-iron crystal from in situ atomic force microscopy", (2018).

Mardi 5 avril - 8:30-9:10

Plasticité d'alliages réfractaires de composition complexe et de structure cubique centrée

Jean-Philippe Couzinié

Institut de Chimie et des Matériaux Paris Est, UMR CNRS UPEC 7182, F-94320 Thiais, France

couzinié@icmpe.cnrs.fr

Forts de propriétés mécaniques élevées jusqu'à 1200°C, certains alliages réfractaires conçus sur la base de l'approche dite à « haute-entropie » constituent une piste intéressante pour de futures applications structurales. Les systèmes présentent le plus souvent une matrice de structure cubique centrée qui peut être durcie, dans certains cas, par une phase ordonnée de type B2. La complexité chimique de ces alliages semble avoir une influence considérable en particulier sur les processus élémentaires de déformation comme tendent à le montrer les récentes simulations numériques effectuées sur ces matériaux réfractaires. Toutefois, les études expérimentales manquent pour rendre compte des mécanismes effectifs et de nombreuses questions restent encore sans réponse quant au comportement de ces matériaux. Ainsi, l'exposé visera à donner un aperçu des processus de déformation de solutions solides présentant ou non de l'ordre B2 dans le système Al-Hf-Nb-Ta-Ti-V-Zr entre 100K et 873K. Une analyse détaillée des défauts régissant la déformation plastique sera rapportée et discutée à la lumière des observations réalisées.

Elementary Dislocation Properties Influencing mechanical behaviour of fcc High Entropy Alloys (HEAs) and FeNi₁₀Cr₂₀ alloy: A Comparative Study

Ayobami Daramola^{1*}, Giovanni Bonny², Gilles Adjanor³, Christophe Domain³,

Ghiath Monnet³, Anna Fraczkiewicz¹

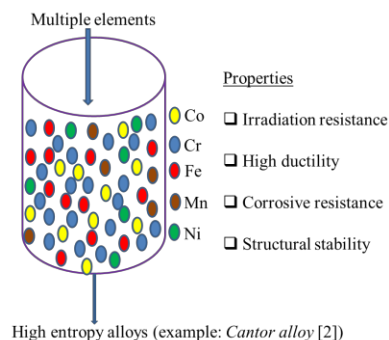
¹MINES Saint-Etienne, Université de Lyon, CNRS, UMR 5307 LGF, Centre SMS, 42023, Saint-Etienne, France

²SCK CEN, Nuclear Materials Science Institute, Boeretang 200, B-2400 Mol, Belgium

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

ayobami.daramola@emse.fr

In HEA, some specific features such as high solid solution, strain hardening, unusual combinations of strength and ductility, slowed down phase transformation kinetics and improved irradiation resistance have been largely identified. Crystal defects such as dislocation's structure are obviously at the origin of many observed features. This present work gives better understanding of the impact of dislocations elementary properties on the plastic behaviour of a single phased HEAs thanks to atomistic simulation techniques using an embedded-atom method (EAM) potential developed by Ayobami et al., [1]. This potential has been shown to describe the dislocation properties of fcc single-phase CrFeMnNi systems and their subsystems. Static properties namely: dislocation core structure, stacking fault energy, dissociation distance was evaluated as a function of local chemical environment and temperature. The work shows that structure and mobility of $\langle 110 \rangle \{111\}$ edge dislocation depends on the fluctuation of the local stacking fault energy, therefore, resulting in high critical shear stress required to cause dislocation motion due to the chemical complexity of the HEA. The obtained results were compared to model alloys representative of austenitic stainless steel (Cr₂₀Fe₇₀Ni₁₀ at. %). The results are in reasonable agreement with experimental measurements and theoretical explanations.



[1] A. Daramola, G. Bonny, G. Adjanor, C. Domain, G. Monnet, A. Fraczkiewicz, Development of a Plasticity-oriented Interatomic Potential for CrFeMnNi High Entropy Alloys, Computational Materials Science, 203 (2022) 111165. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.111165>.

[2] B. Cantor, I.T.H. Chang, P. Knight, A.J.B. Vincent, Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys, Mater. Sci. Eng. 375-377 (2004) 213-218, <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257>.

Impact des effets d'alliage sur les mécanismes élémentaires de déformation plastique dans les matériaux à haute entropie de structure cubique centrée

C. Tafani^{1*}, F. Momprou², G. Laplanche³, L. Perrière¹, G. Dirras⁴, I. Guillot¹ et J.-P. Couzinié¹

¹Université Paris Est Créteil, ICMPE, UMR 7182 CNRS-UPEC, F-94320 Thiais, France

²CEMES ; CNRS, Université de Toulouse, 29 rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse, France

³Institut für Werkstoffe, Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum, Germany

⁴Université Sorbonne Paris Nord, Laboratoire des Sciences des Procédés et des Matériaux (LSPM) - UPR CNRS 3407, 99 Avenue Jean-Baptiste Clément, 93430, Villetaneuse, France

*ctafani@icmpe.cnrs.fr

Une approche traditionnelle en métallurgie consiste à améliorer les propriétés d'un matériau existant par ajouts d'éléments d'alliages en faibles proportions. En rupture avec cette démarche, une nouvelle classe de matériaux a fait son apparition au début des années 2000. Il s'agit d'alliages, sans base majoritaire ni éléments minoritaires, composés à partir d'au moins cinq éléments métalliques en proportions proches. Ces alliages, dits à haute entropie configurationnelle, présentent une grande variété de propriétés, notamment mécaniques. Parmi les matériaux les plus prometteurs, les alliages constitués d'éléments réfractaires sont envisagés pour des applications structurales à haute température grâce à des propriétés intéressantes à des températures supérieures à 1000°C. Ils sont, le plus souvent, constitués d'une matrice de structure cubique centrée.

Les recherches récentes sur ces alliages sont centrées sur l'attractivité du concept et peu d'études ont approfondi les relations entre comportement et processus de déformation plastique. Cependant, ce point est fondamental pour le développement futur de matériaux, notamment en conditions extrêmes (températures par exemple). Il reste notamment à déterminer si les mécanismes de déformation plastique de ces solutions solides concentrées diffèrent significativement de ceux des solutions solides diluées conventionnelles.

Notre projet consiste à examiner l'évolution des propriétés mécaniques d'alliages réfractaires dans le système modèle Nb-Hf-Ta-Ti-Zr, de structure cubique centrée. Ces alliages, dont les compositions vont du niobium pur au mélange quinaire équimolaire, ont été élaborés par fusion solidification, laminés et recristallisés afin d'obtenir une taille de grains équivalente. Les caractérisations mécaniques multi-échelle réalisées pour cette étude sont des essais mécaniques macroscopiques en traction dans une large gamme de température ainsi que des essais *in-situ* en microscopie électronique en transmission (MET) afin d'analyser les mécanismes de déformation plastique sous-jacents des températures cryogéniques jusqu'à quelques centaines de degrés. Les premiers résultats obtenus pour deux compositions intermédiaires ($\text{Nb}_{40}\text{Hf}_{15}\text{Ta}_{15}\text{Ti}_{15}\text{Zr}_{15}$ et $\text{Nb}_{60}\text{Hf}_{10}\text{Ta}_{10}\text{Ti}_{10}\text{Zr}_{10}$) seront présentés et comparés au niobium pur.

Développement d'un critère d'écoulement plastique pour les métaux de transition cubiques centrés à partir de calculs *ab initio*

Baptiste Bienvenu^{a*}, Emmanuel Clouet^a, Lucile Dezerald^b, David Rodney^c

^aUniversité Paris-Saclay, CEA, Service de Recherches de Métallurgie Physique, 91191, Gif-sur-Yvette

^bInstitut Jean Lamour, CNRS UMR 7198, Université de Lorraine, F-54000 Nancy, France

^cInstitut Lumière Matière, Université Lyon 1 - CNRS, Villeurbanne, F-69622, France

*baptiste.bienvenu@cea.fr

Le comportement mécanique des métaux de transition de structure cubique centrée (CC), d'intérêt pour une vaste étendue d'applications, présente des caractéristiques contredisant la loi de Schmid, obéis par les métaux cubiques à faces centrées notamment [1]. La plasticité des métaux CC à basse température s'opère par le mouvement de dislocations vis de vecteur de Burgers $1/2 \langle 111 \rangle$, dont les propriétés peuvent être reliées à la plasticité macroscopique des métaux CC, et notamment aux écarts à la loi de Schmid.

Ces dislocations vis $1/2 \langle 111 \rangle$ sont soumises à une forte friction avec le cristal à basse température, et glissent principalement dans les plans $\{110\}$. Expérimentalement, il a été observé d'une part une asymétrie dite de maclage/antimaclage, avec un sens de cisaillement plus « facile » lors d'essais de chargement uniaxial, et un comportement différent selon le signe de la contrainte, en particulier une limite élastique plus faible en traction qu'en compression. A l'aide de calculs *ab initio*, il a été démontré que ces effets sont dus à deux caractéristiques des dislocations vis $1/2 \langle 111 \rangle$: leur trajectoire est déviée dans les plans $\{110\}$, responsable de l'asymétrie maclage/antimaclage [2] et un champ de dilatation induit par leur cœur, conduisant à l'asymétrie traction/compression [3]. En s'appuyant sur les propriétés *ab initio* de la dislocation vis, un critère d'écoulement plastique a été développé pour le tungstène [4] et le chrome [5], qui est ici étendu à l'ensemble des métaux CC (i.e. vanadium, niobium, tantale, chrome, molybdène, tungstène et fer), dans le but de comparer les métaux entre eux, et les prédictions théoriques aux observations expérimentales.

Les résultats de cette étude systématique sont présentés dans le cas d'un chargement uniaxial, pour lequel une grande variété de données expérimentales est disponible, permettant une comparaison aux prédictions du modèle. Il en ressort que la contrainte nécessaire à l'activation et l'activité des différents systèmes de glissement, dépendent fortement du métal. Les prédictions sont en bon accord avec l'expérience, reproduisant les asymétries traction/compression et maclage/antimaclage mais conduisant néanmoins à des contraintes trop élevées, un désaccord communément observé entre simulations atomiques et expérience. Il est prédit pour certains métaux une contrainte d'activation inférieure en compression qu'en traction, en accord avec l'expérience. La variation de la contrainte d'écoulement plastique avec l'orientation du chargement et la température, dont l'effet est intégré par un modèle de tension de ligne, montre que les écarts à la loi de Schmid disparaissent progressivement à mesure que la température augmente. Ce critère, issu directement des propriétés *ab initio* des dislocations vis $1/2 \langle 111 \rangle$, permet une comparaison satisfaisante avec l'expérience, et constitue un outil pour comparer les différents métaux CC entre eux.

[1] J. W. Christian, Metall. Mater. Trans. A **14**, 1237 (1983).

[2] L. Dezerald, D. Rodney, E. Clouet, L. Ventelon, F. Willaime, Nature Commun. **7**, 11695 (2016).

[3] A. Kraych, E. Clouet, L. Dezerald, L. Ventelon, F. Willaime, D. Rodney, npj Comput. Mater. **5**, 1 (2019).

[4] E. Clouet, B. Bienvenu, L. Dezerald, D. Rodney, Comptes Rendus Physique **22**, 1 (2021).

[5] B. Bienvenu and E. Clouet, Acta Mater. **224**, 117485 (2022).

Crack-Heterogeneity Interactions in NiAl

Erik Bitzek^{1,2*}, Polina Baranova¹, Ralf Webler¹, Steffen Neumeier¹, Mathias Göken¹

¹*Department of Materials Science and Engineering, Institute I, FAU Erlangen-Nürnberg, Germany*

²*Computational Materials Design, Max-Planck-Institut für Eisenforschung, Düsseldorf, Germany*

**e.bitzek@mpie.de*

The interactions of cracks with elements of the microstructure can significantly affect fracture behavior, crack tip plasticity and thus the fracture toughness. Besides obvious interactions like the nucleation and interactions with dislocations or the fracture along grain boundaries, interactions of cracks with mesoscale heterogeneities like voids or precipitates or with atomic-scale heterogeneities like point defects need also to be considered. As crack-heterogeneity interactions take place in the highly stressed volume directly at the crack tip, in the absence of in-situ electron microscopy experiments, crack-heterogeneity interaction mechanisms can only be directly observed in atomistic simulations.

Here we present the results of molecular static and dynamic simulations of cracks in B2 NiAl interacting with arrays of voids of different shapes, sizes and spacings as well as with vacancies and antisite defects. While the interaction with voids can lead to dislocation nucleation and subsequent crack arrest by crack tip blunting and shielding, the point defects directly influence the kinetics of crack propagation. The latter effect can explain the composition depend fracture toughness recently observed in micromechanical fracture experiments on off-stoichiometric NiAl.

Effet de l'épaisseur d'éprouvettes ultra-minces en Ti6242S sur leur comportement en traction à 450°C sous air et sous argon

Kévin Cavé^{1,3}, Damien Texier², Daniel Monceau¹, Emmanuel Fessler³, Dominique Poquillon^{1*}

¹ CIRIMAT

² Institut Clement Ader (ICA)

³ SAFRAN AIRCRAFT ENGINES

*dominique.poquillon@ensiacet.fr

L'oxydation des alliages de titane conduit à la fois à la formation d'une couche d'oxyde mais aussi à la modification de la composition chimique de l'alliage sous la couche d'oxyde avec la présence d'une zone enrichie en oxygène, du fait de la forte solubilité de celui-ci dans le titane [1,2].

Dans cette zone à gradient de composition, les essais mécaniques sur éprouvette ultra-minces peuvent permettre d'évaluer les propriétés mécaniques de l'alliage ainsi modifié [3].

Cependant, le comportement en traction d'éprouvettes de ce type implique, compte tenu du faible volume testé et donc du fort rapport surface sur volume, de regarder en amont les effets qu'induisent l'utilisation d'éprouvettes de très faible épaisseur sur le comportement mécanique de l'alliage non oxydé.

Dans cette étude, des éprouvettes de traction de Ti6242S avec différentes épaisseurs allant de 100 µm à 1 mm ont été sollicitées sous air et sous argon lors d'essais de traction à 450°C. Le protocole de préparation permettant d'avoir moins de 1% de variation sur la section est présenté. La corrélation d'images numériques est utilisée pour évaluer la déformation dans la longueur de la zone utile de 5 mm. Les grandeurs caractéristiques de chaque essai (limite d'élasticité, contrainte maximale) sont analysées en fonction de l'épaisseur de l'éprouvette et des conditions d'essai.

Les résultats mettent en évidence la transition d'un comportement polycristallin équivalent à celui du VER pour une éprouvette de 1 mm d'épaisseur vers un comportement multicristallin pour une éprouvette de 100 micromètres. Les résultats sont discutés en lien avec les grandeurs microstructurales caractéristiques.

[1] T Baur, G., and P. Lehr. 1980. "Influence Spécifique de l'oxygène Sur Quelques Propriétés Physiques, Les Caractéristiques Mécaniques et La Dynamique de Déformation Plastique Du Titane de Haute Pureté." *Journal of The Less-Common Metals* 69(1): 203–18.

[2] Texier, Damien et al. 2020. "Oxygen / Nitrogen-Assisted Degradation of the Mechanical Behavior of Titanium Alloys Exposed at Elevated Temperature." *Ti2019*: 0–4

[3] Texier, D. et al. 2016. "Micromechanical Testing of Ultrathin Layered Material Specimens at Elevated Temperature." *Materials at High Temperatures* 33(4–5): 325–37.

Étude des paramètres mécaniques contrôlant la fragilisation du laiton Cu-30%Zn par l'eGaIn

Marco Ezequiel^{1*}, Ingrid Prorior Serre¹, Eva Héripré², Zehoua Hadjem-Hamouche³, Thierry Auger³

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

²MSSMat, CentraleSupélec, CNRS, Université Paris-Saclay, Gif-sur-Yvette, 91190, France

³PIMM, Arts et Metiers ParisTech, CNRS, Cnam, HESAM Université, 151 Blvd. de L'Hôpital, Paris 75013, France

*marco-alejandro.ezequiel-alvarado@univ-lille.fr

La résistance mécanique d'un alliage métallique solide ductile peut diminuer lorsque celui-ci est sollicité mécaniquement en présence d'un métal liquide, ce qui généralement entraîne une rupture fragile. La sensibilité d'un alliage métallique à ce phénomène, nommé Fragilisation par les Métaux Liquides (FML), dépend d'un nombre important de paramètres. La composition chimique du métal liquide et de l'alliage métallique est un paramètre essentiel car il induit les interactions entre le métal liquide et l'alliage solide influençant fortement la FML, notamment la mouillabilité de l'alliage solide par le métal liquide et la possible formation d'intermétalliques et d'oxydes. De la même manière, la température lors de la sollicitation mécanique, la vitesse de déformation et les contraintes appliquées au solide sont des paramètres influant la sensibilité à la FML. L'étude de ces derniers paramètres est spécialement importante pour comprendre les mécanismes qui amènent à la fragilisation d'un alliage métallique par un métal liquide donné.

La sensibilité à la FML du laiton Cu-30%Zn par l'eutectique Ga-In (eGaIn), qui est liquide à température ambiante, est étudiée. Les premières investigations ont montré que la sensibilité à la FML de ce laiton par l'eGaIn semble dépendre non seulement de la vitesse de déformation mais surtout des contraintes et de la déformation plastique appliquée. Pour décrire plus finement cette dépendance aux paramètres mécaniques et comprendre les mécanismes mis en jeu, différents essais mécaniques ont été menés à l'air et en présence de métal liquide à différentes vitesses de sollicitation : essais de flexion pour des échantillons de taille millimétrique avec différentes montages, essai Small Punch Test (SPT) sur différentes géométries d'échantillon et essais de flexion in-situ sur FIB avec des échantillons de taille micrométrique. En parallèle des études expérimentales, une modélisation mécanique des essais avec la méthode des éléments finis est mise en œuvre afin de déterminer localement les vitesses de déformation et les contraintes, notamment au niveau de l'amorçage de la rupture fragile lors des cas de FML. Ainsi les valeurs seuil de déformation plastique nécessaire pour amorcer la FML sont calculées et comparées pour chacun des essais considérés et, elles sont corrélées aux résultats expérimentaux. La fragilisation de l'alliage Cu-30%Zn par l'eGaIn liquide est observée pour un taux de déformation plastique élevé et une vitesse de déformation importante. Tenant compte de ces résultats, les possibles mécanismes qui expliquent la FML de l'alliage Cu-30%Zn en présence de l'eGaIn sont proposés.

