

# Colloque Plasticité 6 et 7 avril 2021

Programme  
Recueil des résumés

# Programme – Plasticité 2021

## Mardi 6 avril

14:00-14:10 - *Ouverture du colloque*

14:10-14:25 - *Présentations courtes - 3 minutes*

### Daphné Da Fonseca

Simulation et observation de l'influence d'une contrainte sur l'absorption des défauts ponctuels par les dislocations

### Sarah Yehya

In-situ Coherent X-ray Diffraction Imaging of metallic nanoparticles during nano-indentation

### Valentin Delbecq

Etude numérique des propriétés mécaniques des verres  $Mg_2SiO_4$

14:25-14:40 - **Leonel Stermann**

Quantifying plasticity occurring during internal hydrogen assisted cracking with a micro-tensile experiment

14:40-14:55 - **Camille Thenot**

Fragilisation à hautes températures de l'alliage TiAl

14:55-15:10 - **Antoine Clement**

Potentiel EAM pour la plasticité et la rupture des laitons alpha

15:10-15:25 - **Marco Ezequiel**

Fragilisation par métal liquide du cuivre et de laitons alpha en contact avec l'eutectique Ga-In

15:25-15:40 - **Rachma Azihari**

Approche micromécanique de la corrosion sous contraintes intergranulaire des aciers austénitiques inoxydables irradiés

15:40-15:55 - **Nargisse Khiara**

Comportement en fluage d'irradiation du cuivre pur et du cuivre préimplanté à l'hélium

---

15:55-16:25 *Pause - 30 min*

---

16:25-16:40 - **Matheus Brozovic Gariglio**

Stored energy distribution in  $\alpha$  and  $\beta$  phases of hot-deformed titanium alloy microstructures

16:40-16:55 - **Tiphaine Giroud**

Impact de la structure bêta sur les propriétés mécaniques de l'alliage bêta-métastable Ti-10V.2Fe.3Al

16:55-17:10 - **Silvia Lopez Castano**

Impact de l'hétérogénéité microstructurale sur les propriétés en traction du Ti-6Al-4V obtenu par déposition directe de fil

17:10-17:25 - **Clément Ribart**

In situ multimodal experimental testing and simulations in volume for statistical analysis of crystal plasticity

17:25-17:40 - **Ali Rida**

Continuous modeling of dislocations in random fcc alloys

17:40-17:55 - **Adrien Berger**

Mesures quantitatives de champs cinématiques à l'échelle de la microstructure d'un polycristal métallique et analyse des hétérogénéités et localisations de déformation plastique

---

## Mercredi 7 avril

8:30-8:45 - **Marie Landeiro Dos Reis**

Interaction entre les lacunes chargées et une dislocation coin dans MgO

8:45-9:00 - **Baptiste Bienvenu**

Etude ab-initio des dislocations vis dans le chrome

9:00-9:15 - **Arnaud Allera**

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

9:15-9:30 - **Guillaume Hachet**

Etude ab initio de l'interaction entre dislocation vis et carbone dans le tungstène et effets du soluté sur la mobilité de la dislocation

9:30-9:45 - **Benjamin Galy**

Influence du tungstène sur les propriétés mécaniques d'un alliage gamma TiAl

9:45-10:00 - **Dimitri Chauraud**

Atomistic Simulations of Dislocation Processes in Laves Phases

10:00-10:15 - **Loïc Van Hoorde**

Etude par simulation atomistique de la nucléation d'une macle depuis une interface dans un système Ag/Cu nanolamellaire.

---

10:15-10:45 *Pause - 30 min*

---

10:45-11:00 - **Marion Borde**

Mobilité des dislocations dans UO<sub>2</sub> par dynamique moléculaire

11:00-11:15 - **Gaetan Laurens**

Ceria nanocubes under compression : a modelisation study

11:15-11:30 - **Alla Ndiaye Dieng**

Comportement mécanique de nanoparticules isolées : impact du modèle de champ de force utilisé pour la compression

11:30-11:45 - **Javier Gonzalez**

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

11:45-12:00 - **Raphaël Langlois**

Estimation non-paramétrique de champ de contraintes pour la caractérisation de comportement mécanique

12:00-12:15 - **Lucas Lapostolle**

Propagation of stress waves induced by laser shock in elastic-plastic 1D layered materials

---

12:15-14:00 *Pause repas*

---

14:00-14:15 - **Clémence Tafani**

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

14:15-14:30 - **Frédéric Habiyaemye**

Plasticity induced by nanoindentation in a CrCoNi medium-entropy alloy studied by accurate electron channeling contrast imaging revealing dislocation-low angle grain boundary interactions

14:30-14:45 - **Layal Chamma**

Caractérisation par nanoindentation des effets de longueurs internes microstructurales dans les aciers IF (Interstitial Free)

14:45-15:00- **Florent Mignerot**

Plasticité de micro-piliers de semiconducteurs (InSb, Si et GaN) : effet de taille et transition fragile-ductile

15:00-15:15 - **Romain Gautier**

Grain Boundary Plastic Mechanisms on Nanostructured Metals

15:15-15:30 - **Maxime Dupraz**

Three-dimensional structural imaging of defects in Pt nanocrystals

15:30-15:40 - *Clôture du colloque*

# Simulation et observation de l'influence d'une contrainte sur l'absorption des défauts ponctuels par les dislocations

Daphné Da Fonseca<sup>1,2,3\*</sup>, Thomas Jourdan<sup>1</sup>, Fabien Onimus<sup>2</sup>, Frédéric Momprou<sup>3</sup>

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

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

<sup>3</sup>Centre 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

Il est connu que le fluage est accéléré sous irradiation, en grande partie à cause de la sursaturation de défauts ponctuels (lacunes, atomes auto-interstitiels). Ce phénomène peut être problématique dans certaines situations et nécessite donc d'être compris pour être prédit de manière quantitative.

Il existe plusieurs modèles pour expliquer le fluage d'irradiation. Les modèles les plus courants reposent de manière directe ou indirecte sur une dépendance de la vitesse de montée des dislocations vis-à-vis de leur orientation par rapport à la contrainte appliquée. Cette absorption préférentielle des défauts ponctuels (SIPA, pour *stress-induced preferred absorption*), a reçu plusieurs explications, selon les propriétés élastiques des défauts ponctuels mises en jeu<sup>1,2</sup>. Cependant, le rôle précis de ces propriétés élastiques sur le fluage n'a pas encore été quantifié.

L'objectif de cette étude vise à mieux comprendre les mécanismes de fluage d'irradiation. Pour cela, nous étudions l'influence d'une contrainte modérée sur la cinétique de croissance de boucles d'irradiation, à la fois d'un point de vue théorique et expérimental. Afin de simplifier la comparaison entre les simulations et les expériences, le choix du matériau s'est porté sur l'aluminium pur.

Les propriétés élastiques des défauts ponctuels ont été déterminées par des calculs de structure électronique. Elles ont été utilisées dans un code de simulation Monte Carlo cinétique sur objets (OKMC), qui modélise la diffusion des défauts ponctuels dans le champ de contrainte local. Les premières simulations de cette étude ont confirmé la dépendance du taux d'absorption des défauts par un dipôle de dislocations vis-à-vis de l'orientation de la contrainte et ont permis de déterminer le rôle des propriétés élastiques des défauts ponctuels.

Les observations expérimentales ont été réalisées dans un microscope électronique à transmission (MET). Nous avons été capables de créer des boucles d'irradiation sous le faisceau d'électrons et d'observer leur croissance in situ. De plus, une première caractérisation des boucles a été réalisée. Elle montre que la quasi-totalité d'entre elles sont des boucles de Frank de nature interstitielle. Ces premiers résultats ouvrent la voie vers des observations in-situ de la croissance de ces boucles sous contrainte.

1. P. T. Heald and M.V. Speight, Philos. Mag. 29:5, 1075 (1974)

2. C.H. Woo, J. Nucl. Mater. 120, 55 (1984)

# In-situ Coherent X-ray Diffraction Imaging of metallic nanoparticles during nano-indentation

Sarah Yehya<sup>1,2,3\*</sup>, Thomas Cornelius<sup>1</sup>, Marie-Ingrid Richard<sup>2</sup>, Felisa Berenguer<sup>3</sup>, Eugen Rabkin<sup>4</sup>, Olivier Thomas<sup>1</sup>, Stéphane Labat<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Aix Marseille Univ., Université de Toulon, CNRS, IM2NP, Marseille, France

<sup>2</sup>Laboratory CEA Grenoble IRIG/MEM/NRS, 17 rue des Martyrs, FR-38054 Grenoble, France

<sup>3</sup>Synchrotron SOLEIL - L'Orme des Merisiers, Saint-Aubin, BP 48 FR - 91192 Gif-sur-Yvette, France

<sup>4</sup>Departement of Materials Science and Engineering, Technion - Israel Institute of Technology, 3200003 Haifa, Israel

[\\*sarah.yehya@im2np.fr](mailto:*sarah.yehya@im2np.fr)

Defects in nanocrystals have a critical influence on the material properties, where a single defect can completely modify the physical and chemical behavior. Moreover, due to the proximity of surfaces, the energy and mobility of defects in nano-objects are borne to be very different from what they are in the bulk. The understanding of defect behavior in nanocrystals is thus of major importance.

For that reason, we recently performed an experiment on isolated Platinum nanocrystals at the European Synchrotron Radiation Facility (ESRF) in Grenoble. These isolated Pt nanocrystals that have a size of some hundred nanometers were grown by solid state dewetting of a 30-nm Pt thin film at 930°C for 24 hours on a Sapphire substrate. This technique allows to obtain defect-free nanocrystals of Winterbottom shape. The experiment combines *in-situ* mechanical testing using a custom-built atomic force microscope “SFINX” [1] with Bragg coherent X-ray Diffraction Imaging (BCDI) (Figure 1.a). Over the past 2 decades, BCDI has become the most effective technique for imaging the 3D structure of individual crystals at the nanometer scale with an unmatched sensitivity to displacement fields. It appears, nowadays a revolutionary tool to image defects and strain fields in 3 dimensions. As seen in Figure 1.a, the coherent diffraction pattern is recorded during indentation and is inverted using PyNX code [2] unveiling the shape of the Pt crystal and the displacement field (cf. Figure 1.b). The reconstructed objects evidence that defects were induced during indentation (cf. Figure 1c and 1.d).

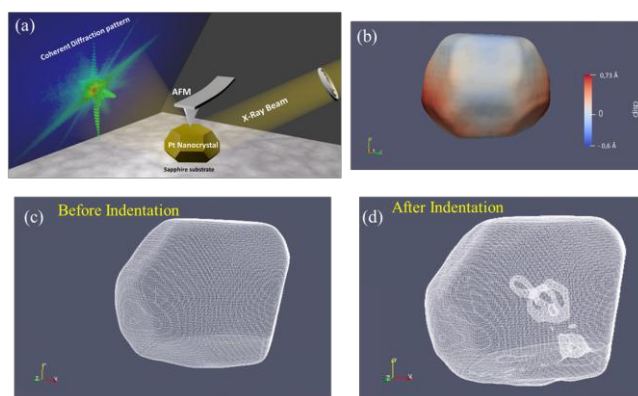


Figure 1: (a) Schematic of the experiment adapted from Ref. [3]. (b) Reconstructed shape of a 400 nm Pt nanocrystal in 3D colored with out-of-plane displacement field. (c) See-through of the 400 nm Pt nanocrystal in 3D before indentation evidencing no defects. (d) See-through of the 400 nm Pt nanocrystal after indentation with induced defects inside.

References : [1] Z. Ren et al., J. Synchrotron Radiat. 21 (2014) 1128 ; [2] V. Favre-Nicolin et al., J. Applied Crystallography 44 (2011) 635 ; [3] M. Dupraz et al., Nano Lett. 17 (2017) 6696.

# Étude numérique des propriétés mécaniques des verres $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$

Valentin Delbecq<sup>1\*</sup>, Philippe Carrez<sup>1</sup>, Patrick Cordier<sup>1,2</sup>, Jean-François Paul<sup>3</sup>, Silvio Pipolo<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup>Institut Universitaire de France

<sup>3</sup>UCCS, Univ. Lille, F-59000 Lille, France

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

L'olivine  $(\text{Mg, Fe})_2\text{SiO}_4$  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. L'étude de la rhéologie de l'olivine amorphe apparaît donc déterminante pour comprendre ce type de glissement. Cependant l'olivine amorphe est difficile à obtenir par trempe du liquide et n'existe pas de manière naturelle. On peut seulement la fabriquer par compression en cellule à enclumes de diamant, par chocs, ou sous forme de films minces déposés par pulvérisation laser. Pour cette étude, nous allons étudier par dynamique moléculaire les propriétés mécaniques du verre  $\text{Mg}_2\text{SiO}_4$  (qui est le pole pur magnésien de l'olivine). Une telle méthode permet de s'affranchir des difficultés expérimentales de création des verres. Les différents tests mécaniques réalisés dans cette étude ont permis entre autres de déterminer le module de Young et le module de cisaillement. De plus l'évolution des courbes contrainte-déformation des tests montrent des sauts de contrainte témoignant de la nature viscoplastique du verre.

# Quantifying plasticity occurring during internal hydrogen assisted cracking with a micro-tensile experiment

Leonel Stermann<sup>1\*</sup>, Loïc Vanel<sup>1</sup>, Dôme Tanguy<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université de Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, Institut Lumière Matière, F-69622, VILLEURBANNE, France

*\*[leonel.stermann@etu.univ-lyon1.fr](mailto:leonel.stermann@etu.univ-lyon1.fr)*

Hydrogen embrittlement is a concern in structural metallic alloys in many industries and potentially in the deployment of the "hydrogen technology" where H<sub>2</sub> is the mean to store electric energy. Despite decades of effort in research, the phenomenon is still not completely understood. Microstructure scale study of the phenomena is a crucial element to elucidate the role of plasticity in the fracture process. Our strategy consists in reducing the system's size by using a micro tensile machine to observe crack propagation at sub-grain scale under a microscope. Hydrogen embrittlement is studied in an AlZnMg industrial alloy (7108 in T4 state). Notched micro-tensile samples are machined along the short transverse direction of a rolled plate offering mostly grain boundaries perpendicular to the tensile axis. The sample is electrochemically charged with hydrogen for different charging times and cathodic potentials before being fractured in air. Crack propagation is followed on the surface with an optical microscope at a high magnification of x 2000, giving access to fracture and plastic mechanisms at a sub-grain size scale. Digital Image Correlation (DIC) is used to measure the surface displacement and strain field and identify the crack tip position with a 1-micron resolution. Two different kinds of plastic deformation were observed accompanying the crack propagation. The first kind has the shape of two inclined deformation bands emitted from the crack tip and spreads over 100 μm. The second one is an intense deformation just ahead of the crack tip with only a few microns extension. Crack propagation velocities are measured, and applied Stress Intensity Factor (SIF) values are calculated. The accompanying plasticity is quantified by integration of the equivalent strain field. Also, incremental crack opening displacement profiles are obtained from the DIC measurements to identify and quantify plasticity near the crack tip region. Scanning Electron Microscope (SEM) observations of the fracture surface are used to correlate fracture morphology (e.g., intergranular, transgranular), crack speed, and plasticity.



