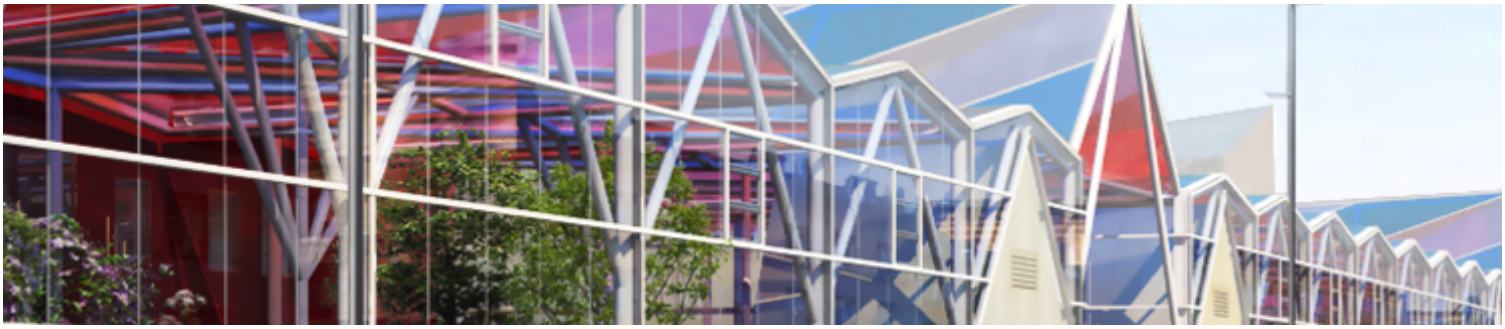


Colloque Plasticité 2018

Nancy, 9-11 Avril 2018

Colloque Plasticité 2018

Nancy, 9-11 Avril

Organisation

Lucile Dezerald (IJL, UL)
Sébastien Allain (IJL, UL)
Thomas Schenk (IJL, CNRS)
Alain Jacques (IJL, CNRS)

Comité scientifique

Nathalie Gey (LEM3, CNRS)
Jean-Christophe Hell (ArcelorMittal Maizières Research SA)
Roxane Massion (LEM3, UL)
Marc Ponçot (IJL, UL)
Vincent Taupin (LEM3, CNRS)
Julien Teixeira (IJL, CNRS)
Lucile Dezerald (IJL, UL)
Sébastien Allain (IJL, UL)
Thomas Schenk (IJL, CNRS)
Alain Jacques (IJL, CNRS)

Gestion administrative et communication

Catherine Augsburger (IJL)
Caroline Barjon (IJL)
Isabelle Fournelle (IJL)
Jean-Pierre Messe (IJL)

