



COLLOQUE
PLASTICITÉ

Recueil de résumés

50 ANS
1969~2019

15-17 avril 2019
LILLIAD Amphi A



Présentation

Informations générales

L'Université de Lille accueille cette année la cinquantième édition du colloque Plasticité, sur le campus Cité Scientifique. Cette conférence réunit tous les ans une centaine de chercheurs venus de laboratoires français et des pays voisins. Depuis quelques années, certaines présentations sont aussi faites en anglais. Le colloque est organisé depuis plus de 40 ans à tour de rôle par les laboratoires de recherche les plus actifs dans le domaine de la plasticité. Les dernières éditions ont été organisées par l'institut Jean Lamour à Nancy (2018), l'INSA Rennes (2017), l'institut P-prime de Poitiers (2016) et le SIMaP de Grenoble (2015). Lille avait déjà accueilli le colloque Plasticité en 2011.

La Communauté scientifique « Plasticité »

Le colloque plasticité rassemble des chercheurs qui s'intéressent aux phénomènes physiques qui gouvernent la déformation plastique des matériaux. C'est une communauté active et variée qui regroupe expérimentateurs et théoriciens. Leurs sujets d'intérêt vont des mécanismes à l'échelle atomique à des problématiques industrielles à l'échelle d'une pièce dans tous types de matériaux (métaux, composites, polymères). C'est un lieu d'échange pour les experts des différentes techniques de pointe, à la fois expérimentales (synchrotron, MET, essais thermomécaniques, etc.) et de simulation (ab initio, dynamique moléculaire, DDD, FE/FFT, etc.). Enfin, le colloque Plasticité a un objectif affiché de formation et met en avant les présentations des doctorants : c'est souvent pour eux l'occasion de présenter leurs travaux pour la première fois devant un public à la fois exigeant et bienveillant.

Programme indicatif de la conférence

Tous les ans, la conférence a lieu sur 3 jours, avec des présentations réparties sur 4 demi-journées. Une session « poster » accompagnée d'un cocktail a lieu le premier soir, et les participants se retrouvent autour d'un dîner de gala le second soir. Cette année, la conférence se déroulera du 15 au 17 avril 2019. Les présentations se dérouleront le lundi après-midi, le mardi toute la journée et le mercredi matin dans l'amphithéâtre A de LILLIAD, au cœur du campus Cité Scientifique. Quatre chercheurs dont les dernières avancées sont particulièrement remarquables seront invités par le comité scientifique pour venir présenter leurs travaux en conférences plénières. La session poster aura lieu le 15 avril en début de soirée sur le site, et le dîner de gala sera organisé dans le restaurant Fort de Mons, à Mons-en-Barœul.

Quel impact local et régional ?

Le colloque Plasticité 2019 mettra l'accent sur des domaines d'excellence de l'Université de Lille comme le comportement mécanique des métaux, la plasticité des polymères, et le fluage des minéraux. Il sera l'occasion de présenter la nouvelle bibliothèque universitaire LILLIAD Learning Center à la communauté Plasticité : la manifestation s'y déroulera intégralement. En incitant les étudiants à participer au colloque, nous souhaitons faire connaître les formations locales en sciences des matériaux à nos collègues enseignants-chercheurs dans ce domaine. Nous souhaitons enfin profiter de l'organisation du colloque Plasticité à Lille pour mettre en avant les activités industrielles locales et appelons les entreprises installées dans la région Hauts de France à contribuer à la réussite du colloque en venant présenter leurs activités et leurs attentes à la communauté.

Comité d'organisation



Pr. Philippe Carrez



Pr. Valérie Gaucher



Dr. Pierre Hirel



Dr. Alexandre Mussi



Dr. Karine Gouriet



Dr. Antoine Ruffini

Gestion administrative et financière

Contact : Danièle Duveau

Gestion financière : Corinne Henry

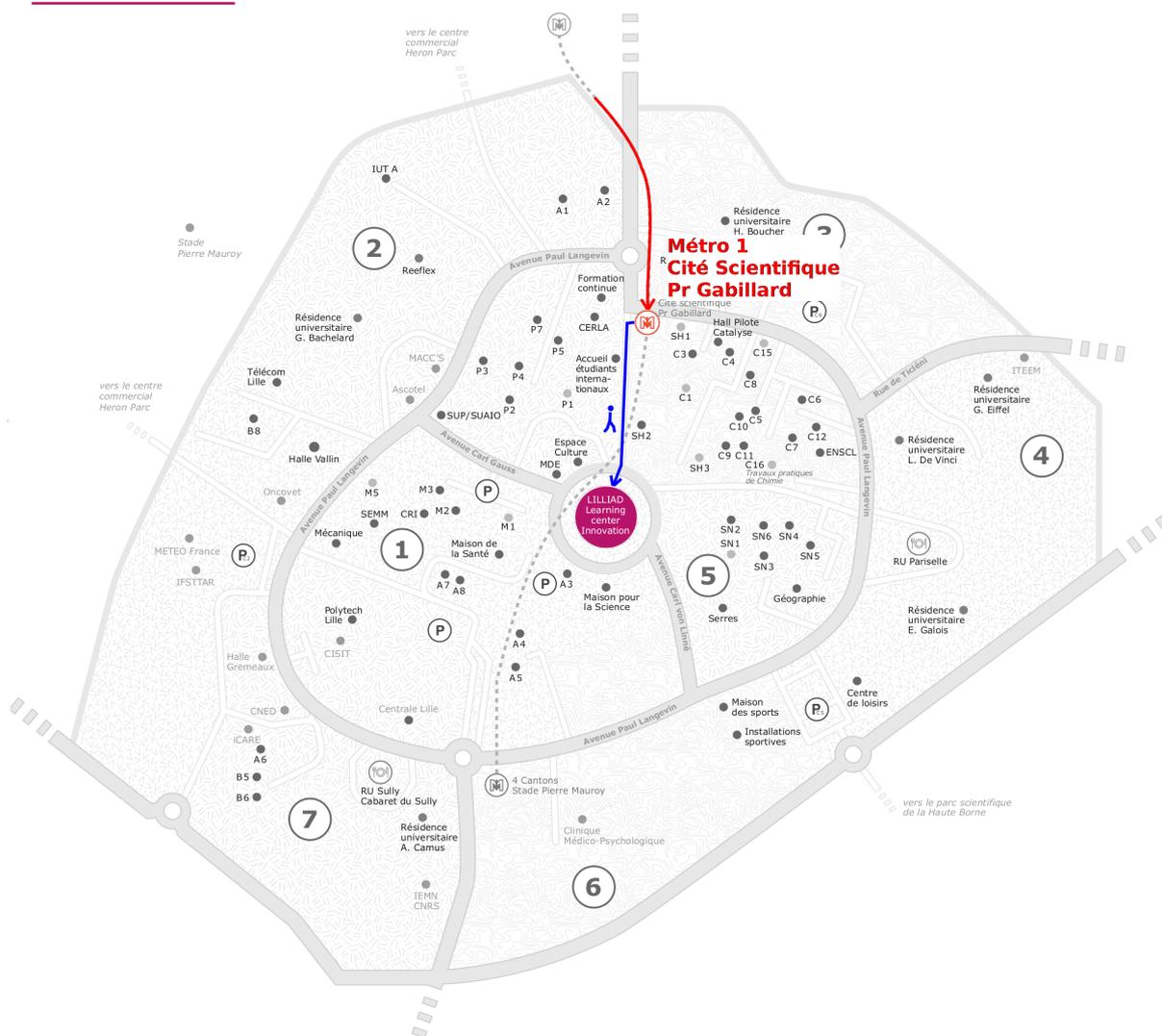
Plan d'accès

Pour sa cinquantième édition, le colloque plasticité aura lieu à l'Université de Lille du 15 au 17 avril 2019, à **LILLIAD Learning Center** sur le campus Cité Scientifique, à Villeneuve d'Ascq.

Depuis le centre de Lille ou les gares, prenez le **Métro Ligne 1** en direction de 4 Cantons/Cité Scientifique, et descendez à l'arrêt **Cité Scientifique Pr Gabillard**. En sortant de la station, suivez la ligne de métro sur environ 150 mètres pour arriver à LILLIAD où a lieu la conférence.

Horaires et tarifs des métros sur le site d'Ilévia : <https://www.ilevia.fr/fr/>

UNIVERSITÉ DE LILLE, SCIENCES ET TECHNOLOGIES PLAN CAMPUS



CITÉ SCIENTIFIQUE

Dîner de gala



Le dîner de gala aura lieu mardi soir, au restaurant **Fort de Mons** à Mons-en-Barœul.

En sortant de LILLIAD, prenez le Métro Ligne 1 jusqu'à l'arrêt Gare Lille Flandres. Là, prenez alors le Métro Ligne 2 en direction de Tourcoing CHR Dron, et descendez à l'arrêt **Fort de Mons**.

Si vous vous déplacez en voiture, entrez l'adresse suivante dans votre GPS :

4 rue de Normandie
59730 Mons-en-Barœul

Programme

Lundi 15 avril

11:30-14:00 *Accueil des participants*

12:30-14:00 *Repas*

14:00-14:20 *Ouverture du colloque*

14:20-15:00 Florence Pettinari-Strumel

Influence de la chimie locale sur les mécanismes de plasticité : ce que peut apporter l'approche expérimentale par MET

15:00-15:20 Philippe Castany

Maclage nano-hiérarchisé d'un alliage de titane α métastable superélastique

15:20-15:40 Jean-Philippe Monchoux

Mécanismes microscopiques de plasticité en fatigue autour de 800° C dans TiAl

15:40-16:00 Jérémie Bouquerel

Apport du couplage mésoscopique OIM-ECCI dans la compréhension des phénomènes de plasticité cyclique

16:00-16:40 *Pause café - Installation des posters*

16:40-17:00 Imen Harbaoui

Anisotropic plastic behavior of TA6V under tensile-compressive loading and microstructure investigation

17:00-17:20 Gabriel L'Hôte

Étude de la dynamique des dislocations de monocristaux sous sollicitation cyclique : émission acoustique et caractéristiques microstructurales

17:20-17:40 Manas Upadhyay

Microstructural evolution during biaxial load path changes of stainless steel: in-situ neutron diffraction and multi-scale modeling

17:40-18:00 Komlavi Eloh

Modélisation par FFT des pics de diffraction à l'aide d'un opérateur de Green discret et une méthode de sous-voxlisation et comparaisons aux résultats expérimentaux

18:00-19:30 *Session posters et cocktail*

Mardi 16 avril

08:30-09:10 Jean-Louis Barrat

Modélisation multiéchelle de l'écoulement de solides désordonnés

09:10-09:30 Tristan Albaret

Plasticité dans les amorphes : des simulations à l'échelle atomique vers les inclusions d'Eshelby

09:30-09:50 Tiana Deplancke

Modélisation du comportement mécanique du UPMWPE : de la structure sphérolithique à la transformation fibrillaire

09:50-10:10 Didier Long

Theory of strain-hardening in glassy polymers: a microscopic theory

10:10-10:30 Shanshan Xu

Influence of macromolecular orientation on mechanical behavior of glassy polymers

10:30-11:00 *Pause café*

11:00-11:20 François Louchet

Plasticité : entre Orowan et criticalité

11:20-11:40 Mikhail Lebyodkin

Sur l'interrelation entre l'effet Portevin-Le Chatelier et la striction

11:40-12:00 Christophe Tromas

Effet Portevin-Le Chatelier dans les alliages d'aluminium : étude par nanoindentation à température ambiante et haute température

12:00-12:20 Salomé Parent

Étude des mécanismes de déformation induits par nanoindentation à haute température sur la phase MAX Ti_2AlN

12:20-14:00 *Repas*

Mardi 16 avril (suite)

14:00-14:40 Laurent Delannay

Plasticité cristalline en présence de macles fines : évaluation d'un modèle sur base d'observations à l'échelle du grain

14:40-15:00 Tuan Le Lu

Modélisation multi-échelle de nouveaux alliages de titane de type TRIP/TWIP

15:00-15:20 Céline Gérard

Compréhension des mécanismes locaux de déformation des micro-fils de nickel : essais mécaniques in-situ sous faisceau synchrotron et simulation éléments finis

15:20-15:50 Pause café

15:50-16:10 Marie Landeiro Dos Reis

Modélisation du glissement assisté par la montée d'une dislocation coin en interaction avec des amas lacunaires

16:10-16:30 Julien Guénolé

Basal slip in Laves phases: the synchroshear dislocation

16:30-16:50 Jacques Rabier

Le cœur des dislocations dans les grenats naturels : un habitat pour des microorganismes endolithiques ?

16:50-17:00 *Les 50 ans du colloque Plasticité !*

17:00-17:30 Georges Saada

L'émergence de la métallurgie physique en France

17:30-18:00 Ladislav Kubin

Plasticité 1970-2000 : les Trente Glorieuses

19:30 Dîner de gala

Mercredi 17 avril

08:30-08:50 Alexandre Dimanov

Glissement cristallin et glissement aux joints de grains : les deux temps de la partition plastique

08:50-09:10 Claude Fressengeas

Migration d'interfaces en mécanique des champs de dislocations et de désinclinaisons généralisées

09:10-09:30 Marc Legros

Dislocation and sub-grain boundaries dynamics in mono-like PV Si

09:30-09:50 Vincent Taupin

Structure et cinétique de défauts tridimensionnels sur le joint de macles cohérent $\{10\bar{1}2\}$ dans le magnésium : simulations atomistiques et champ de phase

09:50-10:10 Pierre-Antoine Geslin

Fluctuations thermiques des dislocations

10:10-10:30 Pause café

11:00-11:20 Benjamin Bertin

Étude par simulation atomistique de l'endommagement d'un film mince au cours du flambage

11:20-11:40 Pierre Godard

Essais de relaxation sous faisceau de rayons X : applications à des films minces d'or nanocristallins

11:40-12:00 Dimitri Chauraud

Comment les traces de glissement modifient la reconstruction de l'Au(111)

12:00-12:20 Maxime Guillotte

Modélisation et propriétés mécaniques de l'or nanoporeux non-revêtu et revêtu de silicium amorphe

12:20-14:00 Clôture et repas

Présentations orales

Étude par simulation atomistique de l'endommagement d'un film mince au cours du flambage

Florence Pettinari-Strumel ¹

¹ CEMES / CNRS Toulouse, France

On sait depuis longtemps que les mécanismes de plasticité sont en grande partie gouvernés par l'interaction des dislocations avec la microstructure. Le cas le plus évident est celui des alliages à durcissement structural pour lesquels la limite d'élasticité est directement liée aux interactions des dislocations avec des précipités parfois de taille nanométrique. Des données expérimentales issues d'essais de traction MET in situ ont d'ailleurs permis d'établir, dans ce type d'alliages, un lien entre les propriétés mécaniques et les interactions des dislocations avec ces nano-obstacles [1, 2]. Si le rôle des éléments d'alliage est clairement identifié dans ces alliages à durcissement structural, il n'en est pas de même pour les alliages à durcissement par effet de solution solide. Peut-être est-ce parce que cet effet est « invisible » ? En tout cas, ce sujet demeure une préoccupation scientifique toujours actuelle. Les éléments d'alliage peuvent influencer les interactions des dislocations avec la solution solide par différentes voies. On peut citer par exemple l'influence de la chimie sur l'énergie de faute d'empilement - qui contrôle la nucléation de dislocations partielles - ou sur la formation d'un ordre à courte distance - qui génère la formation d'empilements de dislocations -. Au cours de cette présentation, différents résultats sur les effets de la chimie locale seront discutés. On montrera combien l'analyse expérimentale des dislocations issue d'observations par Microscopie Electronique à Transmission (MET), notamment au cours d'essais de traction MET in situ, permet de caractériser la solution solide explorée et d'identifier les mécanismes pertinents qui contrôlent la déformation. Les exemples présentés seront issus d'études menées dans des superalliages à base de Nickel [3-4]. On s'attachera à montrer que la méthodologie utilisée peut s'appliquer à toute solution solide complexe, tels que les alliages à Haute Entropie, qui passionnent la communauté scientifique, en témoignent les nombreuses publications dans ce domaine [e.g. 5-7].