# TiAl embrittlement at high temperatures

Camille Thenot<sup>1\*</sup>, Damien Connétable<sup>2</sup>, Pierre Sallot<sup>3</sup>, Jean-Philippe Monchoux<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*CEMES CNRS UPR 8011, Université de Toulouse, 29 Rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse, France.*

<sup>2</sup>*CIRIMAT CNRS UMR 5085, INP UPS, ENSIACET, allée Emile Monso, 31030 Toulouse, France.*

<sup>3</sup>*Safran Tech, Rue des Jeunes Bois, Châteaufort, 78114 Magny-Les-Hameaux, France.*

*[\\*camille.thenot@cemes.fr](mailto:camille.thenot@cemes.fr)*

Titanium-Aluminum alloys (TiAl) are very interesting for applications in turbomachines because of their low density (3,8 - 4,2 g.cm<sup>-3</sup>) and of their high mechanical strength at high temperatures. However, when exposing TiAl alloys to high temperatures, a catastrophic loss of ductility is observed. Here, we study the role of oxygen in this phenomenon. For this purpose, we investigate the nature of the TiAl-oxygen solid solution (diluted O atoms, or forming clusters), we determine the oxygen diffusion mechanisms and study the interactions between the dislocations and the oxygen atoms. The nature of the solute solution and the diffusion mechanisms have been investigated theoretically using atomistic calculations (DFT), and the dislocation-oxygen interactions have been studied experimentally by characterizations at the microscopic scale (TEM).

In the experimental part, tensile test on Ti<sub>48</sub>Al<sub>48</sub>W<sub>2</sub>B<sub>0.08</sub> alloys have been carried out on samples exposed in air at 800°C for 500h, to characterize the embrittlement phenomenon. It was shown that the embrittlement comes from oxygen penetration in a surface layer 10 μm to 100 μm thick. Then, to evaluate the influence of oxygen on the bulk mechanical properties, tensile tests on alloys with low and high oxygen concentrations have been performed. Results showed that the alloy with high bulk oxygen concentration has a lower ductility than the alloy with lower oxygen content, as classically observed in TiAl alloys. TEM observations showed the presence of pinning points on the dislocations, which may have an impact on the alloy ductility. Based on these results, our hypothesis is that TiAl embrittlement at high temperature occurs by a loss of ductility of the superficial diffusion layer.

In the numerical part, DFT simulations were used to study the interactions between clusters of one to 6 oxygen atoms with lattice defects such as vacancies and antisites at the atomic scale. We identified which type of complex defect (defect + oxygen cluster) would be the most probable and in which concentration, depending on the temperature.

# Potentiel EAM pour la plasticité et la rupture des laitons alpha

Antoine CLEMENT<sup>1\*</sup>, Thierry AUGER<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Arts et Métiers Institute of Technology, CNRS, Cnam, HESAM Université, 151 boulevard de l'Hôpital, 75013 Paris, France

\*[antoine.clement@ensam.eu](mailto:antoine.clement@ensam.eu)

Un potentiel EAM (Embedded Atom Method) a été développé pour les alliages de cuivre et zinc en phase alpha (cubique à faces centrées), dans le but d'étudier des problèmes de plasticité et de rupture pour un alliage en solution solide. Une application potentielle pourrait être notamment le traitement de la rupture environnementale (corrosion sous contrainte, fragilisation par les métaux liquides). Pour calibrer le potentiel, des calculs de diverses propriétés physiques (Constantes élastiques, paramètre de maille, énergie cohésive, ...) ont été calculées en DFT-GGA pour le cuivre, le zinc (en cfc) et le Cu<sub>3</sub>Zn (en D0<sub>23</sub>). L'objectif étant d'étudier le comportement des laitons alpha (cfc), le zinc a été modélisé en cfc, ce qui permet d'avoir une validité du potentiel pour une concentration dans la gamme 0-40% de zinc en solution. L'approche EAM utilisé [1] permet de traiter des différents types d'atomes de la solution solide avec une même distance de coupure. Des résultats préliminaires vont être présentés. En effet, le potentiel développé rend bien compte de l'anisotropie et de différents défauts (ponctuels, dislocations, joints de grains). De plus, le spectre de phonon est bien retranscrit, ce qui permet de modéliser les laitons alpha en faisant varier les températures. La plasticité des laitons est abordée au travers des énergies de faute d'empilement et du durcissement en solution solide (voir figures 1 et 2). La décroissance des énergies de faute d'empilement lors de l'augmentation de la concentration en zinc est correctement prédite par le potentiel. Pour le durcissement en solution solide, les données préliminaires montrent un comportement suivant une loi de Friedel (proportionnel à la racine carrée de la concentration), ce qui est comparable avec l'expérience. L'ensemble des résultats sera comparé à des valeurs expérimentales.

Par la suite, ce potentiel sera utilisé pour étudier la transition fragile-ductile dans les laitons alpha induite par un environnement chimique agressif.

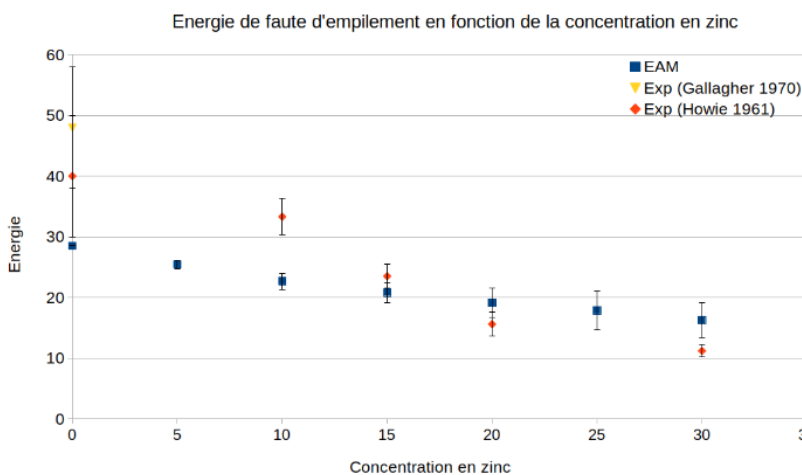


Figure 1 : Energie de faute d'empilement en fonction de la concentration en zinc

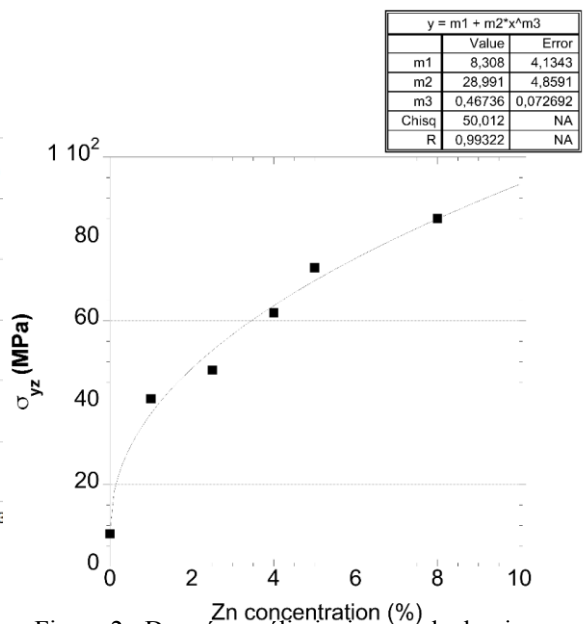


Figure 2 : Données préliminaires sur le durcissement en solution solide pour les laitons alpha

[1] X.W. Zhou, H.N.G. Wadley, R.A. Johnson et al in *Acta Mater.* 49 (2001)

# Fragilisation par métal liquide du cuivre et de laitons alpha en contact avec l'eutectique Ga-In

Marco Ezequiel<sup>1\*</sup>, Ingrid Proriol Serre<sup>1</sup>, Eva Héripré<sup>2</sup>, Thierry Auger<sup>3</sup>, Zehoua Hadjem-Hamouche<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup>MSSMat, CentraleSupélec, CNRS, Université Paris-Saclay, Gif-sur-Yvette, 91190, France

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

\*[marco-alejandro.ezequiel-alvarado@univ-lille.fr](mailto:marco-alejandro.ezequiel-alvarado@univ-lille.fr)

Lors de la fragilisation par les métaux liquides (FML), un métal ou un alliage solide subit une perte de ductilité lorsqu'il est soumis à une déformation plastique en contact avec un métal liquide. Ce phénomène dépend fortement de la composition chimique des métaux impliqués, et donc une modification des éléments d'alliage du métal solide peut empêcher ou favoriser l'apparition de la FML. De plus, les conditions de sollicitation mécanique, le mouillage du métal solide par le métal liquide et les caractéristiques mécaniques et métallurgiques du métal ou de l'alliage métallique solide jouent également un rôle important sur la FML. La FML du cuivre et des laitons Cu-15 %Zn et Cu-30 %Zn par le métal liquide Ga-In eutectique (eGaIn) est étudiée afin de mieux comprendre les phénomènes mis en jeu et notamment l'influence de la déformation plastique.

Un contact intime étant nécessaire pour que la FML se produise, des tests d'angle de contact ont été effectués sur les trois matériaux considérés afin de mesurer la capacité de mouillage de l'eGaIn sur chacun d'entre eux. Ensuite, des essais de flexion 3 points sur éprouvettes entaillées ont été réalisés à l'air et en présence de l'eGaIn à différentes vitesses de déplacement. Les faciès de rupture et la fissuration des échantillons testés ont été observés par microscopie électronique à balayage (MEB). Une simulation numérique par éléments finis de l'essai a été développée pour interpréter les résultats notamment en terme de concentration de contrainte et de déformation.

Les essais de flexion ont montré qu'il n'y a eu aucun effet de l'eGaIn sur le comportement mécanique du cuivre pur et du laiton à 15% de Zn. Cependant, sur le laiton à 30% de Zn, une fragilisation est observée lorsque l'échantillon est testé en contact avec l'eGaIn. Dans ce cas, le faciès de rupture est tout d'abord ductile sur une faible zone, puis fragile. Ces résultats sont concordants avec ceux des mesures de mouillage car, en effet, il a été observé que l'angle de contact diminue à mesure que le taux de zinc dans le matériau augmente. Aucune influence de la vitesse de déformation n'est observée sur l'apparition de la FML. Néanmoins l'état métallurgique semble un paramètre important qui doit être expliqué à travers la détermination des champs de contraintes et de déformations obtenus par simulation numérique.

# **Approche micromécanique de la corrosion sous contraintes intergranulaire des aciers austénitiques inoxydables irradiés**

R. Azihari<sup>1\*</sup>, E. Paccou<sup>2</sup>, M. Legros<sup>3</sup>, J. Hure<sup>4</sup>, B. Tanguy<sup>5</sup>

<sup>1</sup>CEA SACLAY/CEMES

<sup>2</sup>CEA SACLAY/CEMES

<sup>3</sup>CEMES

<sup>4</sup>CEA SACLAY

<sup>5</sup>CEA SACLAY

\*[rachma.azihari@cemes.fr](mailto:rachma.azihari@cemes.fr)

Les aciers austénitiques inoxydables constitutifs des internes de cuve des Réacteurs à Eau Pressurisée (REP) sont sujets au phénomène de corrosion sous contraintes intergranulaire (Irradiation Assisted Stress Corrosion Cracking IASCC) Dans le cadre d'une approche micromécanique, la prédiction de l'amorçage des fissures intergranulaires nécessite de pouvoir estimer les champs mécaniques locaux ainsi que la résistance mécanique des joints de grains irradiés oxydés. Pour cela, une approche micromécanique est proposée combinant expériences et simulations numériques. Des essais de micro-compression ont été réalisés sur des piliers monocristallins d'acier 304L de 500nm à 10µm de diamètre, à l'état non irradié et suite à une irradiation du matériau aux ions simulant l'irradiation aux neutrons des internes de cuve REP. Des simulations par éléments finis ont été effectuées afin de calibrer les paramètres d'une loi de comportement de plasticité cristalline. La loi ainsi calibrée est utilisée pour simuler des essais de micro-flexion sur des micro-poutres contenant un joint de grain afin de déterminer les contraintes au niveau de celui-ci en fonction du chargement appliqué. Ces simulations permettront d'interpréter les essais sur micro-poutres en cours de développement et d'estimer les contraintes à rupture. In fine, la loi de plasticité cristalline calibrée et les contraintes à rupture seront utilisées pour simuler des agrégats polycristallins et prédire l'amorçage de fissures.

# Comportement en fluage d'irradiation du cuivre pur et cuivre préimplanté à l'hélium

Nargisse Khiara<sup>1\*</sup>, Fabien Onimus<sup>1</sup>, Michaël Coulombier<sup>2</sup>, Stéphanie Jublot-Leclerc<sup>3</sup>, Thomas Jourdan<sup>1</sup>, Thomas Pardoën<sup>2</sup>, Jean-Pierre Raskin<sup>4</sup>, Yves Bréchet<sup>5</sup>

<sup>1</sup>Université Paris-Saclay, CEA, Département des Matériaux pour le Nucléaire, 91191, Gif-sur-Yvette, France

<sup>2</sup>Institute of Mechanics, Materials and Civil Engineering, Université catholique de Louvain, Place Sainte Barbe 2 L5.02.02, 1348, Louvain-la-Neuve, Belgium

<sup>3</sup>Université Paris-Saclay, CNRS/IN2P3, IJCLab, 91405 Orsay, France

<sup>4</sup>Institute of Information and Communication Technologies, Electronics and Applied Mathematics, Université catholique de Louvain, Place du Levant 2 L5.04.04, 1348, Louvain-la-Neuve, Belgium

<sup>5</sup>Science et Ingénierie des Matériaux et Procédés (SIMAP), Université Grenoble Alpes, 1130 rue de la Piscine BP 75, 38402, Saint Martin d'Hères, France

\*[nargisse.khiara@cea.fr](mailto:nargisse.khiara@cea.fr)

Pour les applications nucléaires, il est essentiel de comprendre les changements microstructuraux et mécaniques ayant lieu sous irradiation pour le développement et l'évaluation à long terme des matériaux de structure. Les effets d'irradiation sont complexes, impliquant la génération et ségrégation de défauts ponctuels, mais aussi des réactions nucléaires comme la réaction  $(n,\alpha)$  qui résulte en la formation d'hélium qui précipite sous forme de bulles. Tous ces effets d'irradiation ont des conséquences sur le comportement macroscopique des matériaux en réacteur, se traduisant par exemple par de la fragilisation, du gonflement, ou du fluage d'irradiation. Le fluage d'irradiation, qui est une déformation viscoplastique ayant lieu sous chargement constant et sous irradiation, est particulièrement difficile à caractériser. Habituellement, les expériences de fluage d'irradiation sont réalisées sur des matériaux massifs en réacteur sous l'action combinée d'irradiation neutronique et de chargement mécanique [1,2]. Cependant, de telles expériences présentent des inconvénients majeurs ; elles sont longues, coûteuses, activent le matériau et ne permettent pas une observation in-situ des mécanismes physiques sous-jacents.