Remerciements à nos partenaires et sponsors

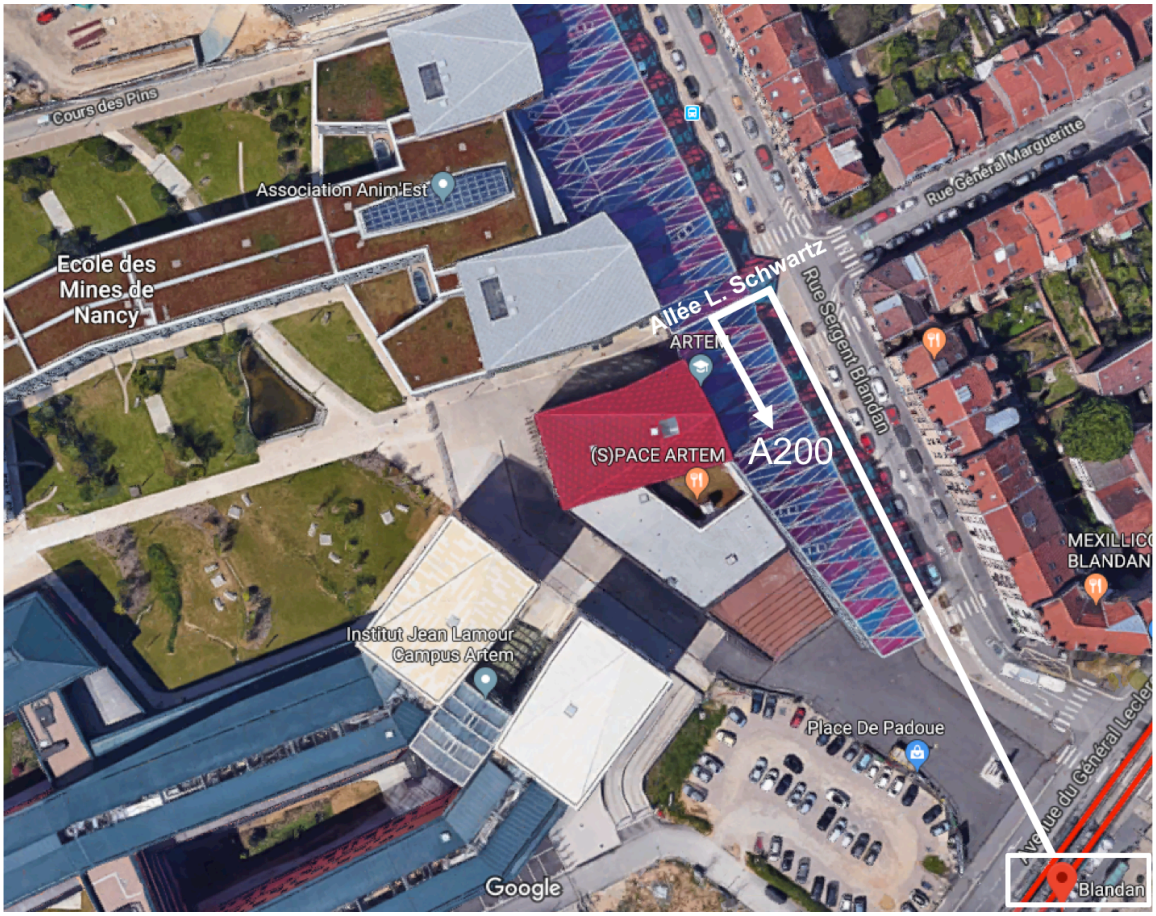
Institut Jean Lamour
Université de Lorraine
CNRS (Centre National de la Recherche Scientifique)
Mines Nancy
LabEx DAMAS (Design of Alloy Metals for low-mAss Structures)
Pôle M4 (Matière, Matériaux, Métallurgie, Mécanique)
ArcelorMittal
Zwick Roell
ICEEL (Institut Carnot Energie et Environnement en Lorraine)
Métropole Grand Nancy

Itinéraire : Gare de Nancy – site du colloque (campus ARTEM)