Hydrogen effects on incipient plasticity and hardness near surface in nickel with different crystal orientations using nanoindentation: Experimental approach

S.P. Murugan^{1*}, N. Iskounen¹, C. Traisnel¹, A. Oudriss¹, M. Landeiro Dos Reis¹, J. Bouhattate¹, X. Feugas¹

¹La Rochelle Université, Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement, UMR CNRS 7356, Avenue Michel Crépeau, 17000 La Rochelle, France.

*smurugan@univ-lr.fr; abdelali.oudriss@univ-lr.fr

A fundamental aspect of hydrogen embrittlement is based on the effects of hydrogen on the elementary mechanisms of plasticity [1]. Yet it is well known that the solute hydrogen deteriorates ductility of nickel, but there are antagonistic aspects in the hydrogen effects on the plasticity, i.e., hydrogen induced hardening and softening in metallic materials [1-4].

In this work, the impact of hydrogen on elastic properties, on elastic-to-plastic transition (pop-in) and on indentation hardness were investigated in nickel single crystals with $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ and $\langle 111 \rangle$ orientations using nanoindentation tests. The indented surfaces were analysed by SEM-FIB, EBSD and TEM to characterize the development of dislocation structures and any other defects and hence to establish the hydrogen-plasticity correlation. Hertz theory [reference] is used to model the elastic regime and Oliver and Pharr model [reference] was used to analyse the elastoplastic regime of the nanoindentation load-displacement curve. A decrease of elastic stiffness was observed with ingress of hydrogen with can be partially discussed with hydrogen impact on vacancies and vacancies clusters formation [5].

The discrepancy in the pop-in behaviour of the three investigated orientations were noticed and were then correlated to the nucleation of dislocations and the mobility of the existing dislocations in the corresponding slip planes. An increase in pop-in load and indentation hardness with hydrogen absorption was observed, which indicates a hardening behaviour in the plastic regime resulting from the interaction of interstitial hydrogen with dislocations. The increase in hardness was a partially reversible phenomenon whereas the increase in pop-in load was a completely irreversible phenomenon, revealing the synergistic effect of diffusible, reversibly trapped and irreversibly trapped hydrogen and the hydrogen induced vacancies on plasticity of nickel.

Keywords: Hydrogen, Nickel, Nanoindentation, Plasticity, Dislocation, Vacancy.

[1] X. Feugas, D. Delafosse, Chapter 9 - Hydrogen and Crystal Defects Interactions: Effects on Plasticity and Fracture, Editor(s): Christine Blanc, Isabelle Aubert, Mechanics - Microstructure - Corrosion Coupling, Elsevier, (2019) 199-222.

[2] M.A. Ghermaoui, A. Oudriss, A. Metsue, R. Milet, K. Madani, X. Feugas, A multiscale approach of hydrogen induced softening on f.c.c. nickel single crystal oriented for multi-slips: elastic screening effect, Scientific Report, 9(1) (2019) 13042

[3] G. Hachet, A. Oudriss, A. Barnoush, R. Milet, D. Wan, A. Metsue, X. Feugas, The influence of hydrogen on cyclic plasticity of $\langle 001 \rangle$ oriented nickel single crystal. Part I: Dislocation organizations and internal stresses, International Journal of Plasticity 126 (2020) 102611.

[4] G. Hachet, A. Oudriss, A. Barnoush, T. Hajilou, D. Wang, A. Metsue, X. Feugas, Antagonist softening, and hardening effects of hydrogen investigated using nanoindentation on cyclically pre-strained nickel single crystal, Materials Science and Engineering: A, 803 (2021) 140480.

[5] G. Hachet, A. Metsue, A. Oudriss, X. Feugas, Influence of hydrogen on the elastic properties of nickel single crystal: A numerical and experimental investigation, Acta Materialia, 148 (2018) 280-288.

Modélisation de la propagation d'une fissure courte en matériau ductile par couplage entre champ de phase et dynamique des dislocations

Luis Eon^{1,2*}, Riccardo Gatti¹, Alphonse Finel¹, Benoît Appolaire²

¹Laboratoire d'Etude des Microstructures (LEM) UMR 104 CNRS - ONERA

²Institut Jean Lamour (IJL) UMR 7198 CNRS - Université de Lorraine

*luis.eon@onera.fr

La propagation des fissures courtes dans les métaux CFC est fortement influencée par la microstructure environnante, en particulier celle engendrée par la configuration 3D des boucles de dislocations. Un outil fiable pour modéliser l'interaction entre une fissure et la microstructure des dislocations à l'échelle mésoscopique est la Dynamique des Dislocations (DD). La DD est une méthode numérique pour simuler le mouvement des dislocations sous chargement externe, basée sur une formulation analytique du champ de contrainte interne généré par chaque dislocation, sous l'hypothèse d'un milieu isotrope infini. Cependant, cette hypothèse n'est plus valable du fait de la présence d'une fissure et il est alors nécessaire de calculer numériquement le champ de contrainte pour gérer les interactions entre dislocations et surfaces libres. Le Modèle Discret-Continu (MDC) (1) permet de surmonter les limitations de la DD en la couplant avec un solveur élastique par éléments finis (EF). La modélisation 3D d'une fissure courte statique en traction utilisant le MDC a fait l'objet de la thèse de L. Korzeczek (2017). Ses travaux ont montré l'importance de la représentation en trois dimensions de l'interaction fissure-dislocations et ont également mis en exergue la limitation des EF en termes de temps de calcul et de stockage mémoire pour modéliser la propagation lente, telle qu'observée dans les matériaux ductiles et sous chargements cycliques.

Nous proposons ici un couplage numérique, basé sur le schéma du MDC, utilisant un solveur élastique à transformées de Fourier rapides (FFT) pour le calcul de l'équilibre mécanique. Le solveur mis en place est mathématiquement stable pour tout type d'interface et massivement parallèle. De plus, afin d'éviter toute sorte d'artefact numérique lié à la représentation de boucles de dislocations sous forme de champ surfacique de déformation plastique, les dislocations sont étudiées par le champ spatial du tenseur de densité de Nye, sur le même principe qu'en *Field Dislocation Mechanics*. Enfin, la simulation de propagation quasi-statique d'une fissure courte est gérée par une méthode des champs de phase, ou *Phase-Field Method* (2) et incorporée dans le couplage. Ce couplage multi-physique permet finalement d'étudier l'interaction d'une fissure courte et de la microstructure de dislocations environnante dans un métal CFC.

- (1) O. Jamond, R. Gatti, A. Roos, B. Devincere, "Consistent formulation for the Discrete-Continuous Model: Improving complex dislocation dynamics simulations", *International Journal of Plasticity*, 80, 19-37, 2016.
- (2) A. Karma, D. A. Kessler, H. Levine, "Phase-Field Model of Mode III Dynamic Fracture", *Physical Review Letters*, 87, 045501, 2001.

Etude des mécanismes de localisation de la déformation plastique dans les polycristaux : Simulations DDD et CPFEM

Baptiste Joste^{1,2*}, Benoit Devincré², Riccardo Gatti², Henry Proudhon¹

¹MINES ParisTech, Centre des matériaux, CNRS UMR 7633
BP 87, F-91003 Evry Cedex, France.

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

*baptiste.joste@mines-paristech.fr

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. Dans ce contexte, nous développons dans le cadre du projet ANR 3DiPolyPlast une modélisation multiéchelles de plasticité des métaux CFC polycristallins à l'échelle mésoscopique par la Dynamique des Dislocations Discrètes (DDD, code '*microMegas*', [1]) et macroscopique par la méthode des Eléments Finis (CPFEM, code '*zëbulon*'). La DDD permet une modélisation quantitative et physiquement justifiée des principaux mécanismes de la plasticité cristalline en tenant compte du comportement individuel et collectif des dislocations. Cependant, cette approche numérique reste limitée par un coût de calcul élevé et à l'étude d'un faible taux de déformation dans un volume restreint à un ou quelques grains. Le code de CPFEM avec des coûts de calculs moindres permet d'étendre la taille des agrégats polycristallins simulés et de résoudre rigoureusement le problème des conditions aux limites dans les grains simulés en DDD. Cette approche multiéchelles est essentielle pour nous permettre des comparaisons directes avec des observations expérimentales sur la base de jumeaux numériques issus de reconstruction par Diffraction à Contraste de Tomographie (DCT, [2]).

Nos premières simulations réalisées sur des agrégats modèles de type réseau de Voronoi 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 [3] 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. Sur la base de ces résultats, nous avons mis en place un critère de sélection des grains ayant une forte probabilité de développer une première bande de glissement. Cet indicateur simple permet la construction d'agrégats à façon pour nos simulations et devrait faciliter la mise en œuvre d'observations expérimentales ciblées sur les grains d'intérêts en Topo-Tomographie (TT). Finalement, nous présentons des simulations révélant le rôle clef joué par le glissement dévié des dislocations dans l'émergence et l'épaississement des bandes de glissement.

Références :

- [1] B. Devincré, R. Madec, G. Monnet, S. Queyreau, R. Gatti, and L. Kubin. Modeling crystal plasticity with dislocation dynamics simulations: the '*micromegas*' code. *Mechanics of Nano-objects*, pages 81–100, 2011
- [2] H. Proudhon, N. Guéninchault, S. Forest, and W. Ludwig. Incipient bulk polycrystal plasticity observed by synchrotron in-situ topotomography. *Materials*, 11(10), 2018.
- [3] 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

Étude par dynamique moléculaire de la déformation d'un film ultra fin d'or nanoporeux pour l'électronique flexible

Gwénaél Massé*, Julien Godet, Lorraine Vernisse, Laurent Pizzagalli

Institut Pprime, Dept Physique et Mécanique des Matériaux, UPR 3346 CNRS - Université de Poitiers – ENSMA

*gwenael.masse@univ-poitiers.fr

L'or nanoporeux est un matériau étudié depuis deux décennies pour sa morphologie particulière. En effet, il est composé de ligaments connectés et enchevêtrés, résultant d'un mécanisme de désalliage. Son grand rapport surface sur volume lui confère des propriétés intéressantes (catalyse, supercapacité) et des portées applicatives (actionneur à énergie chimique). Récemment, il a été synthétisé sous forme de films ultra-minces [1] ayant un fort potentiel d'applications en électronique flexible. Ce matériau est caractérisé par une grande transmittance optique tout en gardant une bonne conductivité électronique. Comme électrode flexible, il devrait toutefois supporter de grandes déformations sans rompre. Mais peu d'études mécaniques ont été réalisées jusqu'à présent.

Afin d'améliorer nos connaissances sur le sujet, une étude par dynamique moléculaire a été réalisée pour décrire finement le comportement en traction de films ultra-minces d'or nanoporeux. Les échantillons numériques ont été créés à partir d'une image de microscopie MEB [1]. Cette image a été utilisée pour reproduire à plus petite échelle un film ultra-mince d'or constitué de ligaments de ≈ 4 nm de côté et de hauteur 6 nm. Les structures ont ensuite été émoussées pour rendre compte de la morphologie expérimentale observée par MEB.

Des tractions jusqu'à 50 % (Figure 1) ont été effectuées pour déterminer la résistance de ces échantillons numériques. Ces essais ont été réalisés à 300 K et 1 K. Une étude des courbes contraintes-déformations, des ruptures et fusions de ligaments ainsi que des mécanismes de déformation sera présentée. La connectivité des échantillons semble être un paramètre primordial pour atteindre des déformations de l'ordre de 20 % sans rupture. Une étude de l'influence du taux de défauts initiaux sur les propriétés mécaniques de l'or nanoporeux est en cours et les premiers résultats seront discutés.

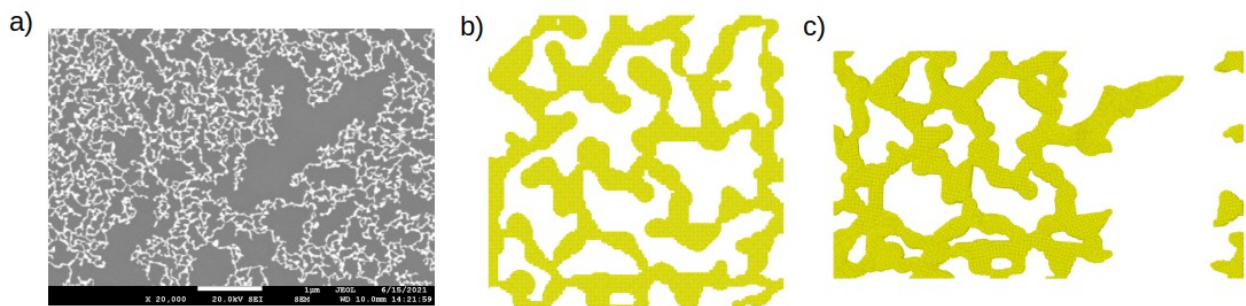


Figure 1 : a) Image MEB réalisée à l'institut Pprime de l'échantillon S5 fournie par l'institut Jean Rouxel à Nantes, barre d'échelle 1 μ m. b-c) Échantillon numérique de 50 nm x 50 nm avec des ligaments de 4 nm de côté et de hauteur 6 nm, avant déformation (b), après un essai de traction à 50 % à 300 K (c).

Références

[1] Chauvin, A., Txia Cha Heu, W., Buh, J. et al. Vapor dealloying of ultra-thin films: a promising concept for the fabrication of highly flexible transparent conductive metal nanomesh electrodes. *npj Flex Electron* 3, 5 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41528-019-0049-1>

Modélisation atomistique de l'ancrage des dislocations dans Fe-C

Arnaud Allera^{1,2*}, Fabienne Ribeiro², Michel Perez³, David Rodney¹

¹Univ Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, Institut Lumière Matière, F-69622, Villeurbanne, France

²IRSN/PSN-RES/SEMIA/LSMA Centre d'études de Cadarache, 13115, Saint Paul-lez-Durance, France

³Univ Lyon, INSA-Lyon, MATEIS UMR CNRS 5510, F69621, Villeurbanne, France

*arnaud.allera@univ-lyon1.fr

Les aciers ferritiques, constitués d'une matrice de fer cubique centré (CC) où s'insèrent des solutés de carbone, sont des matériaux de structure largement utilisés. Pourtant, les mécanismes qui contrôlent leur plasticité à l'échelle atomique ne sont encore que partiellement compris. A basse température, la déformation plastique des métaux CC est contrôlée par la mobilité des dislocations vis, qui est limitée à la fois par une forte résistance du réseau cristallin, et par la présence d'autres défauts cristallins, dont notamment les solutés de carbone.

Les modèles de mobilité des dislocations à l'échelle atomique basés sur la théorie de l'état de transition (TET) fournissent un cadre pour modéliser la déformation plastique des métaux purs et de leurs alliages. Cependant, les approximations couramment utilisées pour appliquer ces modèles (approximation harmonique, entropie d'activation constante) ne permettent pas de reproduire les résultats de simulations de dynamique moléculaire (DM) dans le fer. Nous avons donc calculé l'enthalpie libre d'activation pour la nucléation de paires de crans grâce à la récente méthode *projected average force integrator* [1], qui permet de prendre en compte les effets anharmoniques. Les données indiquent que le régime harmonique est limité à des températures très basses, inférieures à 20 K. Les non-linéarités restent cependant faibles en dessous de 100 K, permettant de calculer une entropie d'activation effective, qui augmente lorsque l'enthalpie d'activation diminue, ce qui correspond à un comportement Meyer-Neldel inverse. L'intégration de ces effets dans les modèles de mobilité des dislocations améliore considérablement l'accord avec les simulations de dynamique moléculaire.

L'application de ce type de modèles aux alliages Fe-C demeure limitée par le réalisme des potentiels interatomiques disponibles pour ce système. Pour résoudre ce problème, nous avons combiné deux potentiels empiriques existants pour Fe et Fe-C [2,3] afin de reproduire à la fois le mécanisme de Peierls et la reconstruction des cœurs de dislocation vis en présence de carbone mise en évidence par des calculs *ab initio*. Des simulations de DM du glissement d'une dislocation vis dans une solution solide aléatoire utilisant ce potentiel confirment un fort durcissement, causé par des processus complexes d'interaction à courte distance entre dislocation et solutés. Nous avons également étudié une géométrie idéalisée où une dislocation vis interagit avec une rangée d'atomes de carbone. En combinant des simulations de DM et des méthodes de recherche de point-col, nous mettons en évidence un très fort ancrage lorsque la séparation des solutés est inférieure à environ 100 vecteurs de Burgers. Cet effet est dû à la nécessité de nucléer deux paires de crans consécutivement sur la dislocation, la deuxième paire ayant une enthalpie d'activation nettement augmentée. Nous avons développé un modèle de ce processus basé sur la TET harmonique, qui intègre également les effets entropiques observés dans le fer pur, en bon accord avec les simulations de DM menées jusqu'à 300 K. Ce travail fournit des processus et des paramètres élémentaires qui seront utiles pour des modèles à plus grande échelle et en particulier des simulations Monte Carlo cinétique.

[1] Swinburne, Marinica, Phys. Rev. Lett. 120, 135503, 2018

[2] Proville, Rodney, Marinica, Nature Mater., 11, 2012

[3] Veiga *et al.*, Comput. Mater. Sci., 82, 2014

Mardi 5 avril - 15:00-15:20

Étude numérique des propriétés mécaniques des verres Mg_2SiO_4

Valentin Delbecq^{1*}, Philippe Carrez¹, Patrick Cordier^{1,2}, Jean-François Paul³, Silvio Pipolo³

¹UMET, Univ. Lille, F-59000 Lille, France

²Institut Universitaire de France

³UCCS, Univ. Lille, F-59000 Lille, France

*valentin.delbecq@univ-lille.fr

L'olivine (Mg, Fe) $_2\text{SiO}_4$ est le constituant principal du manteau terrestre supérieur. Une étude récente a montré qu'à basse température (c'est-à-dire aux environ de 1000 °C), l'olivine se déformait sous fortes contraintes par du glissement aux joints de grains. La microscopie électronique en transmission a révélé le long de ces joints de grains une fine couche amorphisée. La compréhension des mécanismes de déformation de cette olivine amorphe s'impose pour comprendre le glissement observé. Pour étudier cet amorphe nous avons choisi une approche numérique par dynamique moléculaire où nous avons uniquement considéré la forstérite Mg_2SiO_4 (le pôle magnésien de l'olivine). Nous avons réalisé des essais de cisaillements à différentes températures et vitesses de déformation permettant de caractériser l'écoulement du verre. Ces mêmes essais nous ont permis d'étudier des mécanismes de déformation à l'échelle atomique. Ces derniers se manifeste par des mouvements localisés d'atomes appelés « Shear Transformation Zone » (STZ).