Références

- [1] F. Delmas et al. *Materials Science and Engineering A* **340** (2003) 286-291.
- [2] Pettinari-Sturmel, F. et al. *Materials Science and Engineering: A* **576** Issue 1 (2013) DOI :10.1016/j.msea.2013.03.065.
- [3] F. Pettinari-Sturmel et al. *Z. Metallkd* **97** (2006) 3.
- [4] F. Pettinari-Sturmel et al. *Mat. Sci. Eng. A* (2019) doi : 10.1016/j.msea.2019.02.088
- [5] S. Gorse et al., *Comptes Rendus Physique* 2018 **19** (8) pp: 721-736 doi :10.1016/J.CRHY.2018.09.004.
- [6] J.-P. Couzinié, et al (2018) *Data in Brief*. doi:10.1016/j.dib.2018.10.071.
- [7] T.M. Smith et al. *Acta Materialia* **110** (2016) 352-363 doi: 10.1016/j.actamat.2016.03.045

Mots-Clés: Cloquage, Plasticité, Films minces, Simulation atomistique

Maclage nano-hiérarchisé d'un alliage de titane β -métastable superélastique

Philippe Castany¹, Yang Yang¹, Thierry Gloriant¹

¹ Institute of Chemical Sciences of Rennes (UMR CNRS 6226) – INSA Rennes – 20 avenue des Buttes de Coësmes, 35043 Rennes cedex, France

Les alliages de titane beta-métastable sont des candidats très prometteurs pour le remplacement des différents alliages métalliques utilisés actuellement dans le domaine biomédical car ils possèdent une bien meilleure compatibilité avec l'organisme, que ce soit mécanique ou biologique. La microstructure de ces alliages est uniquement composée de phase beta (structure cubique centrée) qui est retenue à température ambiante par ajout d'éléments beta-stabilisants et par trempe. Selon la composition chimique de l'alliage, la phase beta peut être mécaniquement instable. Lorsque le matériau est déformé, il est alors le siège d'une transformation martensitique sous contrainte vers une phase alpha" orthorhombique. Lorsque cette transformation est réversible, ces alliages possèdent alors une très grande déformation recouvrable et sont dits superélastiques. Dans cette étude, l'alliage superélastique Ti2448 de composition Ti-24Nb-4Zr-8Sn (% massique) est étudié car il a la particularité de présenter des macles contenant un grand nombre de macles secondaires. A partir d'essais de traction in situ sous rayonnement synchrotron, d'observations en microscopie électronique en transmission (MET) et de reconstruction cristallographique, la séquence de déformation menant à ces macles nano-hiérarchisées sera déterminée.

Mots-Clés: Alliage de titane, maclage, superélasticité

Mécanismes microscopiques de plasticité en fatigue autour de 800°C dans TiAl

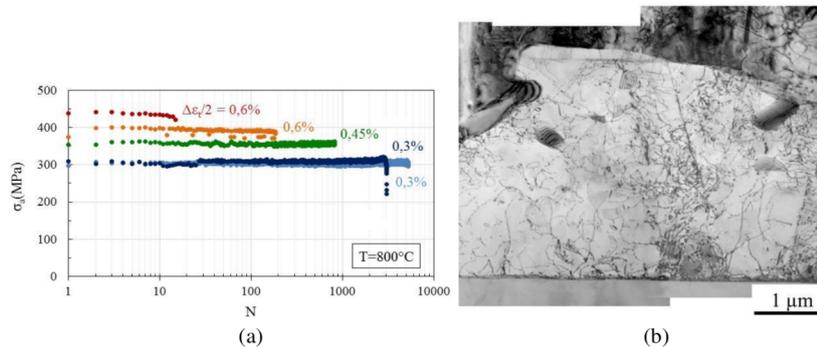
Soumaya Naanani , Alain Couret ¹, Muriel Hantcherli , Catherine Mabru ²,
Jean-Philippe Monchoux ³

¹ Centre d'élaboration de matériaux et d'études structurales (CEMES) – CNRS : UPR8011 – 29 Rue Jeanne Marvig - BP 4347 31055 TOULOUSE CEDEX 4, France

² Université de Toulouse, Institut Clément Ader, UMR CNRS 5312 ; UPS, INSA, ISAE-SUPAERO, EMAC (ICA, UMR CNRS 5312) – Institut Supérieur de l'Aéronautique et de l'Espace (ISAE) : ISAE-SUPAERO – 3, rue Caroline Aigle F-31400 Toulouse, France

³ Centre d'élaboration de matériaux et d'études structurales (CEMES) – CNRS : UPR8011 – 29 Rue Jeanne Marvig - BP 94347 31055 TOULOUSE CEDEX 4, France

Les alliages TiAl, en raison de leur faible masse volumique et de leur grande résistance mécanique à chaud, sont particulièrement attractifs pour servir dans des moteurs en aéronautique ou en automobile. Néanmoins, leur comportement en fatigue à hautes températures est peu exploré, en dépit de l'importance de ce mode de sollicitation pour les applications industrielles envisagées. En particulier, les mécanismes microscopiques élémentaires mis en jeu sont très mal compris. Nous nous sommes donc intéressés à cette question dans le cas de l'alliage TiAl IRIS développé par le CEMES, qui est en voie d'industrialisation. Nous avons soumis cet alliage, particulièrement résistant à chaud, à des essais de fatigue oligocyclique en traction-compression aux températures ultimes prévues pour les applications industrielles, c'est-à-dire autour de 800°C. Les essais réalisés montrent un comportement étonnamment stable (Fig. 1a), sans durcissement ni adoucissement. Par ailleurs, malgré des déformations plastiques cumulées très élevées (supérieure à 500 %), les densités de dislocations observées sont relativement faibles (Fig. 1b). Par une analyse fine des mécanismes de déplacement des dislocations par MET, nous interprétons ces deux résultats surprenants par une très grande réversibilité du mouvement des dislocations lors des phases de traction et de compression pendant les essais de fatigue. Cette réversibilité serait liée à l'absence d'obstacles au mouvement des dislocations. En particulier, les nombreuses boucles de glissement dévié, générées par le grand nombre d'aller-retours des dislocations, s'annihilent probablement par des mécanismes très actifs de montée. La remarquable stabilité mécanique en sollicitation cyclique, très intéressante du point de vue des applications industrielles, serait donc la conséquence inattendue de mécanismes de montée et de diffusion, qui seront discutés.



(a) Variation de l'amplitude de contrainte en fonction du nombre de cycles pour différentes déformations imposées, lors d'essais de fatigue oligocyclique en traction-compression à 800°C. (b) Sous-structure de déformation après $N=5276$ cycles, soit une déformation plastique cumulée supérieure à 500%. Noter la relativement faible densité de dislocations, compte tenu de l'importance de la déformation plastique cumulée.

Mots-Clés: Dislocations, Fatigue, TiAl, MET

Apport du couplage mésoscopique OIM – ECCI dans la compréhension des phénomènes de plasticité cyclique

Jeremie Bouquerel¹, Jean-Bernard Vogt¹

¹ Unité Matériaux et Transformations - UMR 8207 (UMET) – Institut National de la Recherche Agronomique : UMR0638, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Lille, Université de Lille, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8207 – Université Lille 1 Bâtiment C6 59655 Villeneuve d’Ascq, France

Les dernières décennies ont permis une amélioration constante de la technique EBSD. Cela permet l’étude d’un large éventail d’applications, allant d’analyse de texture standard à l’évaluation locale des niveaux de déformations. Concernant la fatigue oligocyclique, l’EBSD s’est longtemps cantonné à la détermination du chemin de propagation de fissures. Parallèlement, la microscopie en transmission est longtemps restée l’outil de choix pour l’étude locale de la plasticité. Néanmoins, les apports obtenus restent plus ou moins qualitatifs.

Le travail ici proposé se focalise sur l’utilisation de l’imagerie d’orientation (OIM-EBSD) dans le but d’identifier des marqueurs de la déformation plastique associée à l’endommagement en fatigue. Le comportement d’alliages métalliques possédant des microstructures plus ou moins complexes a été investigué. La réponse complexe de ces alliages vis-à-vis des chargements cycliques s’expliquent au travers de l’évolution des structures de dislocations rencontrées. La présence de dislocations pouvant induire des rotations de cristal et modifier la qualité des clichés EBSP, des critères de désorientation et de qualité d’image ont été évalués. Enfin, la corrélation entre l’évolution microstructurale et les mesures obtenues en EBSD ont été faites par imagerie ECCI.

Pour les matériaux considérés, le couplage entre OIM et ECCI montre un intérêt certain au regard de la plasticité locale. D’une part, une information qualitative est obtenue en cartographiant les paramètres de désorientations (KAM, GROD, GOS) ainsi que les sous-joints et joints de grains. On obtient, d’autre part, une description plus quantitative au travers de l’étude de profils locaux ou de distributions statistiques de ces valeurs. Ainsi, l’emploi couplé d’informations qualitatives et quantitatives à une échelle mésoscopique permet une meilleure compréhension des mécanismes auxquels s’intéresse la communauté « fatigue ». Dans les cas évoqués, sont ainsi traités la localisation de déformation pouvant influencer sur l’amorçage de fissures et le lien entre évolution microstructurale vis-à-vis des phénomènes de durcissement/adoucissement cyclique.

Mots-Clés: Fatigue, EBSD, OIM, ECCI

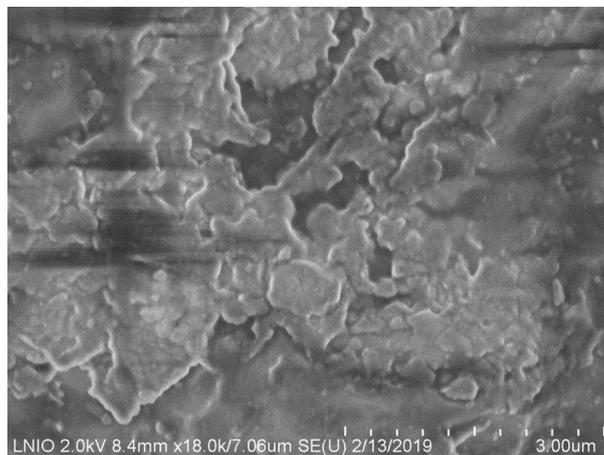
Anisotropic plastic behavior of TA6V under tensile-compressive loading and microstructure investigation

Imen HARBAOUI^{1,2}, Rym HARBAOUI^{1,2}, Amna ZNAIDI

¹ University Tunis El Manar, Tunis, Tunisia

² LRMAI National Engineering School of Tunis, Tunis, Tunisia

Titanium alloys in general and specifically TA6V alloy are traditionally present in the field of transportation, basically in aircraft skins and turbo- reactors. The major advantage of these titanium alloys is linked to their exceptional mechanical behavior presenting a good mechanical resistance in different conditions of solicitations, an important duration of life associated to a low density; these are capital parameters for this kind of applications. Therefore, titanium is now widely used in the conception of high precision manufactured products such as airplane's engine in addition to Hip and knee prosthesis and other implants. The present work considers the study of the anisotropic plastic behavior of Ti-Al6-V4 and discusses some microstructural features under particular tests. To achieve such finality, a modeling study followed by an identification strategy is imposed. Thus, the use of the CPB06 model taking into consideration the microstructural state of titanium is required to have a reliable model for a further implementation in finite element software. The results found by this modeling and identification will serve to study the mechanical behavior of this material under several solicitations and SEM observations will focus on the defects of some deformed specimen in micro scale.



References

- [1] Oana Cazacu, International Journal of Plasticity,(2006)
- [2] Mohsan Jelani, Journal of Materials Research Express (2018)

Keywords: hardening , Identification, Plasticity, Titanium, microstructure

Étude de la dynamique des dislocations de monocristaux sous sollicitation cyclique : émission acoustique et caractérisations microstructurales

Gabriel L'Hôte¹, Cazottes Sophie¹, Maurine Montagnat², Stéphanie Deschanel¹

¹ Matériaux, ingénierie et sciences (MATEIS) – CNRS : UMR5510, Institut National des Sciences Appliquées (INSA) - Lyon, Institut National des Sciences Appliquées [INSA] - Lyon – Bâtiment Blaise Pascal 7, avenue Jean Capelle 69621 VILLEURBANNE CEDEX, France

² Institut des Géosciences de l'Environnement (IGE) – Institut Polytechnique de Grenoble - Grenoble Institute of Technology, Institut national des sciences de l'Université, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR5001, Université Grenoble Alpes, Institut national des sciences de l'Université, Institut national des sciences de l'Université, Institut national des sciences de l'Université – UGA - IGECS 4070038 058 Grenoble Cedex 9, France

Des essais monotones (traction / fluage), suivis par émission acoustique (EA), effectués sur mono et polycristaux de glace et métalliques (HC, CFC) ont mis en évidence la coexistence de deux types de fluctuations de la plasticité : des fluctuations Gaussiennes associées à de nombreux mouvements de dislocations non corrélés et des fluctuations distribuées en loi de puissance, inhomogènes dans le temps et l'espace, sous forme d'avalanches de dislocations. Cependant, ces observations ont été principalement obtenues sous chargement monotone. Qu'en est-il du cas de la sollicitation cyclique, où la formation de structure de dislocation est favorisée ?

L'étude porte sur des monocristaux de cuivre pur. Ce choix permet de limiter les sources d'EA aux mouvements de dislocations et aux microfissurations et éviter des effets dus à des inclusions et aux joints de grains. Des essais de fatigue oligocyclique, suivis par EA, sont effectués à contrainte imposée, avec différents palier de contrainte ($R=0,1$), à une fréquence de 0,1Hz. Les échantillons sont caractérisés au MEB via la méthode ECCI (Electron Channeling Contrast Imaging), méthode permettant l'observation des dislocations. La structure de dislocation peut alors être caractérisée avant et après les essais de fatigue cyclique, de manière à relier l'évolution de la plasticité à la structure des dislocations présentes dans le matériau.

Les différents essais montrent que l'EA s'atténue au cours des cycles de fatigue, avec de brusques sauts d'énergie, apparaissant régulièrement dans le domaine plastique. Les résultats d'EA montrent qu'au cours des essais de fatigue, l'enchevêtrement des dislocations croît et réduit le libre parcours moyen des dislocations mobiles. Les avalanches de dislocations, sous forme de signaux de grandes énergies sont enregistrées pendant le début des essais principalement. Une augmentation de l'importance des avalanches de dislocation dans la plasticité est observée à mesure que la contrainte imposée augmente / que la microstructure se forme. Une organisation complexe de la microstructure de dislocation est observée par ECCI à mesure que l'échantillon est déformé.

Mots-Clés: Fatigue cyclique, émission acoustique, ECCI, cuivre monocristallin

Microstructural evolution during biaxial load path changes of stainless steel: in-situ neutron diffraction and multi-scale modeling

Manas V. Upadhyay ¹, Anirban Patra ², Wei Wen ³, Tobias Panzner ⁴, Jan Capek ⁴, Steven Van Petegem ⁵, Carlos Tome ⁶, Ricardo A. Lebensohn ⁷, Helena Van Swygenhoven ^{8,9}

¹ Laboratoire de mécanique des solides (LMS) – Ecole Polytechnique, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR7649 – Route de Saclay 91128 PALAISEAU CEDEX, France

² Indian Institute of Technology - Mumbai (IITB) – Mumbai, 400076, Inde

³ MST-8, Theoretical Division, Los Alamos National Laboratory (MST8-LANL) – Los Alamos, NM, 87545, États-Unis

⁴ NIAG, NUM, Paul Scherrer Institute – 5232 Villigen PSI, Suisse

⁵ PEM, PSD, Paul Scherrer Institute – 5232 Villigen PSI, Suisse

⁶ MST, Los Alamos National Laboratory – Los Alamos, NM 87845, États-Unis

⁷ Theoretical Division, Los Alamos National Laboratory – Los Alamos, NM 87845, États-Unis

⁸ PEM, PSD, Paul Scherrer Institut – 5232 Villigen PSI, Suisse

⁹ NXMM - IMX - Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne – 1015 Lausanne, Suisse

Engineering materials are often subjected to complex load path changes during their forming processes or under service conditions. Their complex deformation history determines their subsequent mechanical and microstructural response. The origin of these macroscale phenomena is found at the microscopic scale whose evolution depend on the type of loading. Our current understanding of the material behavior, and development of constitutive models, is mainly driven by experimental studies performed under uniaxial loadings and load reversals. However, this may not be sufficient to appropriately capture the material response in complex part geometries subjected to multi-axial load path changes. The present work is relevant to sheet metal forming and applications during which materials are typically subjected to biaxial load path changes. Recently, a series of in-situ neutron diffraction experiments were performed to study the microstructural response of 316L stainless steel cruciform samples subjected to biaxial load path changes. To better understand the material behavior, a combined approach including the viscoplastic self-consistent finite element (VPSC-FE) scheme and the elasto-viscoplastic fast Fourier transform (EVP-FFT) model is proposed [1]. The passage of information between the experiments and simulations was based on a previous work where the aim was to understand the material behavior during monotonic biaxial loading response of 316L steel [2]. At the macroscale, the VPSC-FE model converts experimental boundary conditions to predict the cruciform gauge stresses. These macro-stresses are used as homogeneous boundary conditions to drive the polycrystalline EVP-FFT model. Both models use the same dislocation density based hardening law that accounts for load path changes. Following validation with in-situ digital image correlation and in-situ neutron diffraction experiments, the multi-scale model is applied to quantitatively explain the microstructural behavior [3], including the lattice strain and texture (through diffraction peak intensity) evolution.

[1] Upadhyay et al., *Int. J. Plast.*, 108 (2018) 144 – 168.

[2] Upadhyay et al., *Acta Mat.*, 118 (2016) 28 – 43.

[3] Upadhyay et al., *Int. J. Plast.*, *under review*.