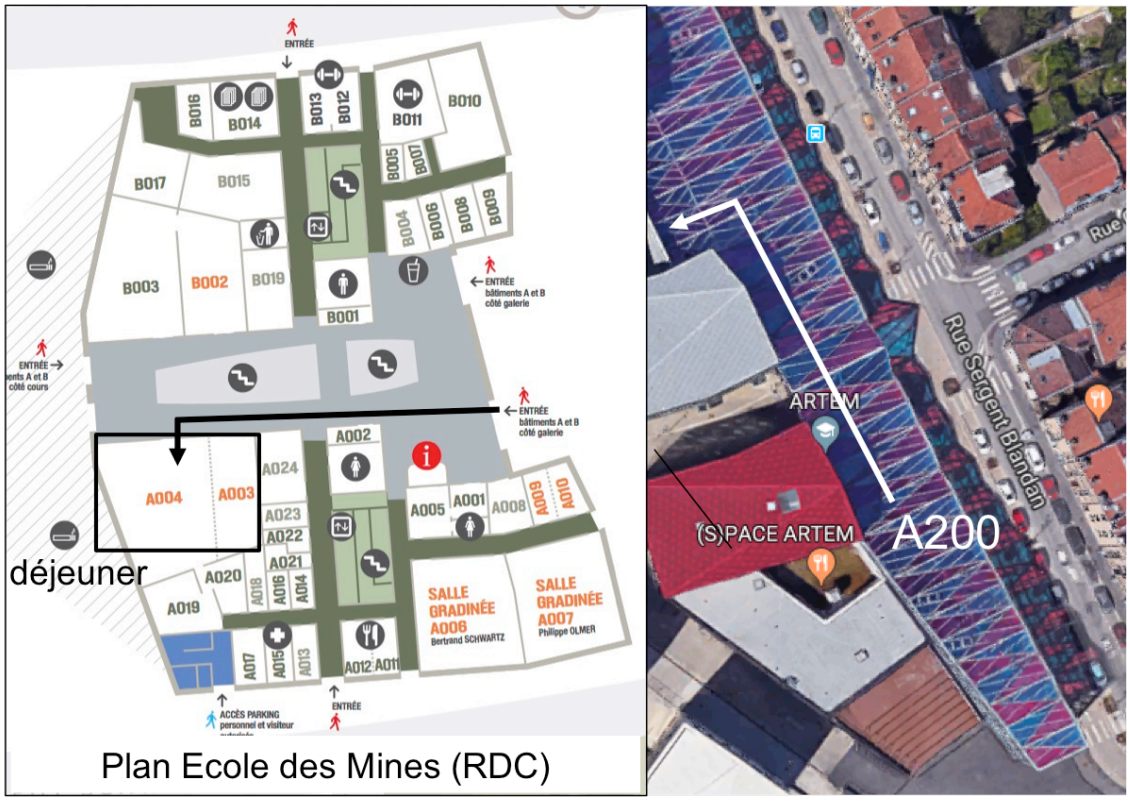
A partir de la Gare de Nancy :

- 15 min. de tram (ligne rouge sur le plan) Direction Vandoeuvre CHU Brabois, descendre à l'arrêt **Blandan**
- 30 min. à pied (ligne épaisse noire en pointillés sur le plan)

Accès au colloque (Amphi 200) depuis l'arrêt de tram Blandan



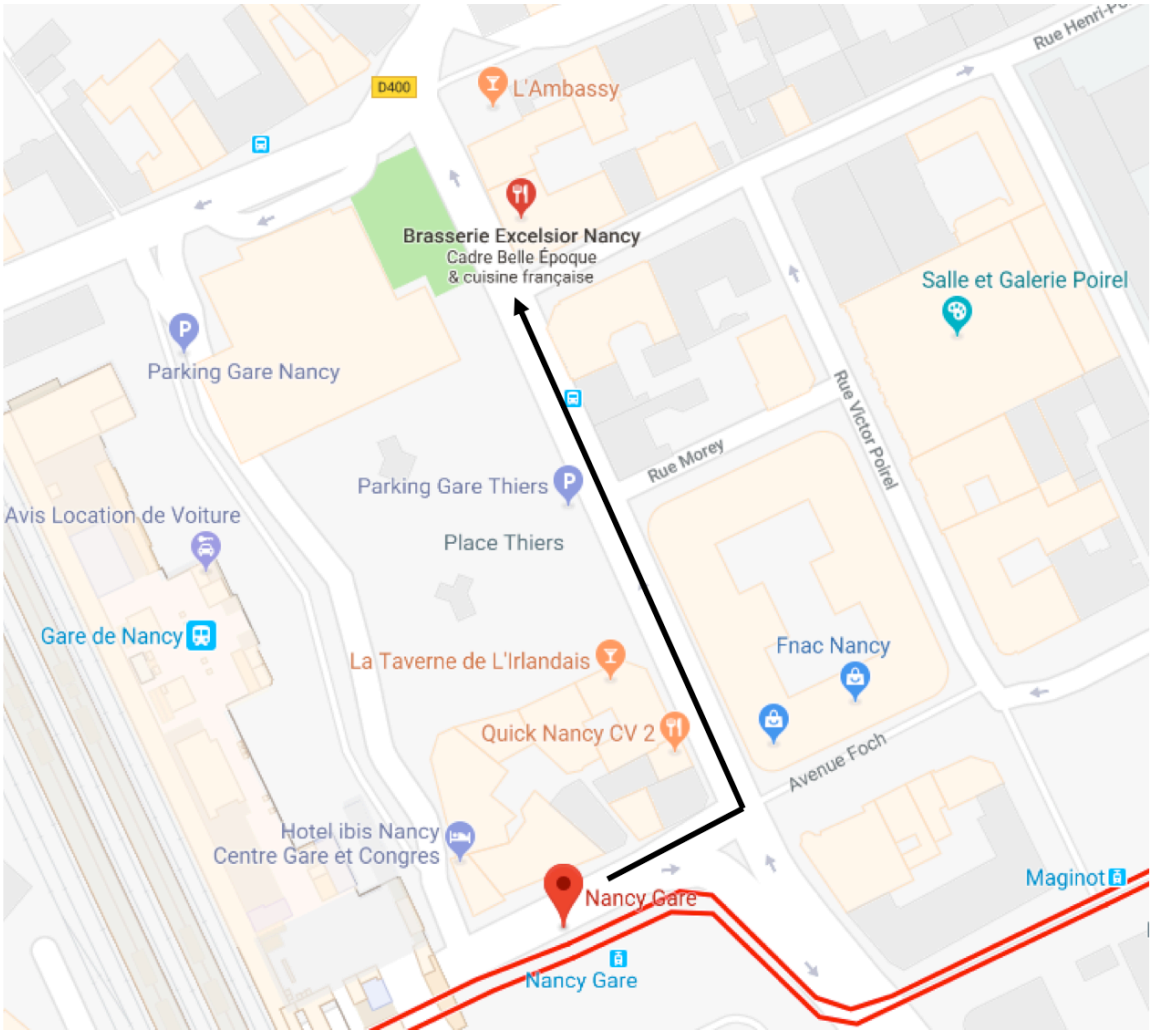
Accès à l'Ecole des Mines pour le déjeuner