Mardi 5 avril - Session hommage Georges Saada - 16:30-17:50

16:30-17:00

Titre non précisé

Muriel Véron

³*SIMaP, Université Grenoble-Alpes, 38402 Saint-Martin d'Hères, France.*

17:00-17:30

Interfaces étroites et solveurs mécaniques discrets

Alphonse Finel

¹*Laboratoire d'Etude des Microstructures (LEM) UMR 104 CNRS - ONERA*

17:30-17:50

Interaction entre systèmes de glissement : une approche semi analytique

Laurent Dupuy¹, Ronan Madec^{2,3*}

¹*CEA, CEA, DEN/DMN/SRMA*

²*CEA, DAM, DIF*

³*Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire Matière en Conditions Extrêmes, F-91680 Bruyères-le-Châtel,*

[*ronan.madec@cea.fr](mailto:ronan.madec@cea.fr)

Les modèles de plasticité cristalline utilisant les densités de dislocations comme variables internes sont couramment utilisés pour décrire le mécanisme d'écrouissage dans les lois de comportement. Pour autant, il n'est pas toujours facile de déterminer les valeurs des différents coefficients d'interaction entre systèmes de glissement qui interviennent dans ces modèles. En effet, ces coefficients, qui mesurent la capacité d'un système de glissement à en écrouir un autre, varient en fonction de nombreux paramètres. Ses paramètres sont fonction de la cristallographie, des propriétés élastiques et plus généralement des propriétés physiques du matériau considéré, mais aussi, potentiellement, de la pression et de la température.

Quand ils ne sont pas ajustés sur l'expérience ou fixés arbitrairement, l'approche la plus prédictive consiste à mesurer ces coefficients grâce à des simulations de Dynamique des Dislocations (DD). Leur mise en œuvre reste cependant technique et leur coût de calcul, toujours important, interdisent une mesure « à la demande ».

C'est pourquoi nous proposons de revisiter l'usage des modèles analytiques initiés par G. Saada dans son article fondateur de 1960 sur le modèle de la forêt [1]. Nous déclinerons ces approches par systèmes de glissement [2,3] et en y incorporant des informations de nature statistique, jusqu'ici absentes, via des moyennes issues de simulations de la DD. Cette approche semi analytique est désormais possible en raison de la base de données accumulée assez large [4- 6] et que l'on peut au besoin enrichir.

[1] G. Saada, Sur le durcissement dû à la recombinaison des dislocations, Acta Metall, 8, 841-847 (1960)

[2] Gunther Schoeck and R. Frydman. The contribution of the dislocation forest to the flow stress. Physica status solidi (b), 53(2):661-673, 1972.

[3] L. Dupuy, M. Fivel, A study of dislocation junctions in fcc metals by an orientation dependent line tension model, Acta Mater., 50, 4873-4885 (2002)

[4] R. Madec, L. Kubin, Dislocation strengthening in FCC and BCC metals at high temperatures, Acta Materialia, 126, 166-173 (2017)

[5] B. Devincere, Dislocation dynamics simulations of slip systems interactions and forest strengthening in ice crystals, Phil. Mag., 93, 235-246 (2013)

[6] L. Portelette, J. Amodeo, B. Michel, R. Madec, Athermal dislocation strengthening in UO₂, Journal of Nuclear Materials 538, 152157 (2020)

Etude des effets de l'irradiation sur la plasticité des alliages de zirconium : du mouvement des dislocations jusqu'au comportement du polycristal

Fabien Onimus^{1*}, Laurent Dupuy¹, Matthew Bono², Frédéric Momprou³, Philippe Pilvin⁴

¹ Service de Recherches de Métallurgie Appliquées, CEA, Université Paris-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

² Service d'Etude des Matériaux Irradiés, CEA, Université Paris-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

³ Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales, CNRS, 29 Rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse, France

⁴ Institut de Recherche Dupuy de Lôme, Université de Bretagne Sud, 27 rue Armand Guillemot, 56321 Lorient, France

*fabien.onimus@cea.fr

Les alliages de zirconium sont utilisés comme gainage du combustible des réacteurs nucléaires à eau. En réacteur, ces matériaux sont soumis simultanément à des sollicitations mécaniques ainsi qu'au dommage résultant du flux de neutrons rapides. Afin de mieux comprendre les effets de l'irradiation sur le comportement mécanique, les mécanismes de déformation ont été étudiés, en partant des échelles les plus fines et en remontant jusqu'au comportement mécanique macroscopique. Des essais mécaniques ont été réalisés sur des tubes irradiés par des neutrons. Les mécanismes de déformation ont été analysés par MET après essais mécaniques. Par ailleurs, sur des échantillons irradiés aux ions zirconium, des essais de traction in situ en MET ont été menés. Un mécanisme de balayage des défauts d'irradiation par les dislocations mobiles a été observé. Les interactions entre dislocations et défauts d'irradiation ont été étudiés par dynamique moléculaire et dynamique des dislocations. Cette étude numérique a permis de mieux comprendre le phénomène de balayage des défauts d'irradiation, en fonction du plan de glissement des dislocations. Enfin, un modèle polycristallin, prenant en compte ces mécanismes, a été développé et comparé à des essais mécaniques présentant un historique de chargement complexe. Un phénomène d'adoucissement cyclique, dû au balayage des défauts d'irradiation, est prédit par le modèle, en bon accord avec les expériences.

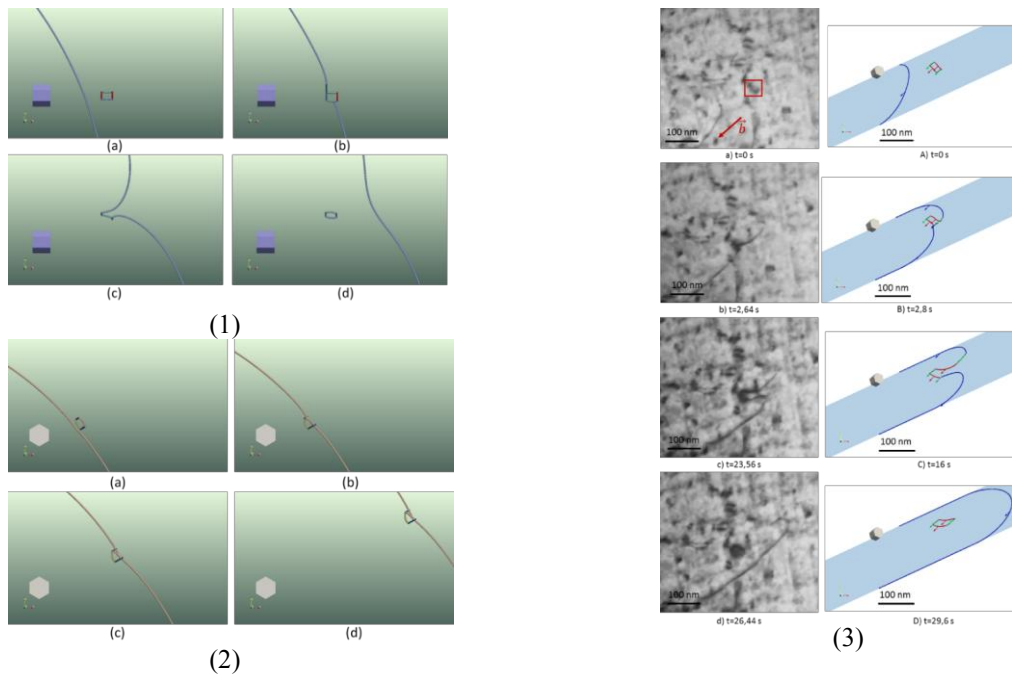


Figure 1 : Séquences montrant l'interaction d'une dislocation mixte glissant dans un plan (1) prismatique ou (2) basal, avec une boucle. (3) Observation in situ d'une dislocation interagissant avec une boucle. La simulation de dynamique des dislocations est comparée à l'expérience.

Atomistic simulation of dislocation mobility and irradiation defects in UO₂

Marion Borde*^{1,3,4,5}, Émeric Bourasseau¹, Adrien Pivano¹, Bruno Michel¹, Laurent Dupuy², David Rodney³ and Jonathan Amodéo^{4,5}

¹CEA, IRESNE, DEC, SESC, Centre de Cadarache, 13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

²CEA, Service de Recherches Métallurgiques Appliquées, Centre de Paris-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

³Université de Lyon, ILM UMR5306 CNRS, 69621 Villeurbanne, France

⁴Université de Lyon, INSA-Lyon, MATEIS UMR 5510 CNRS, 69621 Villeurbanne, France ⁵Université Aix Marseille, Université de Toulon, IM2NP, CNRS, 13397 Marseille, France

*marion.borde@insa-lyon.fr

The plastic deformation of UO₂ is characterized by dislocations in three slip systems: $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ and $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ are often observed in experiments and $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$ is believed to be involved when dislocations cross-slip [1]. In UO₂, dislocations are known to strongly interact with point defects and prismatic loops during irradiation [2]. However, very little is known about primary dislocation mobility and the strain-hardening induced by irradiation defects.

In this study, we focus on the edge dislocation in the $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{100\}$ slip system and study its properties and interactions with irradiation defects as a function of temperature and stress using molecular dynamics simulations and empirical potentials. Special attention is paid to the dislocation core, which can take different structures at 0 K and finite temperature. Results show the dislocation glides by a kink-pair process up to a temperature of about 2000 K with a highly non-linear velocity law. Interactions between mobile dislocations and $\langle 110 \rangle$ irradiation interstitial loops are also investigated, the latter being designed based on TEM observations [3]. We will discuss the influence of the relative orientation between the dislocation and the loop on their interaction mechanism and unpinning stress. In parallel, we performed dislocation dynamics simulations with the same dislocation-loop geometries using the NUMODIS code [4,5]. Comparison of the simulation outcome as a function of loop size will be presented.

[1] R. J. Keller et al. "Plastic deformation in nonstoichiometric UO_{2+x} single crystals—II. Deformation at high temperatures." *Acta metallurgica* 36.4 (1988): 1073-1083.

[2] A. D. Whapham et al. "Radiation damage in uranium dioxide." *Philosophical Magazine* 12.120 (1965): 1179-1192.

[3] C. Onofri et al. "Full characterization of dislocations in ion-irradiated polycrystalline UO₂." *Journal of Nuclear Materials* 494 (2017): 252-259.

[4] L. Dupuy Numodis: <http://www.numodis.fr/>

[5] J. Drouet, et al. "Dislocation dynamics simulations of interactions between gliding dislocations and radiation induced prismatic loops in zirconium." *Journal of Nuclear Materials* 449.1-3 (2014): 252-262.

Etude expérimentale et numérique de l'influence de la contrainte sur les boucles de Frank dans l'aluminium

Daphné Da Fonseca^{1,2,3*}, Thomas Jourdan¹, Fabien Onimus², Frédéric Momprou³

¹Université Paris-Saclay, CEA Service de Recherches de Métallurgie Physique, 91191, Gif-sur-Yvette, France

²Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherches Métallurgiques Appliquées, 91191, Gif-sur-Yvette, France

³Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales, CNRS et Université de Toulouse, 29 rue J. Marvig, BP 94347, 31055 Toulouse, France

*daphne.dafonseca@cea.fr

Sous irradiation, des défauts ponctuels (atomes auto-interstitiels, lacunes) sont générés. Leur sursaturation peut conduire à la formation de boucles, contribuant à une déformation permanente si leur répartition est anisotrope. Des effets de la contrainte ont déjà été constatés sur la répartition des boucles mais le mécanisme sous-jacent n'a pas encore été établi. Ces effets pourraient, au moins en partie, expliquer le fluage d'irradiation.

Parmi les mécanismes proposés pour expliquer ce phénomène, celui reposant sur la diffusion préférentielle des défauts ponctuels sous contrainte vers certaines populations de boucles est étudié ici. Ce mécanisme est nommé SIPA (pour *stress-induced preferential absorption*) [1].

Afin d'évaluer l'intensité de ce phénomène, une approche en deux axes est mise en place ; elle se compose d'une étude expérimentale et d'une étude numérique, avec pour matériau modèle l'aluminium pur.

Dans un premier temps, des expériences in-situ sont réalisées dans un microscope électronique à transmission conventionnel. Les éprouvettes de traction d'aluminium sont irradiées par des électrons de 180-200 keV. La caractérisation indique que la microstructure présente principalement des boucles de Frank de nature interstitielle. Une forte sélectivité des boucles a été constatée entre les quatre familles de type $\{111\}$, en fonction de leur orientation par rapport à l'axe de la contrainte appliquée. Cependant, il a également été observé que la contrainte n'avait pas d'influence lorsqu'elle était appliquée après la formation des boucles.

En parallèle, des simulations de type Monte Carlo cinétique sur objets (OKMC) [2] ont été menées. Il a été possible de représenter l'influence de la contrainte sur l'efficacité d'absorption pour une boucle isolée. Il s'avère que la différence de biais d'absorption entre deux boucles de même taille et orientées différemment est relativement faible. En plus de la boucle isolée, des microstructures contenant plusieurs boucles ont été simulées afin de mieux représenter les conditions expérimentales.

[1] C.H. Woo, J. Nucl. Mater. **120**, 55 (1984)

[2] D. Carpentier, Acta Mater. **136**, 323 (2017)

Load versus displacement control nanomechanics : insights from atomistic simulations

Hugo Iteney^{1*}, Olivier Thomas¹, Thomas W. Cornelius¹, Jonathan Amodeo^{1,2}

¹Aix Marseille Univ, Univ Toulon, CNRS, IM2NP UMR 7334, Marseille, France ²MATEIS, Université Lyon 1 CNRS INSA-Lyon, F-69621 Villeurbanne, France

*hugo.iteney@im2np.fr

The characterization of nano-objects takes a particular interest due to their enhanced mechanical properties when compared to bulk materials. In nanomechanical experiments, two ways of controlling the load are currently available depending on the brand device used i.e., namely the load and the displacement-controlled modes. Most of SEM compression setups used for compression tests on pillars or nanoparticles are load-controlled or benefit of a software-based feedback loop on displacements that is less accurate than the scarcer intrinsic displacement-control setups. On the other hand, displacement-control molecular dynamics (MD) simulations are generally designed for the sake of simplicity.

Thus, the comparison between simulations and experiments is not always straightforward. On one hand, simulations where the displacement of the indenter is monitored show a huge stress drop when the first dislocations nucleate while huge strain bursts and no stress drop are observed in load-controlled experiments.

In this study we present an original load-control MD setup to discuss load vs displacement control experiments and simulations. Here we apply our approach to the cases of Wulff-shaped Au and Ag nanoparticles (NPs) recently investigated using experimental nanocompression tests [1, 2]. First, the mechanical response of Au NPs obtained using the load-control model is investigated. In contrast with the displacement-controlled simulations, the strain bursts are captured and the magic “pancake” shape of metal NPs often observed at the end of nanocompression experiments is now explained. A specific attention is paid to the evolution of the dislocation microstructure during the test in comparison to the displacement-controlled simulations. A similar approach is then applied to Ag NPs for which the load-control analytical model proposed in ref. [1, 2] is directly faced to the simulation’s outcomes. In the both cases, implications for nanomechanics experiments are discussed.

[1] Y. Feruz, D. Mordehai, Towards a universal size-dependent strength of face-centered cubic nanoparticles, *Acta Mater.*, Volume 103 (2016). doi : 10.1016/j.actamat.2015.10.027

[2] A. Sharma, J. Amodeo, N. Gazit, Y. Qi, O. Thomas, E. Rabkin, When More Is Less: Plastic Weakening of Single Crystalline Ag Nanoparticles by the Polycrystalline Au Shell, *ACS Nano* 2021, 15, 9, 14061–14070. doi : 10.1021/acsnano.1c02976

Plasticité des laitons-alpha dans une approche EAM : prédiction quantitative des contraintes de Peierls

Antoine CLEMENT^{*1}, Thierry AUGER¹, Julie BOURGON², Eric LEROY², Eva HERIPRE³

¹*PIMM, Arts et Métiers ParisTech, CNRS, CNAM, HESAM Université*

²*ICMPE, Thiais, Université Paris-Est*

³*LMPS, CentraleSupélec, Université Paris-Saclay*

**antoine.clement@ensam.eu*

Un potentiel EAM, mis au point sur des calculs DFT du cuivre, du zinc cfc et de la phase ordonnée DO₂₃ du Cu₃Zn (paramètre de maille, énergie cohésive, anisotropies élastiques et énergie de formation de la lacune), a été utilisé pour étudier le problème de la contrainte de Peierls dans les alliages de laitons-alpha (moins de 35% de zinc). La dislocation coin dissociée dans les laitons a été étudiée et est bien décrite (longueur de dissociation, énergie de faute d'empilement).

Le durcissement en solution solide a alors été étudié pour les laitons-alpha jusqu'à 30% de zinc en cherchant à prédire la contrainte de Peierls en fonction de la concentration. Les prédictions à 0 K correspondent aux résultats expérimentaux à 4,2 K de manière quantitative pour la première fois pour un alliage. Un modèle d'accrochage fort reproduit au mieux l'évolution en concentration dans le système Cu-Zn.

Le problème de l'émission d'une dislocation en fond de fissure est également étudié dans un cadre d'élasticité anisotrope pour un monocristal et un bi-cristal (S5) avec un bon accord pour le cuivre aux études existantes dans la littérature. Les résultats pour les alliages montrent que, contrairement à l'intuition, le facteur d'intensité de contrainte pour l'émission de dislocation se réduit à mesure que la teneur en zinc augmente.

Ce cadre de simulation du fond de fissure, est étendu dans une approche multi-échelle QM/MM avec un couplage en force, à la prise en compte des effets chimiques d'adsorption par une impureté potentiellement fragilisante, non modélisables par EAM. Les premiers résultats de l'effet d'une adsorption seront montrés en parallèle des premiers résultats de MET in-situ qui permettent de valider les hypothèses physiques sous-jacente.