Modélisation par FFT des pics de diffraction à l'aide d'un opérateur de Green discret et une méthode de sous-voxelisation et comparaisons aux résultats expérimentaux

Komlavi Senyo Eloh^{1,2}, Alain Jacques¹, Stéphane Berbenni²

¹ Institut Jean Lamour (IJL), Université de Lorraine, CNRS, f-54000 Nancy, France

² Laboratoire d'Étude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3), Université de Lorraine, CNRS, f-57073 Metz, France

L'AM1 est un superalliage base Nickel monocristallin mais biphasé, très utilisé dans les turbines des avions pour ces propriétés mécaniques. Son comportement mécanique en fluage à très haute température est étudié par diffraction des rayons X in-situ haute résolution. Lors de ces essais, plusieurs milliers d'images 2D d'un pic de diffraction sont enregistrées. L'interprétation de ces images n'est pas triviale. La modélisation numérique des pics de diffraction est une piste intéressante pour compléter cette étude. Le but de ce travail est de mettre au point une méthode efficace pour évaluer le champ de déplacement dans le matériau pour ensuite générer des diagrammes de diffraction. Du fait de leur efficacité en temps de calculs et mémoire, les méthodes FFT sont de plus en plus utilisées pour calculer les champs locaux dans les matériaux hétérogènes pour des microstructures périodiques. Cependant l'utilisation de ces algorithmes introduit des oscillations numériques et donc des imprécisions sur les champs mécaniques au voisinage des discontinuités physiques matérielles. Ces oscillations sont dues à l'opérateur de Green classique et à la voxelisation de la microstructure. Pour les supprimer, deux nouveaux opérateurs de Green discrets [1] périodiques sont développés pour les solutions en déformation et en déplacement. Ces opérateurs discrets permettent un calcul très précis et sans oscillations des champs locaux. Les effets de la voxelisation sont particulièrement visibles dans le cas des boucles de dislocation inclinées par rapport à la grille FFT : des artefacts apparaissent sur les champs de déplacement. Ces artefacts sont supprimés par l'application d'une méthode de sous-voxelisation [2]. Le champ de déplacement final obtenu sans artefact numérique est utilisé pour la simulation de diagrammes de diffraction des Rayons X. Ces diagrammes sont utilisés pour l'étude de la microstructure et du comportement mécanique in situ des matériaux. La densité et la distribution spatiale des dislocations sont étudiées avec ce modèle numérique.

Références

- [1] K. S. Eloh, A. Jacques, S. Berbenni. Development of a new consistent discrete Green operator for FFT-based methods to solve heterogeneous problems with eigenstrains, IJP,2019, in press
- [2] K. S. Eloh, A. Jacques, G. Ribarik, S. Berbenni. The Effect of Crystal Defects on 3D High-Resolution Diffraction Peaks: A FFT-Based Method. Materials. 2018, 11, 1669.

Modélisation multiéchelle de l'écoulement de solides désordonnés

Jean-Louis Barrat¹

¹ Université Grenoble Alpes

Les solides désordonnés [1] ou amorphes recouvrent une large classe de systèmes, "mous" (pâtes colloïdales, mousses, grains) ou "durs" (verres métalliques, verres d'oxydes), qui ne sont pas ordonnés au niveau microscopique. Ils ne présentent donc pas de dislocations comme les solides cristallins. Leur écoulement, qui se produit au-delà d'une contrainte seuil, est le résultat de l'instabilité locale de zones localisées, les "zones de cisaillements" (shear transformations), qui interagissent élastiquement entre elles, donnant lieu à des phénomènes collectifs d'avalanche. Cette physique est bien décrite par des modèles élastoplastiques [2] de type "automate cellulaire".

Après avoir motivé sur la base des résultats de simulation microscopiques (dynamique moléculaire) et de résultats expérimentaux ces modèles élastoplastiques, je discuterai :

- l'analyse champ moyen de ces modèles et le type d'équation constitutive qui en résulte. [3]
- l'analyse statistique des "avalanches" qui composent l'écoulement. [4]
- la possibilité de "bandes de cisaillement" dans le cadre de ces modèles. [5]

Références

- [1] "Modeling deformation and flow of disordered materials" J-L. Barrat, J. de Pablo, MRS Bulletin 32, 941 (2007) ; " Modeling the mechanics of amorphous solids at different length scale and time scale." , D. Rodney, A.Tanguy, D. Vandembroucq, Modelling and simulation in materials science and engineering, 19, 083001 (2011).
- [2] "Deformation and flow of amorphous solids: Insights from elastoplastic models" A Nicolas, EE Ferrero, K Martens, JL Barrat, Reviews of Modern Physics 90, 045006 (2018)
- [3] "On the relevance of disorder in athermal amorphous materials under shear" E. Agoritsas, E. Bertin, K. Martens, J.-L. Barrat Eur. Phys. J. E, 38, 71 (2015).
- [4] "Driving rate dependence of avalanche statistics and shapes at the yielding transition." C Liu, EE Ferrero, F Puosi, JL Barrat, K Martens, Physical Review Letters, 116 065501 (2016).
- [5] Permanent shear localization in dense disordered materials due to microscopic inertia VV Vasisht, ML Goff, K Martens, JL Barrat, preprint arXiv:1812.03948 (2018)

Plasticité dans les amorphes : des simulations à l'échelle atomique vers les inclusions d'Eshelby

Tristan Albaret¹, Francesca Boioli , David Rodney , Anne Tanguy

¹ Institut Lumière Matière (ILM) – CNRS : UMR5306, Université Claude Bernard - Lyon I (UCBL) – Domaine Scientifique de La Doua, Bâtiment Kastler, 10 rue Ada Byron, 69622 Villeurbanne CEDEX, France

Depuis les travaux d'Ali Argon en 1979 [1], la description de la plasticité dans les solides amorphes s'appuie sur le concept des " transformations de cisaillement " qui peuvent être vues comme des réorganisations plastiques locales de la structure. La plupart des modèles mésoscopiques décrivant la plasticité dans les amorphes sont construits sur ce concept [2].

Ces déformations plastiques locales ont des conséquences élastiques spécifiques qui peuvent être bien décrites par des inclusions d'Eshelby, ces signatures élastiques été largement confirmées par des simulations à l'échelle atomique [3] et parfois directement observées à plus grande échelle dans des verres de colloïdes[4]. Néanmoins, bien que les inclusions d'Eshelby puissent jouer le rôle de " briques élémentaires " de la plasticité dans les amorphes, peu de travaux ont été consacrés à la représentation systématique des résultats de dynamique moléculaire en terme d'inclusions d'Eshelby.

Dans cet exposé, je me baserai sur des simulations atomistiques de silicium amorphe sous cisaillement quasi statique pour présenter une technique permettant premièrement d'extraire les événements plastiques significatifs associés aux transformations de cisaillement et ensuite de les représenter sous la forme d'inclusions d'Eshelby[5]. Cette représentation reproduit avec une bonne précision les courbes contrainte/déformation et permet de caractériser la réponse plastique du matériau. L'approche dans son ensemble pourrait aussi contribuer à créer un lien entre l'échelle atomique et les modèles mésoscopiques pour la plasticité. Dans une dernière partie je mentionnerai des résultats récents obtenus avec une extension de cette technique qui permet de discuter l'effet d'une vitesse de cisaillement finie.

Références

- [1] A. S. Argon, Acta. Metall. **27**, 47 (1979)
- [2] A. Nicolas, E. Ferrero, K. Martens, J. L. Barrat, Rev. Mod. Phys. **90**, 045006 (2018)
- [3] D. Rodney, A. Tanguy, D. Vandembroucq, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **19**, 083001 (2011)
- [4] K. E. Jensen, D. A. Weitz, F. Spaepen, Phys. Rev. E **90**, 042305 (2014)
- [5] T. Albaret, A. Tanguy, F. Boioli, D. Rodney Phys. Rev. E **93**, 053002 (2016)

Mots-Clés: Plasticité, Amorphes, simulations, inclusions d'Eshelby

Modélisation du comportement mécanique du UHMWPE : de la structure sphérolitique à la transformation fibrillaire

Tiana Deplancke¹, Olivier Lame², Marc Fivel³

¹ Unité Matériaux et Transformations (UMET) – Institut National de la Recherche Agronomique : UMR0638, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Lille, Université de Lille, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8207 – France

² Matériaux, ingénierie et sciences (MATEIS) – CNRS : UMR5510, Institut National des Sciences Appliquées (INSA) - Lyon, Institut National des Sciences Appliquées [INSA] - Lyon – Bâtiment Blaise Pascal 7, avenue Jean Capelle 69621 VILLEURBANNE CEDEX, France

³ Science et Ingénierie, Matériaux Procédés (SIMaP) – CNRS : UMR5266, Université Joseph Fourier - Grenoble I, École Nationale Supérieure de Physique de Grenoble (ENSPG) – Domaine universitaire 1130 rue de la Piscine - 75 38402 ST MARTIN D HERES CEDEX, France

Une étude expérimentale et analytique a été réalisée pour comprendre et prédire le comportement mécanique de l'UHMWPE fritté de masses moléculaires : 0,6 ; 3,9 et 10,5 Millions g/mol. Ces matériaux ont été testés sur une large gamme de vitesses de déformation en utilisant des essais de compression uniaxiale sur une machine d'essai servo-hydraulique pour les vitesses de déformation les plus faibles (10^{-4} à 10 s $^{-1}$.) et des barres de pression Hopkinson en magnésium pour les vitesses les plus élevées (10^3 s $^{-1}$).

Une approche hyperélastique-viscoplastique qui s'appuie sur une base physique pertinente a été adoptée pour prédire le comportement mécanique de l'UHMWPE. Le point clé du modèle proposé est de capturer l'énorme évolution microstructural qui se produit pendant la fibrillation (effondrement du réseau cristallin) grâce à un paramètre de couplage mécanique entre la phase amorphe confinée et les lamelles cristallines. La description de la phase amorphe est divisée en deux parties, les réseaux macromoléculaires confinés et le réseau macromoléculaire global. Ceci permet de rendre compte des résultats expérimentaux tels que l'énorme recouvrance observée même après une déformation plastique importante de l'UHMWPE.

Ce modèle décrit avec succès le comportement hyperélastique-viscoplastique en compression de l'UHMWPE fritté pour différentes masses moléculaires sur une large gamme de vitesses de déformation et peut être étendu qualitativement aux charges en traction et cycliques.

Mots-Clés: UHMWPE, modèle constitutif, hyperélasticité, viscoplasticité, polymère semi, cristallin, évolution microstructurale

Theory of strain-hardening in glassy polymers: a microscopic theory

Didier Long¹, Luca Conca , Thomas Merlette , Paul Sotta

¹ Laboratoire Polymères & Matériaux Avancés, UMR5268, joined CNRS-Solvay Laboratory (LPMA) – CNRS UMR 5268 – 85 rue des freres Perret – BP62 69192 Saint Fons Cedex, France

We have recently proposed a 3D model for the deformation of glassy polymers based on the heterogeneous nature of the dynamics. In this model, the evolution of the relaxation time distributions during stretching is described from the linear regime up to yield and up to a few ten percents of deformation. Here, we extend this model to large amplitude deformations, where strain-hardening may be observed for some polymers. We propose that the local orientation on the monomer scale increases during deformation. This effect is described by considering a local nematic order parameter and calculating its evolution during deformation. The order parameter of fast domains relax very rapidly and thus does not increase significantly, whereas it increases in slow domains. We assume that local monomer orientation leads to an increase of the local glass transition temperature T_g . This local increase of T_g (due to higher orientation) enhances the ageing dynamics, which may counterbalance the rejuvenating effect of the stress, leading to strain hardening. As deformation goes on, the volume fraction of subunits with higher local T_g increases and the stress goes on increasing upon deformation.

The model is solved in 3D.

The simulations describe the onset of strain-hardening at strain amplitudes of a few 10 % beyond strain-softening. The resulting strain-hardening moduli are found to be in the range of a few 10 MPa up to 100 MPa. They increase as temperature decreases from T_g-10 K to T_g-30 K, which is consistent with experimental data. The model predicts that the range of increase of the nematic order parameter is between 0 and 0.2 and that about 10 to 20 % of monomers are involved at a macroscopic strain of order 50 %. As a result, a volume fraction 10 to 20 % of the material has a higher T_g , the effect being centered around 10 K and up to 20 K. The simulations show that local strain hardening blocks the propagation of shear bands on a scale of order 10 nm, resulting in an essentially homogeneous deformation field as compared to polymers without strain hardening.

Influence of macromolecular orientation on mechanical behavior of glassy polymers

Shanshan Xu¹, Valérie Gaucher¹, Grégory Stoclet¹

¹ Unité Matériaux et Transformations (UMR CNRS 8207) – Université de Lille - Sciences et Technologies – Université Lille, 59655 Villeneuve d’Ascq, France, France

Poly lactide (PLA) is currently one of the most promising polymers issued from renewable resources with great industrial potential, but its intrinsic brittleness at room temperature has found to be a limit to a wider range of applications [1]. Generally speaking, it is well accepted that the brittle/ductile behavior of glassy polymers is closely linked to the elementary plastic deformation mechanisms (crazing vs shear bands) involved during its stretching [2].

The goal of work is to understand the influence of molecular orientation on the deformation mechanisms involved during the brittle- ductile transition in two types of PLA films (crystallizable & non- crystallizable). In order to induce various macromolecular orientation states, initially 100% amorphous PLAs were biaxially stretched at different draw ratios in the temperature range between the glass transition and the cold crystallization temperature. Then, uniaxial behavior of these pre-oriented samples has been investigated at room temperature. As a result, while isotropic samples exhibit a brittle behavior, a remarkable improvement of ductility (up to 120% of engineering strain) is observed in both PLAs, whether crystallizable or not.

Regarding the structure of crystallizable PLA, thermomechanical treatment has induced a mesomorphic phase as soon as the draw ratio is sufficient. This mesomorphic phase is detected using DSC technique and confirmed by complementary WAXS and FTIR analysis. These techniques are applied to characterize the amorphous and mesomorphic phases (content, structure, chain orientation). Current results have shown that the brittle to ductile transition originates from the achievement of a critical macromolecular chain orientation degree in the amorphous phase. SAXS experiments carried out in ESRF (Grenoble) have revealed that the occurrence of crazing mechanism observed in brittle samples is inhibited in the case of ductile pre- oriented materials. At present, the quantification analysis of geometric parameters of these deformation mechanisms is under progress, accompanied by additional morphological characterization through microscopy experiments in the future.

Références

- [1] S. Ouchiar, G. Stoclet, C. Cabaret, A. Addad, V. Gloaguen (2016) Polymer, 99, 358-367
- [2] De Focatiis D.S.A., Buckley C. P (2011). Polymer, 4045-4053

Mots-Clés: PLA, Biaxial stretching, Molecular orientation, Deformation mechanisms

Plasticité : entre Orowan et criticalité

François Louchet¹

¹ Retraité. Dernière affiliation LGGE Grenoble (LGGE) – Centre national de la recherche scientifique - CNRS (France) – France

La plasticité cristalline est-elle un long fleuve tranquille, superposition d'évènements indépendants (loi d'Orowan), ou bien un torrent tumultueux aux sautes d'humeur imprévisibles? L'analyse de l'émission acoustique (EA) en fluage de plusieurs matériaux cristallins a révélé une réponse en avalanches d'amplitudes distribuées en loi puissance, suggérant un comportement critique (*Richeton et al. 2005*). Cela résulte du fort couplage élastique entre dislocations, dont les mouvements ne sont pas indépendants. Il permet de revisiter de façon simple quelques lois bien connues, mais dont les différentes interprétations concurrentes nécessitent une clarification. Nous donnons ici deux exemples.

La loi de Hall-Petch: la plasticité se généralise lorsque la relaxation de l'énergie élastique stockée dans un grain déclenche une réaction en chaîne de "répliques" se propageant de grain en grain. Un argument dimensionnel permet d'établir une expression générale dont la loi de Hall-Petch est un cas limite (*Louchet et al. 2006*), sans faire appel à une quelconque densité de dislocations. Cela étend son domaine de validité à la plasticité des solides non-cristallins et au clivage (ouvertures corrélées de fissures) qui était le cas étudié par Petch en 1953.

Le fluage transitoire d'Andrade (ou β) s'explique comme l'approche en loi puissance d'un point critique (*Louchet et al. 2009*). Si k est le "facteur reproductif" de la réaction en chaîne des déblocages de dislocations, le fluage β correspond à la décroissance de k de 1 à 0. Le modèle diffère de celui de Cottrell (2004) en prenant comme état critique de référence non pas $k=1$, mais $k=0$ (fluage linéaire χ d'énergie d'activation $U\chi$). On trouve un fluage en $t^{1/3}$ et une énergie d'activation $U\chi/3$, confirmant l'intuition de Mott (1953).

Plus généralement, une étude par EA (*Weiss et al. 2015*) montre que ces comportements fortement intermittents ("wild") peuvent coexister avec un fond continu d'évènements décorrélés ("mild"), dans une proportion dépendant de l'anisotropie plastique et du caractère micro ou nano de l'échantillon. La prise en compte de cette coexistence dans un formalisme unique est un pas important vers un contrôle fiable de la plasticité.