Plan Ecole des Mines (RDC)

Se rendre au diner de Gala

Le diner de Gala se déroulera à l'Excelsior, à 5 min. à pied de la gare de Nancy.
Adresse : 50 Rue Henri-Poincaré, 54000 Nancy
Pour le trajet de la conférence à la Gare, voir p. 4 (15 min. tram, 30 min. à pied)



Programme – Plasticité 2018

Communications orales

Lundi 9 avril

12:00 - 14:00 Déjeuner (Ecole des Mines)

14:00 Ouverture du colloque

14:20 **X. Sauvage (invité)** Évolutions microstructurales sous déformations plastiques intenses et conséquences sur les propriétés mécaniques 11

15:00 **M. Legros** Grain Boundary crack openings during metallization aging in power MOSFETs 12

15:20 **E. Bertrand** Déformation par maclage – ou antimaclage ? - d'un monocristal d'alliage de titane β-métastable superélastique 13

15:40 **B. Nzogang** Characterization of dislocations in minerals by Scanning Electron Diffraction in the Transmission Electron Microscope 14

16:00 - 16:40 Pause café

16:40 **A. Rollett (invité)** Characterization of the Micromechanical Evolution of Ti-7Al Under Cyclic Loading Using High Energy X-Ray Diffraction Microscopy 15

17:20 **A. Guitton** A dislocation-scale characterization of the evolution of deformation microstructures around nanoindentation imprints in TiAl 16

17:40 **F. Pettinari-Sturmel** Etude par MET des micromécanismes de déformation en fluage dans le superalliage AD730 17

18:00 **G. Hachet** Etude multi-échelle de l'influence de l'hydrogène sur les structures hétérogènes de dislocations induites par la fatigue du nickel monocristallin 18

18:20 - 20:00 Session posters

Mardi 10 avril

08:30 Mot de F. Rousseau

08:40 **L. Laiarinandrasana (invité)** Imagerie 3D par tomographie sur les polymères semi-cristallins Dialogue expérience/ modélisation à l'échelle locale. 19

09:20 **A. Létoffé** Étude de la transition fragile/ductile d'une matrice iPP-g-MAH modifiée par différents types de polyétherdiamine. 20

09:40 **M. Donnay** Mécanismes de déformation en traction de films de PET semi-cristallins orientés étudiés par WAXS/SAXS avec rayonnement synchrotron *in situ* 21