Complexions stables d'un joint de grains dans la forstérite: propriétés et implications

Jean Furstoss^{1,*}, Pierre Hirel¹, Philippe Carrez¹ & Patrick Cordier¹

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

*jean.furstoss@univ-lille.fr

La forstérite est le pôle magnésien du minéral principal du manteau supérieur terrestre, l'olivine. Le rôle des joints de grains dans de nombreux processus géologiques impliquant les roches mantelliques, tel que la formation de nouvelles limites de plaques, semble actuellement prépondérant. Cependant, l'étude de ces interfaces à la lumière des développements actuels en physique des matériaux reste peu fréquent.

Dans cette présentation on montrera comment les méthodes de simulations atomistiques permettent d'explorer les différentes structures stables (i.e. complexions) du joint de grains tilt symétrique $60^\circ//[100](010)$ dans la forstérite. On montrera également qu'une déviation de la stœchiométrie au voisinage de l'interface est énergétiquement favorable à température finie et conduit à de nouvelles complexions stables. Dans un second temps on se penchera sur les propriétés de ces complexions en terme de structure atomique, d'énergie interfaciale, de volume d'excès, de diffusion et d'accommodation de la déformation par glissement au joint de grains. Finalement, les implications de ce travail à un contexte géologique seront discutées.

SIMULATIONS ATOMISTIQUES CLASSIQUE ET AB-INITIO DES JOINTS DE MACLE INCOHERENTS $\Sigma 3$ $[\bar{1}10](\bar{1}\bar{1}2)$ DANS L'OR : STRUCTURE ET INTERACTIONS

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

Université de Poitiers, Institut Pprime, France.

* Contact : yen.fred.woguem@univ-poitiers.fr, Tel : +33 (0)5 49 49 66 54

Les matériaux nanomaclés 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 effectué des essais de traction sur des films minces d'or nanomaclés in-situ sous diffraction des rayons X et nous observons la croissance des macles dans le cristal [2]. Les simulations atomistiques sont des outils complémentaires permettant de mieux comprendre la structure et les mécanismes de déformation qui ont lieu dans ces matériaux.

Nous nous sommes focalisés sur les joints de macles incohérents (ITBs) $\Sigma 3$ $[\bar{1}10](\bar{1}\bar{1}2)$. Ces ITBs peuvent être décrits comme des ensembles de trois dislocations partielles de Shockley avec deux dislocations qui sont mixtes et une qui est coin [3].

La relaxation structurale d'un tel ITB est induite par le glissement de la dislocation coin de chaque ensemble ; ce glissement conduit à la formation d'une nouvelle phase cristalline, appelée phase 9R. Nous avons déterminé l'excès de volume introduit par l'ITB et montré son effet sur le système. L'énergie de cet ITB a également été déterminée. Nous avons par la suite caractérisé cette phase 9R, notamment en déterminant son extension en utilisant quatre potentiels interatomiques différents pour l'or et avec la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Les résultats sont discutés en fonction de plusieurs paramètres dont peut dépendre l'extension de cette phase à savoir : son énergie de formation, l'énergie de défaut d'empilement, la déformation élastique créée par cette phase [4].

Enfin, nous avons étudié les interactions entre des ITBs parallèles. Les résultats montrent que, selon la distance et la disposition de l'empilement des plans entre les ITBs, ceux-ci peuvent fusionner, générant une phase 9R plus étendue. Ceci aide à comprendre la migration des ITBs et donc la stabilité des matériaux nanomaclés.

[1] L. Lu et al. « Revealing the maximum strength in nanotwinned copper ». *Science* 323, 5914 (2009), doi: 10.1126/science.1167641.

[2] J. Drieu La Rochelle et al. « Study of uniaxial deformation behavior of 50 nm-thick thin film of gold single crystal using in situ X-ray pole figure measurements ». *Surf. Coat. Technol.* 377, 124878 (2019), doi: 10.1016/j.surfcoat.2019.06.103.

[3] J. Wang et al. « Dislocation structures of $\Sigma 3$ $\{112\}$ twin boundaries in face centered cubic metals ». *Appl. Phys. Lett.* 95, 021908 (2009), doi: 10.1063/1.3176979.

[4] Y. F. Woguem et al, in preparation.

***In situ* Bragg Coherent X-ray Diffraction Imaging of a Pt nanoparticle during nano-indentation**

Sarah Yehya^{1,2,3*}, Thomas Cornelius¹, Marie-Ingrid Richard², Felisa Berenguer³, Eugen Rabkin⁴, Olivier Thomas¹, Stéphane Labat¹

¹Aix Marseille Univ., Université de Toulon, CNRS, IM2NP, Marseille, France

²Laboratory CEA Grenoble IRIG/MEM/NRS, 17 rue des Martyrs, FR-38054 Grenoble, France ³Synchrotron SOLEIL - L'Orme des Merisiers, Saint-Aubin, BP 48 FR - 91192 Gif-sur-Yvette, France ⁴Departement of Materials Science and Engineering, Technion - Israel Institute of Technology, 3200003 Haifa, Israel

*sarah.yehya@im2np.fr

Crystal lattice defects can dramatically alter material properties and functionality. Furthermore, the energy and mobility of defects in nano-objects vary significantly from their bulk counterpart. Thus, the understanding of defects behavior is crucial to optimize material performance. Bragg coherent X-ray diffraction imaging (BCDI), a lensless imaging technique that relies on phase retrieval algorithms, allows for 3D characterization of morphology and strain with a 3D spatial resolution of 10 nm and picometer sensitivity of lattice displacement field. It has emerged nowadays as a revolutionary tool to image defects and strain fields in 3D [1-2]. BCDI is thus an ideal technique to probe the stability of defects in nanocrystals during mechanical straining.

Here we report on defect characterization in a Pt nanoparticle (having the size of some hundred nanometers and oriented with [111] perpendicular to the substrate's surface) from two recent successive synchrotron experiments: The first at ESRF-ID01 and the second at SOLEIL-CRISTAL. The former is an experiment that combines *in-situ* mechanical testing using a custom-built atomic force microscope "SFINX" [3] with BCDI. The coherent diffraction pattern of a single 111 reflection is recorded during indentation and is inverted using PyNX software [4] unveiling the shape of the Pt crystal with an isosurface in amplitude colored with the reconstructed phase (proportional to the out-of-plane displacement field along [111]) (cf. Fig. 1a,1c). The semi-transparent reconstructed objects evidence that defects were induced during indentation (cf. Fig. 1b,1d). In the latter experiment at SOLEIL, post-indentation experiment, multiple-Bragg reflections (Pt 111, Pt 002, Pt 020, and Pt 022 Bragg peaks) were recorded using rocking scans. The Bragg electron density and the phase of each Bragg peak were reconstructed. The semi-transparent reconstructions allow characterizing the Burgers vector of each dislocation line and reveal the complex structure of the induced defects. I will discuss in detail the structure of these defects and what we can learn from their stability in this indented nanocrystal.

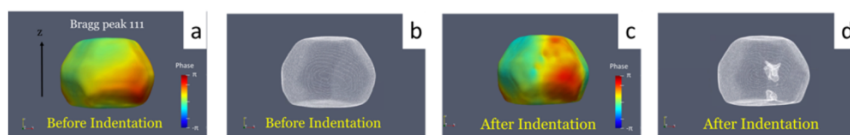


Figure 1 : (a-c) Reconstructed shape of a 400 nm Pt nanocrystal in 3D colored with the reconstructed phase. (b-d) See-through of the 400 nm Pt nanocrystal in 3D before and after indentation evidencing induced defects. (ID01-ESRF)



Figure 2: Semi-transparent reconstructions of multi-Bragg reflections after indentation showing the characteristic induced defects for each Bragg peak. (CRISTAL-SOLEIL)

Présentations par poster

Modélisation multi-échelle de la plasticité à l'aide d'algorithmes de Machine Learning

Armand Barbot^{1*}, Riccardo Gatti¹

¹*Laboratoire d'Étude des Microstructures, UMR 104 Onera - CNRS, 29 avenue de la division Leclerc, 92322 Châtillon, France*

**armand.barbot@onera.fr*

La nucléation des dislocations hétérogènes thermiquement activées est le mécanisme dominant de la plasticité pour les cristaux ayant une taille inférieure à 100-200nm tel que les nano-piliers ou nano-films métalliques ou semi-conducteurs. La nucléation est ainsi un phénomène essentiel pour la compréhension et la maîtrise des propriétés mécaniques à l'échelle nanométrique, et donc, par exemple, permettre la miniaturisation des composants électroniques soumis à de fortes contraintes et températures. Ce mécanisme joue de plus un rôle important pour la compréhension et la modélisation de la propagation des fissures, en effet, les nucléations se produisant à la pointe des fissures les arrondissent, ralentissant ainsi leur vitesse de propagation.

Bien que ce phénomène puisse être reproduit dans des simulations numériques à l'échelle atomique, son implémentation dans des simulations de Dynamique Discrète des Dislocations (DDD), permettant de simuler des matériaux sur des plus grandes échelles de tailles et de temps, fait encore défaut. Nous proposons ici des approches basées sur l'utilisation d'algorithmes de machine learning afin de permettre l'implémentation de ces nucléations dans des simulations de DDD en se basant sur des résultats obtenus à l'aide de simulations à l'échelle atomique.

TEM dislocation interaction with the microstructure of an Al-Si-Mg alloy elaborated by laser beam melting

Nicolas Bello^{1,2*}, Malo Jullien², Cassiopée Galy¹, Céline Larignon¹ et Joël Douin²

¹ IRT Saint Exupéry, 3 rue Tarfaya 31400 Toulouse FR

² CEMES, Université de Toulouse, CNRS, 29 rue Jeanne Marvig 31055 Toulouse Cedex 4 FR

*nicolas.bello@cemes.fr

To understand the microscale precipitation hardening in an AS7G06 alloy elaborated by laser beam melting, a comparison between T6 heat treatment and a direct artificial ageing (DAA) have been made. TEM *in situ* straining experiments conducted on a JEOL allow the direct observation of the dislocation movement within a microstructure. The precipitate resistance can then be calculated based on the Hazzeldine formula to obtain a value of its resistance.

Fine TEM characterizations confirmed the presence of the Si-network on the DAA microstructure and a foundry-like one for the T6 heat treatment. TEM *in situ* straining experiments allow the identification of the hardening precipitates. Though the dislocation interactions, their resistance has been calculated. With these values we were able to quantify hardening participation and adapt the Hirsh & Kelly formula to fit with the measured properties.

Le glissement anomal dans les métaux cubiques centrés

Daniel Caillard^{1*}, Baptiste Bienvenu², Emmanuel Clouet²

¹CEMES-CNRS 29 rue J. Marvig, BP 94347, 31055 Toulouse

² Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherches de Métallurgie Physique, Gif-sur-Yvette 91191, France

*caillard@cemes.fr

Les métaux de structure cubique centrée (CC) se déforment à basse température par le glissement de dislocations coins rapides et par le glissement beaucoup plus lent de dislocations vis soumises à une forte friction de Peierls. Ces dislocations, de vecteur de Burgers $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$, se déplacent habituellement dans des plans de facteur de Schmid maximum, de type $\{110\}$, ou parfois de type $\{112\}$, avec beaucoup de déviation. Cependant, on observe également des systèmes de glissement beaucoup moins sollicités et dits « anomaux », pour des axes de traction ou de compression dans le centre du triangle stéréographique. Le glissement anomal est beaucoup plus planaire que le glissement habituel, et il fait intervenir des dislocations des deux vecteurs de Burgers du plan.

Le glissement anomal est connu depuis les années 70, mais son origine demeure mal comprise. Il a été observé dans la plupart des métaux CC, mais pas dans le fer. Il est généralement attribué à un glissement collectif des dislocations d'un réseau formé par les deux familles de dislocations vis et par leurs réactions de jonction $\langle 100 \rangle$, mais il n'y a jamais eu de confirmation directe de ce mécanisme.

Nous avons donc fait des expériences de traction in situ dans du niobium à 95K. Nous avons observé des réseaux mobiles dans leur plan, en accord avec les modèles de la littérature, mais leur mobilité est trop faible pour expliquer le glissement anomal. Nous avons par contre observé la formation et le glissement extrêmement rapide d'un nouveau type de défaut appelé multi-jonction. Il s'agit d'un assemblage de quatre dislocations vis des quatre vecteurs de Burgers du cristal, selon les arêtes d'un tétraèdre, dont le sommet réalise l'équation $b_1 + b_2 + b_3 + b_4 = 0$. Des simulations atomistiques montrent que les kinks nécessaires au mouvement sont nucléés spontanément au sommet du tétraèdre, ce qui explique pourquoi la multi-jonction peut glisser rapidement sur de longues distances et sans force de friction. On explique ainsi toutes les propriétés caractéristiques du glissement anomal.

Nous avons enfin élucidé la relation entre le degré d'anisotropie, la possibilité de réaliser une jonction $\langle 100 \rangle$, et l'apparition (ou non) du glissement anomal dans le niobium le tungstène et le fer.

Effet de l'écart géométrique induit par l'usinage sur le comportement en fatigue vibratoire du Ti-6Al-4V

Manel Dallali¹, Leila Khalij¹, Egle Conforto², Christophe Gautrelet¹, Marcela Machado³,
Eduardo Souza de Cursi¹

¹LMN/INSA ROUEN Normandie, Université de Normandie, 76000 Rouen, France, leila.khalij@insa-rouen.fr

²LaSIE UMR CNRS 7356, La Rochelle université, 17042 La Rochelle, France, egle.conforto@univ-lr.fr

³Department of Mechanical Engineering, University of Brasilia, 70910-900, Brasilia, Brésil

Résumé

Des éprouvettes avec section réduite ont été usinées simultanément par électroérosion à fil à partir de plaques de Ti-6Al-4V de 2mm. Des erreurs de forme géométrique dues à la déviation du chemin de coupe ont été découvertes sur de nombreuses éprouvettes après la fabrication finale, comme montrées dans la Figure 1. Des essais de fatigue vibratoire à grand nombre de cycles ont été effectués sur ces éprouvettes de formes symétrique et asymétrique afin d'examiner l'impact de l'écart géométrique sur la durée de vie en fatigue et la propagation des fissures.



Fig 1. Géométrie et dimensions (en mm) de l'éprouvette symétrique et (à gauche) disparité de formes des sections réduites de seize éprouvettes (à droite)

Les résultats sur 50 éprouvettes ont montré un ou deux sites de fissuration. De plus, les éprouvettes avec deux sites ont présenté des fissures symétriques et des fissures asymétriques.

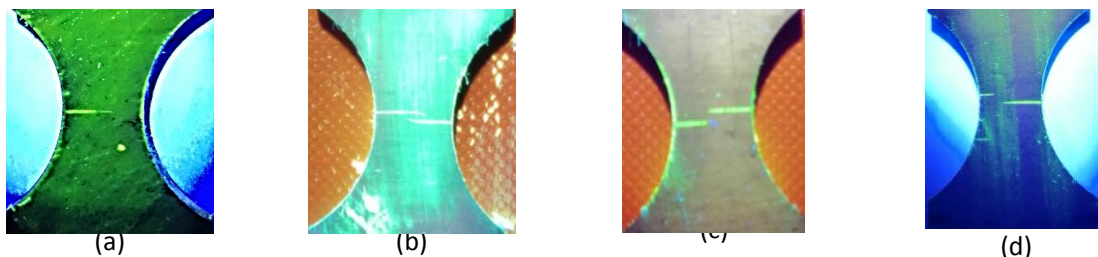


Fig 2. Observation des fissures par ressuage sur une des faces de 4 éprouvettes

Une analyse statistique a été appliquée à partir des résultats obtenus sur ces 50 éprouvettes pour examiner la probabilité d'occurrence d'une ou deux fissures et les mécanismes de rupture par fatigue ont été étudiés à travers des fractographies obtenues avec un MEB. Ce travail conduit à la conclusion qu'une petite différence de géométrie n'entraîne pas nécessairement une différence significative de durée de vie en fatigue. Cependant, le nombre de sites de fissures et leurs tailles sont différents en fonction de l'erreur géométrique et donc, principalement en raison de la concentration de contraintes. L'étude montre également que les essais de vibration impliquant des fréquences raisonnablement élevées conviennent aux essais de fatigue des plaques minces.

Insights on the robustness, sensitivity and expressivity of simple many-body potentials: application to α -Zr (Oral presentation)

A. Del Mastro¹⁻², C. Varvenne², J. Baccou¹,
G. Tréglia², F. Ribeiro¹, J.C. Crivello³

¹*Institut de Radioprotection et de Sûreté Nucléaire, IRSN, Saint Paul-Lez-Durance, France*

²*Centre Interdisciplinaire de Nanosciences de Marseille, CINaM, CNRS-Aix-Marseille Université, France*

³*Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est, ICMPE, CNRS - Thiais, France*

Computational material science, including irradiation physics, has been relying on classical interatomic potentials for decades: they efficiently allow to simulate complex phenomena at length and time scales that outrun the capacity of the most accurate *ab initio* approaches. Two different classes of interatomic potentials are currently used. The so-called machine learning potentials[1], on one hand, have a high number of parameters and thus a high flexibility to reproduce a number of physical quantities, but a high computational cost. On the other hand, many-body interatomic potentials, like Embedded Atom Method (EAM) and tight binding Second Moment Approximation (SMA) potentials, have a more limited accuracy due to a reduced number of parameters. However, they are based on physically-inspired functional forms which ensures a reasonable transferability. Their low computational cost thus allow studies that require multiple evaluations of system energy and forces[2]. The identification of the potential parameters for a given system is of crucial importance, but challenging.

In this work, we apply efficient tools of model screening and sensitivity analysis to get insights on the capabilities of two SMA potentials [3, 4], in the context of irradiated α -zirconium. We focus on properties that are relevant for irradiation, i.e. elastic constants, point defect properties and stacking faults energies. The local screening of the potential parameters appears to be an efficient method to check the robustness of the potential, *i.e.* to identify the possible artefacts related to the roughness of the potential. After correcting for these artefacts, the most influential parameters on the computed properties are identified. In particular, one parameter affects most of the self-interstitial properties, while having a limited effect on bulk and vacancy properties. This suggests a sensitivity indices-oriented technique to refit existing potentials. Following this approach, we refine a potential for irradiation defects in α -Zr, thanks to a multi-objective optimisation package.

References

- [1] Y. Mishin. In: *Acta Mater.* 214 (2021), pp. 1–48.
- [2] J. Pirart et al. In: *Nat. Commun.* 10.1 (2019), pp. 1–7.
- [3] A. Dufresne, F. Ribeiro, and G. Tréglia. In: *J. Phys. Condens. Matter* 27.33 (2015).
- [4] F. Willaime and C. Massobrio. In: *Phys. Rev. B* 43.14 (1991), pp. 11653–11665.