Une méthode originale a été proposée par Lapouge et al. [3] sur du cuivre pur, considéré comme un matériau modèle, pour étudier le fluage d'irradiation en combinant des essais micromécaniques sur des structures « lab-on-chip » développées à l'UC Louvain et des irradiations aux ions. Cette méthode nécessite des temps d'irradiation courts et n'induit pas l'activation du matériau. Cependant, des différences notables existent entre une irradiation aux ions et aux neutrons, comme le fait que l'hélium ne se forme pas sous irradiation aux ions. Dans notre étude, nous avons utilisé ces « lab-on-chips » sur du cuivre pur et du cuivre pré-implanté à 1%at d'hélium afin d'évaluer l'impact des bulles d'hélium sur le comportement en fluage d'irradiation. La pré-implantation à l'hélium induit la formation de bulles nanométriques ainsi qu'un dommage d'irradiation d'environ 2 dpa. Pour distinguer l'effet de ce dommage et celui de la présence de bulles, une expérience de fluage d'irradiation sur du cuivre pré-irradié avec un dommage de 2 dpa a également été réalisée. Le cuivre implanté à l'hélium est plus dur que le cuivre irradié. Par ailleurs, à contrainte égale, le cuivre implanté à l'hélium flue deux fois moins vite sous irradiation que le cuivre pré-irradié, qui lui-même flue légèrement moins vite que le cuivre pur.

Cependant, cette méthode ne donne pas un accès direct aux mécanismes de fluage d'irradiation. Des expériences in-situ de traction, dans un microscope électronique en transmission, et sous irradiation aux ions lourds ont été réalisées sur du cuivre pur. Un glissement des dislocations assisté par l'irradiation a été observé. En s'appuyant sur des considérations expérimentales et théoriques, un mécanisme de glissement assisté par les cascades de déplacements générées par l'irradiation a été proposé et vérifié par simulation en dynamique moléculaire.

- [1] Aitkhozhin, E. S., & Chumakov, E. V. (1996). *Journal of nuclear materials*, 233, 537-541.
- [2] Garnier, J et al. (2011). *Journal of nuclear materials*, 413(2), 63-69.
- [3] Lapouge, P. et al. (2017). *Acta Materialia*, 131, 77-87.

# Stored energy distribution in $\alpha$ and $\beta$ phases of hot-deformed titanium alloy microstructures

Matheus BROZOVIC GARIGLIO\*, Nathalie BOZZOLO, Daniel PINO MUNOZ

CEMEF – Centre for Material Forming, Mines ParisTech – PSL Research University, CNRS UMR 7635

\*[matheus.brozovic\\_gariglio@mines-paristech.fr](mailto:matheus.brozovic_gariglio@mines-paristech.fr)

Titanium alloys are widely used in aviation industries due to their properties of high mechanical and temperature strength, excellent corrosion resistance and low weight. These properties are strongly related to their microstructure (shape, size, phase distribution and crystallographic texture), thus it is essential to comprehend precisely the correlation between the thermomechanical parameters and the microstructural evolutions. Among all physical parameters controlling microstructure evolutions, the amount of strain energy stored in the material in the form of crystalline defects is of utmost importance as it provides the thermodynamic driving force for recrystallization and interface migration. The aim of this work is to describe how stored energy distributes among the phases in titanium alloys,  $\alpha$  (hcp) and  $\beta$  (bcc), when processed in the two-phase domain, by analyzing dislocation fields from electron backscatter diffraction (EBSD) maps.

The microstructural evolution during hot compression of Ti-6Al-4V ( $\alpha + \beta$ ) and Ti-10V-2Fe-3Al (metastable  $\beta$ ) alloys was studied in order to discuss the effect of phase topology. Two initial microstructures were chosen for each alloy, with equiaxed  $\alpha$  phase or with lamellar  $\alpha$  phase. Deformation temperatures were set at 950°C and 750°C for the Ti-6Al-4V and the Ti-10V-2Fe-3Al double-cone samples, being 50°C below the  $\alpha + \beta / \beta$  phase transus temperature for each one. At these temperatures the  $\alpha$  phase fraction of the previously mentioned alloys are 35% and 25%, respectively. The samples were deformed to an equivalent strain level of 1.3 at 0.1s<sup>-1</sup> strain rate. Crystalline orientation maps were acquired by EBSD, which allows, by analysis of the intragranular disorientations, the evaluation of a dislocation density ( $\rho_{EBSD}$ ) at each dislocation mode. The stored energy distribution at each phase was then calculated. It is worth mentioning that stored energy is not directly proportional to the dislocation density, as each phase has its respective shear modulus and Burgers vector. This is principally perceived in the  $\alpha$  phase, as different dislocation modes have their individual Burgers vector.

It was found that the total stored energy distribution is favored in the  $\beta$  phase for all conditions analyzed. This behavior is possibly in consequence of the higher amount of dislocation modes, as a higher norm of the Burgers vector and phase fraction. Nevertheless, this difference is less noticeable for the lamellar cases, where the stored energy in the  $\alpha$  phase was higher compared to the equiaxed microstructures, though the opposite behavior was noticed in the  $\beta$  phase. This shows that a lamellar morphology favors microstructural evolution in the  $\alpha$  phase, while an equiaxed morphology favors the  $\beta$  phase. When both alloys were compared, the stored energy in the Ti-10V-2Fe-3Al was always superior to the Ti-6Al-4V, exhibiting a favored deformation behavior for the metastable  $\beta$  alloy.

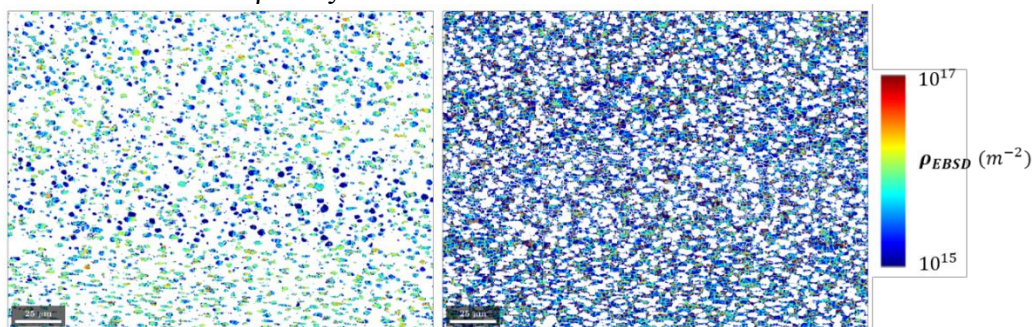


Figure 1. Dislocation density maps of the  $\alpha$  (left) and  $\beta$  (right) phases of a Ti-10V-2Fe-3Al alloy, with equiaxed  $\alpha$ , deformed at 750°C, to an equivalent strain of 1.3 at 0.1s<sup>-1</sup> strain rate.

# Impact de la structure $\beta$ sur les propriétés mécaniques de l'alliage $\beta$ -métastable Ti-10V.2Fe.3Al

Tiphaine Giroud<sup>1\*</sup>, Samuel Hémerly<sup>1</sup>, Patrick Villechaise<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut Pprime, CNRS - ENSMA - Université de Poitiers, UPR CNRS 3346, Department of Physics and Mechanics of Materials, ENSMA - Téléport 2, 1 avenue Clément Ader, BP 40109, 86961 Futuroscope Chasseneuil Cedex, France

\* [tiphaine.giroud@ensma.fr](mailto:tiphaine.giroud@ensma.fr)

Les alliages de titane  $\beta$ -métastable sont largement utilisés dans le domaine aéronautique pour leur résistance spécifique élevée. En particulier, l'alliage Ti-10V-2Fe-3Al est employé pour la fabrication de certains composants de trains d'atterrissage ou encore de moyeux et d'arbres de rotors de certaines gammes d'hélicoptères. Ses propriétés résultent notamment d'une microstructure bimodale avec une fraction élevée de phase  $\beta$  à température ambiante (environ 40%). Alors que la compréhension des processus de déformation des phases  $\alpha$  et  $\beta$  a progressé au cours des dernières décennies, les études traitant du comportement des microstructures avec des proportions similaires de ces deux phases sont plus rares. Cet aspect constitue un enjeu important pour comprendre la variabilité considérable des propriétés mécaniques en traction qui constitue un frein à l'extension de son utilisation.

Des essais de traction monotone, réalisés à température ambiante suivant différentes directions de prélèvement, ont confirmé cette variabilité et mis en évidence une anisotropie marquée des propriétés mécaniques. Le grand nombre de données considérées a permis une étude statistique des relations entre la microstructure et les propriétés mécaniques telles que le module de Young, la limite d'élasticité, la résistance à la traction et la ductilité. Par le biais de caractérisations MEB et EBSD, une attention particulière a été portée sur l'influence des textures morphologiques et cristallographiques de la phase  $\beta$ . De plus, la localisation de la déformation en lien avec la microstructure a été prise en considération via des essais de traction in-situ réalisés sous microscope optique, combinés à la corrélation d'image numérique. Cette étude a permis de mettre en évidence le rôle essentiel de la structure de grains  $\beta$  millimétriques sur le comportement mécanique de l'alliage de titane Ti-1023.



# Impact de l'hétérogénéité microstructurale sur les propriétés en traction du Ti-6Al-4V obtenu par déposition directe de fil

Silvia Lopez-Castaño<sup>1, 2\*</sup>, Samuel Hémerly<sup>3</sup>, Patrick Villechaise<sup>3</sup>, Philippe Emile<sup>1</sup>, Claude Archambeau<sup>1</sup>, Florence Pettinari-Sturmel<sup>2</sup>, Joël Douin<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Airbus Operations S.A.S, 316 Route Bayonne, 31060 Toulouse, France*

<sup>2</sup>*CEMES-CNRS, Université de Toulouse, 29 Rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse, France*

<sup>3</sup>*Institute Pprime, CNRS-ENSMA, Université de Poitiers, UPR CNRS 3346, Département de Physique et Mécanique des Matériaux. ENSMA – Téléport 2, 1 avenue Clément Ader, BP 40109, 86961 Futuroscope Chasseneuil Cedex, France*

\*[silvia.lopez-castano@cemes.fr](mailto:silvia.lopez-castano@cemes.fr)

Certains défis dans l'industrie aéronautique comme la réduction de coûts ou de l'empreinte environnementale peuvent être atteints grâce à l'utilisation des procédés de fabrication additive. Les techniques à base de fil présentent un intérêt pour la production en série de grandes pièces métalliques aéronautiques, en particulier pour les alliages de titane comme le Ti-6Al-4V, en raison d'une diminution considérable du rapport « buy-to-fly ». Néanmoins, cette technologie génère des traitements thermiques périodiques avec des gradients de température très élevés qui conduisent à des microstructures hétérogènes et anisotropes. Des gros grains  $\beta$  colonnaires traversant plusieurs couches ainsi que des lignes thermiques parallèles au substrat ont été observées dans des pièces en Ti-6Al-4V élaborées par la technique de déposition directe de fil par faisceau d'électrons. Au voisinage de ces lignes thermiques, un changement de la morphologie et de la taille des lamelles  $\alpha$  a lieu en raison des différentes histoires thermiques engendrées à chaque position lors de la déposition de différentes couches. Le but de ce travail est d'identifier les effets potentiels des gradients de microstructure sur les propriétés en traction, notamment dans les premiers stades de déformation plastique. Pour cela, un essai de traction in-situ sur un microscope optique a été réalisé sur une microéprouvette prélevée dans la direction de construction, perpendiculairement aux lignes thermiques. Une localisation de la déformation avec des grandes bandes de glissement a été observée juste en dessous de ces lignes thermiques, où la microstructure de type « basketweave épaisse » est présente. Des observations en EBSD montrent que dans ces régions il y a des clusters avec trois variants dominants qui partagent une direction et un plan de glissement. Ainsi, le transfert entre chaque groupe se produit car chacun se comporte comme s'il était « une colonie ». De plus, une localisation de la déformation aux joints de grains  $\beta$  a aussi été constatée avec des conditions favorables à la déformation quand deux colonies naissent de part et d'autre d'un ex-joint de grain  $\beta$  (morphologie communément connue sous le nom de « plumes »). Des observations en MET seront aussi réalisées pour mieux comprendre les mécanismes de déformations dans ces régions.

**Mots-clés:** fabrication additive, titane, lignes thermiques, traction in-situ, EBSD

# In situ multimodal experimental testing and simulations in volume for statistical analysis of crystal plasticity

Clément Ribart<sup>1\*</sup>, Andrew King<sup>2</sup>, Wolfgang Ludwig<sup>3,4</sup>, Henry Proudhon<sup>1</sup>

<sup>1</sup>MINES ParisTech, PSL University, MAT—Centre des Matériaux, CNRS UMR 7633, BP 87 91003 Evry, France

<sup>2</sup>SOLEIL Synchrotron, L'Orme des Merisiers, F-91190 Saint-Aubin, France

<sup>3</sup>Laboratoire Matériaux, Ingénierie et Science, INSA Lyon, Université de Lyon, 25 Avenue Jean Capelle, 69621 Villeurbanne, Cedex, France

<sup>4</sup>European Synchrotron Radiation Facility, 71, avenue des Martyrs, CS 40220, 38043 Grenoble CEDEX 9, France

\*[clement.ribart@mines-paristech.fr](mailto:clement.ribart@mines-paristech.fr)

Establishing microstructure-property relationships is a critical engineering challenge for advanced structural materials. Metals display heterogeneous polycrystalline organization which drives performance, hence the necessity to access to grain and sub-grain scales. A variety of characterization techniques now allows to reach those levels of details. Primarily recent progress in synchrotron and laboratory X-ray techniques [1] have paved the way to a paradigm shift leading to more and more complex multimodal in-situ experiments producing significantly richer datasets. In particular, Diffraction Contrast Tomography (DCT) allows reconstruction of digital grain maps on which simulations can be computed directly [2] [3]. Convergence of experimental and numerical techniques lead to unified but massive databases which require to leverage on recent progress in statistical learning in order to extract relevant information and ultimately to derive physical mechanisms at stake [4].