Mots-Clés: Criticalité, loi puissance, invariance d'échelle, émission acoustique, Andrade, Hall, Petch

Sur l'interrelation entre l'effet Portevin-Le Chatelier et la striction

Mikhail Lebyodkin¹, Daria Zhemchuzhnikova^{1,2}, Tatiana Lebedkina³

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

² Belgorod State University (BSU) – Belgorod, 308015, Russia, Russie

³ Laboratory of Excellence on Design of Alloy Metals for low-mAss Structures (DAMAS) – Université de Lorraine – 7 rue Félix Savart, Metz, 57070, France, France

L'effet Portevin Le-Chatelier (PLC) et la striction sont deux types bien connus d'instabilité plastique contrôlés par des mécanismes physiques différents. L'effet PLC se manifeste par des oscillations de contrainte liées à des localisations répétitives de la déformation dans des bandes qui peuvent se déplacer ou être immobiles. Il se produit lors de la déformation des alliages et est dû à une sensibilité négative de la contrainte d'écoulement à la vitesse de déformation, provoquée par l'interaction des dislocations avec des atomes de soluté. La striction est une instabilité plastique de nature générale, qui se produit dans des conditions de traction lorsque la capacité de durcissement du matériau n'est plus suffisante pour compenser les fluctuations aléatoires de la section de l'éprouvette, et conduit à sa rupture. Etant donné que l'effet PLC est associé à des localisations de déformation, il peut éventuellement entraîner un début prématuré de la striction. Cependant, il n'y a pas de consensus sur cette question dans la littérature. Les contradictions pouvant être dues à la dépendance de ces phénomènes à la microstructure, le présent travail vise une étude systématique utilisant deux matériaux, un alliage AlMg binaire et un alliage renforcé par précipitation, qui ont été fabriqués avec trois différentes microstructures initiales et déformés dans une large plage de vitesse de déformation couvrant tous les types de comportement connus de l'effet PLC. Des comportements particuliers, par exemple une propagation inhabituelle lente des bandes PLC à faibles vitesses de déformation, ont été trouvés dans l'alliage avec des particules de seconde phase, ainsi que dans les deux alliages soumis à un prétraitement par déformation plastique sévère. Malgré la diversité des comportements observés, le début de la striction en présence de l'effet PLC correspond bien au critère de Considère. Néanmoins, l'analyse par la méthode de corrélation d'images a révélé un lien étroit entre le début de la striction et les bandes PLC. De plus, on constate que les deux types d'instabilité plastique peuvent coexister lors du développement de la striction et modifier le comportement mutuellement.

Mots-Clés: Alliages métalliques, Effet Portevin, Le Chatelier, Striction, Bandes de déformation, Corrélation d'images

Effet Portevin-Le Chatelier dans les alliages d'aluminium : étude par nanoindentation à température ambiante et haute température

Christophe Tromas¹, Gaurav Mohanty², Aurelie Joseph³, Anne Joulain³, Joël Bonneville³, Véronique Gauthier-Brunet³, Sylvain Dubois³, Dominique Eyidi³, Johann Michler², Jean-Philippe Monchoux⁴, Marcello Conte⁵

¹ Institut Pprime (PPRIME) – Université de Poitiers, ENSMA, Centre National de la Recherche Scientifique : UPR3346 – Institut P: Recherche et Ingénierie en Matériaux, Mécanique et Energétique SP2MI Téléport 2 Boulevard Pierre et Marie Curie BP 3017986962 FUTUROSCOPE CEDEX, France

² Empa – Suisse

³ 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

⁴ Centre d'élaboration de matériaux et d'études structurales (CEMES) – CNRS : UPR8011 – 29 Rue Jeanne Marvig - BP 94347 31055 TOULOUSE CEDEX 4, France

⁵ Anton Paar Tritech – Suisse

L'effet Portevin – Le Chatelier (PLC) est une instabilité de la déformation plastique observée dans différents alliages, en particulier dans les alliages d'aluminium. Cet effet se caractérise par des discontinuités sur la courbe d'écoulement (chute de contrainte ou saut de déformation selon le type de machine de déformation utilisée), liées aux interactions entre les dislocations mobiles et les atomes de soluté qui diffusent. L'effet PLC a été largement étudié dans le cas d'essais de déformation macroscopique. Cette étude s'intéresse à la caractérisation de l'effet PLC localement par essai de nanoindentation.

Dans un premier temps, cette étude montrera comment se manifeste l'effet PLC sur un alliage AlMg3% lors d'un essai de nanoindentation. L'effet des différents paramètres de pilotage de l'appareil (contrôle en force ou en déplacement...) sera présenté et une comparaison sera faite avec l'effet PLC observé par essai uniaxial conventionnel (déformation localisée, gradient de contrainte). Dans un second temps, des essais de nanoindentation réalisés de 25°C à 300°C dans le cas d'AlMg3% montreront l'influence de la température sur l'effet PLC.

Enfin, cette présentation détaillera les résultats obtenus dans le cas d'un composite à matrice aluminium renforcé par des particules de la phase ω -AlCuFe. Lors de la synthèse de ce matériau, réalisée par métallurgie des poudres, des atomes de cuivre diffusent des particules de renfort vers la matrice donnant lieu à un gradient de concentration en cuivre dans la matrice aluminium au voisinage des interfaces. La nanoindentation a permis de sonder les propriétés mécaniques locales et d'analyser l'effet PLC au voisinage de ces interfaces en fonction de la concentration locale en cuivre. La caractérisation locale de cet effet PLC par nanoindentation a été couplée à des cartographies chimiques par EDX et à la caractérisation des microstructures de dislocations sous les empreintes de nanoindentation par microscopie électronique en transmission.

Mots-Clés: Portevin, Le Chatelier, nanoindentation, nanoindentation en température

Étude des mécanismes de déformation induits par nanoindentation à haute température sur la phase MAX Ti_2AlN

Salomé Parent¹, Wilgens Sylvain¹, Christophe Tromas¹, Anne Joulain¹,
Ludovic Thilly¹, Sandra Korte², Sebastien Schröders²,
Christopher Zehnder⁴, Gilles Renou³

¹ Institut Pprime (PPRIME) – Université de Poitiers : UPR3346, ENSMA : UPR3346, Centre National de la Recherche Scientifique : UPR3346 – Institut PPRIME : Recherche et Ingénierie en Matériaux, Mécanique et Energétique SP2MI Téléport 2 Boulevard Pierre et Marie Curie BP 3017986962 FUTUROSCOPE CEDEX, France

² Institut RWTH – Aachen, Allemagne

³ Laboratoire SIMPA – Centre national de la recherche scientifique - CNRS (France) – Grenoble, France

Les phases MAX, de formule $M(n+1)AX_n$, sont des matériaux hexagonaux possédant une structure nanolamellaire. Dans cette formule, M est un métal de transition, A est un élément appartenant au groupe A (de IIIA à VIA) et X est soit du carbone soit de l'azote. Ces matériaux présentent un fort potentiel technologique, en particulier pour des applications à haute température. Toutefois, Si le rôle des dislocations dans la déformation plastique est avéré, les mécanismes de déformation élémentaires dans ces matériaux ne sont pas encore entièrement connus. C'est le cas de l'origine de la transition fragile-ductile. Les propriétés macroscopiques des phases MAX sont liées à leurs cristallographies ainsi qu'aux arrangements particuliers des grains dans la microstructure.

Afin de comprendre les mécanismes de déformation élémentaire en haute température à petite échelle, des expériences de nanoindentation à haute température ont été réalisées à l'échelle du grain dans du polycristallin. La zone déformée a été étudiée par AFM (Atomic Force Microscopy) et par microscopie électronique en transmission (MET) sur la coupe transverse. Une analyse ACOM (Automatic Crystal Orientation and phase Mapping) ASTAR permettant d'obtenir une carte des orientations cristallographiques a également été réalisée. Cette dernière a permis d'étudier les désorientations locales induites par indentation à haute température. En dessous de la zone indentée, qui correspond à un seul grain, des domaines de fortes désorientations ont été observés avec des désorientations allant jusqu'à 70°. Par ailleurs, des murs de dislocations formant des joints de faible désorientation ont aussi été observés et caractérisés par MET ainsi que par technique ACOM ASTAR. Différents mécanismes de déformation sont possibles et discutés pour expliquer ces observations expérimentales.

Mots-Clés: phases MAX, nanoindentation, désorientation, joints de grain, dislocations, ACOM ASTAR, MET, AFM

Plasticité cristalline en présence de mâcles fines : évaluation d'un modèle sur base d'observations à l'échelle du grain

Laurent Delannay¹, Fengxiang Lin¹, Matthieu Marteleur¹,
Pascal J. Jacques¹, Sylvain Dancette²

¹ UCLouvain, iMMC, Louvain-la-Neuve, Belgique

² INSA Lyon, MATEIS, Villeurbanne, France

Le maclage mécanique, en particulier lorsque les macles formées sont de très faibles épaisseurs, contribue à l'écroutissage des alliages métalliques et au raffinement de leur microstructure, ce qui tend à améliorer la ductilité. A l'échelle microscopique, cet écroutissage influence la déformation plastique de deux manières : d'une part, les joints des macles constituent des obstacles au glissement des dislocations ; d'autre part, le maclage s'accompagne d'un cisaillement localisé qui accentue l'hétérogénéité de déformation du grain et donc les contraintes internes (écroutissage cinématique).

Lorsque l'on adapte un modèle de plasticité cristalline pour tenir compte d'une déformation réalisée à la fois par maclage et par glissement de dislocations, on observe que l'anisotropie des grains est augmentée parce que les macles présentent des orientations préférentielles par rapport aux directions du chargement et cela influence la sélection des systèmes de glissement. Cela se répercute notamment dans l'évolution de la texture cristallographique [1].

Dans cette présentation, le modèle de plasticité cristalline développé à l'UCLouvain sera confronté à des mesures expérimentales réalisées à l'échelle du grain dans trois matériaux différents. On s'intéressera, en premier lieu, à la formation de bandes de localisation par cisaillement et à leur influence sur la ré-orientation des macles au sein d'échantillons de cuivre sous chargement dynamique. Ensuite, on étudiera, sur base de calculs par éléments finis, les conditions de transmission des macles au travers des joints de grains d'un alliage de titane β -métastable [2]. Enfin, on comparera les prédictions du modèle à des mesures combinées de cartographie EBSD et d'hétérogénéité microscopique de déformation par corrélation d'images dans un acier austénitique à effet TWIP.

Références

- [1] Dancette, S., Delannay, L., Renard, K., Melchior, M., Jacques, P.J., "Crystal plasticity modeling of texture development and hardening in TWIP steels", Acta Mater., 60 (2012), 2135-2145.
- [2] Lin, F.X., Marteleur M., Jacques, P.J. , Delannay, L., "Transmission of $\{332\} < 113 >$ twins across grain boundaries in a metastable β -titanium alloy", Int. J. Plast., 105 (2018), 195-210.

Modélisation multi-échelle de nouveaux alliages de titane de type TRIP/TWIP

Lu Tuan Le , Samuel Forest ¹, Kais Ammar ¹, Yolaine Danard ², Frédéric Prima ³

¹ Centre des Matériaux – MINES ParisTech - École nationale supérieure des mines de Paris, CNRS : UMR7633 – France

² Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris- Chimie ParisTech-PSL (ENSCP) – Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris- Chimie ParisTech-PSL – 11, rue Pierre et Marie Curie75231 Paris Cedex 05, France

³ PSL Research University, Chimie ParisTech – CNRS, Institut de Recherche de Chimie Paris, 75005, Paris, France – PSL Research University, Chimie ParisTech – CNRS, Institut de Recherche de Chimie Paris, 75005, Paris, France, PSL Research University, Chimie ParisTech - CNRS, Institut de Recherche de Chimie Paris, 75005 Paris, France – France

Un nouveau modèle de plasticité cristalline, intégrant la déformation par maclage et par transformation de phase a été développé, en se basant sur la compréhension des résultats expérimentaux de nouveaux alliages de titane [1,2]. On a utilisé les systèmes de glissement " pencil-glide " [3] pour remplacer les nombreux systèmes de glissement non-connus dans ces alliages. L'avantage de ce modèle est de réduire le nombre de paramètres à identifier en respectant le comportement général. Ensuite, la méthode d'homogénéisation beta-model [4,5], a été implémentée en grandes déformations [6] dans le code par élément finis Z-set et utilisée afin d'étudier le comportement de alliage.

Le beta-model est une méthode efficace et rapide, qui s'appuie sur une règle de transition d'échelle du comportement dans les grains en fonction de la contrainte macro appliquée et à l'hétérogénéité de la déformation plastique entre les différentes orientations. Les paramètres du modèle seront ajustés par rapport à des essais de traction simple (et cyclique) d'un polycristal de l'alliage de titane. Les résultats de la simulation montrent un très bon accord avec l'expérience : l'évolution de la fraction volumique de maclage et la courbe contrainte-déformation.

Les résultats de la simulation, à savoir le seuil de plasticité pour les différences familles de systèmes de maclage, la loi d'évolution, l'interaction entre les mécanismes, servira à optimiser la conception de ces alliages, suivant ainsi la stratégie ICME en intégrant les considérations mécaniques. Le travail s'inscrit dans le cadre du projet ANR TiTwip.

Mots-Clés: pencil, glide, plasticité, alliages de titane, TRIP, TWIP, homogénéisation, beta, model

Compréhension des mécanismes locaux de déformation des micro-fils de nickel : Essais mécaniques in-situ sous faisceau synchrotron et simulation éléments finis.

Ravi Raj Purohit Purushottam Raj Purohit ¹, Abhinav Arya ²,
Girish Bojjawar ², Céline Gerard ¹, Loïc Signor ¹, Satyam Suwas ², Atul H.
Chokshi ², Ludovic Thilly ¹

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

² Indian Institute of Science (IISc) – Bangalore 560 012, Inde

Les micro-fils de nickel étirés à froid présentent des effets de taille significatifs. Une réduction de diamètre de 120 à 20 μm par polissage électrolytique fait apparaître une résistance à la traction proche de la valeur théorique [Warthi et al, 2013].

L'objectif est ici de mieux comprendre ces effets de tailles grâce à des essais mécaniques sous radiation synchrotron, et à des simulations de plasticité cristalline par éléments finis (CPFE).

Des micro-fils de 100 microns sont, soit électropolis, soit étirés à froid. Leur architecture initiale est de type cœur-coque. Le cœur a une texture d'orientation cristallographique 111 dominante, tandis que la coquille, plus hétérogène, est principalement composée des orientations 111 et 100. L'électropolissage de ces fils conduit à une microstructure homogène. A l'inverse, la réduction de taille par étirage à froid conserve l'architecture cœur-coque et renforce la texture.

Les essais mécaniques, monotones ou cycliques, sont conduits à température ambiante sur des micro-fils de diamètres de 40 à 100 μm [R. Purushottam raj purohit et al, Scientific Reports, 2019].

La limite d'élasticité des micro-fils électropolis s'accroît lorsque le diamètre des fils décroît. A l'inverse, la ductilité décroît. Les micro-fils obtenus par étirage à froid voient leur limite d'élasticité et leur ductilité, s'accroître. L'analyse DRX donne accès à la transition élastoplastique des différentes familles de grains dans des conditions iso-déformation. Le gradient de la texture du micro-fil active des mécanismes de déformation non-observés dans le cas des micro-fils à texture homogène.

Une microstructure 3D représentative est générée et des simulations CPFE sont réalisées. Le comportement moyen simulé de différentes familles de grains est en bon accord avec les résultats expérimentaux.

Différents scénarii sont étudiés, montrant que l'ingénierie de la microstructure et de la répartition spatiale de micro-texture (homogène ou architecturée) peut être utilisée comme directives de conception selon les propriétés mécaniques souhaitées.

Recherches conduites dans le cadre du projet 5408-1 du Centre Franco-Indien pour la Promotion de la Recherche Avancée.

Références

- [1] N. Warthi et al, Scripta Mat., 68 (2013) 225-228.
- [2] RRP Purushottam Raj Purohit, thèse de doctorat, Université de Poitiers, Oct. 2018.
- [3] R. Purushottam raj purohit, A. Arya, G. Bojjawar, M. Pelerin, S. Van Petegem, H. Proudhon, S. Mukherjee, C. Gerard, L. Signor, C. Mocuta, N. Casati, S. Suwas, A.H. Chokshi, L. Thilly, Scientific Reports, 9 (2019).

Mots-Clés: Effets de taille, microtexture, microfils de nickel, DRX haute énergie, simulations éléments finis, microstructure représentative, plasticité cristalline

Modélisation du glissement assisté par la montée d'une dislocation coin en interaction avec des amas lacunaires

Marie Landeiro Dos Reis¹, Laurent Proville¹, Mihai-Cosmin Marinica¹,
Emmanuel Clouet¹, Maxime Sauzay²

¹ Service de recherches de métallurgie physique (SRMP) – CEA – CEA Saclay 91191 Gif sur Yvette, France

² Service de recherches de métallurgie appliquée (SRMA) – CEA – CEA Saclay, France

Des observations en microscopie électronique en transmission sur différents matériaux modèles tel que le cuivre et l'aluminium [1-6] ont mis en évidence la formation d'amas de lacunes après déformation. Ces amas contribuent au durcissement du matériau en gênant la propagation des dislocations dont le cœur s'ancrage sur les amas. Cet ancrage ne pouvant être bien décrit théoriquement qu'à l'échelle atomique nous avons développé une étude multi-échelle sur la base de calculs atomiques.