Modélisation en champ complet de la précipitation dans les alliages à durcissement structural

Mathilde Eymann^{1*}, Michel Perez¹, Thomas Elguedj², Thibaut Chaise², Pierre-Antoine Geslin¹

¹MATEIS, INSA-Lyon

²LaMCos, INSA-Lyon

*mathilde.eymann@insa-lyon.fr

La précipitation d'une phase secondaire est un moyen d'augmenter considérablement la limite d'élasticité des alliages d'aluminium et de nickel, qui sont largement utilisés dans les transports. C'est pourquoi il est primordial de prédire l'état de précipitation de ces alliages et son influence sur la limite élastique, en fonction de leur histoire thermique qui peut être complexe, en particulier dans le cas de certains procédés d'élaboration comme la fabrication additive ou le soudage.

Dans ce contexte, le but de ce travail de thèse est de développer des approches numériques permettant de mieux prédire la microstructure et son influence sur la limite élastique des alliages à durcissement structural.

Ainsi, nous avons poursuivi le développement d'une approche numérique permettant de modéliser l'évolution microstructurale dans les alliages à durcissement structural tels que Al-Sc et l'Inconel 718. Il s'agit d'un modèle en champ complet, reposant sur les ingrédients suivants :

- (i) la théorie classique pour la nucléation de nouveaux précipités,
- (ii) la condition de Gibbs-Thomson imposée à l'interface de chaque précipités,
- (iii) l'intégration spatiale et temporelle de l'équation de la diffusion stationnaire,
- (iv) un bilan de masse à l'interface des précipités permettant de déduire leur vitesse de croissance.

Ce modèle permet ainsi de dépasser les limites des modèles de précipitation en champ moyen en incorporant l'évolution spatio-temporelle du champ de soluté. De plus, cette approche ne repose pas sur une description diffuse des interfaces et est ainsi numériquement plus efficace que les approches de type champs de phase, ce qui permet de simuler aisément des volumes représentatifs. La Fig. 1 représente une microstructure obtenue pour un alliage Al-0,25at %Sc revenu 84 min à 700 K et la distribution de précipités obtenue.

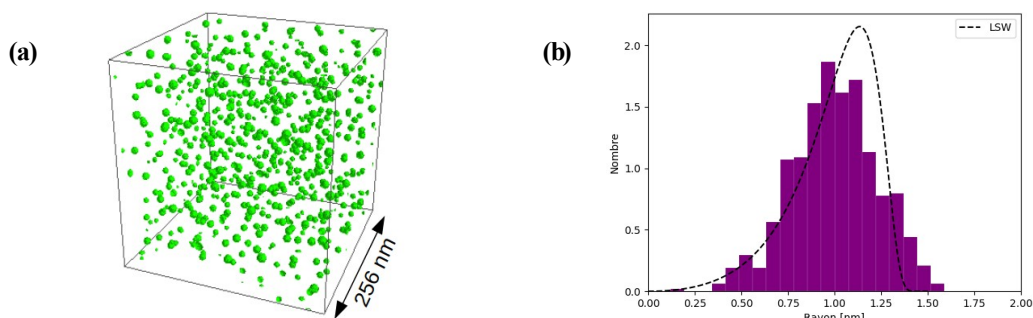


Figure 1. **(a)** Modèle en champ complet d'une microstructure d'un alliage Al-Sc après les étapes de nucléation/croissance/mûrissement des précipités. **(b)** Distribution des précipités en fonction de leur rayon, d'après le modèle en champ complet, en comparaison avec une distribution LSW.

À terme, les microstructures obtenues avec les simulations de précipitation seront utilisées dans un code de dynamique des dislocations afin de modéliser les interactions entre les dislocations et les précipités. Ce modèle nous permettra de déduire la limite élastique de l'alliage à partir d'une microstructure non idéalisée.

Impact de précipité de Nb sur le glissement des dislocations dans le Zr

Zhengxuan FAN^{1*}, Emmanuel CLOUET¹

¹ Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherches de Métallurgie Physique, Gif sur Yvette

*zhengxuan.fan@cea.fr

Les alliages de zirconium contenant du niobium sont utilisés avec succès dans les réacteurs à eau sous pression à cause de leur bon comportement mécanique et leur bonne résistance à la corrosion. Sous irradiation, des nano-précipités β -Nb de structure cubique centrée se développent dans la matrice α -Zr de structure hexagonale compacte [1]. Cette étude consiste à étudier l'impact de ces précipités de Nb sur le glissement des dislocations dans la matrice de Zr.

La forme de ces précipités de Nb ainsi que les différentes interfaces entre Nb et Zr sont étudiées dans un premier temps afin d'identifier les structures d'interface et la forme de précipité qui minimisent l'énergie de formation. Les mécanismes d'interaction entre la dislocation et le précipité sont d'abord examinés pour les dislocations coin qui glissent dans les plans prismatiques. Les dislocations sont 'épinglées' par les précipités et des segments vis sont nucléées pour aider la dislocation à se détacher du précipité. Des jogs sont observés lorsque la dislocation se détache du précipité et la dislocation change de plan de glissement entre les jogs. La présence de ces précipités durcit le matériau.

L'influence de la distance entre les précipités, de la température, de la vitesse de déformation ainsi que les interfaces cohérentes et semi-cohérentes sont étudiées. On considère aussi l'influence de l'orientation du précipité par rapport au plan de glissement prismatique. Les comparaisons des comportements plastiques sont faites en changeant ses différents critères.

[1] J. Ribis *et al.*, J. Nucl. Mater. **511**, 18 (2018)

L'indentation pour la détection des mécanismes de déformation : application aux matériaux gradés

Clémence Fontaine^{1*}, Lola Lilensten¹, Dalibor Preisler², Josef Strasky², Milos Janecek², Frédéric Prima¹

¹*Institut de Recherche de Chimie Paris, PSL University, Chimie ParisTech, CNRS, Paris, France*

²*Department of Physics of Materials, Charles University, Prague, République Tchèque*

**clemence.fontaine@chimieparistech.psl.eu*

Les matériaux à gradient chimique permettent une conception accélérée d'alliages en balayant rapidement une grande gamme de compositions. Le lien entre chimie, microstructures et propriétés, ainsi que les mécanismes de déformation, peuvent ainsi être étudiés.

Une application possible de cette approche expérimentale serait les alliages de titane TRIP (transformation induced plasticity) / TWIP (twinning induced plasticity). Ces alliages TRIP/TWIP présentent une plasticité induite par transformation de phase et une plasticité induite par maclage mécanique en plus du glissement des dislocations. Cela en fait des matériaux présentant des propriétés mécaniques inédites. Cependant, l'activation de ces mécanismes de déformation alternatifs dépendent de la composition du matériau, de sa microstructure et de sa texture, de nombreux paramètres dont l'identification reste aujourd'hui très coûteuse expérimentalement, et pour lesquels les modèles prédictifs restent limités. L'étude des couples de diffusion appliqués aux matériaux TRIP/TWIP permettrait donc d'identifier les paramètres les plus pertinents en allégeant le travail expérimental.

Cette approche est tout d'abord appliquée au système binaire modèle Ti-Nb. Ce système propose une grande diversité de propriétés mécaniques et de systèmes de déformation selon la composition, avec un diagramme de phase simple et une grande solubilité mutuelle des deux éléments (présence d'un domaine monophasé bcc à haute température sur toute la gamme de composition). La zone de composition entre Ti-18Nb (% atomique) et Ti-30Nb (% atomique) est particulièrement intéressante car les effets TRIP/TWIP ainsi que la déformation par glissement des dislocations peuvent y être retrouvés.

Le potentiel de l'indentation pour caractériser les différents mécanismes présents dans le système Ti-Nb est ici évalué. En effet, l'indentation permet d'évaluer facilement les propriétés mécaniques locales d'un matériau telles que la dureté, le module d'Young ou la limite d'élasticité, mais elle permet aussi de déclencher localement les mécanismes de déformation plastique. L'utilisation de l'indentation permettra de développer une méthode de caractérisation systématique des systèmes binaires gradés TRIP/TWIP.

Plasticité sans dislocations dans les métaux à petits grains

Romain Gautier^{1,3}, Christophe Coupeau¹, Oliver Renk², Marc Legros^{*3}

¹*Institut PPrime, Poitiers, France*

²*Eric Schmid Institute, Leoben, Autriche*

³*CEMES-CNRS, Toulouse, France*

**marc.legros@cemes.fr*

La relation de Hall-Petch décrit une augmentation de la limite d'élasticité d'un métal avec l'inverse de sa taille de grain. Ce modèle, que l'on peut expliquer à partir d'empilements de dislocations, atteint ses limites pour les grains nanométriques, en général vides de dislocations. A cette échelle, le seuil de plasticité sature ou décroît, ce qui est généralement attribué à des processus plastiques portés par les joints de grains eux-mêmes, comme la rotation, le glissement intergranulaire et/ou le couplage migration/cisaillement. Si de nombreuses observations rendent compte de ces mécanismes dans les métaux à petits grains, ceux-ci ont rarement été quantifiés expérimentalement, hormis pour les expériences de couplage du groupe d'Aachen sur les bicristaux [1]. Les résultats semblent conformes au modèle de Cahn, Mishin, Suzuki et Taylor (CMST), basé sur les dislocations de réseau et l'équation de Frank-Bilby qui permet de prévoir le facteur de couplage beta du processus migration-cisaillement, en fonction de la désorientation de joints de flexion symétriques. Ce modèle conservatif, qui prévoit que beta augmente avec la désorientation du joint, peine cependant, à expliquer les rares mesures faites sur polycristaux.

Cette étude, basée sur la microscopie électronique en transmission (MET) *in situ* et la microscopie à force atomique (AFM), couplées avec des techniques de cartographie d'orientation cristalline ACOM (Automated Crystalline Orientation Mapping) permet à la fois de suivre le mouvement des joints et, grâce à la corrélation d'image, de remonter au cisaillement qui en découle. Dans de l'aluminium à grains ultra fins (issu de déformation plastique sévère) et vides de leurs dislocations, nous avons quantifié le couplage migration cisaillement de façon statistique dans le plan d'un échantillon fin (MET *in situ*) et hors plan pour un échantillon plus massif (AFM).

Dans nos conditions d'expérience, on peut clairement montrer qu'en l'absence de dislocation intra-granulaire, le couplage-cisaillement est le principal vecteur de la déformation plastique véhiculée par les joints de grains [2]. Celle-ci est accommodée par endroit par de la rotation. Dans les trois dimensions de l'espace, ce couplage est caractérisé par un facteur beta faible, souvent plusieurs ordres de grandeur inférieurs à ceux prédits par le modèle CMST. Contrairement à ce modèle la valeur du facteur de couplage semble également indépendante de la désorientation et peut changer lors de la migration d'un même joint. Pour l'instant, seuls les modèles de couplage basés sur les disconnections peuvent expliquer ces observations, mais ceux-ci ne sont pas (encore) prédictifs. Ces résultats expliquent le faible rendement des mécanismes de plasticité par joint de grain, et donc la faible ductilité des nano-cristaux métalliques.

- [1] T Gorkaya, DA Molodov, G Gottstein. Stress-driven migration of symmetrical $\langle 100 \rangle$ tilt grain boundaries in Al bicrystals. *Acta Materialia* 2009;57:5396–405.
- [2] R Gautier, A Rajabzadeh, M Larranaga, N Combe, F Momprou, M Legros. Shear-coupled migration of grain boundaries: the key missing link in the mechanical behavior of small-grained metals. *Comptes Rendus Physique* 2021;22:1–16.

Etude du comportement mécanique de films d'or monocristallins par des figures de pôles in-situ

Pierre Godard^{1*}, Yen Fred Woguem¹, Cristian Mocuta², Anny Michel¹,

Dominique Eyidi¹, Dominique Thiaudière², Pierre-Olivier Renault¹

¹*Institut Pprime, Université de Poitiers*

²*Synchrotron SOLEIL*

**pierre.godard@univ-poitiers.fr*

Les matériaux cristallins ductiles peuvent se déformer par glissement de dislocation et/ou par maclage, et le mécanisme principal dépend des conditions de contraintes appliquées comme la température et la vitesse de déformation, mais aussi des conditions géométriques comme la taille des grains. Par exemple, il a été constaté que le maclage se produisait même dans des métaux à haute énergie de défaut d'empilement comme l'aluminium lorsqu'il est nanocristallin [1]. Dans ce travail, nous visons à quantifier par des mesures de figures de pôles in situ l'évolution des macles en fonction de la contrainte appliquée dans des monocristaux d'or.

Deux films minces d'or de 55 et 165 nm d'épaisseur ont été déposés sur un monocristal de NaCl à 400°C. Les films sont ensuite transférés sur un substrat cruciforme en polyimide pour être déformés in situ lors de mesures de diffraction des rayons X (ligne DiffAbs de la source SOLEIL). Le monocristal contient initialement une fraction volumique de macle de quelques pourcents. L'épaisseur et la taille typiques des macles, caractérisées par microscopie électronique en transmission, sont respectivement de 10 à 20 nm et de 50 à 100 nm.

Nous présenterons des résultats obtenus lors d'une déformation uniaxiale jusqu'à 4% dans la direction [110] du film monocristallin. Un effet d'épaisseur sur le comportement fragile/ductile est observé. De plus, les figures de pôles in-situ montrent non seulement un accroissement du volume de certaines familles de macles, mais aussi leur rotation autour de la direction de traction ; nous proposerons plusieurs scénarios menant à une telle désorientation cristalline, déjà observée par J. D. L. Rochelle et al [2].

[1]: M. Chen *et al*, Science 300 (2003) 1275

[2]: J. Drieu La Rochelle *et al*, Surf. Coat. Technol. 377 (2019) 124878

Ultimate mechanical properties of forsterite

Karine Gouriet^{1*}, Philippe Carrez¹, Patrick Cordier¹

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

**karine.gouriet@univ-lille.fr*

Olivine (Mg,Fe)₂SiO₄ is the main constituent of the Earth upper mantle. At high pressure and high temperature, olivine transforms into two polymorphs, wadsleyite and ringwoodite. Such phase transitions are the main cause of seismic discontinuity, at 410 and 520 km depth. When pressure is applied either at high strain rates (shock loading) or at low temperature, amorphization of olivine is observed [1,2]. Pressure induced amorphization is usually described as a kinetically preferred transformation resulting from frustration in reaching the high-pressure equilibrium crystalline state. Although its role is not quantified, deviatoric stress plays a role in addition to pressure. This transformation questions the mechanical stability of olivine under mechanical loading.

Here we propose a first investigation of the mechanical stability of iron-free olivine (forsterite) based on the characterization of ultimate mechanical properties. The ideal strengths of Mg₂SiO₄ forsterite have been calculated using first-principles calculations and the generalized gradient approximation under tensile and shear loading. The ideal tensile strengths (ITS) and ideal shear strengths (ISS) are computed by applying homogeneous strain increments along high-symmetry directions ([100], [010] and [001]) and low index shear plane ((100), (010) and (001)) of the orthorhombic lattice.

Our results show that the ultimate mechanical properties of forsterite are highly anisotropic with ITS ranging from 12.1 GPa along [010] to 29.3 GPa along [100] and ISS ranging from 5.6 GPa for simple shear deformation along (100) to 11.5 GPa for shear along (010).

[1] Finkelstein et al. (2014)

[2] Santamaria-Perez et al. (2016)

On the numerical atomistic characterization of interfacial plasticity

Julien Guénol^{1*}

¹CNRS, Université de Lorraine, Arts et Métiers, LEM3, Metz

*julien-guenole@cnrs.fr

Interfaces such as grain boundaries and phase boundaries play a crucial role in the plastic deformation of materials. While the interaction between dislocations and grain boundaries has been studied for decades in ideal cases, like for low angle grain boundary or with 2D approaches, realistic features of interfaces have been largely ignored. High angle non-symmetric grain boundaries, phase boundaries with complex intermetallic, interfaces with segregated solute, etc., are few of the parameters that can alter drastically known models and mechanisms of the plasticity at interfaces.

This poster will showcase peculiar plasticity mechanisms at interfaces as revealed by atomistic simulations based on semi-empirical potentials. From superalloy [1], to Mg-base composites [2,3], MAX phases [4] and silicon nanowires [5], this endeavor will encounter complex intermetallics, nano-twist phases and zonal dislocations.

- [1] A Prakash, J Guéno
l¹, J Wang, J Müller, E Spiecker, MJ Mills, I Povstugar, P Choi, D Raabe, E Bitzek, *Atom probe informed simulations of dislocation–precipitate interactions reveal the importance of local interface curvature*, Acta Materialia 92 (2015).- [2] J Guéno
l¹, F-Z Mouhib, L Huber, B Grabowski, S Korte-Kerzel, *Basal slip in Laves phases: The synchroshear dislocation*, Scripta Materialia 166 (2019).- [3] J Guéno
l¹, M Zubair, S Roy, Z Xie, M Lipińska-Chwałek, S Sandlöbes-Haut, S Korte-Kerzel, *Exploring the transfer of plasticity across Laves phase interface in magnesium alloy*, Materials & Design 202 (2021).- [4] J Guéno
l¹, V Taupin, M Vallet, W Yu, A Guitton, *Features of a nano-twist phase in the nanolayered Ti3AlC2 MAX phase*, Scripta Materialia 210 (2022).- [5] J Guéno
l¹, J Godet, S Brochard, *Plasticity in crystalline-amorphous core-shell Si nanowires controlled by native interface defects*, Physical Review B 87 (2013).

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

Muhammad Fakhry Hatta^a, Bouzid Kedjar^a, Ludovic Thilly^a

^aInstitut Pprime, CNRS – ENSMA – Université de Poitiers, Département Physique et Mécanique des Matériaux, 86961 Futuroscope, France

^a muhammad.fakhry.hatta@univ-poitiers.fr

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 [1-2]. Furthermore, the onset of plasticity is a multi-scale phenomenon. Therefore, the 3DiPolyPlast (3D Incipient Polycrystals Plasticity) project aims at studying these mechanisms by a multi-modal characterization (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 μm .

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 in-situ monotonously tensile 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, with additional support from DIC technique. 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. 3D-EBSD can also be applied to gain insight into the sub-surface characteristics and compare with bulk information collected from synchrotron-based techniques and simulation results.