This talk, will present developments of multimodal in situ testing for the study of incipient plasticity. Focus will be on presentation of experimental data collected on Commercially-Pure Titanium. First of all, DCT was carried out for the first time at the PSICHE beamline. This demonstrates the ability of the technique to reconstruct digital twins of volumes representative of the mesoscopic scale as they contain several thousands of grains. In parallel in situ EBSD mechanical testing was carried out, giving access to lattice curvature. Slip activity was also observed and will be discussed. Eventually, special attention was paid on metallurgical analysis, essential for detailed interpretation. Next phase of the project will be to enrich the dataset with simulations providing local stress fields. In addition we aim at taking advantage of the present successful exploratory phase to generate new optimized datasets.

## References :

- [1] É. Maire et P. J. Withers, « Quantitative X-ray tomography », *Int. Mater. Rev.*, vol. 59, n° 1, p. 1-43, 2014, doi: 10.1179/1743280413y.0000000023.
- [2] W. Ludwig *et al.*, « Three-dimensional grain mapping by X-ray diffraction contrast tomography and the use of Friedel pairs in diffraction data analysis », *Rev. Sci. Instrum.*, 2009, doi: 10.1063/1.3100200.
- [3] H. Proudhon, N. Guéninchault, S. Forest, et W. Ludwig, « Incipient bulk polycrystal plasticity observed by synchrotron in-situ topotomography », *Materials*, vol. 11, n° 10, p. 18 p., 2018, doi: 10.3390/ma11102018.
- [4] M. D. Sangid, « Coupling in situ experiments and modeling – Opportunities for data fusion, machine learning, and discovery of emergent behavior », *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, vol. 24, n° 1, p. 100797, févr. 2020, doi: 10.1016/j.cossms.2019.100797.

# Continuous modeling of dislocations in random fcc alloys

Ali Rida<sup>1\*</sup>, David Rodney<sup>2</sup>, Enrique Martinez<sup>3</sup>, Pierre-Antoine Geslin<sup>1</sup>

<sup>1</sup> INSA Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS UMR 5510, laboratoire Mateis, 69100 Villeurbanne, France

<sup>2</sup> Université Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, Institut Lumière Matière, LYON, F-69622 France

<sup>3</sup> Theoretical division, T-1, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, 87545, NM, USA

[\\*ali.rida.1993@hotmail.com](mailto:ali.rida.1993@hotmail.com)

The motion of dislocations and their interactions with obstacles control the mechanical behavior of metals and alloys. In disordered random alloys such as binary solid solutions or high entropy alloys, the random distribution of atoms generates internal stresses that impede the motion of dislocations, leading to improved mechanical properties. Understanding the interactions between dislocations and this structural environment is crucial to better predict the mechanical properties of the alloys.

In this context, we investigated the behavior of a dislocation evolving in a random solid solution by means of a continuous elastic model [1]. In a first step, we build an elastic model of a random alloy where atoms of different nature are represented with dilatational eigenstrains. Using the micro-elasticity theory, we derive analytical expressions for the amplitude and the spatial correlations of the stress and displacement fields emerging from the elastic equilibrium. In particular, we show that the model is able to reproduce the amplitude and the correlations of the stress and displacements fields measured in atomistic calculations.

In a second step, the influence of the random solid solution is assessed by relaxing a dislocation line in a noisy stress environment. The nature of the noise (amplitude and spatial correlations) is carefully implemented using the elastic model mentioned above. This approach allows us to characterize the equilibrium shape of the dislocation represented as a power spectrum, as well as model quantitatively the dislocation behavior in a random structural environment without integrating the dynamics of individual atoms. Finally, the results obtained from the continuous model are compared with atomistic simulations performed in Al<sub>50</sub>-Mg<sub>50</sub> random alloys, and the assumptions used in previous models in the literature [2] are discussed in light of the present findings. In particular, we show that both the correlations of the stress field and the long-range dislocation interactions are key ingredients to incorporate in order to reproduce the power spectra obtained from atomistic calculations.

## REFERENCES

- [1] P.A. Geslin, D. Rodney. "Thermal fluctuations of dislocations reveal the interplay between their core energy and long-range elasticity." *Physical Review B* 98 (2018), 174115.
- [2] C. Varvenne, A. Luque, W.A. Curtin. "Theory of strengthening in fcc high entropy alloys." *Acta Materialia* 118 (2016), 164-176.

# Mesures quantitatives de champs cinématiques à l'échelle de la microstructure d'un polycristal métallique et analyse des hétérogénéités et localisations de déformation plastique

Adrien Berger<sup>1, 2\*</sup>, Ahmed El Bartali<sup>1</sup>, Jean-François Witz<sup>1</sup>, Nathalie Limodin<sup>1</sup>, Mirentxu Dubar<sup>3</sup>, Denis Najjar<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, UMR 9013 – LaMcube – Laboratoire de Mécanique, Multiphysique, Multiéchelle, F-59000 Lille, France

<sup>2</sup>MG-VALDUNES – BP 12 – Rue Gustave Delory – 59125 Trith-Saint-Leger – France

<sup>3</sup>UPHF, CNRS, UMR 8201 – LAMIH – Laboratoire d'Automatique, de Mécanique et d'Information Industrielles et Humaines, F-59313, Valenciennes, France

\*[adrien.berger@centralelille.fr](mailto:adrien.berger@centralelille.fr)

Ce travail s'inscrit dans le cadre du laboratoire commun SWIT'Lab entre l'entreprise MG-Valdunes, producteur d'organes ferroviaires, et les laboratoires LaMcube et LAMIH. Une meilleure maîtrise de la chaîne de conception et de la durée de vie des organes ferroviaires sous sollicitation complexe nécessite la prise en compte de la microstructure des aciers ferroviaires. Cette microstructure peut présenter une grande variabilité au travers de la taille, la morphologie et les orientations cristallographiques des deux constituants que sont la ferrite pro-eutectoïde et la perlite. Le travail présenté se focalise sur les mécanismes de plasticité de la ferrite pro-eutectoïde davantage ductile que le constituant perlitique. En outre, l'étude d'une microstructure monophasée modèle est une porte d'entrée en prévision d'analyses similaires sur une microstructure ferrito-perlitique d'organes ferroviaires.

Ce travail a pour objectif de mesurer quantitativement l'évolution des hétérogénéités et localisations de déformation à l'échelle de la microstructure d'une éprouvette de fer pur recristallisé. L'éprouvette est sollicitée en traction uniaxiale monotone jusqu'à 2% de déformation axiale macroscopique. L'essai est instrumenté avec mesures de champs cinématiques en surface par Corrélation d'Images Numériques (CIN) de source optique. La combinaison d'une caméra haute résolution et d'un objectif télécentrique à fort grossissement permet de capturer jusqu'à plusieurs dizaines d'images par seconde et d'obtenir des mesures quantitatives à l'échelle de la microstructure sur l'ensemble de la surface utile de l'éprouvette. Un mouchetis fin, dense et contrasté a été déposé par dispersion de particules calibrées dans de l'éthanol. La texture obtenue permet l'utilisation d'éléments de taille restreinte dans un algorithme global de CIN de type régularisation par éléments finis, nécessaire à la mesure de déplacements locaux avec une résolution spatiale micrométrique.

Ces mesures de champs cinématiques sont couplées à des observations avant et après sollicitation en microscopies optique et électronique, des mesures profilométriques ainsi qu'à des cartographies obtenues par Diffraction des Électrons Rétrodiffusés (EBSD). Ce couplage permet d'analyser les mécanismes de plasticité en fonction des caractéristiques microstructurales et du niveau de déformation macroscopique. Les résultats montrent la prédominance d'un mécanisme de glissement avec des déformations qui se localisent de plus en plus au niveau des joints de grains à mesure que le niveau de déformation macroscopique augmente. Une interprétation mettant en jeu l'orientation cristallographique des cristaux est proposée pour expliquer les mécanismes de plasticité à l'échelle de la microstructure. La richesse spatiale et temporelle des mesures cinématiques permet de proposer une analyse statistique.

# Interaction entre les lacunes chargées et une dislocation coin dans MgO

Marie Landeiro Dos Reis<sup>1,2\*</sup>, Philippe Carrez<sup>1</sup>, Patrick Cordier<sup>1,3</sup>

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

<sup>2</sup>maintenant à Univ. La Rochelle, Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement, UMR CNRS 7356,  
Avenue Michel Crépeau, 17000 La Rochelle, France

<sup>3</sup>Institut Universitaire de France, 1 rue Descartes, F-75005 Paris, France

\*[marie.landeiro\\_dos\\_reis@univ-lr.fr](mailto:marie.landeiro_dos_reis@univ-lr.fr)

A basses températures, il a été montré [1-2] que les défauts ponctuels jouent un rôle sur le durcissement des matériaux. Cela peut être dû au ralentissement du glissement des dislocations qui interagissent avec ces défauts ponctuels [1-2]. Dans le cadre de cette étude, nous avons cherché à quantifier le rôle des lacunes sur le glissement des dislocations dans MgO. Pour cela, nous avons déterminé l'énergie d'interaction dislocation-lacune ainsi que la force d'ancrage des lacunes.

Nous avons déterminé ces interactions en considérant un champ de force empirique simple [3], et nous les avons ensuite comparées aux prédictions théoriques de l'élasticité anisotrope [4]. Dans MgO, les dislocations n'étant pas chargées, l'interaction lacune-dislocation peut être décrite purement par la théorie élastique, lorsque les lacunes sont relativement loin du cœur de la dislocation (au-delà de 5,5 vecteurs de Burgers). En revanche, lorsque les lacunes sont dans la zone de cœur, l'interaction est plus complexe et ne peut être reproduite par la théorie élastique. L'écart à l'élasticité est expliqué par la structure de cœur complexe de la dislocation qui agit sur la relaxation locale des atomes au voisinage de la lacune. Contrairement à la théorie élastique qui prédit une augmentation brutale de l'énergie de liaison à mesure que la distance dislocation-lacune se réduit, du fait de considérer le cœur d'une dislocation comme étant une singularité, les calculs atomistiques donnent une interaction plus forte mais beaucoup plus étalée et moins abrupte, qui est directement liée à la structure de cœur et l'étalement de la dislocation. Ainsi, la force d'ancrage déduite de nos simulations, qui est simplement la dérivée de l'énergie d'interaction dans la direction du glissement, est plus faible que les prédictions élastiques. Nous avons donc montré que l'interaction dislocation-lacune a un faible impact sur le mécanisme de glissement de dislocation.

Dans un deuxième temps, nous avons étudié l'impact de cette interaction sur les processus de diffusion. A l'aide de simulations de Monte Carlo cinétique hybride basées à la fois sur nos calculs en potentiel empirique et la théorie élastique, nous observons une nette accélération de la diffusion du fait des processus de « pipe diffusion ». L'énergie d'activation pour la pipe diffusion a été trouvée comme étant 78% l'énergie d'activation de l'autodiffusion dans le cas de la lacune anionique et 91% pour la lacune cationique. Aux températures  $T < 0.95T_f$ , l'interaction dislocation-lacune influence fortement les processus de diffusion des lacunes (notamment pour la lacune anionique). Le rôle de cette interaction est d'autant plus important que la température est faible.

[1] F. Sato, K. Sumino, *J Mater Sci* 15, 1625 (1980)

[2] D. Caceres, I. Vergara, R. Gonzalez, Y. Chen, *Phys. Rev. B* 66, 024111 (2002)

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

[4] J.W. Steeds, *Introduction to anisotropic elasticity theory of dislocations*, (1973)

# Étude *ab-initio* des dislocations vis dans le chrome

Baptiste Bienvenu\*, Chu Chun Fu, Emmanuel Clouet

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

\*[baptiste.bienvenu@cea.fr](mailto:baptiste.bienvenu@cea.fr)

Le chrome (Cr) est un métal de transition cubique centré dont les propriétés mécaniques et magnétiques soulèvent encore de nombreuses interrogations, notamment en plasticité (transition ductile-fragile, types de dislocation, effet du magnétisme, ...). Nous nous intéressons ici à étudier le comportement plastique du Cr à l'aide de calculs *ab initio* à 0K des propriétés des dislocations vis, et ce en qualifiant l'influence du magnétisme à basse température où le Cr présente un ordre magnétique proche de l'antiferromagnétisme (AF).

En-dessous de sa température de Néel ( $T_N$ ) de 311K, l'état magnétique fondamental du Cr est une onde de densité de spin (*Spin Density Wave*, ou SDW) [1], une onde de modulation quasi-sinusoidale de l'amplitude des moments magnétiques selon un axe  $\langle 100 \rangle$ , conservant localement un ordre AF. Nos calculs *ab-initio* prédisent un état fondamental AF à 0K, en accord avec d'autres études [2]. Cependant, les propriétés élastiques des phases AF et SDW sont très proches, et plus cohérentes avec les mesures expérimentales que celles de la phase non-magnétique (NM). La SDW sera donc approchée par la phase AF, présentant un ordre magnétique proche [3].

En tant que métal à structure cubique centrée, la plasticité du Cr à basse température est pilotée par le glissement des dislocations vis de vecteur de Burgers  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$  dans les plans  $\{110\}$  du cristal. Or, ce vecteur ne respecte pas l'ordre magnétique AF du Cr. Nos calculs ont montré qu'une faute magnétique d'énergie finie apparaît lorsque le cristal est cisailé de ce vecteur. Celle-ci sépare deux dislocations  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ , mais ne modifie cependant pas leurs propriétés structurelles par rapport au cas NM. L'énergie de cette faute étant élevée, nous supposons qu'elle contraint les dislocations  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$  à coexister et à se déplacer par paires, constituant une superdislocation de vecteur de Burgers total  $\langle 111 \rangle$ , dissociée en deux dislocations  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$  séparées par une faute magnétique, et dont la distance de dissociation est d'environ 6 nm [3].

D'un autre côté, plusieurs études expérimentales rapportent le glissement de dislocations  $\langle 100 \rangle$  dans le Cr [4]. Ces dislocations, de norme légèrement plus importante que les dislocations  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$  ne sont généralement pas considérées du fait de leur énergie élastique plus élevée. Cependant, l'importante anisotropie élastique du Cr leur procure une tension de ligne similaire aux dislocations  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ . Celles-ci ne génèrent de plus aucune faute magnétique comme  $\langle 100 \rangle$  est un vecteur de périodicité de l'ordre magnétique du Cr. Nos calculs *ab initio* ont montré la stabilité des dislocations vis  $\langle 100 \rangle$ , avec de plus une contrainte de Peierls dans les plans  $\{110\}$  similaire aux dislocations vis  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$  dans les deux phases magnétiques NM et AF [3].