Pour de fortes contraintes la dislocation cisaille très rapidement l'amas comme cela a déjà été étudié précédemment [7-8]. Par contre à faibles contraintes, la dislocation reste ancrée un certain temps sur l'amas. Dans ce cas, nous montrons par nos simulations à l'échelle atomique que la diffusion de lacunes, provenant essentiellement des amas, induit la formation de crans au niveau du point d'ancrage. La force d'ancrage de l'amas diminue au fur et à mesure que des lacunes sont absorbées sur les crans. Lorsque celle-ci devient compétitive par rapport à la force de Peach et Koehler alors la dislocation se désancrage. Ce processus peut mener à la dissolution des amas si ces derniers sont suffisamment petits. Nous avons estimé statistiquement le temps de désancrage de la dislocation grâce à un algorithme de Monte Carlo cinétique (KMC) couplé à un modèle de tension de ligne [9]. Les paramètres injectés dans le modèle ont été déterminés à l'échelle atomique en utilisant un potentiel interatomique de type Embedded Atom Method [10-11]. Nous discuterons de la pertinence de ce modèle par rapport aux résultats expérimentaux de fluage de l'aluminium.

Références

- [1] Kiritani, J. Nucl. Mater (2000)
- [2] Kiritani, Mater. Chem. Phys. (1997)
- [3] Kojima et al., Philos. Mag. (1989)
- [4] Loretto et al., Philos. Mag. (1965)
- [5] Clarebrough et al., Acta Metall (1967)
- [6] Dai et al., Acta Mater (1997)
- [7] Bacon et al., Dislocation in solids (2009)
- [8] Dérès et al., Acta Mat (2015)
- [9] Proville et al. Phys. Rev. B (2010)
- [10] Liu et al. Surf. Sci. (1997)
- [11] Landeiro et al. Phys. Rev. Materials (2018)

Mots-Clés: Dislocations, Amas de lacunes, Aluminium, Glissement, Montée

Basal Slip in Laves Phases: the Synchronshear Dislocation

Julien Guénol¹, Fatim-Zahra Mouhib¹, Liam Huber², Blazej Grabowski²,
Sandra Korte-Kerzel¹

¹ Institute of Physical Metallurgy and Metal Physics [RWTH Aachen University] (IMM) – Kopernikusstr.
14, D-52074 Aachen, Germany, Allemagne

² Max-Planck-Institut fuer Eisenforschung GmbH (MPIE) – Max-Planck-Straße 1, 40237 Düsseldorf,
Allemagne

Laves phases are intermetallic compounds that form in many alloys and can play a crucial role in their deformation. Understanding the intrinsic deformation behaviour of Laves phases is critical and many activities have been initiated in that direction. Laves phases can be cubic (C15) or hexagonal (C14 and C36) layered structures with the archetypal chemical compositions of Cu₂Mg, Zn₂Mg and Ni₂Mg. The lattice consists of two structural units: a single layer formed of large atoms and a triple layer mixing small and large atoms. For the hexagonal structures, these layers form the basal planes.

Two different mechanisms have been reported in previous *ab initio* studies to describe basal slip in complex intermetallic Laves phases: synchronshear [1] and undulating slip [2]. To date, no clear answer has been given on which is the energetically favourable mechanism and whether either of them could effectively propagate as a dislocation. Using classical atomistic simulations supported by *ab initio* calculations, we present a study [3] that removes the ambiguity and shows that the two mechanisms are, in fact, identical. Furthermore, we establish synchronshear as the mechanism for propagating dislocations within the basal plane in Laves phases.

[1] Vedmedenko, Rösch, Elsässer, *Acta Mater.* 56 (2008) 4984–4992

[2] Zhang, Yu, Du, Cheng, Zhu, Ye, *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 2–5

[3] Guénol, Mouhib, Huber, Grabowski, Korte-Kerzel, *arXiv preprint* (2019) arXiv:1902.01646

Mots-Clés: plasticity, complex alloys, intermetallic, atomistic simulations, nudge elastic band

Le cœur des dislocations dans les grenats naturels : un habitat pour des microorganismes endolithiques ?

Jacques Rabier¹, Arthur H. Heuer², Kevin J. Hemker³

¹ Institut Pprime – Centre National de la Recherche Scientifique : UPR3346, Université de Poitiers – France

² Department of Materials Science and Engineering, Case Western Reserve University, – Cleveland, Ohio,, États-Unis

³ Departments of Mechanical Engineering and Materials Science and Engineering, Johns Hopkins University – Baltimore, MD, États-Unis

Ivarsson et al [1] rapportent dans un article publié dans PLoS ONE l'analyse de Micro Cavités Tubulaires (MCT) trouvées dans le volume d'un grenat naturel. D'après ces auteurs ces MCTs imbriquées et ramifiées ont été " creusées par des microorganismes endolithiques (MOE)" dont les restes ont été localisés dans ces MCTs. Cette interprétation a été largement véhiculée par les media grand public (voir par exemple [2]). On présente ici une alternative concernant la genèse de ces microcavités tubulaires (TMC).

On rappelle brièvement les propriétés des dislocations dans les grenats : grand vecteur de Burgers, dissociation par glissement et par montée, fortes forces de Peierls ainsi que les caractéristiques de la plasticité de ces matériaux : " comportement cubique centré " jusqu'à des températures élevées [3]. On justifie ainsi que la topologie décrite par Ivarsson et al [1], composée à la fois de longs segments rectilignes et de configurations ramifiées résulte plutôt d'une sous structure de dislocations régie par des effets de forte contrainte de Peierls en même temps que par des processus de polygonisation.

En raison de la prévalence des MOEs pour former des MCTs en exploitant les faiblesses structurales et les hétérogénéités de composition des minéraux [4], plusieurs scénarios peuvent être avancés pour leur formation à partir de dislocations préexistantes : attaque des cœurs par un processus géochimique suivie par une bio altération ou bio altération directe des cœurs de dislocations.

Références :

- [1] Ivarsson M, Skogby H, Phichaikamjornwut B, Bengtson S, Siljeström S et al; PLoS ONE. 2018;13(8):e0200351.
- [2] Greenwood V; NY Times "Science", Aug. 8, 2018. <https://www.nytimes.com/2018/08/08/science>
- [3] Rabier J, Garem H; "Deformation of Ceramic Materials II", R Tressler. R. C. Bradt, edts., Plenum Press, New-York (1984) 187
- [4] McLoughlin N, Staudigel H, Furne H, Eickmann B and Ivarsson M ; Geobiology 2010, **8**, 245–255 DOI: 10.1111/j.1472-4669.2010.00.

Mots-Clés: Plasticité, Dislocation

Mardi 16 avril

17:00-17:30

L'émergence de la métallurgie physique en France

Georges Saada¹

¹ LEM, CNRS-ONERA, Châtillon

Le développement de la métallurgie physique en France à partir des années 50 est due à un tout petit nombre d'individualités particulièrement lucides, parmi lesquels je cite volontiers Charles Crussard, Jacques Friedel, Bernard Jaoul.

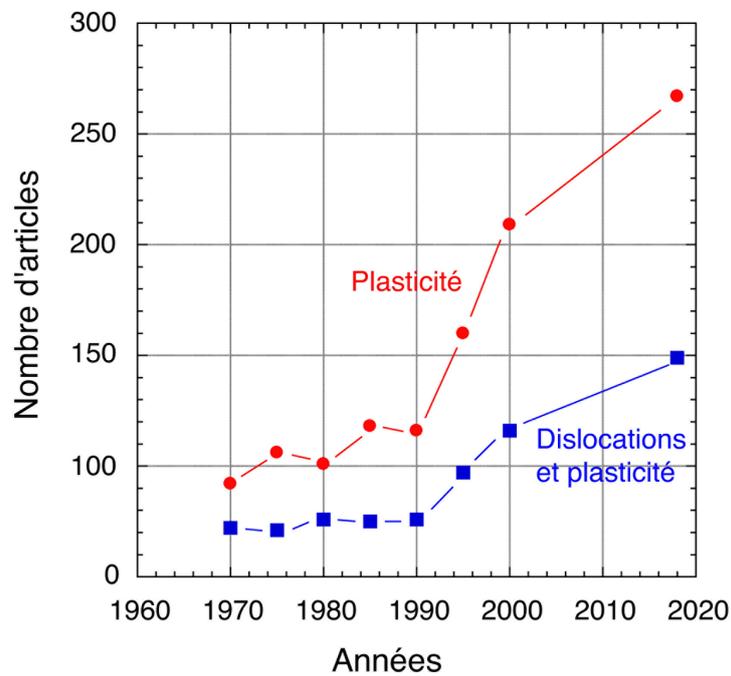
Je rappellerai la situation qui prévalait à l'époque et analyserai les diverses étapes de ce développement, jusqu'à la situation actuelle.

Plasticité 1970 - 2000 : les Trente Glorieuses

Ladislav Kubin¹

¹ LEM, CNRS-ONERA, Châtillon

L'audience du 50ème Colloque Plasticité rassemble plusieurs générations dont certaines ont connu les premiers Colloques et une autre le découvre aujourd'hui. Cela suggère de poursuivre la revue des progrès effectués depuis la fin de la période historique (1970), qui est discutée par ailleurs, jusqu'à l'an 2000 (et un peu plus).



Cette figure donne le nombre d'articles publiés en français contenant le mot "Plasticité" ou le terme "Dislocations et plasticité" en fonction du temps. De 1970 à 1990, le décollage a du mal à se faire. À partir de 1990 cela change abruptement.

Glissement cristallin et glissement aux joints de grains: les deux temps de la partition plastique

Alexandre Dimanov¹, Michel Bornert², Jean Raphanel¹, Eva Héripré³,
Mathieu Bourcier⁴, Ababacar Gaye², Alexandre El Sabbagh⁵, Wolfgang
Ludvig, Andrew King

¹ Laboratoire de mécanique des solides (LMS) – Polytechnique - X, MINES ParisTech - École nationale supérieure des mines de Paris, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR7649 – Route de Saclay 91128 PALAISEAU CEDEX, France

² Laboratoire Navier (NAVIER UMR 8205) – Institut français des sciences et technologies des transports, de l'aménagement et des réseaux, Ecole des Ponts ParisTech, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8205 – Ecole des Ponts ParisTech 6 / 8 avenue Blaise Pascal 77455 CHAMPS SUR MARNE, France

³ Laboratoire de mécanique des sols, structures et matériaux (MSSMat) – CentraleSupélec, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8579 – CentraleSupélec - 3 Rue Joliot Curie, 91190 Gif-sur-Yvette, France, France

⁴ Laboratoire de glaciologie et géophysique de l'environnement (LGGE) – CNRS : UMR5183, Université Joseph Fourier - Grenoble I – Domaine Universitaire 54 Rue Molière - BP 96 38402 ST MARTIN D HERES CEDEX, France

⁵ Laboratoire de mécanique des solides (LMS) – Centre National de la Recherche Scientifique : UMR7649, MINES ParisTech - École nationale supérieure des mines de Paris, Ecole Polytechnique – Route de Saclay 91128 PALAISEAU CEDEX, France

Les propriétés viscoplastiques des matériaux polycristallins conditionnent de nombreux aspects de la vie courante, comme la durabilité des structures métalliques à haute température, mais aussi l'écoulement des glassiers ou la tectonique des plaques, activée par la convection des roches du manteau. Il est d'usage de considérer que la viscoplasticité des polycristaux est largement dominée par la plasticité cristalline. Les mécanismes liés aux interfaces, comme le glissement aux joints de grains (GJG) ne sont en général invoqués que pour le comportement superplastique, actif à faibles vitesses de sollicitation et taille de grain et à haute température. Et cependant, de nombreuses études ont clairement identifié la concomitance des deux mécanismes. Mais, très peu ont porté sur la quantification de leurs contributions respectives à la déformation plastique totale. De même, les interactions entre ces mécanismes de volume et d'interface restent obscures. Ce sont les deux questions principales que nous avons abordées. Nous avons étudié le comportement viscoplastique sous sollicitation uniaxiale de deux classes de matériaux polycristallins CFC, recuits et non-texturés: le NaCl ionique et l'aluminium faiblement allié. Les deux matériaux présentent des grains polygonaux, larges (env. 300 micromètres) et équilibrés. Recherchant spécifiquement à caractériser la localisation plastique et l'identification de mécanismes, nous avons réalisé des mesures de champs mécaniques complets 2D, grâce aux observations multi-échelle in situ MEB et aux techniques de corrélation d'images numériques. Le NaCl a également été étudié in situ sous micro-tomographie en faisceau RX synchrotron, afin d'obtenir des champs mécaniques complets 3D. Nos résultats montrent clairement que le glissement cristallin et GJG co-existent et co-opèrent. Le glissement cristallin domine, mais le GJG participe de façon continue, en tant que mécanisme d'accommodation des incompatibilités plastiques locales. Les deux mécanismes apparaissent comme nécessaires pour assurer l'écoulement macro-homogène, notamment en permettant le développement et la propagation de bandes de localisation plastique à l'échelle de l'agrégat.

Migration d'interfaces en mécanique des champs de dislocations et de désinclinaisons généralisées

Claude Fressengeas¹, Vincent Taupin¹

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

Les dislocations sont des boucles de défauts cristallins limitant des surfaces sur lesquelles le déplacement élastique subit une discontinuité constante (translation). Lorsqu'elles sont accompagnées de g-désinclinaisons, qui sont des boucles de défauts limitant des surfaces sur lesquelles le champ de distorsion élastique est lui-même discontinu, la discontinuité de déplacement élastique résulte d'une translation, d'une rotation et d'une déformation. La distorsion élastique de second ordre est alors incompatible et il existe un champ de tenseurs des densités de g-désinclinaisons complétant le tenseur de Nye.

Les lois cinématiques du mouvement des dislocations et des g-désinclinaisons sont des équations de transport découlant d'axiomes de conservation du vecteur de Burgers pour les dislocations et de la discontinuité de la distorsion élastique pour les g-désinclinaisons. Pour déterminer complètement la dynamique de ces densités, ces équations doivent être complétées par des lois constitutives pour leur mobilité, qui doivent elles-mêmes assurer le caractère défini-positif de la dissipation mécanique. A ces conditions, on peut construire une théorie des transformations élasto-viscoplastiques couplées aux transformations de phase, où les champs de déplacements et de densités de défauts sont les inconnues d'un problème aux limites susceptible d'être résolu par une méthode d'éléments finis ou par une méthode FFT pour des conditions aux limites périodiques. Une telle théorie du second ordre fournit une généralisation non-locale des équations de la mécanique des milieux continus, basée sur la physique des défauts cristallins.

Nous présentons un résumé des équations fondamentales de cette théorie en petites transformations et des applications à la migration de joints de grains de flexion symétriques sous chargement mixte de cisaillement et de compression, dans le but d'étudier l'influence de la pression hydrostatique sur la migration des joints induite par le cisaillement.

Mots-Clés: dislocations, désinclinaisons, interfaces, joints de grains

Dislocation and sub grain boundaries dynamics in mono-like PV Si

Arthur Lantreibecq ^{1,2}, Marc Legros ², Etienne Pihan ¹,
Jean-Philippe Monchoux ²

¹ Institut National de l’Energie Solaire (INES) – CEA – Parc Technologique de Savoie Technolac 50 av. du Lac Léman, Bâtiment Lynx - BP 332 F-73377 LE BOURGET DU LAC - CEDEX, France

² Centre d’élaboration de matériaux et d’études structurales (CEMES) – CNRS : UPR8011 – 29 Rue Jeanne Marvig - BP 94347 31055 TOULOUSE CEDEX 4, France

To increase the efficiency of silicon-based solar grade wafers at lower cost, a solution consists in growing single-crystalline –like (or ”mono-like”) ingots with a technique mixing multi-crystalline solidification method and directional growth from oriented seeds. This promising technique is up to now limited by the apparition of specific defects such as micro-twins (MTs) or sub-grain boundaries (SGBs). If MTs do not harm the cell efficiency, it was found that SGBs contain more electrically active dislocations as they expand along the height of the ingot. These active dislocations may arise from interaction between mobile dislocations subjected to thermomechanical stresses (during the cooling phase) and sessile dislocations initially present in SGBs. Micro-twin, on the other side do not seem to cause dislocation accumulation. Here, we combine several characterization methods including in situ TEM deformation to study how mobile dislocations can multiply, interact with other defects, form sub-grain boundaries at a given stress and temperature. Sub-grain boundaries (Fig.1) seem to be stabilized by secondary dislocations whose origin remains to be found.