Keywords: Strain localization, in-situ tensile testing, slip bands, incipient plasticity,

References:

- [1] Antolovich, S.D, Plastic localization in metals:origins and consequences, Progress in Materials Science, 59, 2014, 1-160.
- [2] Britton, T.B., Stress fields and geometrically necessary dislocation density distributions near the head of a blocked slip band, Acta Materialia, 60, 2012, 5773-5782

Hydrogen effects on incipient plasticity and hardness near surface in nickel for different crystal orientations using nanoindentation: Modelling approach

N. Iskounen^{1*}, C. Traisnel^{1**}, S.P. Murugan¹, M. Landeiro Dos Reis^{1***}, A. Oudriss¹, J.

Bouhattate¹, X. Feugas¹

¹La Rochelle Université, Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement, UMR CNRS 7356, Avenue Michel Crépeau, 17000 La Rochelle

*nadjib.iskounen@univ-lr.fr, **caroline.trasinell@univ-lr.fr, *** mlandeir@univ-lr.fr

When hydrogen penetrates in the material it diffuses easily and interacts with the microstructure and the defects that compose the material [1]. Hydrogen promotes the formation of vacancies, and may recombine with such vacancies to form clusters and bubbles that are potential site for crack germination. Moreover, hydrogen interacts with dislocations at short and long range, which impacts diffusivity and plasticity mechanisms. In the long term range, all such interactions could lead to the hydrogen embrittlement process [1]. In order to study these mechanisms, experimental investigations of nanoindentation have been performed on nickel single crystal with or without vacancies and with or without hydrogen (see S.P. Murugan, *et al.* present conference).

In addition to this experimental study, we perform the same kind of analysis, although based on an atomistic approach. In order to dissociate the effects due to such multiple interactions, we first study the simple system composed of point-defects and surfaces at the atomic-scale (DFT, EAM) [2, 3], the surface being the front door of hydrogen in the material (Fig. 1). The vacancy/hydrogen interaction has also been studied separately [4] to investigate the void formation. Finally, nanoindentation simulations have been performed with or without vacancies and with or without hydrogen to combine all these interactions and to be more realistic in regards of the experimental study (see S.P. Murugan, *et al.*).

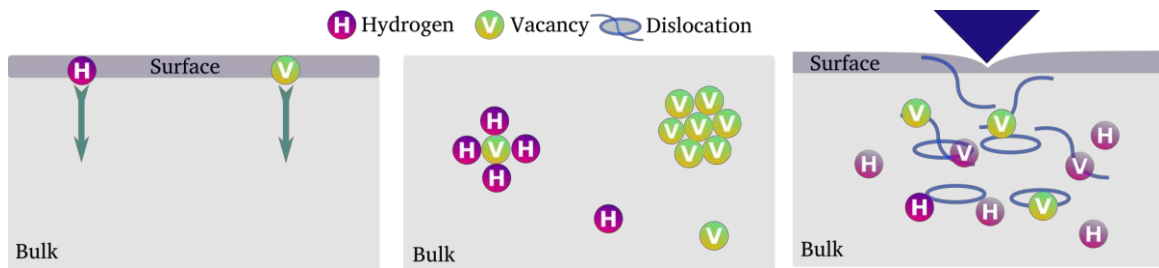


Fig. 1: Scheme of studied systems.

The confrontation of the results from these various simulations allow us to highlight the role of hydrogen on the elastic and plastic properties of nickel for several crystal orientations. The latter is complex and strongly depends on the hydrogen/vacancies ratio. In the elastic domain, a hardening effect is observed as long as the hydrogen concentration remains higher than the vacancy concentration, otherwise a softening effect prevails. In the plastic domain, hydrogen enhances plasticity processes (decrease in the pop-in force) and has mainly a hardening effect. In perspective, nanoindentation simulations at larger scale are planned, using finite element method.

[1] Y. Fukai (2006) The metal-hydrogen system: basic bulk properties.

[2] C. Traisnel *et al.*, Comput. Mater. Sci. 188 (2021) 110136.

[3] J. Angelo *et al.*, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng., 3, 289-307 (1995).

[4] A. Metsue *et al.*, Comput. Mater. Sci. 151 (2018) 144-152.

Etude multi-échelle de l'influence du traitement de surface par grenailage sur les instabilités plastiques dans un alliage AlMg

Hafsa Jaber^{1*}, Benoit Beausir¹, Tatiana Lebedkin^{1,2}, Matthieu Mazière³, Marc Novelli¹,

Mikhail Lebyodkin¹

¹Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3), CNRS, Université de Lorraine, Arts & Métiers ParisTech, 7 rue Félix Savart, 57070 Metz, France

²Center of Excellence "LabEx DAMAS", Université de Lorraine, 7 rue Félix Savart, 57070 Metz, France

³Centre des Matériaux, Mines Paristech, CNRS UMR 7633, BP 87, F-91003 Evry Cedex, France

* hafsa.jaber@univ-lorraine.fr

L'application de déformations plastiques sévères menée lors des dernières décennies a eu une importance remarquable sur l'amélioration des propriétés mécaniques et fonctionnelles des métaux et alliages, comme le traitement de surface par grenailage (SMAT–Surface Mechanical Attrition Treatment). Cette technique se trouve parmi les méthodes proposées récemment pour créer des microstructures à gradient [1]. Elle permet d'augmenter localement la densité de dislocations et peut entraîner un affinement des grains en surface, ce qui pourrait être une technique prometteuse pour produire des matériaux à haute résistance. Puisque les alliages industriels sont souvent sujets à l'instabilité plastique – l'effet Portevin - Le Chatelier (PLC) associé à des bandes de déformation qui se forment souvent dans la région de la surface [2] – l'étude de l'influence du SMAT sur l'effet PLC est d'un grand intérêt. En raison de la nature complexe de l'instabilité, qui est contrôlée par l'auto-organisation des défauts cristallins et par conséquent, implique plusieurs échelles physiques, une telle étude doit inclure diverses approches expérimentales et théoriques visant à examiner des échelles distinctes des processus de déformation.

Dans ce travail, nous présentons les résultats d'une étude multi-échelle de l'effet du SMAT sur la déformation plastique d'un alliage Al-Mg, combinant l'évaluation des propriétés mécaniques macroscopiques, de la nucléation et de la formation des bandes de déformation visualisées à l'aide de la technique de corrélation d'images numérique (digital image correlation), ainsi que de l'émission acoustique générée par les processus de déformation. L'étude expérimentale sera soutenue par des analyses statistiques adaptées de la théorie des systèmes dynamiques non linéaires [3]. Outre l'étude de l'instabilité plastique, les premiers résultats seront présentés concernant la recherche sur l'hétérogénéité accompagnant la déformation macroscopiquement uniforme, qui correspond à une échelle plus fine que celle de l'effet PLC.

[1] K. Lu, J. Lu, J. Mater. Sci. Technol. 15 (1999) 193.

[2] A. Portevin, F. Le Chatelier, C. R. Acad. Sci. 176 (1923) 507.

[3] M.A. Lebyodkin, T.A. Lebedkina, J. Brechtl, P.K. Liaw, *Serrated Flow in Alloy Systems*, in: High-Entropy Materials: Theory, Experiments, and Applications, J. Brechtl, P.K. Liaw (Eds.), Springer Nature Switzerland AG 2021.

Propriétés mécaniques de l'Inconel 718 soumis à l'oxydation par cartographies de nanoindentation

Malo Jullien^{a,b}, Damien Texier^a, Marc Legros^b

^a*Institut Clément Ader, 3 rue Caroline Aigle, Toulouse, France*

^b*CEMES, 29 rue Jeanne Marvig, Toulouse, France*

^amalo.jullien@mines-albi.fr

Les performances mécaniques et de résistance à l'oxydation/corrosion à températures intermédiaires rendent l'Inconel 718 précieux pour plusieurs applications. Ces propriétés mécaniques, sont cependant dégradées lors d'expositions longues à l'air au-dessus de 700 °C [1]–[3]. Le présent travail s'intéresse aux propriétés mécaniques locales de l'Inconel 718 oxydé à 850°C pendant 450h en utilisant des cartographies en mesure de rigidité continue (CSM).

Nous avons caractérisé les produits d'oxydation interne et externe à l'aide d'analyses EDS ainsi que l'évolution microstructurale de l'alliage métallique sur des sections transverses et des sections en biais. Ces dernières permettent d'étaler le matériau affecté par l'oxydation profonde (quelques micromètres) sur plusieurs millimètres à l'aide d'un polissage à petit angle. En plus de l'oxyde de chrome externe et de l'alumine interne attendus, des oxydes internes riches en (Nb,Ti) ont été trouvés. Des observations en microscopie électronique à transmission doivent identifier la nature chimique et cristallographique de ces précipités et des oxydes internes.

Les tests de nano-indentation sur la section en biais visent à identifier le gradient des propriétés mécaniques (dureté et module réduit) selon la profondeur du matériau. Des cartes haute résolution à différentes échelles ont été construites pour identifier à la fois le gradient des propriétés à grande échelle (Fig. 1. a) et le gradient de sous-grain inhérent à l'état métallurgique local. Dans le but de mettre en évidence l'influence de l'oxydation par diffusion interne, les propriétés des zones proches de la surface de l'oxyde ont été comparées à celles des zones de cœur.

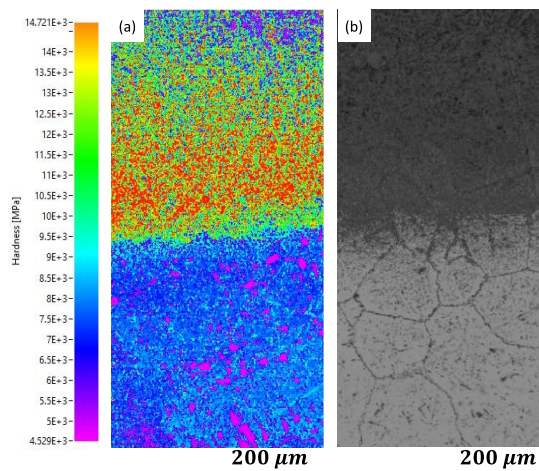


Fig.1 (a) Carte de dureté d'un échantillon d'Inconel 718 oxydé. La coupe en biais montre un gradient de composition allant de la chromine (haut) au cœur d'Inconel 718 (bas). (b) Image de la zone correspondante obtenue par microscopie confocale à balayage laser.

[1] J. P. Collier and al., Effect of varying Al, Ti and Nb content on the phase stability of Inconel 718, *Metallurgical Transactions A*, vol. 19 A, 1988, pp. 1657–1666.

[2] J. W. Brooks and P. J. Bridges, “Metallurgical Stability of Inconel Alloy 718”, *Superalloys*, 1988 pp. 33–42,

[3] G. A. Greene and C. C. Finfrock, “Oxidation of Inconel 718 in Air at High Temperatures”, *Oxidation*

Impeding strain localization upon static ageing of severely deformed AlMg-based alloys

Aleksandr Kalinenko^{1,2*}, Diana Yuzbekova¹, Anna Mogucheva¹,
Tatiana Lebedkina^{2,3}, Mikhail Lebyodkin²

¹Laboratory of Mechanical Properties of Nanoscale Materials and Superalloys, Belgorod National Research University, Pobeda 85, 308015 Belgorod, Russia

²Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3), CNRS, Université de Lorraine, Arts & Métiers ParisTech, 7 rue Félix Savart, 57070 Metz, France

³Center of Excellence "LabEx DAMAS", Université de Lorraine, 7 rue Félix Savart, 57070 Metz, France

*aleksandr.kalinenko@univ-lorraine.fr

The interaction of dislocations with solutes in alloys often causes an unstable plastic flow known as the Portevin-Le Chatelier effect (PLC), which manifests itself as repetitive localizations of plastic flow in deformation bands, also resulting in serrations on the deformation curves. It is often remarked that the strain localization is undesirable in practice as it may leave traces on the surface of the fabricated pieces. Besides, the strain localization may influence on the work hardening, material ductility, fracture conditions, and so on [1,2]. Many efforts are thus devoted to finding the conditions to reduce the heterogeneity of plastic deformation. Moreover, as the PLC effect is a striking example of collective processes in dynamical systems, represented in the deforming material by the ensemble of dislocations interacting with each other and with other crystal defects, this problem is of great interest for basic research [3].

With this purpose in view, the method of digital image correlation was applied to investigate the strain heterogeneity in several AlMg-based alloys subjected to various pretreatments influencing on their microstructure. Besides a model binary AlMg alloy, two alloys with different additions of Mn, Zr and Sc were studied. All materials were subjected to severe plastic deformation using either the method of equal channel angular pressing alone or in combination with an additional cold rolling. Some samples were then aged during two years before mechanical testing. The talk presents a comparison of both mechanical properties, as revealed by the deformation curves, and strain-heterogeneity patterns for various microstructures. Among the results obtained, one finding attracts a special attention. Namely, the first results suggest that even when the deformation curve does not seem to be strongly affected by the artificial ageing, the degree of the strain heterogeneity may change considerably, leading to a more uniform plastic flow associated with diffuse deformation bands instead of abrupt PLC bands having a clear shear character.

[1] P. Rodriguez, Serrated plastic flow, Bull. Mater. Sci. 6 (1984) 653.

[2]. D. Zhemchuzhnikova, M. Lebyodkin, D. Yuzbekova, T. Lebedkina, A. Mogucheva, R. Kaibyshev, Intern. J. Plasticity 110 (2018) 95.

[3] M.A. Lebyodkin, T.A. Lebedkina, J. Brechtel, P.K. Liaw, *Serrated Flow in Alloy Systems*, in: High-Entropy Materials: Theory, Experiments, and Applications, J. Brechtel, P.K. Liaw (Eds.), Springer Nature Switzerland AG 2021.

Grain boundaries in metals: Atomistic to continuum crossover

Houssam KHAROUJI^{*}, Julien GUÉNOLÉ, Vincent TAUPIN

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

*[*houssam.kharouji@univ-lorraine.fr](mailto:houssam.kharouji@univ-lorraine.fr)*

The polycrystalline metallic materials lie at the heart of many important engineering applications, including aerospace, automotive, aeronautic and energy industries. Their mechanical properties depend not only on the grain size, grain morphology and textures, but also more specifically on the grain boundary types and structures themselves. Therefore, a fundamental understanding of the structures of grain boundaries (GBs) is necessary to improve our understanding of their impact on the mechanical properties of polycrystalline metallic materials. In the present work, we focus first on the atomic scale features of GBs. We propose to use molecular dynamic simulations based on semi-empirical potentials, in order to obtain physical features of selected grain boundaries and interfaces of metallic alloys. In particular, various intrinsic properties will be computed, such as the optimal microscopic degrees of freedom for the GB, the GB defects content and the interfacial GB-energy. Recently, a new framework has been developed to derive a continuous representation of the defected structure and plasticity of grain boundaries from atomic-scale modeling [1,2]. The obtained interfacial atomistic configurations will thus be employed in a “bottom-up” approach to determine an accurate continuum field description of interfaces, which aims at building the foundation of a generalized discrete-to-continuum crossover for the meso-scale continuum modeling of interfacial plasticity in high performance materials.

Keywords: Polycrystalline metallic materials, Grain boundaries, Molecular dynamics, Plasticity.

References:

- [1] X.-Y. Sun, V. Taupin, C. Fressengeas, P. Cordier, *Int. J. Plast.*, 77, 2016, 75–89.
- [2] X.-Y. Sun, V. Taupin, P. Cordier, C. Fressengeas, B.B. Karki, *J. Mater. Res.*, 31, 2016, 3108–3114.

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

Mathieu Lalé^{*}, Pierre Planques, Bernard Viguier

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

^{*}Mathieu.Lale@toulouse-inp.fr

L'essai de Small Punch Test (SPT) a été développé au cours des années 1980 par l'industrie du nucléaire. Cette dernière avait besoin d'un essai permettant d'évaluer les propriétés mécaniques de pièces en service tout en travaillant avec de faibles quantités de matière pour limiter les risques liés aux irradiations. Pour cela, le punch test consiste à réaliser un essai de compression au moyen d'un poinçon sur un disque de 10 mm de diamètre et d'épaisseur 0,5 mm. Il permet d'estimer les propriétés normalement obtenues par un essai de traction uniaxiale ainsi que par un essai de fluage uniaxial (Small Punch Creep Test ou SPCT). [1]

Ce type d'essai est en parfaite adéquation avec les problématiques de la fabrication additive (FA). En effet, il permet 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.

Les résultats des essais SPT et SPCT réalisés sur du TA6V seront présentés. Les propriétés mécaniques de l'alliage obtenu par FA seront comparées à celles obtenues sur du TA6V mis en œuvre par des méthodes d'élaboration conventionnelles (forgeage et laminage).

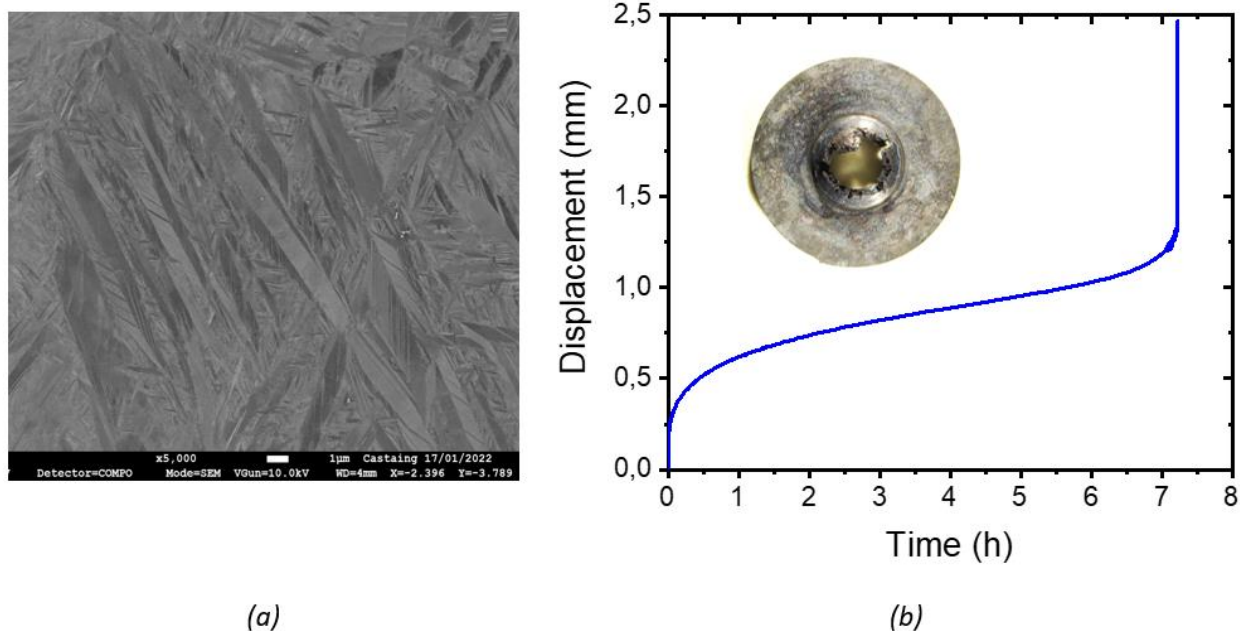


Figure 1 : Microstructure (a) et courbe SPCT (b) du TA6V mis en œuvre par LPB-F. L'essai SPCT a été réalisé à 500°C sous 850N sur un disque de diamètre 10mm et d'épaisseur 0,5 mm.