Nous avons ensuite comparé l'activation des deux systèmes  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle\{110\}$  et  $\langle 100 \rangle\{110\}$  en fonction de l'orientation de l'axe de traction/compression d'un chargement uniaxial. Nous avons ainsi montré que les dislocations vis  $\langle 100 \rangle$  glissent plus facilement dans les plans  $\{110\}$  pour une gamme importante d'orientations, et ce dans les deux phases magnétiques NM et AF du Cr. Ces résultats incitent à considérer les deux types de systèmes de glissement afin de rationaliser la plasticité du Cr à basse température.

[1] S.-B. Palmer et E.-W. Lee., *Philos. Mag.*, **24**, 311 (1971).

[2] V. Vanhoof *et al.*, *Phys. Rev. B*, **80** 184420 (2009).

[3] B. Bienvenu, C.-C. Fu et E. Clouet, *Acta Mat.* **200**, 570 (2020).

[4] C. N. Reid et A. Gilbert, *J. Less Common Metals* **10**, 77 (1966).

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

Arnaud Allera<sup>1,2\*</sup>, Fabienne Ribeiro<sup>2</sup>, Michel Perez<sup>3</sup>, David Rodney<sup>1</sup>

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

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

<sup>3</sup>Univ Lyon, INSA-Lyon, MATEIS UMR CNRS 5510, F69621, Villeurbanne, France

\*[arnaud.allera@univ-lyon1.fr](mailto:arnaud.allera@univ-lyon1.fr)

En service, les cuves de réacteurs à eau pressurisée (REP) en acier ferritique sont soumises à des conditions extrêmes (300°C, 155 bar, irradiation,...) qui peuvent dégrader leurs propriétés à long terme. Elles subissent notamment un durcissement et une fragilisation, dus à la formation d'atmosphères de Cottrell autour des dislocations. L'objectif de cette étude est de caractériser la mobilité des dislocations dans le fer cubique centré, lorsqu'elles interagissent avec ces atmosphères. Pour cela, il est nécessaire de combiner des calculs à différentes échelles : *ab initio*, simulations atomistiques (statique et dynamique moléculaire), et Monte Carlo cinétique.

À l'échelle atomique, les interactions entre atomes peuvent être calculées de façon simplifiée à l'aide d'un potentiel empirique. La précision des potentiels disponibles étant limitante pour cette étude, nous avons mis au point un potentiel hybride sur la base des deux potentiels les plus performants [1][2], permettant de décrire les propriétés des dislocations dans les alliages fer-carbone en accord avec les données *ab initio* de référence. L'utilisation de ce potentiel nous a permis d'examiner en détail l'ancrage des dislocations par une solution solide de carbone *via* des simulations atomistiques, montrant un fort effet ancrant des atomes de carbone les plus proches du coeur de dislocation et les plus rapprochés, pouvant conduire à des contraintes de désancrage deux fois supérieures au fer pur dans les mêmes conditions.

Ce durcissement est associé à une perturbation locale du paysage énergétique de la dislocation que nous avons examiné à l'aide de calculs de barrière d'énergie sous contrainte. Une approche stochastique permet finalement de rapprocher nos calculs statiques et dynamiques, afin de décrire de façon complète la mobilité des dislocations en fonction de la présence de solutés et de la température, par la prise en compte d'effets anharmoniques.

Ces résultats permettent de caractériser les événements élémentaires de la déformation plastique -formation et propagation de double-crans- que nous intégrons désormais à un modèle Monte Carlo Cinétique, qui tient également compte des effets de diffusion du carbone aux temps longs. La mise au point de ce modèle permettra de dégager une loi de mobilité des dislocations au cours du vieillissement, permettant de se tourner vers les échelles supérieures (dynamique des dislocations discrète, approches continues).

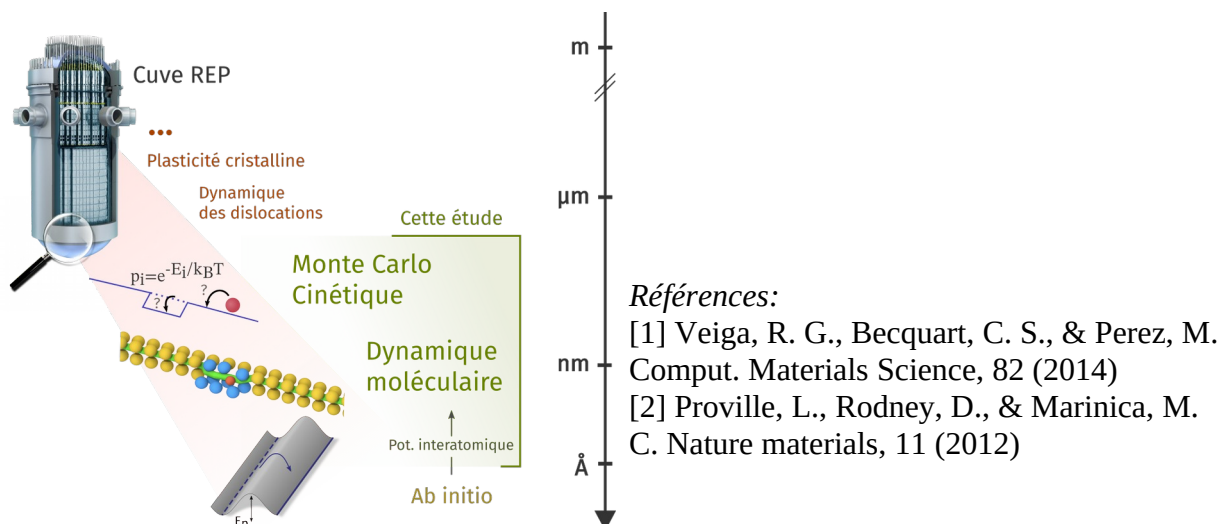


Figure 1: Approche multi-échelles de cette étude

# Etude *ab initio* de l'interaction entre dislocation vis et carbone dans le tungstène et effets du soluté sur la mobilité de la dislocation

Guillaume Hachet\*, Lisa Ventelon, François Willaime, Emmanuel Clouet

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

\*[guillaume.hachet@gmx.com](mailto:guillaume.hachet@gmx.com)

Les solutés tels que le carbone peuvent avoir un impact considérable sur la plasticité des métaux, notamment à hautes températures. Récemment, des essais de traction *in-situ* dans un MET sur du tungstène contenant 1 appm de carbone ont été réalisés à  $T > 1373\text{K}$  [1]. Ces essais ont montré un retour du mécanisme de Peierls correspondant au glissement de dislocations vis rectiligne [1]. Comme le carbone devient mobile dans ces gammes de températures, il peut fortement interagir avec les dislocations et impacter les propriétés mécaniques du métal. De ce fait, nous nous sommes intéressés dans ces travaux à l'effet des atomes interstitiels de carbone sur les dislocations vis de vecteur de Burgers  $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$  dans le tungstène cubique centré (CC), en utilisant des méthodes de calculs *ab initio*.

Dans les métaux de transition CC, de précédents calculs ont montré que le carbone induit une reconstruction spontanée du cœur de la dislocation vers une structure de plus basse énergie où, de manière inattendue, le cœur de la dislocation adopte la configuration dite difficile, instable dans les métaux purs [2]. Nos calculs confirment cette reconstruction du cœur, associée à une interaction fortement attractive entre les atomes de carbone et le cœur de dislocation. Cette reconstruction est parfaite aux fortes fractions atomiques de carbone ségréguées sur la ligne ( $x_C > 1/3$ ), et partielle pour les fractions atomiques inférieures, avec la dislocation qui a tendance à retomber dans son état fondamental (configuration cœur facile) loin du soluté, comportement qui se décrit à l'aide d'un modèle de tension de ligne.

Nous avons ensuite déterminé les concentrations d'équilibre de carbone dans les différents sites possibles de ségrégation en développant un modèle d'Ising paramétré sur les calculs *ab initio* et en utilisant une approximation de champ moyen. Ce modèle thermodynamique met en évidence que les dislocations vis restent entièrement saturées d'atomes de carbone et épinglées dans leur configuration cœur difficile jusqu'à environ 2500 K [3].

A ces températures, le carbone est mobile et les dislocations se déplacent avec leur atmosphère de soluté. Nous avons déterminé les barrières énergétiques contrôlant la mobilité d'une dislocation décorée en carbone en calculant les énergies de formation et de germination de double-décrochements ainsi que l'énergie de migration des décrochements. A partir de ce paysage énergétique, nous avons déterminé la vitesse de glissement des dislocations, tout d'abord par simulations de Monte-Carlo cinétique, puis analytiquement en utilisant la théorie classique de germination. Un bon accord est obtenu entre chaque approche pour la vitesse de la dislocation en fonction de la température, la contrainte appliquée et la longueur de la ligne de dislocation données. L'expression analytique ainsi obtenue pour la vitesse de la dislocation permet d'estimer la contrainte locale à partir des vitesses de glissement mesurées au cours des essais de traction MET *in-situ*.

[1] D. Caillard ; communication privée

[2] L. Dezerald, L. Ventelon, E. Clouet, C. Denoual, D. Rodney, F. Willaime ; Phys. Rev. B **89** ; 024104 ; 2014

[3] G. Hachet, L. Ventelon, F. Willaime, E. Clouet ; Acta Mater. **200** ; 481-489 ; 2020



# Influence du tungstène sur les propriétés mécaniques d'un alliage gamma TiAl

Benjamin Galy<sup>1\*</sup>, Jean-Philippe Monchoux<sup>1</sup>, Muriel Hantcherli<sup>1</sup>, Alain Couret<sup>1</sup>, Guy Molenat<sup>1</sup>

<sup>1</sup> CEMES, CNRS, 29 rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse, France

\* *Email : [benjamin.galy@cemes.fr](mailto:benjamin.galy@cemes.fr)*

Réduire les émissions de CO<sub>2</sub> dans l'industrie aéronautique nécessite le développement de nouveaux matériaux fonctionnels à hautes températures. Les alliages intermétalliques TiAl sont de bons candidats puisqu'ils présentent des propriétés mécaniques adaptées pour un tel usage. Ces alliages ont une faible densité volumique ainsi qu'une bonne résistance mécanique à hautes températures. Aujourd'hui, leur température d'utilisation est limitée à environ 700°C. Afin de pouvoir un jour remplacer les super alliages base nickel, matériaux plus denses, dans les moteurs d'avion, il est nécessaire d'améliorer les alliages TiAl pour qu'ils puissent être fonctionnels à des températures d'au moins 800°C. Pour cela, on peut ajouter des éléments d'alliage lourds comme le tungstène ou le molybdène, dont l'action supposée est de réduire la mobilité des dislocations. Cependant, l'amélioration des propriétés résultant de l'incorporation de ces éléments, n'est pas encore bien comprise. C'est pourquoi, dans cette étude, on s'intéresse notamment à l'influence du W sur les propriétés mécaniques d'un alliage gamma TiAl de composition Ti-48Al-2W-0.2B [at.%) en comparaison avec un alliage gamma TiAl de composition Ti-48Al-0.2B [at.%). Cette influence sera étudiée au niveau macroscopique à l'aide d'essais mécaniques de traction et de fluage. Une diminution d'un facteur 2 de la vitesse de fluage sous l'effet du W a ainsi été montrée. L'étude se poursuit actuellement au niveau microscopique avec des investigations post-mortem en microscopie électronique en transmission (MET) mettant en évidence des mécanismes de déformation à hautes températures, ainsi qu'avec des expériences de traction MET in situ à chaud, où de la déformation par maillage a été mise en évidence (Fig. 1).

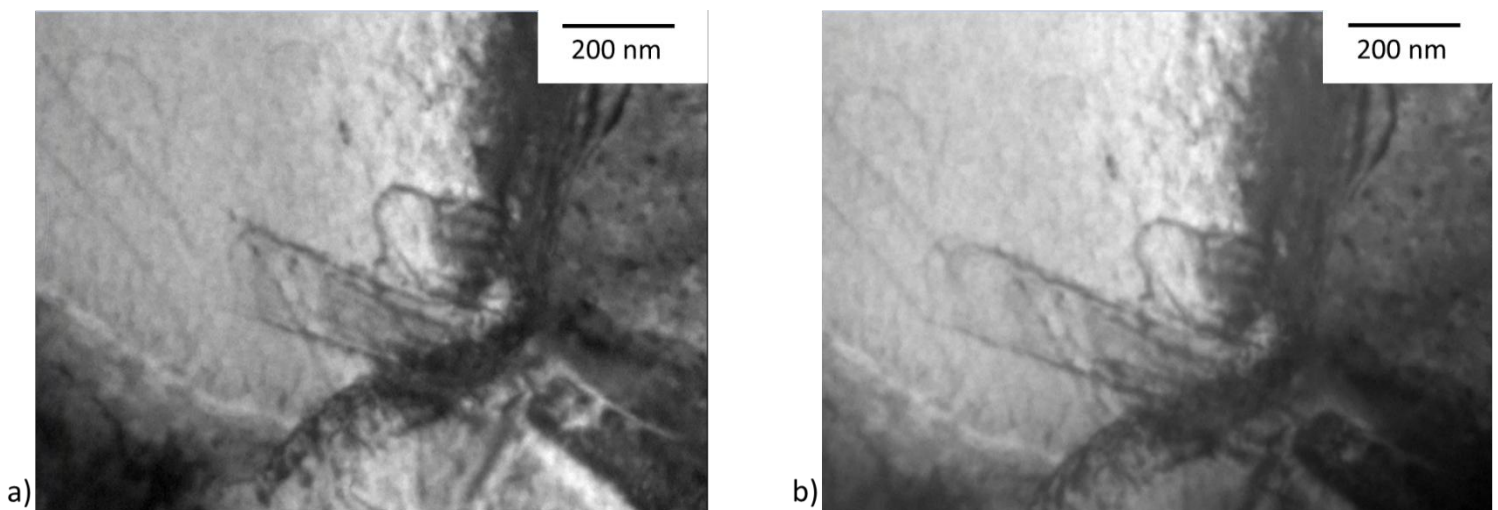


Fig. 1. Image MET : Maillage observé au cours d'une expérience de déformation in-situ sur l'alliage TiAl à 800°C. a) t = 0 s. b) t = 9 s.

# Atomistic Simulations of Dislocation Processes in Laves Phases

Dimitri Chauraud<sup>1\*</sup>, Zhuocheng Xie<sup>2</sup>, Erik Bitzek<sup>1</sup>, Julien Guénoles<sup>2,3,4</sup>

<sup>1</sup> Department of Materials Science & Engineering, Institute I: General Materials Properties, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, 91058 Erlangen, Germany

<sup>2</sup> Institute of Physical Metallurgy and Materials Physics, RWTH Aachen University, 52056 Aachen, Germany

<sup>3</sup> Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers ParisTech, LEM3, 57070 Metz, France

<sup>4</sup> Labex Damas, Université de Lorraine, 57070 Metz, France

\*[dimitri.chauraud@fau.de](mailto:dimitri.chauraud@fau.de)

Understanding dislocations and their interactions with others defects such as interphase boundaries, segregating atoms, other dislocations is of fundamental importance for optimizing the mechanical properties of crystalline materials. Many commercial alloys are characterized by the presence of complex intermetallic phases. Laves phases are an example for binary intermetallic phases that are known to play a crucial role in the deformation of alloys containing them. Laves phases are topologically close packed phases that are arranged in cubic (C15) or hexagonal (C14 and C36) layered structures.