Mots-Clés: Mono, like silicon, growth, subgrain boundary, dislocations, TEM, in situ TEM

Structure et cinétique de défauts tridimensionnels sur le joint de macle cohérent $\{10\bar{1}2\}$ dans le magnésium : Simulations atomistiques et champ de phase

Doug Spearot ¹, Vincent Taupin ², Khan Dang ¹, Laurent Capolungo ³

¹ University of Florida – États-Unis

² LEM3 UMR 7239 Université de Lorraine, CNRS, Arts et Metiers ParisTech, France – CNRS : UMR7239 – France

³ Los Alamos National Laboratory – États-Unis

On s'intéresse à la structure et au mouvement de facettes formant un cratère créé par dynamique moléculaire dans un joint de macle cohérent $\{10\bar{1}2\}$ dans le magnésium. Des interfaces de type Prismatique-Basal (PB) et Pyramidal-Pyramidal (PP1) sont observées. Elles ont une mobilité plus importante que celle du joint de macle cohérent lors de l'annihilation du cratère. Un modèle champ de phase est développé pour déconvoluer le rôle de l'anisotropie des énergies et des mobilités d'interfaces, et des contraintes internes sur la cinétique du cratère.

Mots-Clés: Magnésium, maclage, dislocations, disconnections, champ de phase, atomistique

Fluctuations thermiques des dislocations

Pierre-Antoine Geslin¹

¹ Matériaux, ingénierie et science [Villeurbanne] (MATEIS) – Université Claude Bernard Lyon 1, Centre National de la Recherche Scientifique, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon : UMR5510 – Bâtiment Blaise Pascal 7, avenue Jean Capelle 69621 VILLEURBANNE CEDEX, France

Les fluctuations thermiques des dislocations jouent un rôle central dans l'étude de la plasticité cristalline car elles contrôlent leur mobilité ainsi que la fréquence d'attaque des mécanismes thermiquement activés tels que le franchissement d'obstacles ou le glissement dévié. Alors que les approches précédentes reposent essentiellement sur des descriptions simplifiées de type tension de ligne [1,2], nous proposons d'analyser ces fluctuations thermiques à l'aide de simulations atomistiques combinées à une approche analytique tenant compte des interactions élastiques à longue distance.

En se basant sur la théorie non-singulière des dislocations, une solution analytique pour l'énergie d'une dislocation faiblement perturbée est obtenue, ce qui nous permet de prédire l'amplitude des fluctuations thermiques grâce au théorème d'équi-partition [3]. La comparaison de cette prédiction analytique aux résultats de dynamique moléculaire montre qu'une énergie de cœur (proportionnelle à la longueur de la dislocation) doit être incorporée en plus des interactions élastiques pour reproduire les spectres de fluctuations issus des simulations atomistiques. Cette comparaison permet également d'extraire des paramètres quantitatifs dépendants de la température (rayon de cœur, tension de ligne) utilisés comme données d'entrée des modèles mésoscopiques de type dynamique des dislocations. Nous avons montré qu'un modèle continu ainsi paramétré peut reproduire très fidèlement les configurations de *bow-out* obtenues en simulations atomistiques. Également, une analyse des corrélations temporelles des fluctuations permet de clarifier le comportement dynamique des dislocations et d'extraire leur coefficient de traînée et leur masse effective.

Nous avons également appliqué ces mêmes concepts aux dislocations partielles dans les métaux FCC afin de mieux caractériser les fluctuations de la distance de dissociation et de déduire de ces calculs les paramètres dynamiques caractéristiques des partielles.

Références

- [1] A. Granato, K. Lücke, J. Schlipf, and L. Teutonico, J. Appl. Phys. 35, 2732 (1964).
- [2] J. Friedel, Dislocations (Pergamon Press, Oxford, 1964).
- [3] P.-A. Geslin, D. Rodney, PRB 98, 174115 (2018)

Mots-Clés: Dislocations, fluctuations, FCC, partielles

Propriétés mécaniques de nanoparticules covalentes : effet de formeDimitrios Kilymis , Céline Gerard ¹, Jonathan Amodeo , Laurent Pizzagalli ¹

¹ Institut Pprime (P') – Centre National de la Recherche Scientifique : UPR3346, Université de Poitiers – Département de Physique et Mécanique des Matériaux, SP2MI, Téléport 2, Boulevard Marie et Pierre Curie, BP 30179, 86962 Chasseneuil- Futuroscope Cedex, France

Depuis une quinzaine d'années environ, la communauté scientifique s'intéresse activement aux propriétés mécaniques des nanomatériaux, et en particulier comment ces dernières sont modifiées lorsque la taille caractéristique des systèmes diminue. On peut citer comme (célèbre) exemple l'accroissement spectaculaire de la limite élastique. Concernant les types de nano-objets, ces recherches sont principalement effectuées sur des systèmes 1D comme les nanofils et les nanopiliers, ou 2D comme les films minces. On dispose de beaucoup moins d'informations concernant les nanoparticules, bien qu'elles sont par ailleurs énormément étudiées pour leurs propriétés autres que mécaniques, du fait d'un vaste champ d'applications. Les nanoparticules sont pourtant des systèmes de choix pour étudier l'influence de la géométrie sur les propriétés mécaniques, car une grande variété de forme est possible pour plusieurs matériaux.

Dans cet exposé, nous présenterons des résultats obtenus par dynamique moléculaire, concernant tout d'abord la déformation plastique de nanoparticules de silicium. Nous nous sommes en particulier concentrés sur l'influence de la forme des nanoparticules, par opposition à la plupart des travaux existants, généralement focalisés sur l'effet de taille. De nombreux mécanismes inattendus et originaux ont été obtenus [1]. Dans une seconde partie, nous présenterons d'autres résultats concernant les propriétés mécaniques de nanoparticules coeur-coquille Si-SiC, qui ont permis de montrer une transition entre déformation plastique du coeur et de la coquille, selon l'épaisseur de cette dernière. Nos analyses suggèrent également qu'un état particulier peut être obtenu pour une géométrie bien spécifique, pour lequel la contrainte est fortement délocalisée, et qui s'accompagne d'une ductilité très accentuée [2].

Références

- [1] D. Kilymis et al., *Acta Materialia* **158**, 155 (2018)
- [2] D. Kilymis et al., *Acta Materialia* **164**, 560 (2019)

Mots-Clés: Molecular dynamics, nanoparticles

Étude par simulation atomistique de l'endommagement d'un film mince au cours du flambage

Benjamin Bertin ¹, Jérôme Colin ¹, Julien Durinck ¹

¹ 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

Le flambage de films minces déposés sur substrats ainsi que celui de revêtements de matériaux métalliques est un phénomène étudié depuis de nombreuses années en science des matériaux [1,2] dans le but de contrôler les propriétés mécaniques de ces structures. Dans ce cadre, différentes morphologies ont été observées telles que les rides droites [3,4], les cloques circulaires et en " donuts " [5,6] ainsi que les cordons de téléphone [7,8]. Ces différentes morphologies ont été ensuite étudiées à l'aide de la théorie élastique des plaques minces de Föppl Vön Kármán.

Les travaux que nous présentons portent sur l'étude numérique, à l'aide de simulations atomistiques réalisées à 0 K, de la plasticité générée lors du flambage d'un film mince d'or sous déformation appliquée croissante, ces simulations étant effectuées pour différentes valeurs de l'énergie d'adhésion entre le film et son substrat. Trois régimes ont été identifiés en fonction de l'énergie d'adhésion du film sur son substrat. Dans le cas de faibles énergies d'adhésion (entre 0,585 et 1,05 J.m⁻²), le cloquage du film s'accompagne de glissement, par un mécanisme de nucléation de dislocation à l'interface, et de la propagation de la décohésion (par l'extension de la fissure à l'interface). Dans le cas de fortes énergies d'adhésion (entre 1,305 et 1,758 J.m⁻²), après la nucléation de la première dislocation à l'interface, la fissure continue son extension dans le film jusqu'à ce que la zone en forte compression de la cloque se plastifie sévèrement (voir figure). Dans le cas d'une énergie d'adhésion intermédiaire comprise entre ces deux régimes (entre 1,05 et 1,305 J.m⁻²), le comportement plastique devient plus complexe. Dans ce cas, on retrouve en effet les différents comportements observés dans les deux régimes évoqués précédemment.

Finalement, un diagramme présentant les différents phénomènes activés lors du flambage est présenté pour le film d'or en fonction de l'énergie d'adhésion du film sur son substrat et de la déformation appliquée caractérisant ainsi l'endommagement du film.

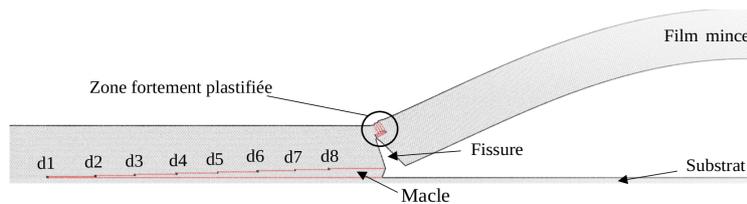


Image extraite d'une simulation atomistique du film mince déformé de 3% dans le cas d'une énergie d'adhésion film/substrat de 1,6 J.m⁻².

Références

- [1] L. Freund, S. Suresh, Thin Film Materials-Stress, Defect Formation and Surface Evolution, Cambridge Edition, Cambridge University Press (2003)
- [2] J.W. Hutchinson, Z.Suo, Advances in Applied Mechanics 29 (1992) 63
- [3] J. Colin, C. Coupeau, J. Durinck and J. Grilhé, Phys. Rev. B 78 (2008) 153411.
- [4] K. Wu, J.Y. Zhang, J. Li, Y.Q. Wang, G.Liu, J.Sun, Acta Mater. 100 (2015) 344-358.
- [5] J. Colin, C. Coupeau and J. Grilhé, Phys. Rev. Lett. 99 (2007) 046101.
- [6] H. Zhou, L. Ma, S.-J. Yu and Y. Ni, Thin Solid Films 651 (2018) 131-137.
- [7] M.W. Moonet al., J. Mech. Phys. Solids 50 (2002) 2355-2377.
- [8] S.-J. Yu, S.-C. Li, Y. Ni, H. Zhou, Acta Mater. 127 (2017) 220-229.

Mots-Clés: Cloquage, Plasticité, Films minces, Simulation atomistique

Essais de relaxation sous faisceau de rayons X : applications à des films minces d'or nanocristallins

Pierre Godard¹, Renault Pierre-Olivier², Damien Faurie³, Dominique Thiaudière⁴

¹ CNRS, Université de Poitiers, SP2MI (Institut P') – Université de Franche-Comté – Téléport 2, 11 bd Maire et Pierre Curie, BP 3079, 86962 Futuroscope Chasseneuil Cedex, France

² Institut Pprime (Université de Poitiers) – Institut Pprime – Technopole du Futuroscope, France

³ Université de Paris 13 (LSPM) – CNRS : UPR3407 – University of Paris 13, Villetaneuse, 93430, France, France

⁴ Synchrotron SOLEIL (SSOLEIL) – CNRS : UMRUR1 – L'Orme des Merisiers Saint-Aubin - BP 48 91192 GIF-sur-YVETTE CEDEX, France

Nous présenterons une méthode originale pour étudier la relaxation des films minces déposés sur substrats étirables[1]. En effet, nous avons remarqué que (1) après un saut en déplacement imposé au substrat, la déformation au centre de l'éprouvette reste constante, et (2), la déformation macroscopique se transmet intégralement entre le substrat et le film mince[2]. Lors de ces essais biaxiaux, la déformation macroscopique et la contrainte sont suivies *in-situ* respectivement par corrélation d'images numériques et par diffraction des rayons X.

Nous montrerons deux exemples où un film mince d'or nanocristallin est déposé sur un substrat en Kapton®. Dans le premier cas, l'épaisseur du film est 500 nm, et nous nous intéressons aux comportements des différentes composantes de texture[1]. Dans le second cas (figure), l'épaisseur est 50 nm, et nous montrons comment un faible recuit post-dépôt (d'une température homologue de 0,35) change la microstructure initiale, et par conséquent le comportement mécanique[3].

Par la mesure simultanée des paramètres d'activation et du profil du faisceau X diffracté, nous espérons caractériser les mécanismes principaux de déformation plastique des films minces nanocristallins.

Références :

[1] P. Godard et al., Relaxation mechanisms in a gold thin film on a compliant substrate as revealed by X-ray diffraction, Appl. Phys. Lett., 110, 211901 (2017)

[2] P.O. Renault et al., Continuous cyclic deformations of a Ni/W film studied by synchrotron X-ray Diffraction, Surf. Coat. Technol., 332, 351 (2017)

[3] P. Godard et al., article soumis

Mots-Clés: film mince, relaxation, diffraction des rayons X, nanocristal, recuit thermique, recuit mécanique

Comment les traces de glissement modifient la reconstruction de l'Au(111)

Dimitri Chauraud¹, Julien Durinck¹, Michel Drouet¹, Lorianne Vernisse¹,
Joël Bonneville¹, Christophe Coupeau¹

¹ 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

La surface (111) de l'or est bien connue pour présenter une reconstruction de surface ($22 \times \sqrt{3}$) sous forme de chevrons. Cette dernière permet d'accommoder une contrainte de surface en tension et se caractérise par une alternance de zones d'empilement hcp et cfc, séparées par des parties de Shockley localisées sous la dernière couche atomique de surface. La reconstruction de l'Au(111) possède des sites régulièrement disposés, au niveau desquels viennent se déposer préférentiellement et se former des nanoparticules ou agrégats métalliques. Elle constitue donc un gabarit de dépôt intéressant qui pourrait être ajustable s'il était possible de piloter la reconstruction de surface, dans le but de fonctionnaliser les surfaces et d'offrir ainsi des opportunités dans divers domaines applicatifs tels que la microélectronique ou la nanocatalyse [1]. Dans cette étude, nous avons étudié l'évolution de la reconstruction de surface sous contrainte et plus particulièrement la modification de la structure en chevrons causée par l'émergence de traces de glissement à la surface. Pour ce faire, le dispositif Nanoplast [2], qui permet de suivre in situ par STM sous UHV l'évolution d'une surface sous contrainte, a été utilisé. Il a été montré que l'apparition de motifs en " U " dans la reconstruction de surface était causée par la formation des traces de glissement. Des simulations atomistiques utilisant des potentiels interatomiques [3] ont ensuite été réalisées afin de mettre en évidence les mécanismes élémentaires qui participent à la modification de la reconstruction de surface Au(111) observée expérimentalement. Un scénario de formation des motifs en " U " impliquant la présence nécessaire de décrochements sur les traces de glissement a ainsi été proposé.

Références

- [1] Corso, M., Fernandez, L., Schiller, F., Ortega, E., American Chemical Society, 2009.
- [2] Coupeau, C. et al., Rev. Sci. Instrum. 84, 1051117, 2013.
- [3] Chauraud, D., Durinck, J., Drouet, M., Vernisse, V., Bonneville, J. and Coupeau, C., PRB, 96(045410), 2017.

Mots-Clés: Reconstruction de surface, Microscope à effet tunnel, Dynamiques Moléculaires

Modélisation et propriétés mécaniques de l'or nanoporeux non-revêtu et revêtu de silicium amorphe

Maxime Guillotte¹, Julien Godet¹, Laurent Pizzagalli¹

¹ Institut Pprime (P²) – CNRS : UPR3346, Université de Poitiers – Département de Physique et Mécanique des Matériaux, SP2MI, Téléport 2, Boulevard Marie et Pierre Curie, BP 30179, 86962 Chasseneuil- Futuroscope Cedex, France

L'or nanoporeux est un matériau largement étudié dans la communauté scientifique puisqu'il trouve son application dans plusieurs domaines (actuation, détection de cellules ou signaux biologiques, catalyse, par exemple). En effet, ce matériau est simple à synthétiser, présente une quantité de surface importante, est léger en comparaison à son massif (env.35%at), est un bon conducteur, est hautement fonctionnalisable, biocompatible, etc. En revanche, il est connu que ses propriétés mécaniques dévient de la loi d'échelle de Gibson-Ashby [1] vers un comportement moins rigide et moins résistant. De plus, ce matériau a un comportement fragile alors qu'il est admis que l'or non poreux (massif, nanofils...) est ductile. En vue d'accroître son applicabilité, il nécessaire de comprendre ces propriétés mécaniques particulières pour tenter de les améliorer.

Biener et al. [2] ont montré qu'un revêtement amorphe stabilise la structure en température. Dans ce projet nous étudions si un revêtement amorphe peut également améliorer les propriétés mécaniques de l'or nanoporeux. La dynamique moléculaire est un outil performant pour ce genre d'analyses puisqu'elle offre une résolution atomique. Afin de réaliser des simulations représentatives, une des étapes les plus importantes est d'obtenir un modèle réaliste. Dans cet oral nous présenterons brièvement la méthode développée pour construire les modèles atomistiques [3], puis nous comparerons les propriétés mécaniques et les mécanismes de déformation de l'or nanoporeux avec et sans revêtement en traction et en compression.