References:

- [1] M. Bruchhausen et al., « European standard on small punch testing of metallic materials », Am. Soc. Mech. Eng. Press. Vessels Pip. Div. Publ. PVP, vol. 1A-2017, 2017

Efficacité de la « pipe diffusion » dans MgO

Marie Landeiro Dos Reis^{1*}, Yvelin Giret², Philippe Carrez², Patrick Cordier^{2,3}

¹*La Rochelle Université, Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement, UMR CNRS 7356, Avenue Michel Crépeau, 17000 La Rochelle*

²*Univ. Lille, CNRS, INRAE, Centrale Lille, UMR 8207 – UMET – Unité Matériaux et Transformations, F-59000 Lille, France*

³*Institut Universitaire de France, 1 rue Descartes 75005 Paris, France*

**mlandeir@univ-lr.fr*

La diffusion des lacunes est perturbée par les défauts du matériau, qui peuvent servir de points de piégeage ou de court-circuits de diffusion (« Pipe diffusion ») [1]. Dans MgO, à basses températures, le régime pour lequel l'effet de la « pipe diffusion » est à son apogée, la diffusion est supposée être contrôlée par les lacunes anioniques moins mobiles que les lacunes cationiques [2], les premières étant majoritairement de nature intrinsèque contrairement aux secondes [3]. Or pour ces lacunes, une grande dispersion dans les données expérimentales de la diffusivité est observée ainsi qu'un changement de pente à basses températures qui semble venir de l'interaction entre les lacunes et d'autres défauts (dislocations) [3]. Pour élucider cela, nous avons étudié à l'aide de simulations numériques, l'effet d'une dislocation coin sur la diffusion des lacunes dans MgO.

Pour évaluer l'efficacité de la « pipe diffusion » dans MgO et simuler ce mécanisme nous avons adopté une approche double : Nous avons dans un premier temps étudié à l'échelle atomique tous les chemins de diffusion au voisinage du cœur de la dislocation en utilisant un potentiel de type Buckingham [4] et la méthode Nudged Elastic Band. Nous avons ensuite comparé les résultats de ces simulations à la théorie de l'élasticité anisotrope afin d'en définir le domaine de validité [5]. Dans un second temps, nous avons développé un Monte Carlo cinétique (KMC) hybride dont les barrières d'énergie proviennent soit des calculs atomistiques ou bien de l'élasticité anisotrope, dépendamment de la distance entre la lacune sous considération et le cœur de la dislocation.

A l'aide du déplacement quadratique moyen des lacunes (MSD) obtenu à différentes températures, nous avons pu déterminer les barrières d'activation liées à la « pipe diffusion ». Elles sont significativement plus faibles que les barrières de migration obtenues dans le cristal parfait avec une baisse de 10% pour la lacune cationique et de 22% pour la lacune anionique. Nous avons alors déterminé la diffusivité des lacunes anioniques en tenant compte de la densité de dislocations et estimé un effet pouvant s'élever à plusieurs ordres de grandeur. Nous avons confronté nos résultats aux expériences [6,7,8] et montré que la prise en compte des dislocations permettrait d'expliquer la disparité des résultats ainsi que la rupture de pente observée à basses températures.

[1] F. Nabarro, *Philos. Mag.* 16 (140) (1967) 231-237

[2] S. Mahmoud et al., *Phys. Rev. Materials* 5 (2021) 033609

[3] J. Van Orman et al., *Rev. Mineral. Geochem.* 72 (1) (2010) 757-825

[4] G. Henkelman et al., *Phys. Rev. B* 72 (11) (2005) 115437

[5] M. Landeiro et al., *Phys. Rev. Materials* 5 (6) (2021) 063602

[6] Y. Oishi et al., *J. Am. Ceram. Soc.* 66 (4) (1983) 60-62

[7] K. Reddy et al., J. Am. Ceram. Soc. 66 (9) (1983) 664-666

[8] H.I. Yoo et al., Solid state Ion. 150 (3-4) (2002) 207-221

Etude de populations de dislocations par tomographie électronique en transmission dans le Zr déformé puis irradié

Alexandre Mussi^{1*}, Ahmed Addad¹, Fabien Onimus², Laurent Dupuy²

¹Unité Matériaux et Transformations, Université de Lille and CNRS, UMR8207, Villeneuve d'Ascq, France

²CEA-DEN, Service de Recherches Métallurgiques Appliquées, CEA-Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

*alexandre.mussi@univ-lille.fr

Les gaines à combustible des centrales nucléaires, en Zircaloy, voient leurs propriétés mécaniques modifiées par le flux de neutrons. Les mécanismes fondamentaux de déformation plastique du Zr en conditions d'irradiation doivent être maîtrisés pour comprendre ces modifications.

Dans cette étude nous avons entrepris une caractérisation 3D des populations de dislocations d'un échantillon de Zr déformé puis irradié aux ions. Les tailles nanométriques des boucles de dislocation dues aux irradiations et la finesse des interactions boucles/dislocations nécessitent une qualité de reconstruction ultime (résolution spatiale de 1 nm).

Une première étude de tomographie montre que les dislocations présentes dans le matériau après un essai de traction à température ambiante (avant irradiation) sont proches de leurs caractères vis. Les principaux systèmes de glissement activés sont prismatiques $1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle \{1\bar{1}00\}$ avec quelques systèmes pyramidaux $1/3 \langle 11\bar{2}0 \rangle \{1\bar{1}01\}$. Une deuxième étude de tomographie montre que lors de l'irradiation, les dislocations montent par absorption des défauts ponctuels créés par l'irradiation. De plus, les dislocations interagissent avec les boucles d'irradiations. Les dislocations perdent donc la quasi-totalité de leurs configurations initiales de glissement ainsi que leurs caractères vis.

La tomographie a également permis d'effectuer une étude statistique des plans d'habitat des boucles d'irradiation.

About the implication of dislocations patterns, long/short range internal stresses, and vacancies on the hydrogen diffusion and trapping in nickel single crystal

A. Oudriss ^(*), S. P. Murugan, M. Landeiro Dos Reis, J. Bouhattate, X. Feugas ^(**)

*La Rochelle Université, Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement, UMR CNRS
7356, Avenue Michel Crépeau, 17000 La Rochelle*

*abdelali.oudriss@univ-lr.fr, **xfeugas@univ-lr.fr

Hydrogen-Plasticity interactions are one of the main keys in the mechanisms of hydrogen embrittlement. These interactions are reflected by the influence of dislocations on the processes of diffusion and trapping of hydrogen, and by the impact of hydrogen on the emission and motion of dislocations. From a macroscopic point of view, these interactions can generate hardening and/or softening phenomena, which raises questions about the influence of the distribution of dislocation structures and the involvement of the resulting heterogeneities (internal stresses at short and long distance), without forgetting the major role of vacancies.

The aim of the present work is thus to investigate the impact of dislocation density and organization, to question the implication of long-range internal stresses arises to the dislocation cell structure and about the role of vacancies produced and stabilized by hydrogen and plastic strain on the hydrogen diffusion and trapping processes in pure nickel single crystals oriented for multiple slips. A thorough analysis of dislocation densities and distribution, resulting long-range internal stresses and vacancies concentration was performed at different levels of plastic deformation to precisely characterize the different trapping sites and their impact on apparent diffusion coefficient. Both factors, which govern the hydrogen distributions, have been examined using an original analyze combining electrochemical permeation and thermal desorption mass spectroscopy. The results revealed a slowing of the hydrogen diffusion resulting from the phenomenon of trapping by dislocations at different scales. An energetic approach made it possible to associate the reversible trapping with the elastic field of dislocations, and the irreversible trapping with the core of dislocations and vacancies. Moreover, the analyses highlight an implication of the long-range internal stress in the increase of the apparent hydrogen solubility in relation with dislocation cells formation. Finally, a contribution of vacancies to hydrogen trapping is demonstrated with a competition between the formation of vacancies induced by plastic strain and hydrogen ingress.

Combiner dynamique moléculaire et calcul de structures électroniques pour déterminer les propriétés mécaniques de nanoparticules sub-nanométriques

Laurent Pizzagalli*

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

**Laurent.Pizzagalli@univ-poitiers.fr*

Grâce au développement de dispositifs expérimentaux permettant d'effectuer des tests mécaniques sur des systèmes de plus en plus petits, plusieurs phénomènes associés à la réduction des dimensions caractéristiques des matériaux ont été mis en évidence [1]. On peut mentionner par exemple l'augmentation de la résistance à la déformation plastique, ou bien encore l'apparition d'un comportement ductile pour des matériaux fragiles à des tailles supérieures. Les systèmes étudiés sont principalement de type piliers et nanofils, mais de nombreux travaux concernent également des nanoparticules, dont les plus fines font à peine quelques dizaines de nm. Il est toutefois difficile de sonder de manière contrôlée des systèmes plus petits du fait des limitations actuelles des dispositifs. En parallèle aux expériences, de nombreuses études basées sur des simulations numériques de type dynamique moléculaire ont été réalisées [2]. La limite principale de ces approches pour les très petites échelles est la description des interactions atomiques à l'aide de potentiels empiriques, peu précis pour décrire des systèmes très contraints ou avec une proportion importante de surfaces.

Dans ce contexte, j'ai récemment développé une approche combinant dynamique moléculaire *ab initio* et champ de force répulsif [3]. Ce type de champ de force permet de reproduire à moindre coût un indenteur plat, et a été souvent utilisé dans des simulations de dynamique moléculaire classique. Son utilisation avec la dynamique moléculaire *ab initio* rend possible la déformation de nanoparticules à température finie et avec la précision et la fiabilité associées à la DFT. Au cours de cet exposé, l'approche sera tout d'abord décrite ainsi que les avantages/inconvénients inhérents. Dans une seconde partie, les premières applications de la méthode à la détermination des propriétés mécaniques de différents types de systèmes carbonés (buckminsterfullerène [4], endofullerènes) seront exposées. On montrera par exemple comment ces structures peuvent surmonter des déformations élasto-plastiques sévères, ou bien encore comment la compression mécanique peut initier la dissociation d'une molécule confinée par la coquille carbone.

Enfin, des résultats très préliminaires concernant le comportement mécanique sous compression uniaxiale de nanoparticules Si et SiC de quelques nm seront présentés.

[1] O. Kraft et al., *Annu. Rev. Mater. Res.* 40 (2010) p293

[2] J. Amodeo et al., *Comptes Rendus Physique* 22 (2021) p1

[3] L. Pizzagalli, *Phys. Rev. B* 102, 094102 (2020)

[4] L. Pizzagalli, *Diamond & Related Materials* 123, 108870 (2022)

Calculs des contraintes de surface et analyse de la validité de l'équation de Young-Laplace à l'échelle nanométrique

Laurent Pizzagalli^{*}, Marie-Laure David

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

*[*Laurent.Pizzagalli@univ-poitiers.fr](mailto:Laurent.Pizzagalli@univ-poitiers.fr)*

Nous avons développé une approche permettant le calcul des énergies de surface et de contrainte pour des nanoparticules et des cavités, à partir de simulations employant des potentiels interatomiques. Nous l'avons utilisée pour étudier les variations de ces quantités en fonction de la taille de la nanoparticule/cavité, en présence ou non d'une pression, dans le cas de l'aluminium, du silicium, et du fer. Ces résultats nous ont également permis d'estimer la validité de l'équation de Young-Laplace pour des conditions similaires [1].

Nos calculs montrent tout d'abord une augmentation des énergies de surface et de contrainte en fonction de la pression pour des nanoparticules. Pour des cavités, nous observons au contraire une décroissance assez conséquente, laquelle est corrélée à l'apparition de mécanismes de relaxation plastique aux fortes pressions (Fig. 1). Par ailleurs, il est montré que l'équation de Young-Laplace ne devrait pas être utilisée pour des prédictions quantitatives lorsque la pression de Laplace est calculée en utilisant une valeur constante d'énergie de surface, comme on peut le voir très souvent dans la littérature. Cependant une amélioration significative est obtenue en utilisant une valeur d'énergie de contrainte dépendant de la taille et de la pression. Dans ce cas, l'équation de Young-Laplace peut être employée avec une précision raisonnable pour des nanoparticules jusqu'à 4 nm de diamètre, et des cavités jusqu'à 2 nm, en se restreignant toutefois à des pressions faibles. Pour des tailles plus petites, ou pour des pressions élevées, un calcul précis des énergies de contrainte est difficile et devient le facteur limitant.

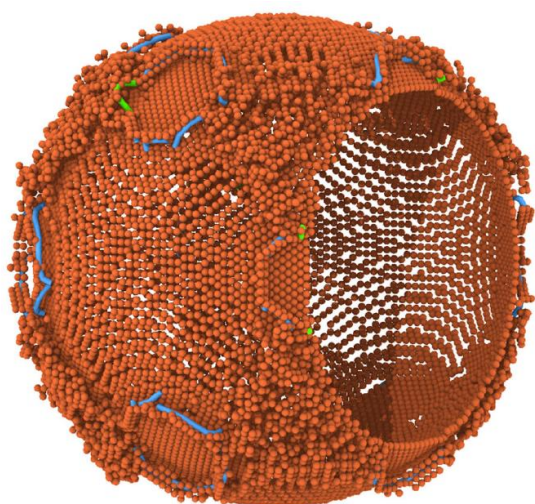


Fig 1: Structure atomique d'une cavité de 15 nm dans Fe pour une pression interne de 10.2 GPa. Seuls les atomes ayant une coordination inférieure à 8 sont affichés (une partie de la cavité est également coupée pour voir l'intérieur). Les tubes bleus et verts représentent respectivement des dislocations de vecteurs de Burgers $\langle 100 \rangle$ et $1/2\langle 111 \rangle$.

[1] L. Pizzagalli and M.-L. David, *Materials Theory* 5, 5 (2021)

Three-dimensional structural imaging of defects in Pt nanocrystals

Jérôme Carnis^{1,2}, Aseem Rajan Kshirsagar³, Longfei Wu^{1,2}, Maxime Dupraz^{2,4}, Stéphane Labat¹, Michaël Texier¹, Luc Favre¹, Lu Gao⁵, Freddy Oropeza-Falacio⁵, Ehud Almog⁶, Jean-Sébastien Micha⁷, Emiel J. M. Hensen⁵, Steven J. Leake², T. Schüllli², Eugen Rabkin⁶, Olivier Thomas¹, Roberta Poloni³, Jan-Philip Hofmann⁵ and Marie-Ingrid Richard^{2,4*}

¹ Aix Marseille Université, CNRS, Université de Toulon, IM2NP UMR 7334, 13397, Marseille, France.

² ID01/ESRF, The European Synchrotron, 71 Avenue des Martyrs, 38000 Grenoble, France.

³ SIMaP, Université Grenoble-Alpes, 38402 Saint-Martin d'Hères, France.

⁴ Univ. Grenoble Alpes, CEA Grenoble, IRIG, MEM, NRS, 17 rue des Martyrs 38000 Grenoble, France

⁵ Laboratory for Inorganic Materials and Catalysis, Department of Chemical Engineering and Chemistry, P. O. Box 513, 5600 MB Eindhoven, The Netherlands.

⁶ Department of Materials Science and Engineering, Technion-Israel Institute of Technology, 3200003, Haifa, Israel.

⁷ CRG-IF BM32 beamline at the European Synchrotron (ESRF), CS40220, 38043 Grenoble Cedex 9,

[*mrichard@esrf.fr](mailto:mrichard@esrf.fr)

At the nanoscale, the properties of materials are largely influenced by elastic strain and depend critically on the presence of crystal defects. However, imaging and characterising the structure of defects inside a crystal in three-dimensions (3D) and *in situ* during reaction remain a challenge. Here, we demonstrate the capabilities of Bragg coherent diffraction imaging to reveal in 3D the structure of defects in Platinum (Pt) nanocrystals and their associated lattice strains. Dislocations are characterised from their characteristic displacement and strain fields (see Figure 1). We also succeeded to reveal in 3D the detwinning process in a single Pt nanoparticle during *in situ* gas reaction [1]. *In situ* and non-invasive structural characterisation of defects during reaction opens new avenues for understanding defect behaviors in confined crystals and paves the way for strain and defect engineering.

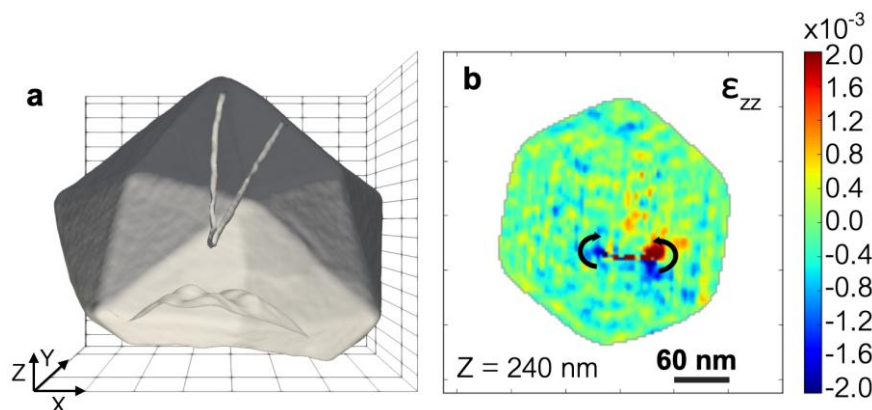


Figure 1: (a) Wireframe plots of the reconstructed electron density of a Pt particle drawn at 35% of the maximum density. A dislocation loop is evidenced. (b) Two-dimensional cut of the out-of-plane strain, ϵ_{zz} , at a particle height of 240 nm.