Recently, the modified embedded atom method (MEAM) potential by Kim et al. [1] allowed detailed atomistic investigations of Laves phase deformation. This potential accurately describes the mechanical properties of the C14 Mg<sub>2</sub>Ca Laves phase. In a preliminary work, synchroshear was confirmed as the most favourable mechanism for basal slip in the C14 Mg<sub>2</sub>Ca Laves phase [2]. This potential was also used to study the mechanisms of slip transmissions from an Mg matrix to the C14 Mg<sub>2</sub>Ca Laves phase using molecular dynamics (MD) simulations [3]. The focus of the present study lies on the fundamental dislocation processes in C14 (Mg,Al)<sub>2</sub>Ca phases. In particular, our aim is to determine the natural slip systems for dislocations.

To be able to better study the deformation mechanisms of Laves phase via atomistic simulations, a novel structural analysis method, called Laves phase Crystal Analysis (LaCA)[4], was developed in the framework of the German Collaborative Research Centre SFB1394. This new method can identify the polytypes of Laves phases, typical crystallographic defects, and common deformation mechanisms such as synchroshear and

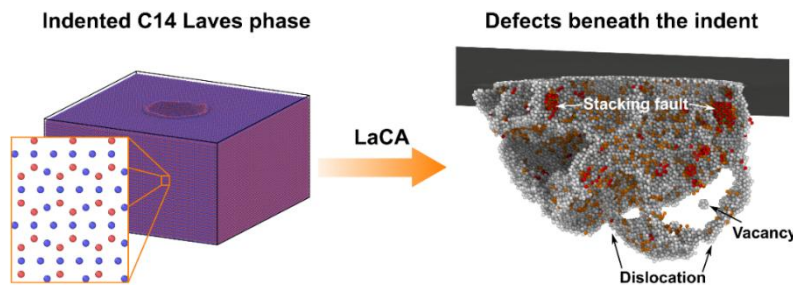


Fig.1 (extracts from[4]).

Left: Nanoindentation on the C14 Mg<sub>2</sub>Ca Laves phase. Insert shows the layered structure of the Laves Phase.

Right: Plastic deformation zone beneath the indent colored by LaCA (atoms in C14 structure are not shown).

non-basal dislocations (Fig.1).

[1] K.H. Kim *et al.*, Calphad Comput. 48 (2015) 27–34.

[2] J. Guénoles, *et al.*, Scr. Mater. 166 (2019) 134–138.

[3] J. Guénoles *et al.*, Mater. Des. (2021) 109572.

[4] Z. Xie *et al.*, Journal of Materials Research, 2021, to be submitted.

# Étude par simulation atomistique de la nucléation d'une macle depuis une interface dans un système Ag/Cu nanolamellaire

Loïc Van Hoorde<sup>1</sup>, Sandrine Brochard<sup>1</sup>, Julien Durinck<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Institut Pprime (PPRIME) – CNRS : UPR3346, Université de Poitiers, ISAE-ESMA – Département de Physique et Mécanique des Matériaux, SP2MI, Téléport 2, Boulevard Marie et Pierre Curie, BP 30179, 86962 Chasseneuil-Futuroscope Cedex, France

L'intérêt premier des composites lamellaires métalliques est de profiter d'interactions heureuses entre les couches afin d'améliorer les propriétés mécaniques générales du composite au regard des propriétés individuelles des constituants. Ces matériaux ont longtemps vu leur potentiel limité par une dimension limite des épaisseurs des couches qui était supérieure au micron. Mais depuis une dizaine d'années de nouvelles méthodes de synthèse (déformation plastique sévère, PVD, CVD) ont été développées et appliquées à ces matériaux de telle manière que l'épaisseur des couches a pu être réduite à des dimensions inférieures à 100 nm. Ces nouveaux matériaux, désormais nanostructurés, ont bénéficié de remarquables améliorations de leurs propriétés mécaniques. Ces améliorations ont été attribuées au rôle de plus en plus déterminant, à mesure que l'épaisseur des couches diminue, que prennent les interfaces dans la plasticité des matériaux nanolamellaires. Le rôle joué par les interfaces est notamment crucial dans le composé nanolamellaire Ag/Cu. Alors que l'argent monoatomique est connu pour être facilement sujet au maclage sous contrainte mécanique, le cuivre n'y est favorable que sous des conditions bien plus spécifiques. Cependant, dans le composite Ag/Cu, des études par microscopie électronique en transmission ont mis en évidence que les macles provenant d'une couche d'argent peuvent aisément traverser certaines interfaces pour s'étendre ensuite dans le cuivre, menant à l'observation de maclage dans celui-ci à un niveau de contrainte faible [1]. Malgré le fait que ces observations aient été complétées par des études en simulation atomistique [2,3], il demeure encore quantité d'inconnues pour une compréhension précise des mécanismes élémentaires à l'œuvre.

L'échelle nanométrique et le caractère élémentaire des mécanismes étudiés rendent l'utilisation de la simulation atomistique, et principalement de la dynamique moléculaire, particulièrement adaptée à ce sujet. Dans les études par simulation atomistique [2,3,4] les macles sont introduites de manière détournée dans les composés nanolamellaires Ag/Cu ; bien souvent on a recours à des défauts de surface pour initier le maclage [4]. Ces surfaces interagissent systématiquement avec les macles, c'est pourquoi les mécanismes élémentaires décrits dans ces études dépendent beaucoup de l'effet des surfaces, elles qui pourtant ne représentent pas une part importante du volume dans le matériau. Dans notre étude sur un matériau nanostructuré Ag/Cu similaire, nous mettons en évidence la nucléation et l'extension d'une macle, non plus uniquement depuis une surface, mais depuis une interface. Je me propose de détailler les conditions d'obtention de ce nouveau mécanisme élémentaire et d'en discuter les caractéristiques.

## Références :

- [1] BEYERLEIN, Irene J., MARA, Nathan A., *et al.*, *International journal of plasticity*, 2011, vol. 27, no 1, p. 121-146.
- [2] MARA, N. A., BEYERLEIN, I. J., CARPENTER, J. S., *et al.*, *Jom*, 2012, vol. 64, no 10, p. 1218-1226.
- [3] AN, X. H., ZHU, S. M., CAO, Y., *et al.*, *Applied Physics Letters*, 2015, vol. 107, no 1, p. 011901.
- [4] BÉJAUD, R., DURINCK, J., et BROCHARD, S. T., *Acta Materialia*, 2018, vol. 144, p. 314-324.

# Mobilité des dislocations dans $\text{UO}_2$ par dynamique moléculaire

Marion Borde<sup>1,2,3\*</sup>, Émeric Bourasseau<sup>1</sup>, Bruno Michel<sup>1</sup>, David Rodney<sup>3</sup> et Jonathan Amodeo<sup>2,4</sup>

<sup>1</sup>CEA, DES/IRENE/DEC, 13018 Saint Paul Lès Durance, France

<sup>2</sup>Université de Lyon, INSA-Lyon, MATEIS UMR 5510 CNRS, 69621 Villeurbanne, France

<sup>3</sup>Université de Lyon, ILM UMR5306 CNRS, 69621 Villeurbanne, France

<sup>4</sup>Université Aix-Marseille, Université de Toulon, CNRS, IM2NP, F-13397 Marseille, France

\*[marion.borde@insa-lyon.fr](mailto:marion.borde@insa-lyon.fr)

Le dioxyde d'uranium ( $\text{UO}_2$ ) est le combustible majoritairement utilisé dans l'industrie du nucléaire en France. En fonctionnement normal, les pastilles de combustibles sont portées à  $\sim 1000^\circ\text{C}$  et subissent de fortes sollicitations thermo-mécaniques en fluage, associées aux processus d'irradiation. Ces contraintes sont encore amplifiées en conditions incidentelles ( $T > 1600^\circ\text{C}$ ) où les pastilles sont fortement déformées plastiquement.

Plusieurs études dédiées à la plasticité de l' $\text{UO}_2$  ont récemment été menées par simulation à l'échelle atomique et dynamique des dislocations [1, 2]. En plasticité conventionnelle, deux à trois modes de glissement sont impliqués :  $1/2\langle 110 \rangle\{100\}$  (le mode de glissement facile),  $1/2\langle 110 \rangle\{110\}$  et potentiellement  $1/2\langle 110 \rangle\{111\}$  (modes I, II et III). Concernant  $1/2\langle 110 \rangle\{100\}$ , des études en MET montrent que la dislocation coin contrôle la plasticité à basse température [3]. Sous irradiation, les dislocations interagissent avec les défauts étendus créés et les boucles prismatiques [4]. Néanmoins, peu d'études permettent de quantifier la mobilité des dislocations dans  $\text{UO}_2$  ainsi que le durcissement induit par les défauts d'irradiation.

L'objectif de ce travail est d'étudier les cœurs et la mobilité des dislocations. Tout d'abord, les différents cœurs (neutre et chargé) de la dislocation coin dans  $1/2\langle 110 \rangle\{100\}$  ont été étudiés par statique moléculaire à l'aide du potentiel d'un potentiel interatomique classique [5]. Plusieurs structures de cœur stables ont été identifiées, dont le cœur neutre asymétrique d'Ashbee [6]. Néanmoins, cette structure de cœur n'est pas stable en température, où une configuration « en zig-zag » apparaît. La mobilité de la dislocation coin dans  $1/2\langle 110 \rangle\{100\}$  a été ensuite étudiée à différentes températures et contraintes, grâce à des simulations de dynamique moléculaire. Les processus de glissement sont discutés et les résultats seront utilisés comme base pour un modèle mésoscopique permettant une meilleure description de la déformation plastique dans  $\text{UO}_2$ .

[1] L. Portelet et al. "Crystal viscoplastic modeling of  $\text{UO}_2$  single crystal." *Journal of Nuclear Materials* 510 (2018): 635-643.

[2] A. Soulié et al. "Atomistically-informed thermal glide model for edge dislocations in uranium dioxide." *Acta Materialia* 150 (2018): 248-261.

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

[4] C. Onofri et al. "Full characterization of dislocations in ion-irradiated polycrystalline  $\text{UO}_2$ ." *Journal of Nuclear Materials* 494 (2017): 252-259.

[5] S. I. POTASHNIKOV et al. "High-precision molecular dynamics simulation of  $\text{UO}_2$ - $\text{PuO}_2$ : Pair potentials comparison in  $\text{UO}_2$ ." *Journal of Nuclear Materials*, 2011, vol. 419, no 1-3, p. 217-225.

[6] K. H. G. Ashbee, and F. C. Frank. "Dislocations in the fluorite structure." *Philosophical Magazine* 21.169 (1970): 211-213.

## Ceria nanocubes under compression : a modelisation study

G. LAURENS<sup>1</sup>, J. AMODEO<sup>2</sup>, T. ALBARET<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>*Université de Lyon, INSA-Lyon, MATEIS, UMR 5510 CNRS, 69621 Villeurbanne, France*

Ceria-based materials have raised a growing interest during the past decades which parallels their numerous developed and emerging applications[1]. Although the important properties of this material are largely due to its ability to easily produce a reduced form ( $\text{CeO}_2$  to  $\text{CeO}_x$  with  $x < 2$ ), its mechanical properties become particularly relevant at the nanoscale, where the microstructure (dislocations and grain boundaries) as well as the strain state can influence its catalytic activity[2].

Expectedly, the effect of charge transfer and cation reduction ( $\text{Ce}^{4+}/\text{Ce}^{3+}$ ) are often considered in the literature, while the mechanical properties and especially the plastic behavior of  $\text{CeO}_2$  at small scale have been far less investigated. Since ceria nanocubes can be synthesized and mechanically probed under an indenter, we investigated such compression tests from a molecular dynamics perspective.

In this work, we thus simulate the compression of nanocubes of ceria with a fluorite structure for various sizes ranging from 3 to 22 nm. The plastic deformations are finely analyzed and described from the low lying energy configurations obtained from fixed charge empirical potentials. It appears that the plastic behavior of the  $\text{CeO}_2$  nanocubes can be described by two dominant mechanisms: (i) a relaxation process due to a phase transformation which mainly occurs at “low” strain; (ii) a plastic relaxation due to dislocations leaving twin boundaries orientated along the  $\{111\}$  planes of fluorite.

From these results, we will discuss a size effect for which the first relaxation process tends to disappear with the increasing size of the nanocube, leading to more clearly evidenced  $\{111\}$  dislocations at large sizes. We will also comment some intriguing features of the observed phase transformation.

This study exploring the deformation behavior of nanoceria brings into light some mechanisms which could be useful to interpret future experiments on these nanosystems.

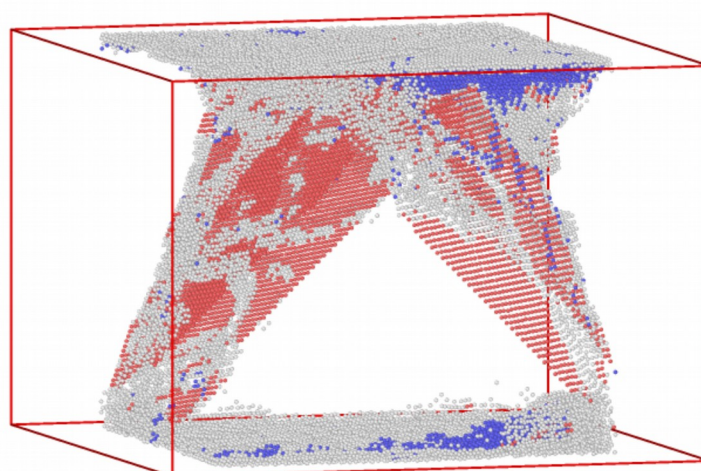


Figure:  $\{111\}$  dislocations obtained during the simulated compression of a 22-nm  $\text{CeO}_2$  nanocube along  $[001]$ . Red, blue and white Ce-atoms correspond to local symmetry structure analyzed in OVITO, namely HCP, BCC and no symmetry, respectively. Non-deformed atoms are removed for sake of clarity.