Références

- [1] L.J Gibson et M. F. Ashby, Cambridge Solid State Science Series (1997)
- [2] M.M. Biener et al., NanoLetters (2011)
- [3] M. Guillotte et al., Computational Materials Science (2019)

Mots-Clés: Nanoporous gold, molecular dynamics, model

Présentations par poster

On the role of an amorphous surface overlayer on the mechanical properties of fcc Ni nanoparticles under compression

Arnaud Allera ^{1,2}, Antoine Kraych ², Fabienne Ribeiro ¹, Thomas Niehaus ²,
Michel Perez ³, David Rodney ²

¹ IRSN/PSN-RES/SEMIA/LPTM Centre d'études de Cadarache, 13115, Saint Paul-lez-Durance, France

² Univ Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, Institut Lumière Matière, F-69622, Villeurbanne, France

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

Les aciers ferritiques utilisés dans l'industrie nucléaire sont soumis à d'importantes sollicitations mécaniques, à de hautes températures et à l'irradiation, qui sont susceptibles d'avoir un impact sur leur vieillissement. Celui-ci se traduit dans la structure cristalline par la formation de populations résiduelles de solutés, capables d'interagir avec les dislocations qui contrôlent la déformation plastique (formation d'atmosphères de Cottrell autour des dislocations [1], reconstruction de la structure de cœur [2]), et ainsi de modifier les propriétés mécaniques du matériau. Le but de ce travail est de modéliser à l'échelle atomique le glissement de dislocations dans le Fer cubique centré, en prenant en compte l'effet des solutés de carbone. Différents modèles énergétiques à l'échelle atomique sont évalués dans le but de modéliser le glissement thermiquement activé des dislocations dans des systèmes de taille suffisamment importante. Ces méthodes comprennent des potentiels interatomiques (EAM, MEAM), ainsi que la méthode DFTB (« Density Functional Tight Binding ») [3] basée sur la mécanique quantique et la théorie de la fonctionnelle de la densité mais accélérée par des approximations du type liaisons fortes. Les différentes approches sont comparées sur leur capacité à reproduire les énergies d'interaction carbone-carbone, dislocation-carbone, et sur les structures et les potentiels de Peierls des dislocations.

Références

- [1] O. Waseda, R. G. A. Veiga, J. Morthomas, P. Chantrenne, C.S. Becquart, F. Ribeiro, A. Jelea, H. Goldenstein, M. Perez, "Formation of carbon Cottrell atmospheres and their effect on the stress field around an edge dislocation", Scripta Mater. 129:16-19 (2017)
- [2] Ventelon et al. Phys. Rev. B. 91 (2015)
- [3] <https://www.dftbplus.org/>

On the role of an amorphous surface overlayer on the mechanical properties of fcc Ni nanoparticles under compression

Alexandra Goryaeva^{1,2}, Matthieu Bugnet¹, Claudio Fusco¹,
Jonathan Amodeo¹

¹ MATERiaux, Ingénierie et Science (MATEIS) – Université Claude Bernard Lyon 1, Centre National de la Recherche Scientifique, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon : UMR5510 – Bâtiment Blaise Pascal 7, avenue Jean Capelle 69621 VILLEURBANNE CEDEX, France

² DEN Service de Recherche de Métallurgie Physique (SRMP) – CEA-DEN-SRMP – CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France, France

Nano-objects, such as nanoparticles, nanowires, nanopillars and thin films are characterized by the large surface to volume ratio that, to a certain degree, defines their exceptional physical properties, significantly different from those in their bulk counterparts. In particular, nanocrystals are known for their promising mechanical properties: a size-dependent elastic regime, large values of yield strength and ductility, that are mainly linked to the dislocation nucleation from surface.

In this context, the various surface states of a sample are expected to lead to significant differences in terms of mechanical behavior. So far, nano-compression experiments in TEM or SEM occasionally report the presence of oxide or amorphous overlays at the top of nano-objects [1] while theoretical atomic scale studies are mainly focused on perfect crystalline systems [2].

Here we present a recent atomistic study [3] that aims to investigate the influence of amorphous shells on the mechanical response of Ni nanospheres upon compression. In order to avoid complex effects of chemistry on the onset of plasticity, we focus on pure Ni compound, without adding alloying elements to the amorphous overlay. Based on multiple EAM potentials and various sample elaboration tests, a unique methodology that provides a reasonably slow "crystallization" rate of the amorphous Ni on fcc substrate is proposed. Then, mechanical properties of the designed nanospheres with different shell thickness are investigated under uniaxial compression. The mechanical response of the composite systems is compared with that of purely crystalline and amorphous particles, with a particular focus on dislocation-based deformation processes.

Références

- [1] W.-Z. Han, L. Huang, S. Ogata, H. Kimizuka, Z.-C. Yang, C. Weinberger, et al., *Adv. Mater.* 27 (2015) 3385–3390.
- [2] D. Mordehai, S.-W. Lee, B. Backes, D.J. Srolovitz, W.D. Nix, E. Rabkin, *Acta Mater.* 59 (2011) 5202–5215.
- [3] A. M. Goryaeva, C. Fusco, M. Bugnet, J. Amodeo, *Phys. Rev. Mat.* (2019, accepted)

Mots-Clés: nanoparticle, molecular dynamics, nanocompression, core, shell, metals, dislocations

Deformation mechanisms in fine-grained iron-free forsterite aggregates at 900-1200°C and 0.3 GPa

Sylvie Demouchy¹

¹ Geosciences Montpellier (GM) – CNRS, Univ Montpellier – Pl. E. Bataillon, 34095 Montpellier, France

Deformation experiments were carried out on forsterite aggregates in axial compression using an *in situ* deformation gas-medium apparatus (Paterson press) at 0.3 GPa, 900-1200°C and nearly constant strain rates of 10^{-5} s^{-1} . The starting material is a synthetic iron-free forsterite aggregate with average grain sizes of 2.8 μm and about 2% of iron-free enstatite to buffer silica activity [1]. Eight deformation experiments were performed as well as one additional static annealing to characterize grain growth. Maximum stresses obtained range from 480 to 1800 MPa. The samples were investigated *post mortem* by scanning electron microscopy (SEM), electron backscatter diffraction (EBSD) and transmission electron microscopy (TEM). The mechanical data show that iron-free forsterite aggregates have greater strengths than their iron-bearing olivine counterparts, with a maximum strength close to 1800 MPa at 900°C. Textural characterization in SEM and TEM show a transition from micro-fracturation to intracrystalline plasticity around 1000°C. Below 1000°C, where the stress largely exceeds the confining pressure, grain boundary-mediated creep is observed, notably in the form of sliding at grain interfaces, gapping and out-of-plane displacement as reported by [2] at 1-atm and by [3] at 3.5-5 GPa. At 1050-1200°C, where pseudo-steady state could be achieved, analyses of the microstructures show very different features, with less serrated interfaces and tight (closed) grain boundaries, and evidences for activation of several dislocation slip systems with increasing temperature (e.g., subgrain boundaries). Mechanical data are compared to previously obtained rheological laws from similar experiments at higher temperatures and from Fe-bearing olivine. Implications for creep mechanisms of the uppermost mantle and associated deformation-induced textures will be presented.

Mots-Clés: foresterie, dislocation, GBS, hautes pressions

Propriétés élastiques de la phase martensitique α' du Ti-6Al-4V

Nathan Dumontet , Bernard Viguier ¹, Benoit Malard ², Damien Connétable ³

¹ Centre interuniversitaire de recherche et d'ingénierie des matériaux (CIRIMAT) – Université Paul Sabatier (UPS) - Toulouse III, CNRS : UMR5085, Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT – 4 allée Emile Monso 31030 Toulouse Cedex 4, France

² CIRIMAT (UMR 5084 INPT UPS CNRS) – Univ. Toulouse – 4 Allée Emile Monso, BP44362, 31030 Toulouse, France, France

³ Ecole Nationale d'Ingénieurs en Arts Chimiques et Technologiques (ENSIACET) – CNRS : UMR5085 – 4, allée Emile Monso, BP 44362, F-31030 Toulouse Cedex 4, France

Avec le développement de la fabrication additive de nouveaux procédés de métallurgie des poudres émergent. Parmi eux le Laser Beam Melting (LBM) consiste en la fabrication couche par couche d'une pièce en 3D par la fusion d'un lit de poudre par un laser. A cause des fortes vitesses de refroidissement induites par le procédé, une phase martensitique α' précipite dans le Ti-6Al-4V, habituellement ($\alpha+\beta$) quand élaboré par voies conventionnelles. Si la déformation plastique de la phase α' a été étudiée dans la littérature, les propriétés élastiques de cette phase sont très peu référencées. Nous avons abordé cette étude de l'élasticité de la phase martensitique α' en comparant les résultats de différentes méthodes expérimentales à des simulations atomistique (Density Functional Theory -DFT). L'évolution du module d'Young entre les structures martensitiques (brut de fabrication) et $\alpha+\beta$ (après traitement thermique) a été mesurée par des essais de traction et de vibration acoustique. Les constantes d'élasticité de la phase hexagonale compacte ont été calculées par DFT pour différentes compositions chimiques, allant de Ti pur (α) à la composition du Ti-6Al-4V (martensite α'). Nous montrons un bon accord entre résultats expérimentaux et simulations, indiquant que la martensite est moins rigide et plus anisotrope que le Ti α .

Mots-Clés: Fabrication additive, Titane, Ta6v, DFT, Modules, Martensite

Modification de la reconstruction de la surface (111) de l'or sous contrainte

Julien Durinck¹, Dimitri Chauraud¹, Michel Drouet¹, Christophe Coupeau

¹ 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

La surface (111) de l'or est bien connue pour présenter une reconstruction de surface ($22\times\sqrt{3}$) sous forme de chevrons. La densité atomique de la dernière couche d'atomes de surface est plus élevée que celles situées dans le volume et cette structure particulière permet la relaxation des contraintes de surface de tension. Le prix à payer pour cette reconstruction est la création de défauts d'empilement entre la dernière couche atomique et le reste du cristal. Ainsi la reconstruction de surface se caractérise par une alternance de domaines hcp et cfc en zig-zag délimités par des dislocations partielles de Shockley situées sous la couche atomique de surface. Les zones de désaccord paramétrique se manifestent par une surélévation des atomes de surface d'une vingtaine de picomètres, lesquelles sont ainsi visibles par microscopie à effet tunnel et constituent des sites préférentiels de dépôt des atomes d'un métal. La reconstruction en chevrons de la surface (111) de l'or est donc idéale pour être utilisée comme gabarit modèle pour l'auto-organisation à 2D d'agrégats d'atomes d'un métal déposé. Des observations par STM d'échantillons d'or monocristallins déformés in situ ont montré que la contrainte pouvait modifier la topologie de la reconstruction de surface. Dans cette étude, nous proposons d'étudier l'influence que peut avoir une contrainte appliquée extérieure sur la modification de la structure en chevrons de la reconstruction Au(111). Pour ce faire, nous avons réalisé des simulations atomistiques utilisant des potentiels interatomiques MEAM, bien adaptées pour aborder ce problème d'un point de vue numérique. Les mécanismes de base à l'origine du déplacement et de la réorganisation sous contrainte des dislocations partielles de Shockley situées sous la surface ont ainsi pu être mis en évidence.

Mots-Clés: Reconstruction de surface

Machine Learning for structural analysis of defects in crystalline solids

Alexandra Goryaeva¹, Mihai-Cosmin Marinica¹

¹ Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives (CEA) – Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives – 91191 Gif-sur-Yvette cedex, France

In the last decade, the emergence of artificial intelligence (AI) methods and their combination with Big Data has been named the "fourth paradigm of science". Machine learning (ML) is a subfield of AI, can be effectively adopted for various applications in materials sciences, such as guiding chemical synthesis and discovery of new compounds, development of accurate interatomic force fields and structural analysis of materials. This study proposes using ML techniques as a tool for detection and description of structural defects in crystalline solids.

Coupling ML and atomic-scale materials science is commonly performed via so-called atomic descriptors, also known as fingerprints [1,2]. In contrast to the conventional Cartesian representation of crystal structure, descriptors enable its invariant description with respect to basic physical principles and symmetry. Here we use the state-of-the-art ML methods combined with descriptors for automatic detection and refined structural analysis of point (vacancy, interstitials) and extended (dislocations) defects in solids. In contrast to the conventional methods, such as Wigner-Seitz and Voronoi polyhedra analysis, bond-angle and common neighbor analysis, centrosymmetry parameter, etc., ML structural analysis is universal and can be combined with any standard technique in order to provide more elaborate description of the defect structure. In this study we employ semi-supervised ML techniques based at novelty/outlier detection, such as Support Vector Machine (SVM) and Minimum Covariance Determinant (MCD). We firstly learn the bulk environment relying on the atomic configurations from MD calculations. Based on the learned atomic environments, we further perform detection of the defects embedded in the bulk as outliers different from the rest of atomic array.

Furthermore, based on this structural analysis technique, we also propose a generic numerical tool for examination of transferability of non-parametric kernel ML potentials to accurately compute objective defects. This tool can effectively be applied before performing time consuming MD calculations.

References

- [1] J. Behler and M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.* 98:146401 (2007)
- [2] A. Bartok *et al.* *Phys. Rev. B* 87:184115 (2013)

Mots-Clés: Machine Learning, structural analysis, defects

Influence of hydrogen on work hardening of (001) oriented nickel single crystal: an experimental and numerical approach

Guillaume Hachet¹, Arnaud Metsue¹, Abdelali Oudriss¹, Xavier Feaugas¹

¹ Laboratoire des Sciences de l'Ingénieur pour l'Environnement (LaSIE) – CNRS : UMR7356, Université de La Rochelle – Avenue Michel Crépeau -17042 La Rochelle Cedex 1, France

The effect of hydrogen on the mechanical properties of metals needs to be quantified for a better understanding of Hydrogen Embrittlement (HE). Different models have been proposed to describe the effect of the embrittlement of hydrogen on nickel (HEDE, HELP, SAV...). For cyclic loading, nickel develops heterogeneities such as persistent slip bands and matrix bundles, which make the characterisation of HE with one model more difficult. These heterogeneities, partially responsible of the work hardening, are mostly controlled by dipoles formation, which themselves are connected to the elastic interactions in nickel. That is why we studied, first, the influence of hydrogen on elastic properties of Ni by conducting uniaxial tensile tests and *ab initio* calculations at finite temperature. The uniaxial tensile tests were conducted with an extensometer and each sample was charged by cathodic polarization. Meanwhile, the simulation calculated the influence of H on the elastic constants of Ni. We showed that models underestimate the effect of hydrogen on elastic properties of nickel in comparison with the experiment. Additional calculations were performed on the elastic properties of Ni-Vacancies systems. They highlighted that vacancies induced by the incorporation of hydrogen deteriorate more the elastic properties of Ni than the hydrogen itself. These works are the first step to understand the influence of hydrogen on work hardening of nickel during cyclic loading. Now, we investigate the stability of dislocation dipoles distance with hydrogen, and vacancies clusters thanks to molecular dynamics simulations. Also, we conduct cyclic test on (001) oriented nickel single crystal without and with hydrogen at different plastic strain to observe the evolution of the work hardening with the incorporation of hydrogen. Finally, transmission electron microscope links with a statistical approach is used in order to characterize experimentally the stability of dislocation dipole distance.

Mots-Clés: hydrogen, dislocations, fatigue, nickel single crystal, multi, scale

Simulation de dynamique moléculaire des mécanismes de fluage d'irradiation du zirconium

Nargisse Khiara¹, Laurent Dupuy¹, Fabien Onimus¹, J.-P. Crocombette²,
Thomas Pardoën³, Jean-Pierre Raskin⁴, Yves Brechet⁵

¹ Service de recherches métallurgiques appliquées, CEA, Université Paris-Saclay (CEA) – Commissariat à l’Energie Atomique et aux Energies Alternatives (CEA) - Saclay, Université Paris-Saclay, Sorbonne Universités – 91191, Gif-sur-Yvette, France

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

³ Institute of Mechanics, Materials and Civil Engineering, Université catholique de Louvain – 1348, Louvain-la-Neuve, Belgique

⁴ Institute of Information and Communication Technologies, Electronics and Applied Mathematics, Université catholique de Louvain – 1348, Louvain-la-Neuve, Belgique

⁵ CEA Saclay (CEA) – Commissariat à l’énergie atomique et aux énergies alternatives – 91191 Gif-sur-Yvette cedex, France

Les métaux et alliages utilisés dans les réacteurs nucléaires, comme par exemple les aciers austénitiques ou les alliages de zirconium, sont sujets au fluage d’irradiation. Si aujourd’hui les lois de comportement décrivant ce phénomène ont été déterminées, les mécanismes physiques élémentaires qui en sont à l’origine restent méconnus. En effet, bien que de nombreux modèles microscopiques théoriques aient été proposés dans la littérature, très peu d’expériences ont réellement été concluantes pour l’identification de ces mécanismes. Des expériences in situ au MET de traction sous irradiation aux ions sur le Zircaloy-4 (alliage de zirconium) ont été réalisées récemment sur les plateformes IVEM (Argonne National Lab) et JANNuS Orsay (CNSM/CNRS). Pour une contrainte légèrement inférieure à la limite d’élasticité, des dislocations initialement bloquées sur des défauts d’irradiation hors flux d’ions peuvent, sous irradiation, se libérer de ces défauts. Une des interprétations possibles de ces observations est que lorsqu’un ion (ou neutron) incident se trouve suffisamment proche du point d’ancrage d’une dislocation, il entraîne une cascade de déplacements atomiques qui induit alors le désancrage de la dislocation.