- [1] J. Carnis, A. R. Kshirsagar, L. Wu, M. Dupraz, S. Labat, M. Texier, L. Favre, L. Gao, F. E. Oropeza, N. Gazit, E. Almog, A. Campos, J.-S. Micha, E. J. M. Hensen, S. J. Leake, T. U. Schüllli, E. Rabkin, O. Thomas, R. Poloni, J. P. Hofmann, and M.-I. Richard, *Twin Boundary Migration in an Individual Platinum Nanocrystal during Catalytic CO Oxidation*, Nat. Commun. **12**, 5385 (2021).

Caractérisation de l'anisotropie plane sur la mise en forme des tôles minces en acier IF-Ti avec ou sans traitements thermiques

Amel Samet^{1*}, Latifa Arfaoui¹, Amna Znaïdi¹

¹*LMAI, ENIT-Tunisie.*

[*amelsamet@laposte.net](mailto:amelsamet@laposte.net), amel.samet@ipeiem.utm.tn

Dans ce travail, on étudie l'effet des changements de la direction de chargement sur le comportement plastique orthotrope d'un acier IF-Ti, laminé à froid. Notre base de données expérimentale est constituée des essais de traction effectués sur des éprouvettes (avec ou sans traitement thermique) découpées dans différentes orientations par rapport à la direction de laminage. Un modèle est proposé, dépend d'un critère de plasticité, d'une loi d'érouissage et d'une loi d'évolution, qui tient compte de l'anisotropie du matériau. Notre procédure d'identification nous permettra par la suite de faire une comparaison avec les résultats expérimentaux des essais de traction plane. Les résultats trouvés vont nous permettre par la suite de prédire le comportement de ce matériau quand il est soumis à d'autres sollicitations que ce soit simples ou composées. Le critère de plasticité proposé par Barlat a été adopté et les lois analytiques (Hollomon, Swift, Ludwik) ont été comparés le long de la procédure d'identification. La méthodologie d'identification proposée ; à partir des courbes d'érouissage de traction hors axes et des valeurs expérimentaux du coefficient de Lankford r ; a permis par la suite une bonne validation du modèle à partir des résultats expérimentaux de l'essai de traction plane. Finalement, le modèle constitutif a servi à présenter les surfaces de charge relatives à différents essais mécaniques. Pour conclure :

- D'un point de vue expérimental, le traitement thermique appliqué au matériau a permis d'améliorer ses propriétés mécaniques en termes d'allongement à la rupture et de module d'Young et a contribué à diminuer sa limite d'élasticité tout en préservant des valeurs de résistance maximale élevées. Ceci contribue à l'amélioration la ductilité et la formabilité du matériau et il est en faveur de son utilisation industrielle. En outre, les valeurs de E , R_e , R_m et $A\%$ relatives aux échantillons découpés selon la direction transversale sont légèrement supérieures à celles trouvées selon la direction de laminage. Par contre, un écart significatif a été trouvé pour le coefficient de Lankford.

- La formulation des lois de comportement accompagnée de cette stratégie d'identification s'avère très satisfaisante en termes d'identification des courbes d'érouissage et du coefficient de Lankford. Cependant, elle est moins satisfaisante pour la description de l'évolution des surfaces de charges. En effet, des améliorations du modèle peuvent être envisagées. D'un point de vue théorique, il serait intéressant de soulever l'hypothèse d'érouissage isotrope qui paraît trop grossière pour décrire le comportement plastique. Les variables d'érouissage doivent être d'avantage investiguées à partir de la réalisation des essais cycliques ou bien en adoptant des méthodologies permettant d'estimer ces propriétés à partir des propriétés monotones.

Elastic model of BCC high entropy alloys.

Bassem Sboui^{1,2*}, David Rodney², Pierre-Antoine Geslin¹

¹*Institut Lumière Matière - Université Claude Bernard Lyon 1, 69622 Villeurbanne, France*

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

*bassem.sboui@insa-lyon.fr

High entropy alloys made of refractory elements and presenting a single BCC phase conserve exceptional mechanical properties at elevated temperatures [1]. Nevertheless, their plastic behavior is not yet fully understood as a function of their composition and their interstitial content.

The objective of this work is to study dislocation-mediated plasticity in HEA with a BCC structure (e.g. Ta₂₅Nb₂₅Mo₂₅W₂₅) by means of a continuous elastic model carefully parametrized from atomistic calculations.

Based on previous contributions [2,3], we first develop an elastic model of BCC HEAs that considers each atom as an Eshelby inclusion embedded in a continuous framework. The mean-square displacement predicted by the elastic model can be compared to atomistic simulations. If a unique diagonal eigenstrain tensor (i.e. a unique misfit volume) is considered for each element, the elastic model underestimates significantly the mean square displacement. We show that the discrepancy can be corrected by considering an environment-dependent anisotropic eigenstrain tensor. The methodology to compute the atomic eigenstrain tensor will be presented. In a second step, we use this elastic framework to compute the variance and spatial correlations of shear stresses that control dislocation motion and therefore the yield stress of the alloy.

Acknowledgment: This project is funded by the “Agence nationale de la recherche” (ANR project INSPIRA)

References:

[1] Senkov, Oleg N., et al. "Development and exploration of refractory high entropy alloys—A review." *Journal of materials research* 33.19 (2018): 3092-3128.

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

[3] Geslin, Pierre-Antoine, Ali Rida, and David Rodney. "Microelasticity model of random alloys. Part II: displacement and stress correlations." *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 153 (2021): 104480.

Mesure de la déformation plastique accompagnant la fissuration fragile par l'hydrogène.

L. Stermann, A. Ollivier, A. Pereira, N. Blanchard, L. Vanel et D. Tanguy^{1,*}

¹Nom du labo Institut Lumière Matière, Université Lyon 1

*dome.tanguy@univ-lyon1.fr

La propagation de monofissures est étudiée au moyen d'une micro-platine de traction dans un alliage d'aluminium fragilisé par l'hydrogène. Ce dernier est introduit dans le système par une méthode électrochimique, en milieu aqueux. Les éprouvettes sont ensuite sollicitées en traction, à l'air. L'amorçage et la propagation des monofissures sont suivis par microscopie optique. Le champ de déplacement en surface est mesuré par corrélation d'images avec une résolution spatiale de l'ordre de 1 micron. Ceci permet de déterminer la position de la pointe de fissure ainsi que la vitesse locale de la propagation à une échelle plus faible que la taille de grains. La déformation de Von Mises, calculée à partir des déplacements mesurés, donne une image détaillée de la traînée plastique associée à la fissuration. La plasticité "primaire" se traduit par deux lobes intenses émis à proximité immédiate de la pointe de fissure. Une zone plastique "secondaire" est aussi observée sur quelques microns à l'avant de la pointe. Ses caractéristiques, ainsi que la vitesse de fissuration, le facteur d'intensité des contraintes et la nature de la rupture sont corrélés. Une grande dispersion dans la vitesse de propagation locale est observée quand elle est tracée en fonction de la déformation plastique locale (l'angle d'ouverture de la fissure). Cette dispersion est interprétée comme un effet polycristallin fort.

Pour augmenter la résolution spatiale des observations et diminuer l'effet de lissage provenant de la corrélation d'images, nous avons développé des mesures du champ de déplacement par suivi individuel de nanoparticules d'or en microscopie à balayage. La méthode et de premiers résultats obtenus sur l'acier Eurofer 97 seront présentés.

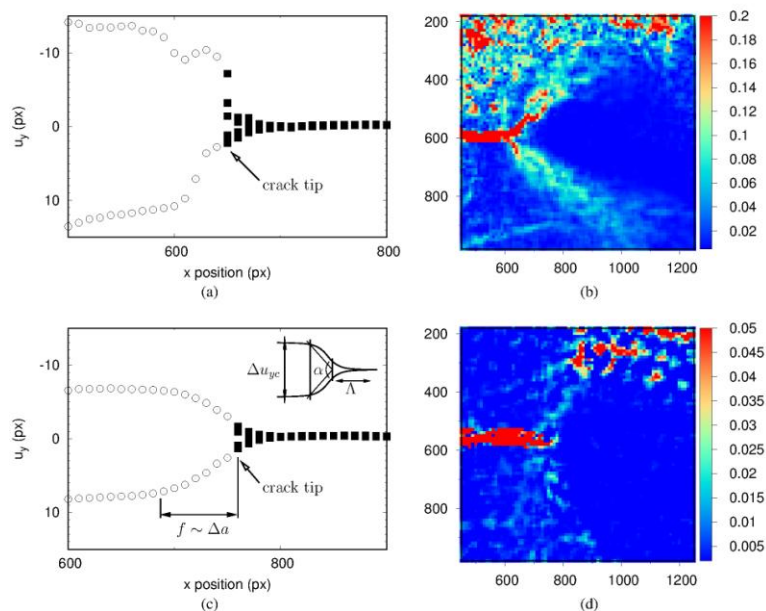


Figure : Cartes de déformation de Von Mises et profils d'ouverture de fissure pour deux niveaux de fragilisation (faible, en haut et fort en bas).

L. Stermann et al., "In situ measurement of plasticity accompanying Hydrogen induced cracking", Int. J. Fracture, (soumis) <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-03410735v1>

Application d'un modèle champ de phase pour le maclage dans Mg

Vincent Taupin^{1*}, Khan Dang², Douglas Spearot³, Mingyu Gong⁴, Laurent Capolungo²

¹LEM3, France

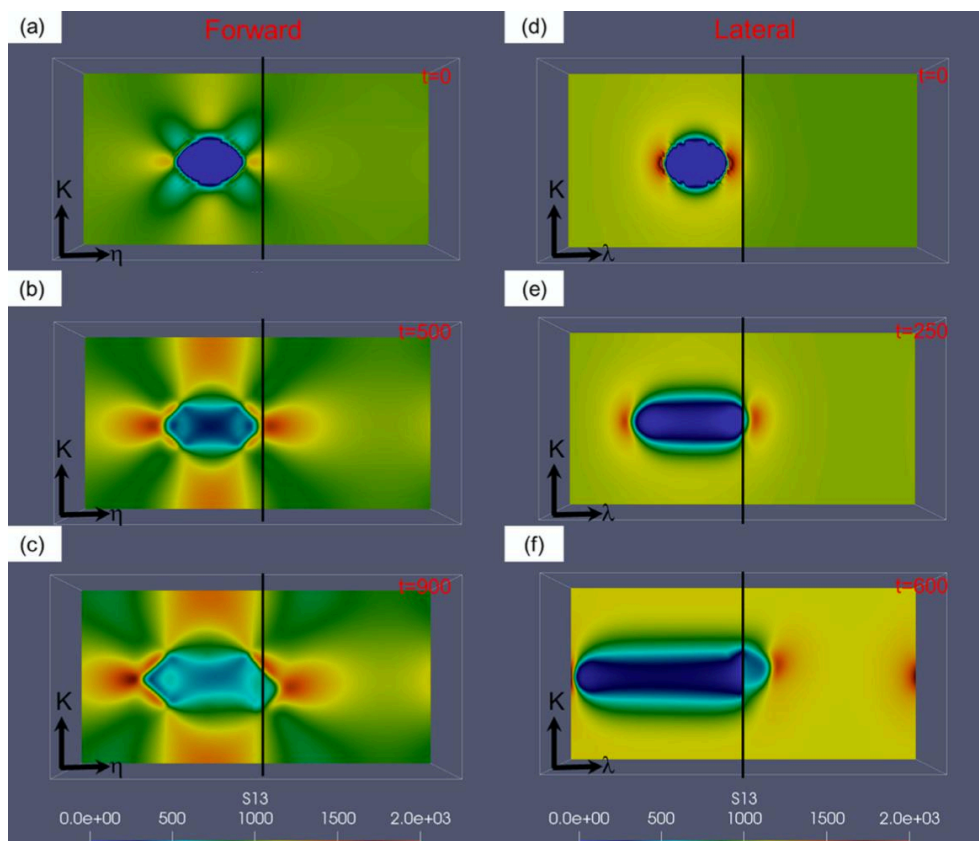
²LANL, USA

³University of Florida, USA

⁴University of Nebraska, USA

*vincent.taupin@univ-lorraine.fr

On présente ici l'application d'un modèle champ de phase récemment développé pour étudier la croissance des macles {10-12} dans Mg. Le modèle est anisotrope et introduit des énergies d'excès des interfaces de macles, ainsi que leur mobilité dépendante de la contrainte et de la température, d'après des valeurs issues de simulations par dynamique moléculaire. En comparaison avec soit des simulations de dynamique moléculaire, soit des données EBSD, on utilise le modèle pour étudier la croissance de macles sous contrainte et en température, puis la transmission de macles au travers de différents types de joints de grains.



Évolution du champ de contrainte de cisaillement projetée lors de la non-transmission (colonne de gauche) et de la transmission (colonne de droite) d'une macle au travers d'un joint de grain.

Stability of vacancy and interstitial dislocation loops in α -zirconium: atomistic calculations and continuum modelling

Céline Varvenne^{1*}, Cong Dai², Peyman Saidi², Zhongwen Yao², Mark R. Daymond² and Laurent Beland³

¹*CINaM, UMR 7325, Aix-Marseille Université, CNRS, Marseille, F13288, France*

²*Canadian Nuclear Laboratories, Chalk River, ON K0J 1J0, Canada*

³*Department of Mechanical and Materials Engineering, Queen's University, Kingston, ON K7L3N6, Canada*

*varvenne@cinam.univ-mrs.fr

We combine atomistic calculations and continuum laws to model irradiation-induced vacancy and interstitial dislocation loops in α -zirconium. A comprehensive set of Burgers vectors/stacking sequences in the prismatic and basal planes, of sizes accessible to experiments, are studied by Molecular Statics (MS) simulations. Their formation energies and structural details are determined using two different interatomic potentials for α -Zr, considering dislocation loops in hexagonal and circular shapes. Molecular Dynamics annealing of dislocation loops then validates the envisioned potential energy landscape. Finally, the continuum modelling hybridly calibrated on MS results and *ab initio* data indicate that the coexistence of vacancy and interstitial <a> loops is supported by stability arguments. We also establish the limitations of such an approach for quantitative predictions.

[1] C. Dai, C. Varvenne, P. Saidi et al., J. Nucl. Mater. 554 (2021), 153059

Influence de la rhéologie de la surface des aciers sur l'endommagement des revêtements métalliques

Ahmed Zouari, Samuel Forest

¹*Mines ParisTech –PSL Research University, UMR CNRS 7633, Centre des Matériaux, 91003 Evry, France*

**ahmed.zouari@mines-paristech.fr*

Les revêtements métalliques en alliage de zinc sont largement utilisés dans l'industriel automobile grâce à leurs bonnes performances à protéger les tôles en acier contre la corrosion. Cependant, le comportement mécanique de ces revêtements est souvent étudié sans tenir compte de l'effet des chargements appliqués par le substrat en acier. Dans cette étude, nous nous concentrons sur l'effet de la rhéologie de la surface du substrat sur les modes de déformation et sur le comportement de fissuration dans un alliage de zinc Zn-1.2Al-1.2Mg développé par Arcelor Mittal. Ce revêtement est composé des dendrites de zinc séparées par des phases minces remplissant l'espace entre les dendrites et leurs bras qui sont les phases intermétalliques et eutectiques. Un acier dur (MS1500 acier martensite), un acier doux (ferritique type IF) et un acier biphasé (DP600) sont utilisés comme substrat. Des simulations numériques par éléments finis avec un modèle de plasticité cristalline en grande transformation sont utilisées pour comprendre le comportement des revêtements en fonction des chargements appliqués par les différents aciers. Pour tenir compte de la morphologie des surfaces des aciers en contact avec le revêtement, la rugosité de la surface ainsi que la taille et l'orientation des grains de la surface du substrat seront utilisées comme des paramètres dans les calculs. Les résultats de simulations seront par la suite comparés aux observations expérimentales avec des essais in-situ à l'échelle macroscopique et mesoscopique.

Liste des Participants

Adogou Benedicte
Allera Arnaud
Amodeo Jonathan
Auger Thierry
Azihari Rachma
Barbot Armand
Bello Nicolas
Bequet Théo
Bienvenu Baptiste
Bitzek Erik
Borde Marion
Boulaire Louis
Brochard Sandrine
Caillard Daniel
Carrez Philippe
Castany Philippe
Clément Antoine
Clouet Emmanuel
Conforto Egle
Cordier Patrick
Cormier Jonathan
Couret Alain
Couzinié Jean-Philippe
Da Fonseca Daphné
Daramola Ayobami
Del Mastro Alessandra
Delbecq Valentin
Douin Joël
Durand Lise
Eon Luis
Eymann Mathilde
Ezequiel Marco
Fan Zhengxuan
Feaugas Xavier
Fevre Mathieu
Finel Alphonse
Fivel Marc
Fontaine Clémence
Furstoss Jean
Galy Benjamin
Gatti Riccardo
Geslin Pierre-Antoine
Godard Pierre
Godet Julien
Gonzalez Joa Javier Antonio
Gouriet Karine
Grigorev Petr
Guénolé Julien
Guitton Antoine

Hantcherli Muriel
Hatta Muhammad Fakhry
Iteney Hugo
Jaber Hafsa
Joste Baptiste
Jullien Malo
Kalinenko Aleksandr
Karanja Liz
Kharouji Houssam
Lalé Mathieu
Landeiro Dos Reis Marie
Lartigue-Korinek Sylvie
Legros Marc
Lilensten Lola
Madec Ronan
Majoul AYDA
Mansoz Benoît
Massé Gwénaël
Molénat Guy
Mompiou Frédéric
Monchoux Jean-Philippe
Murugan Siva Prasad
Mussi Alexandre
Nadjib Iskounen
Oliveros Daniela
Ollivier Antoine
Onimus Fabien
Pellegrini Yves-Patrick
Perrais Maxime
Pettinari-Sturmel Florence
Pizzagalli Laurent
Poquillon Dominique
Ramos Sofien
Richard Marie-Ingrid
Sboui Bassem
Schaal Hugo
Swinburne Thomas
Tafani Clémence
Tanguy Dome
Taupin Vincent
Texier Damien
Thenot Camille
Varvenne Céline
Veron Muriel
Viguiet Bernard
Woguem Yen Fred
Yehya Sarah
Zouari Ahmed