[1] Montini *et al.*, *Chem. Rev.* **2016**, 116, 5987–6041

[2] Seal *et al.*, *Nanoscale*, **2020**, 12, 6879-6899

## Comportement mécanique de nanoparticules isolées : impact du modèle de champ de force utilisé pour la compression

*Alla Ndiaye DIENG, Céline GÉRARD, Jean Claude GRANDIDIER*

*Institut Pprime, Université de Poitiers - CNRS - ISAE-ENSMA, 86962 Chasseneuil  
Futuroscope Cedex*

Email : [alla-ndiaye.dieng@ensma.fr](mailto:alla-ndiaye.dieng@ensma.fr), [celine.gerard@ensma.fr](mailto:celine.gerard@ensma.fr)

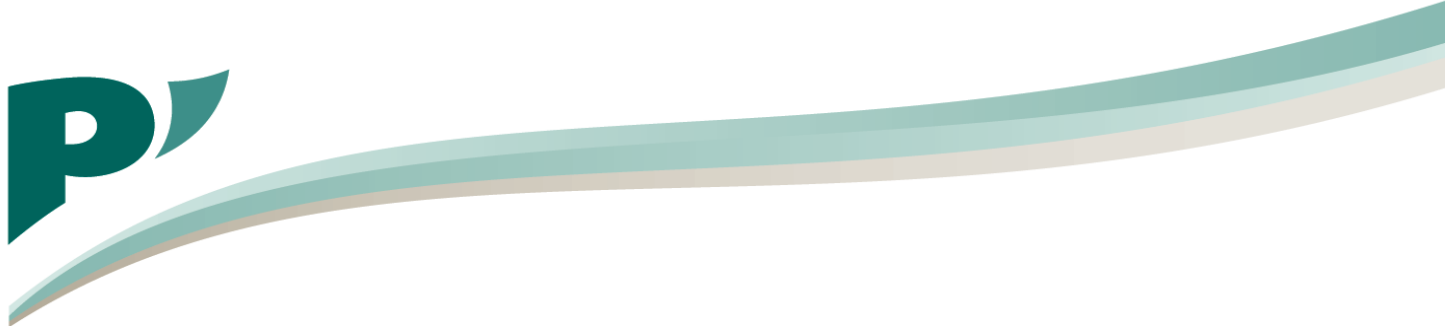
### Résumé

Les matériaux nano-composites, grâce à leurs renforts, permettent aujourd'hui d'obtenir des propriétés mécaniques améliorées et adaptées selon les besoins. Mais la connaissance du comportement mécanique de ces renforts reste incontournable pour une bonne maîtrise du comportement mécanique de ces matériaux. Des résultats issus des premières études sur des nanoparticules comprimées semblaient contradictoires quant à la question la présence ou non d'effet de taille [3] [5]. Des études plus récentes ont montré que la géométrie de surface de ces nanoparticules a un rôle dans l'instauration des premières évènements plastiques [4] [1] [2].

Deux points majeurs sont étudiés dans la présente étude. Dans un premier temps, l'impact du modèle de champ de force, utilisé pour modéliser la compression, sur l'initiation de la plasticité est étudié sur des nano-sphères d'aluminium de 20nm de diamètre. Dans un second temps, l'effet de la forme, de l'orientation cristallographique et du potentiel d'interaction sur le comportement mécanique des nanoparticules de  $Ni_3Al$  sont étudiés.

### Références

- [1] J. Amodeo and K. Lizoul. *Mater. & Design*, 135:223–231, 2017.
- [2] D. Kilymis and al. *Acta Mater.*, 158:155–166, 2018.
- [3] D. Mordehai and al. *Acta Mater*, 59(6):2309–2321, 2011.
- [4] SBH. Salah, C. Gerard, and L. Pizzagalli. *Comput. Mater. Sci.*, 129:273–278, 2017.
- [5] AJ. Wagner and al. *Acta Mater*, 100:256–265, 2015.



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

Javier Gonzalez<sup>1\*</sup>, Laurent Dupuy<sup>2</sup>, Peter Råback<sup>3</sup>, Michel Perez<sup>1</sup>, Jonathan Amodeo<sup>1,4</sup>

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

<sup>2</sup>CEA, DEN, SRMA, F-91191 Gif-sur Yvette, France

<sup>3</sup>CSC-IT Center for Science, P.O. Box 405, FI-02101 Espoo, Finland

<sup>4</sup>Université Aix-Marseille, Université de Toulon, CNRS, IM2NP, F-13397 Marseille, France

\*[javier-antonio.gonzalez-joa@insa-lyon.fr](mailto:javier-antonio.gonzalez-joa@insa-lyon.fr)

The study of nano-particles (NPs) mechanical properties has proved to be of high importance including several applications in various fields as catalysis, nanomaterial engineering and medical imaging. Indeed, NPs are characterized by high yield strength and ductility, when compared to their bulk counterpart, that are mostly attributed to surface mechanisms.

Usually, the two techniques used to investigate NPs mechanics are microscopy-assisted compression tests and Molecular Dynamics (MD) simulations. While in-situ experimental tests remain complex to carry and expensive, MD has severe drawbacks, especially regarding the sample size and strain rate. In this study, we revisit the superposition method [1] that relies on coupling dislocation dynamics (DD) and Finite-Element Modeling (FEM) to solve a boundary problem here applied to nano-objects. In this study, we use the DD code Numodis and the Elmer elastic solver to deal with the interaction between dislocations and physical boundaries. Among others, El-Numodis accounts for the interactions between dislocations and free surfaces using the method developed by Weygand et al. [2] and uses a Kinetic Monte Carlo algorithm to statistically model the dislocation nucleation process from NPs corners and lateral surfaces. Load and displacement-control feedback loops are implemented to mimic regular experimental tests. Methodology and benchmarking applications will be presented.

## **REFERENCES**

- [1] E. van der Giessen, A. Needleman, Modelling and Simulation in Materials Sciences and Engineering, 3(5), 689-735 (1995).
- [2] D. Weygand, L. Friedman, E. Van Der Giessen, A. Needleman, Modelling and Simulations in Material Sciences and Engineering, 10(4) 437-468 (2002).



# Estimation non-paramétrique de champ de contraintes pour la caractérisation de comportement mécanique

R. Langlois\*, J. Réthoré, L. Stainier et M. Coret

Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique, École Centrale de Nantes, CNRS  
UMR 6183

L'identification de relations de comportement restent aujourd'hui un problème essentiel dans la communauté de la mécanique des matériaux. Des méthodes inverses, comme la FEMU ou la VFM [1], permettent d'obtenir des paramètres *constitutifs* d'une équation de comportement à partir de mesures cinématiques et de chargement.

Cette formalisation *a priori* paramétrée de la relation de comportement posent plusieurs difficultés. Premièrement, elle peut générer un biais de modélisation du à la mauvaise prise en compte de certains mécanismes physiques sous-jacents. Deuxièmement, les essais classiques de caractérisation n'explorent qu'une portion de l'espace des phases ( $\sigma$ ,  $\epsilon$ ) ce qui forcent l'extrapolation des prédictions du modèle à des zones non explorées de cet espace.

Dans ce papier, les approches d'identifications classiques et leurs limites sont brièvement présentées, puis on se concentrera sur une méthode non paramétrique permettant l'estimation d'un champ de contrainte admissible statiquement sans supposer la forme de la relation de comportement. Développée initialement pour des comportements élastiques [2] ou inélastiques pour des chargements monotones [3], on propose son extension à des comportements inélastiques dépendant de l'histoire. Une fois les champs de contraintes obtenus et en ajoutant des hypothèses *a posteriori*, des quantités physiques d'intérêt peuvent être calculées (la déformation plastique dans notre cas).

La méthodologie sera illustrée sur deux cas, (1) la formation et la propagation d'un front de localisation (bande de Piobert–Lüders) et (2) l'évolution de la plasticité en pointe d'une fissure de fatigue au cours d'un cycle de chargement.

## Références

- [1] M. Grédiac, F. Hild, *Full-Field Measurements and Identification in Solid Mechanics*, Wiley, 2012.
- [2] A. Leygue, M. Coret, J. Réthoré, L. Stainier, and E. Verron, *Data-based derivation of material response*, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 2018.
- [3] A. Leygue, R. Seghir, J. Réthoré, M. Coret, E. Verron, and L. Stainier, *Non-parametric material state field extraction from full field measurements*, Computational Mechanics, 2019.

---

\*raphael.langlois@ec-nantes.fr

# Propagation of stress waves induced by laser shock in elastic-plastic 1D layered materials

Lucas Lapostolle<sup>1\*</sup>, Katell Derrien<sup>1</sup>, Léo Morin<sup>1</sup>, Olivier Castelnau<sup>1</sup>, Laurent Berthe<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*PIMM, Arts et Metiers Institute of Technology, CNRS, Cnam, HESAM University, Paris, France*

*\*[lucas.lapostolle@ensam.eu](mailto:lucas.lapostolle@ensam.eu)*

The Laser Sock Peening (LSP) process is a mechanical surface treatment process which uses a laser to impact the surface of a material. This impact generates a high-pressure plasma at the surface of the specimen. Upon decompression, a shockwave propagates into the specimen, generates plastic strains, and leads to the build-up of compressive residual stresses, improving the fatigue resistance of the target. For the LSP process, the laser usually has an 8-10 GW/cm<sup>2</sup> energy density, a 10-20 ns pulse duration, which allows for an impact pressure of around 5 GPa. Our work concerns the modelling and simulation of residual stresses induced by laser shocks in metallic alloys. Accurate models can be used as a predicting dimensioning tool, and as a way to study and understand the influence of the process parameters. Unlike already existing works, we wish to study the stress wave propagation in heterogeneous material, i.e. accounting for the microstructure of the specimen. In this work, we will consider the particular case of laminate materials, since their structure is easy to model, while still yielding interesting results. We consider the case of a stress wave propagating perpendicularly to a laminated microstructure. The problem being axisymmetric for a circular laser spot shape, we consider only the stress wave propagating in the direction of the shock, entailing a uniaxial strain modelling. The laminated structure is composed of two alternating metallic phases, with perfect interfaces, creating a periodic pattern. This heterogeneous problem is then solved numerically using Godunov-type methods which are suitable for hyperbolic equations.

To compare with literature results and to assess microstructure effects, we also compute the stress wave propagation in the corresponding equivalent homogeneous medium defined by homogenization of the laminate two-phase specimen. Thanks to our modelling hypotheses, we benefit from analytical results for the homogenization of the laminate structure. When considering an elastic perfectly plastic isotropic behaviour for all the layers, one obtains changes in the way the stress wave propagates, which can be observed either directly in the axial stress spatial profile for any given time, or in the time profile of the material velocity at the end of the simulated specimen (which is measurable experimentally). More precisely, the solution exhibits oscillations around a mean behaviour, which are linked to the distribution of the mechanical properties. The mean behaviour will be different from the homogeneous one, because the phases may not reach plasticity simultaneously for a given applied load. We propose a macroscopic plasticity model for this case, allowing the modelling of the mean elastic-plastic behaviour of the heterogeneous structure.

Wave propagation obtained with the homogenized model is globally in good agreement with those obtained when considering explicitly the specimen microstructure, but the large spatial fluctuation of the plastic strain cannot be reproduced. These results suggest that because the plastic strains profiles are impacted by the heterogeneous description, it might be the same for the residual stress profiles. However, the current 1D model being too restrictive to produce relevant residual stress results, we aim at expanding our approach to 2D models, allowing simultaneously the computation of residual stresses (which was of little relevance for the previous 1D model), and also a finer modelling of a metallic microstructure. We will present the results (wave

propagations, residual stresses) obtained for the 1D and 2D models. Comparison to experimental data will also be presented (possibly obtained on accumulative roll bonding specimen, in progress).

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

C. Tafani<sup>1\*</sup>, F. Momprou<sup>2</sup>, G. Laplanche<sup>3</sup>, G. Dirras<sup>4</sup>, L. Perrière<sup>1</sup>, I. Guillot<sup>1</sup> et J.-P. Couzinié<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>CEMES ; CNRS, Université de Toulouse, 29 rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse, France

<sup>3</sup>Institut für Werkstoffe, Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum, Germany

<sup>4</sup>Université 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](mailto: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, généralement monophasés, sans base majoritaire ni éléments minoritaires, composés à partir d'au moins cinq éléments métalliques en proportions proches. Ces alliages, dits à haute entropie de configuration, présentent une grande variété de propriétés, notamment mécaniques. Ainsi, les alliages constitués d'éléments réfractaires apparaissent comme particulièrement prometteurs pour des applications structurales à haute température. Ils sont, le plus souvent, de structure cubique centrée.

Les recherches récentes sur ces alliages restent, pour l'heure, principalement focalisées sur l'attractivité du concept et peu d'études ont approfondi les relations entre comportement et mécanismes de déformation plastique. Cependant, ce point est fondamental pour le développement futur de matériaux, notamment en conditions extrêmes.

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 envisagées 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 sur quatre alliages seront présentés.

# Plasticity induced by nanoindentation in a CrCoNi medium-entropy alloy studied by accurate electron channeling contrast imaging revealing dislocation-low angle grain boundary interactions

Frederic HABİYAREMYE<sup>1</sup>, Antoine GUITTON<sup>1,\*</sup>, Florian SCHÄFER<sup>2</sup>,  
Felicitas SCHOLZ<sup>3</sup>, Mike SCHNEIDER<sup>3</sup>, Jan FRENZEL<sup>3</sup>,  
Guillaume LAPLANCHE<sup>3</sup>, Nabila MALOUFI<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Université de Lorraine–CNRS–LEM3, 57070 Metz, France

<sup>2</sup>Department Materials Science and Engineering, Saarland University, 66123 Saarbruecken, Germany.

<sup>3</sup>Institut für Werkstoffe, Ruhr-Universität Bochum, Universitätsstr. 150, 44801 Bochum, Germany.

*\*[frederic.habiyaremye@univ-lorraine.fr](mailto:frederic.habiyaremye@univ-lorraine.fr)*

In the present work, interactions of nanoindentation-induced dislocations (NIDs) with a low-angle grain boundary (LAGB) are investigated in a single-crystalline CrCoNi medium-entropy alloy (MEA). Microstructural evolutions before and after nanoindentation were examined using accurate electron channeling contrast imaging. In the as-grown state, the alloy microstructure consists of subgrains separated by LAGBs. After nanoindentation on the (001) plane far away from LAGBs, the load-displacement curves exhibit the typical behavior of metals and alloys with a pop-in marking the elastic-plastic transition. This pop-in is related to the nucleation of NIDs that are observed to form pile-ups on {111} planes. In contrast, when indents are performed in the vicinity of a LAGB with a low misorientation angle of 0.24° and consisting of dislocations spaced ~60 nm apart, different micromechanical responses and deformation mechanisms are observed depending on the distance between the LAGB and the nanoindenter tip. When the distance between the LAGB and the nanoindenter tip is larger than four times the size of the indent (corresponding ratio:  $R > 4$ ), the LAGB does not affect the micromechanical response nor interact with NIDs. In contrast, when the indenter comes in direct or indirect contact with the LAGB ( $R < 1$ ), the load-displacement curve deviates at low loads from the elastic stage and pop-ins are not observed. In this case, the continuous deformation is accommodated by the movement of the pre-existing LAGB dislocations. For intermediate cases with  $1 < R < 4$ , the load of the initial pop-in is dependent on the local defect density. In this latter case, the pile-ups of NIDs directly impinge on the LAGB. Microstructural analyses reveal that the LAGB accommodates plasticity by blocking the NIDs, activating a dislocation nucleation site in the adjacent subgrain/emission of dislocation from the LAGB, and inducing slight motions of its constituent dislocations.