Du fait du caractère instantané du mécanisme proposé, une étude en dynamique moléculaire a été réalisée sur le zirconium. L’interaction d’une dislocation vis avec une boucle d’irradiation dans le plan prismatique a d’abord été étudiée afin notamment de déduire la contrainte de désancrage en l’absence de cascades (correspondant à la limite d’élasticité). Le désancrage par une particule incidente a ensuite été étudié pour une contrainte fixe légèrement inférieure à la limite d’élasticité. Le désancrage semble dépendre du niveau de contrainte et de la position de la particule incidente, conformément aux observations expérimentales. A partir de ces calculs, un modèle analytique probabiliste a ensuite été proposé pour expliquer le fluage d’irradiation à haute contrainte.

Mots-Clés: Fluage d’irradiation, dynamique moléculaire, MET

Generalized yield criterion in BCC metals from first principles

Antoine Kraych¹, Bassem Ben Yahia², Lucile Dezerald², Emmanuel Clouet³, Lisa Ventelon⁴, Francois Willaime⁵, David Rodney¹

¹ Institut Lumière Matière (ILM) – CNRS : UMR5306, Université Claude Bernard - Lyon I (UCBL) – UMR5306 CNRS Université Claude Bernard Lyon 1 Domaine Scientifique de La Doua Bâtiment Kastler, 10 rue Ada Byron 69622 Villeurbanne CEDEX, France

² Institut Jean Lamour (Matériaux - Métallurgie - Nanosciences - Plasmas - Surfaces) (IJL) – Université de Lorraine, CNRS : UMR7198 – Parc de Saurupt CS14234 54042 Nancy Cedex, France

³ Service de recherches de métallurgie physique (SRMP) – CEA – CEA Saclay 91191 Gif sur Yvette, France

⁴ DEN-Service de Recherches de Métallurgie Physique, CEA, Université Paris-Saclay (SRMP) – CEA – CEA Saclay 91191 Gif sur Yvette, France

⁵ Département des Matériaux pour le Nucléaire (SRMP) – CEA – CEA, DEN, Département des Matériaux pour le Nucléaire, 91191 Gif sur Yvette, France

Body-centered cubic (BCC) metals are known for their atypical plasticity at low temperatures. In particular, their elastic limit depends strongly on the orientation of the applied stress, in contradiction with Schmid's law that is used to describe the plastic behavior of most other metals, such as face-centered cubic metals. The plastic behavior of BCC metals is controlled by the glide of $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$ screw dislocations. These dislocations display strong core effects at the atomic scale that are responsible for the atypical low temperature plasticity of these metals. Here, we investigate the link between screw dislocation core properties and Schmid law deviation in BCC metals using ab initio simulations based on the Density Functional Theory (DFT). We calculate the Peierls barriers of screw dislocations, i.e., the energy barrier between two neighboring equilibrium configurations, in order to evaluate the trajectory and core eigenstrain variation as the dislocation glides. The results are used in a modified version of the Schmid law in order to predict the variations of the critical resolved shear stress (RSS) as a function of crystal orientation. The trajectory of the dislocation is used to predict the so-called twinning/anti-twinning asymmetry, while the eigenstrain variations are linked to the effect of non-glide stresses that are known to impact the yield stress although they do not produce any Peach & Koehler force on the dislocation. We evidence a strong twinning/antitwinning and tension/compression asymmetry of the critical RSS, directly linked to the dislocation trajectory and eigenstrain variations at the atomic scale. These results – obtained from calculations in the absence of applied stress – are validated by comparison with direct DFT calculations performed under shear and non-glide stresses.

Mots-Clés: BCC, Dislocations, DFT

Plasticity of InSb micro-pillars: size effect and brittle to ductile transition

Florent Mignerot , Ludovic Thilly ¹, Bouzid Kedjar ²

¹ 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

² Institut Pprime (PPRIME) – Université de Poitiers, ENSMA, Centre National de la Recherche Scientifique : UPR3346 – Institut P: Recherche et Ingénierie en Matériaux, Mécanique et Energétique SP2MI Téléport 2 Boulevard Pierre et Marie Curie BP 3017986962 FUTUROSCOPE CEDEX, France

With the development of semiconductors and the miniaturization of the microelectronics components, research on small-scale materials has expanded considerably. New properties have been discovered with the size reduction of the sample and in particular a modification of the mechanical behavior [1]. For semiconductors, notably silicon (Si) and III-V compound materials (InSb, GaAs...), the brittle-to-ductile (BDT) transition usually observed in bulk samples with temperature [2-5] is modified with the reduction of the sample size [6, 7]. In the case of indium antimonide (InSb), the zinc-blende lattice structure imposes two types of {111} glide planes for dislocations: glide set (small interplanar distance) or shuffle set (large interplanar). Three different domains were defined with respect to the nature of dislocations [5, 6]: at high temperature, plasticity proceeds by the glide of perfect dislocations weakly dissociated in the glide set; at room temperature, plasticity is controlled by the motion of partial dislocations, also in the glide set and at low temperature, there are only perfect dislocations presumably in the shuffle set. This study aims at understanding the size effect dependence of the BDT in semiconductors and the role of dislocation nucleation during plastic deformation. Hence, InSb micro-pillars have been fabricated by Focused Ion Beam (FIB) and deformed *ex-situ* by a nanoindenter equipped with a flat punch (fig. 1.a). Transmission electron microscopy (TEM) thin foils have been extracted from the deformed InSb micro-pillars to study the deformed microstructure. TEM analysis reveals the presence of long thin defects that could correspond to stacking faults due to the propagation of leading partial dislocations along the slip plane. In parallel, phase field dislocation dynamics (PFDD) simulations have been performed in cooperation with the group of Prof. Irene Beyerlein (USCB, USA) to study the nature of dislocations (glide set and shuffle set). First PFDD simulations confirm that, in the glide set, deformation is induced by partial dislocations (fig. 1.b - 1.c) while in the shuffle set, only perfect dislocations are gliding. Both experimental and simulation work are under progress and will be later confronted to better understand the elementary deformation mechanisms of InSb micro-pillars.

Mots-Clés: Plasticity, Micro pillars, Size effect, Brittle to ductile transition

Microstructural evidence of grain boundary sliding in iron-free forsterite aggregates deformed 900-1200°C

Alexandre Mussi ¹, Patrick Cordier ¹, Julien Gasc ², Sylvie Demouchy ³,
Sanae Koizumi ⁴

¹ Unité Matériaux et Transformations - UMR 8207 (UMET) – Institut National de la Recherche Agronomique : UMR0638, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Lille, Université de Lille, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8207 – Université Lille 1 Bâtiment C6 59655 Villeneuve d'Ascq, France

² Laboratoire de Géologie de l'Ecole normale supérieure - UMR8538 (LG-ENS UMR8538) – Laboratoire de Géologie de l'Ecole normale supérieure : UMR8538 – UMR 8538 Ecole Normale Supérieure 24 Rue Lhomond 75231 Paris CEDEX 5, France

³ Géosciences Montpellier - UMR5243 (Géosciences Montpellier) – Géosciences Montpellier : UMR5243 – Géosciences Montpellier Université de Montpellier Campus Triolet cc060 Place Eugène Bataillon 34095 Montpellier Cedex05 France, France

⁴ Geochemical Laboratory - Graduate School of Science (Geochemical Laboratory) – Geochemical Laboratory, Graduate School of Science, University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-0033, Japan, Japon

In a recent study (see Gasc et al., this meeting) deformation experiments were carried out on forsterite aggregates using an *in situ* deformation gas-medium apparatus (Paterson press) at 300 MPa, 900-1200°C and nearly constant strain rates of 10^{-5} s^{-1} . The starting material is a synthetic iron-free forsterite aggregate with an average grain size of 2.8 μm and 2% of iron-free enstatite to buffer silica activity. Results show a transition from brittle to ductile deformation around 1000°C. At 1100-1200°C, where pseudo-steady state could be achieved, the microstructures show creep by dislocation glide, resulting from the activation of several dislocation slip systems with increasing temperature. Below 1100°C, where stress significantly exceeds confining pressure, grain boundary mediated creep is observed, with evidences of sliding and cavitation (gaping) at grain boundaries. We present here a detailed characterization of one of this sample exhibiting extensive sliding and cavitation based on transmission electron microscopy involving automatic orientation mapping (ACOM-TEM).

Mots-Clés: Forsterite, Dislocation, Grain Boundary Sliding, TEM, ACOM, TEM

Simulation du comportement thermomécanique d'un acier IF au cours du soudage par Laser

Latifa Arfaoui , Amel Samet¹, Amna Znaïdi²

¹ ipei el manar – ipei EL mANAR, Tunisie

² Amna Znaïdi – Tunisie

La simulation du comportement thermomécanique au cours du soudage par laser de l'acier IF (ARCELOR Mittal) été effectuée sur le code de calcul ABAQUS dans le cas particulier d'un comportement élastique linéaire et un modèle de plasticité isotrope transverse selon le critère de Hill sous l'hypothèse d'un écrouissage isotrope. Le soudage par faisceau laser induit un important gradient de température, d'une part entre les différentes parties de la pièce, notamment au voisinage de la source de chaleur, et d'autre part entre le début et la fin du traitement. D'où la nécessité d'introduire les propriétés thermo-physiques du matériau (la conductivité thermique, Le coefficient de dilatation thermique en fonction de la T). La modélisation de la source de chaleur est un paramètre clé dans la simulation des procédés de soudage. La valeur numérique de celle-ci correspond à la densité de puissance dans le keyhole qui transmet l'énergie thermique à l'intérieur de la pièce. Nous avons adopté une source de chaleur volumique de forme gaussienne. Des conditions aux limites de convection et de rayonnement ont été prises en compte. A partir des résultats de la simulation, on constate que la vitesse de chauffage varie en fonction de la position transversale du point d'analyse par rapport au cordon de soudure. Elle est d'autant moins importante que ce dernier est loin de la source. En plus, la température maximale atteinte au niveau des points les plus distants est plus faible que celle mesurée au niveau de la ligne de fusion. Pour une vitesse de refroidissement donnée, le temps d'incubation nécessaire à la germination des grains de ferrite est plus grand quand la température atteinte est plus importante. Ceci explique l'apparition des premiers grains de ferrite loin du centre de la soudure, à une distance où $T = 900^\circ\text{C}$ alors que les derniers apparaissent à proximité de la ligne de fusion. Le grossissement du grain est gouverné par le gradient thermique local. Ce dernier étant très important, la croissance de ces grains sera favorisée par rapport à la nucléation de la ferrite. Les noyaux formés peuvent croître à un certain taux que la germination du point adjacent n'est plus possible.

Mots-Clés: acier IF soudage Laser grossissement des grains

Glissement des dislocations $c + a$ dans le zirconium

Thomas Soyez¹, Emmanuel Clouet¹, Fabien Onimus²

¹ Service de recherches de métallurgie physique (SRMP) – CEA – CEA Saclay 91191 Gif sur Yvette, France

² Laboratoire d'Analyse Microstructurale des Matériaux (DEN/DANS/DMN/SRMA/LA2M) – CEA – CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

Le zirconium est un métal de structure hexagonale compacte. La plasticité des métaux hexagonaux est contrôlée par le glissement des dislocations. Néanmoins, ces dernières ne permettent pas l'accommodation de la déformation dans les directions contrairement au maillage ou au glissement des dislocations. Cette étude vise à étudier le glissement de ces dislocations en se basant sur une approche expérimentale et numérique. Des observations en microscopie électronique à transmission ont été réalisées sur des échantillons tractionnés à 350°C à 2 %. Le plan de glissement des dislocations a été déterminé et uniquement du glissement pyramidal de première espèce a été observé, ce qui est en accord avec de précédentes publications [1,2]. Les dislocations observées sont alignées dans une orientation préférentielle qui correspond à l'intersection de leur plan de glissement avec le plan basal, correspondant à des dislocations à fort caractère coin.

Afin de modéliser à l'échelle atomique les structures de cœurs des dislocations, des potentiels empiriques sont utilisés. Le choix du potentiel empirique devant être validé, une étude des fautes d'empilement dans les plans possibles de dissociation est réalisée. Les résultats sont comparés aux fautes d'empilement obtenues avec des calculs *ab initio* [3]. Après avoir fait cette comparaison deux potentiels ont été validés et ont été utilisés pour simuler les structures de cœur des dislocations vis. Un potentiel prédit une dissociation non planaire de la dislocation, c'est à dire dans deux plans différents tandis que l'autre prédit des structures de cœurs dissociées dans un seul plan, la structure la plus stable étant dissociée dans un plan pyramidal de première espèce. Une dissociation non planaire des dislocations vis amènerait à de fortes forces de friction avec le réseau ce qui n'a pas été observé en microscopie électronique pour l'orientation vis. Le potentiel amenant à des structures dissociée dans un seul plan est donc préféré et est maintenant utilisé pour étudier le glissement des dislocations vis.

Références

- [1] H. Numalura et al., *Philos. Mag. Let.* 63, 5 1077-1084 (1991).
- [2] F. Long et al., *Scripta Mat.* 153, 94-98 (2018).
- [3] D. Rodney et al., *Acta Mat.* 124, 633-359 (2017).

Mots-Clés: dislocation, simulation, potentiel empirique, microscopie, MET

Atomistic simulation of jog pair in magnesium oxide

Jian-Hui Zhai¹, Pierre Hirel¹, Philippe Carrez¹

¹ Unité Matériaux et Transformations - UMR 8207 (UMET) – Institut National de la Recherche Agronomique : UMR0638, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Lille, Université de Lille, Centre National de la Recherche Scientifique : UMR8207 – Université Lille 1 Bâtiment C6 59655 Villeneuve d'Ascq, France

Magnesium oxide MgO is known for its ductility, allowed by dislocations which are surprisingly glissile for an oxide ceramic material. However in high-temperature applications, the enhanced diffusion may activate another mechanism: dislocation climb, where a dislocation moves out of its glide plane. This is particularly true when one considers creep conditions, where high temperatures come together with very slow strain rates. In this work, we investigate dislocation climb in magnesium oxide for the two main slip systems 110 by means of atomistic simulation. The edge dislocation core configurations are obtained at different pressures from dislocation dipolar configurations with periodic boundary conditions. Jog pair configurations are constructed by duplicating different dislocation dipole configurations. We determine the formation energy of jog pairs under various pressure conditions, and find that they bear an electric charge. We demonstrate that jog density is low and jog pair nucleation mechanism should be considered to model dislocation climb in MgO.

Mots-Clés: Dislocation climb, MgO, Jog pair, Charged unit jog, Formation energy.

Liste des participants

Amodeo Jonathan	Landeiro Dos Reis Marie
Barrat Jean-Louis	Le Lu Tuan
Bertin Benjamin	Lebedkina Tatiana
Bouquerel Jeremie	Lebyodkin Mikhail
Castany Philippe	Lefebvre Jean-Marc
Chauraud Dimitri	Legros Marc
Cordier Patrick	Long Didier
Demouchy Sylvie	Lopez Castano Silvia
Deplancke Tiana	Mama Toulou Michel Bertrand
Dimanov Alexandre	Mussi Alexandre
Douin Joël	Marano Aldo
Durinck Julien	Mignerot Florent
Eloh Komlavi Senyo	Monchoux Jean-Philippe
Fressengeas Claude	Nzogang Billy Clifton
Gallet Julien	Parent Salomé
Gaucher Valerie	Pettinari-Sturmel Florence
Gérard Céline	Pizzagalli Laurent
Geslin Pierre-Antoine	Rodney David
Godard Pierre	Samet Amel
Goryaeva Alexandra	Schenk Thomas
Gouriet Karine	Soyez Thomas
Guénolé Julien	Taupin Vincent
Guillotte Maxime	Upadhyay Manas
Hachet Guillaume	Verdier Marc
Hirel Pierre	Viguiier Bernard
Harbaoui Imen	Xu Shanshan
Khiara Nargisse	Zhai Jian-Hui
L'Hôte Gabriel	Znaidi Amna

Liste des sponsors



Excellence in Science

Shimadzu

Shimadzu est le groupe japonais leader mondial spécialisé dans l'instrumentation analytique et physique, le diagnostic médical et l'aéronautique. Fondé en 1875 au Japon, Shimadzu s'appuie sur une très riche histoire ponctuée de découvertes, d'innovations et de premières mondiales. Depuis le début, Shimadzu a toujours misé sur le talent de ses collaborateurs pour transformer l'industrie.

SYNERGIE⁴

SYNERGIE4

SYNERGIE4 est votre interlocuteur privilégié pour ce qui concerne la microanalyse, la microtomographie par rayons X, le dépôt de couches minces et tout ce qui concerne la microscopie électronique.