# Caractérisation par nanoindentation des effets de longueurs internes microstructurales dans les aciers IF (Interstitial Free)

L. Chamma<sup>1,2\*</sup>, J.M. Pipard<sup>2</sup>, A. Arlazarov<sup>2</sup>, T. Richeton<sup>1</sup>, J.S. Lecomte<sup>1</sup>, S. Berbenni<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Université de Lorraine, Arts et Métiers Paris Tech, CNRS, LEM3, Metz, F-57000, France

<sup>2</sup> ArcelorMittal Maizières Research SA, Voie Romaine - BP30320, 57283 Maizières-lès-Metz, France

\*Email : [laval.chamma@arcelormittal.com](mailto:laval.chamma@arcelormittal.com)

L'acier ferritique IF (Interstitial Free), élaboré par ArcelorMittal, est un acier monophasé polycristallin à basse teneur en carbone. Une identification des longueurs internes microstructurales est réalisée sur ce type d'acier en couplant l'observation microscopique par MEB et EBSD à la caractérisation mécanique fine par nano-indentation [1]. Ces longueurs internes sont définies par la taille des grains et par la « couche » de fortes densités de « dislocations géométriquement nécessaires » (« GNDs » en anglais) produites au cours de la déformation plastique autour des joints de grains en raison d'incompatibilités de réseau cristallin [2].

Des essais de nanoindentation ont été tout d'abord réalisés à différentes charges d'indentation sur un acier IF non déformé afin d'étudier l'influence de plusieurs facteurs sur la nano-dureté locale telles que : (i) l'orientation cristallographique des grains, (ii) la profondeur d'indentation obtenue à différentes charges, et (iii) la distance aux joints de grains. D'autres essais ont été réalisés à une faible charge sur des aciers IF déformés en traction à 2% et 10%. Les indents ont été réalisés dans des zones autour de joints de grains étudiés au MEB, et, préalablement sélectionnées à l'aide de cartographies EBSD permettant de caractériser les forts gradients de densités de GNDs. Les corrélations spatiales entre les gradients de nano-dureté et les densités de GNDs sont ainsi étudiées, pour différents joints de grains et taux de déformation plastique.

Les longueurs internes microstructurales dues aux GNDs ainsi extraites des mesures de nano-dureté seront introduites dans une Approche micromécanique à Champs Moyens à Longueurs Internes (« ACMLI »), ce qui permettra de mieux décrire le comportement aciers IF [3] puis celui des aciers multiphasés [4] grâce à des lois d'interaction dépendant de la taille des constituants et de leur topologie.

## Références :

- [1] W. C. Oliver and G. M. Pharr, *Journal of materials research*, vol. 19, no. 1, pp. 3-20, 2004.
- [2] Ashby, M. F, *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*, vol. 21, no. 170, pp. 399-424, 1970.
- [3] Pipard, J. M; Nicaise, N; Berbenni, S; Bouaziz, O; Berveiller, M, *Computational Materials Science*, vol. 45, no. 3, pp. 604-610, 2009.
- [4] A. Arlazarov, O. Bouaziz, J. Masse and F. Kegel, *Materials Science and Engineering: A*, vol. 620, pp. 293-300, 2015.

# Plasticité de micro-piliers de semiconducteurs (InSb, Si et GaN) : effet de taille et transition fragile-ductile

Florent Mignerot<sup>1\*</sup>, Bouzid Kedjar<sup>1</sup>, Ludovic Thilly<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institut Pprime, CNRS – Université de Poitiers – ENSMA, SP2MI 86962 Futuroscope

\*[florent.mignerot@univ-poitiers.fr](mailto:florent.mignerot@univ-poitiers.fr)

Les semi-conducteurs sont connus pour être fragiles à température ambiante et à pression atmosphérique à l'état massif mais lorsque la température augmente, une transition fragile-ductile (BDT) apparaît généralement autour de  $0,6 \times T_f$  ( $T_f$  étant la température de fusion du matériau) [1,2]. Les études existantes s'accordent sur un changement de nature des dislocations afin d'expliquer l'apparition de la BDT en température. Le développement d'instruments de gravure tel que le *Focused Ion Beam* (FIB) a permis la fabrication de petits objets tels que les micro-piliers pour mener l'étude de la plasticité aux petites échelles [3]. Une BDT liée à la taille des échantillons a ainsi pu être révélée dans le cas des semi-conducteurs et, pour l'antimoniure d'indium (InSb), les premières études ont suggéré un changement de nature de dislocations suivant la température de déformation, proche de ce qui est observé dans les échantillons massifs [4].

Cette étude vise à déterminer les mécanismes de déformation impliqués lors d'essais mécaniques de compressions in-situ de micro-piliers à température ambiante pour InSb, le silicium (Si) et le nitrure de gallium (GaN). Différentes méthodes d'analyses sont ici combinées pour identifier la nature des défauts induits lors de la déformation : des micro-compressions monotones ou avec sauts de vitesse de déformation permettant la détermination du volume d'activation ainsi que des analyses de lames MET provenant des micro-piliers déformés (lames transverses et longitudinales). Dans le cas d'InSb, les résultats obtenus suggèrent l'activation des mécanismes de déformation déjà observés dans le massif à l'ambiante (dislocations partielles isolées, défauts d'empilement étendus) ainsi que des nano-macles, résultat nouveau puisque le maclage n'a pas été observé dans le massif à l'ambiante pour InSb. En parallèle, des tests similaires sur des échantillons de Si, et de GaN, ont été effectués suggérant l'activation de mécanismes de déformation différents.

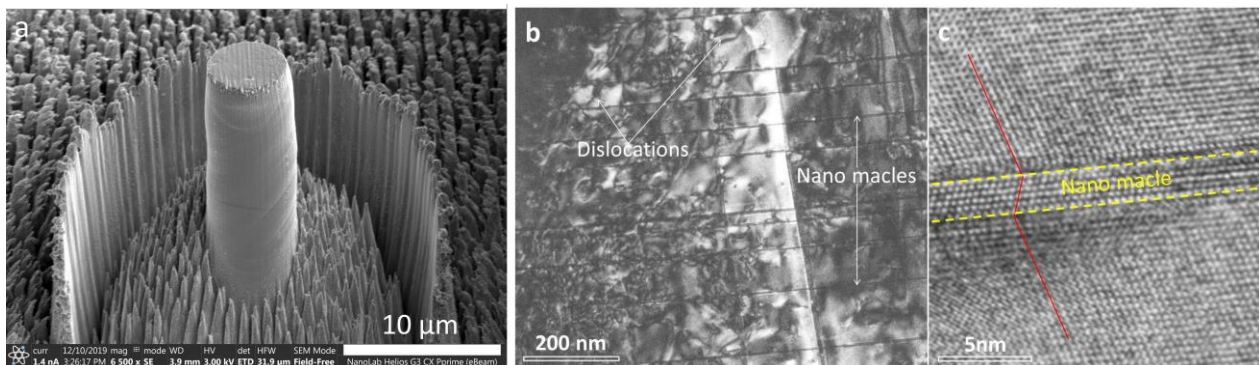


Fig. 1 – (a) Micrographie MEB d'un micro-pilier d'InSb déformé (5 µm de diamètre), (b) champ clair d'une lame MET transverse d'un micro-pilier d'InSb déformé et (c) image haute résolution d'une nano-macle provenant de la lame transverse.

- [1] B. Kedjar, L. Thilly, J.-L. Demenet, and J. Rabier, *Plasticity of Indium Antimonide between -176 and 400°C under Hydrostatic Pressure. Part I: Macroscopic Aspects of the Deformation*, Acta Mater. **58**, 1418 (2010).
- [2] B. Kedjar, L. Thilly, J.-L. Demenet, and J. Rabier, *Plasticity of Indium Antimonide between -176°C and 400°C under Hydrostatic Pressure. Part II: Microscopic Aspects of the Deformation*, Acta Mater. **58**, 1426 (2010).
- [3] M. D. Uchic, *Sample Dimensions Influence Strength and Crystal Plasticity*, Science **305**, 986 (2004).
- [4] J. M. Wheeler, L. Thilly, A. Morel, A. A. Taylor, A. Montagne, R. Ghisleni, and J. Michler, *The Plasticity of Indium Antimonide: Insights from Variable Temperature, Strain Rate Jump Micro-Compression Testing*, Acta Mater. **106**, 283 (2016).

# Grain Boundary Plastic Mechanisms on Nanostructured Metals

Romain Gautier<sup>1,2\*</sup>, Christophe Coupeau<sup>2</sup>, Marc Legros<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*CEMES-CNRS*

<sup>2</sup>*Institut Pprime-CNRS*

*\*[romain.gautier@cemes.fr](mailto:romain.gautier@cemes.fr)*

The Hall-Petch relationship establishes the proportional dependency of a metal's strength with the inverse of its grain size. This plastic phenomena, well understood by the dislocation model, can't be explained in the same way when the grain size become too small. In fact, grains are too thin for the usual plastic models to be applicable. The driving plastic mechanisms are thus related to the grains.

Previous studies have observed and simulated several plastic deformations such as grain rotation, grain sliding and shear-migration coupling (Figure 1). Some models have been proposed to predict shear-migration coupling [1], [4]. However, they have not yet been proven experimentally. This study is based on the shear-migration coupling, which is a rather new trend in the plasticity field [1], [2], [3]. To carry it out we use polycrystals of Aluminum, Copper and Nickel, with ultrafine grains. We aim to find experimental evidence of such mechanism and characterize it in order to correlate it with initial grain desorientations, habit plane, straining rate, chemical distribution, etc.

Transmission Electron Microscopy (TEM) analyses are combined with Automated Crystalline Orientation Mapping (ACOM-ASTAR) and in-situ straining experiments at room and high temperatures. Shear-coupled grain boundary migration has been quantify several times.

AFM experiments coupled with EBSD are also carried-out in order to identify grain boundaries and quantify the migration perpendicular to the surface of the sample.

[1].Cahn, John W., Yuri Mishin, et Akira Suzuki. « Coupling grain boundary motion to shear deformation ». *Acta Materialia* 54, no 19 (1 novembre 2006): 4953-75.

[2].Gottstein, G., D.A. Molodov, L.S. Shvindlerman, D.J. Srolovitz, et M. Winning. « Grain Boundary Migration: Misorientation Dependence ». *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 5, no 1 (janvier 2001): 9-14.

[3].Momprou, F., D. Caillard, et M. Legros. « Grain boundary shear–migration coupling—I. In situ TEM straining experiments in Al polycrystals ». *Acta Materialia* 57, no 7 (1 avril 2009): 2198-2209.

[4].Chen, Kongtao, Jian Han, Spencer L. Thomas, et David J. Srolovitz. « Grain boundary shear coupling is not a grain boundary property ». *Acta Materialia* 167 (1 avril 2019): 241-47.



# Three-dimensional structural imaging of defects in Pt nanocrystals

Jérôme Carnis<sup>1,2,#</sup>, Aseem Rajan Kshirsagar<sup>3</sup>, Longfei Wu<sup>1,2</sup>, Maxime Dupraz<sup>1,2</sup>, Stéphane Labat<sup>1</sup>, Michaël Texier<sup>1</sup>, Luc Favre<sup>1</sup>, Lu Gao<sup>4</sup>, Freddy Oropeza-Falacio<sup>4</sup>, Ehud Almog<sup>5</sup>, Jean-Sébastien Micha<sup>6</sup>, Emiel J. M. Hensen<sup>4</sup>, Steven J. Leake<sup>2</sup>, T. Schüllli<sup>2</sup>, Eugen Rabkin<sup>5</sup>, Olivier Thomas<sup>1</sup>, Roberta Poloni<sup>3</sup>, Jan-Philip Hofmann<sup>4</sup> and Marie-Ingrid Richard<sup>1,2,&\*</sup>

<sup>1</sup>Aix Marseille Université, CNRS, Université de Toulon, IM2NP UMR 7334, 13397, Marseille, France.

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

<sup>3</sup>SIMaP, Université Grenoble-Alpes, 38402 Saint-Martin d'Hères, France.

<sup>4</sup>Laboratory for Inorganic Materials and Catalysis, Department of Chemical Engineering and Chemistry, P. O. Box 513, 5600 MB Eindhoven, The Netherlands.

<sup>5</sup>Department of Materials Science and Engineering, Technion-Israel Institute of Technology, 3200003, Haifa, Israel.

<sup>6</sup>CRG-IF BM32 beamline at the European Synchrotron (ESRF), CS40220, 38043 Grenoble Cedex 9, France.

<sup>#</sup>Now, at Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), D-22607 Hamburg, Germany

<sup>&</sup>Now, at Univ. Grenoble Alpes, CEA Grenoble, IRIG, MEM, NRS, 17 rue des Martyrs 38000 Grenoble, France

\*[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.

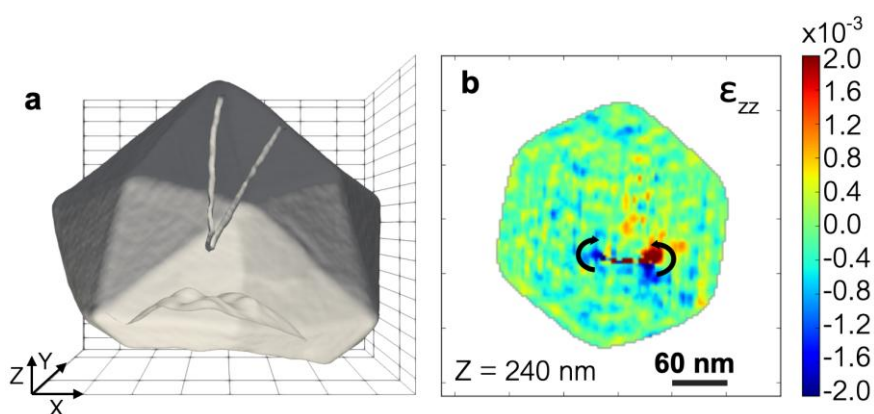


Figure 1: (a) Wireframe plots of the reconstructed electron density of a Pt particle drawn at 35% of the maximum density. A dislocation loop is evidenced. (b) Two-dimensional cut of the out-of-plane strain,  $\epsilon_{zz}$ , at a particle height of 240 nm.

[1] J. Carnis *et al.*, Twinning/detwinning in an individual platinum nanocrystal during catalytic CO oxidation, submitted (2021).