10:00 **P. Lafourcade** Analyse du comportement en compression d'un cristal moléculaire : Une étude de Dynamique Moléculaire 22

10:20 - 11:00 Pause Café

11:00 **O. Hardouin Duparc** Mieux enchaîner les icosaèdres dans les carbures de bore pour les renforcer 23

11:20 **E. Maras** Modélisation du glissement secondaire des dislocations vis <a> dans le zirconium 24

11:40 **A. Soulié** Plasticité induite par glissement thermiquement activé dans le dioxyde d'uranium 25

12:00 **L. Portelette** Viscoplasticité du monocristal d'UO2 avec matrice d'interaction entre systèmes de glissement calibrée par Dynamique des Dislocations 26

12:20 - 14:00 Déjeuner (Ecole des Mines)

14:00 **L. Capolungo (invité)** Integrated computational mechanics: perspectives 27

14:40 **J. Chevy** Défis techniques et leviers liés à la localisation de la déformation dans les alliages d'aluminium à haute performance 28

15:00 **S. Berbenni** Fast Fourier Transform micromechanical modeling of interfacial defects mechanical fields and applications 29

15:20 **M. A. Lebyodkin** Correlation of dislocation avalanches in the low strain-rate regime of jerky flow 30

15:40 - 16:20 Pause Café

16:20 **A. Ask** A Cosserat crystal plasticity and phase field model for recrystallization 31

16:40 **P. Hirel** Étude systématique de joints de grains dans MgO et leur évolution à très haute pression 32

17:00 **A. Kraych** Effet des contraintes non-glissiles sur l'anisotropie plastique du tungstène 33

17:20 **F. Willaime** Effet des solutés interstitiels sur la structure de cœur et la mobilité des dislocations dans les métaux cubiques centrés 34

17:40 - 18:40 Visite de l'Institut Jean Lamour (sur inscriptions)

20:00 Diner de Gala (Excelsior)

Mercredi 11 avril

08:30 **D. Gloaguen (invité)** Apport des grands instruments pour l'étude du comportement mécanique des matériaux hétérogènes 35

09:10 **R. Purushottam Raj Purohit** Insights into deformation mechanism of Ni microwires: synergy between experiment and simulation 36

09:30 **J. L. Dequiedt** Localisation de la déformation plastique dans une plaque en traction biaxiale : apport de la plasticité cristalline 37

09:50 **T. Auger** Couplage entre plasticité et rupture : le rôle des transformations de phase dans la rupture des aciers austénitiques induite par un métal liquide 38

10:10 - 10:50 Pause Café

10:50 **R. Candela** Influence du carbone sur une boucle d'auto-interstitiels dans le fer par simulations à l'échelle atomique 39

11:10 **A. Ruffini** Modélisation champ de phase du comblement des pores par montée de dislocations dans les superalliages à base nickel 40

11:30 **A. M. Goryaeva** On the role of amorphous shells on mechanical properties of fcc Ni nanoparticles under compression 41

11:50 **M. Guillotte** Etude du comportement mécanique de nanofils coeur@coquille or@silicium au cours de cycles traction-compression par dynamique moléculaire. 42

12:10 Message de cloture

12:20 - 14:00 Déjeuner (Ecole des Mines)

Posters

A. Znaidi Etude et modélisation des alliages de titane par une stratégie d'identification : application biomécanique 43

A. Znaidi Stratégie d'identification des lois de comportement des alliages Al2024 Dialogue modèle-expérience 44

T. Richeton Contraintes internes dues au glissement au joint de grains : effets de l'élasticité anisotrope, de la plasticité et des jonctions triples 45

J. Guenole Plasticity in Laves phases: an atomistic approach 46

T. Soyez Interaction dislocation – hydrogène dans le zirconium 47

V. Taupin Dynamic strain aging, strain localization and fracture in Al-Cu-Li alloys 48

C. Fressengeas Disconnections, dislocations and generalized disclinations in grain boundary ledges 49

E. Clouet Atomic scale study of twinning in hcp metals 50

R. Madec Déformation rapide des métaux par dynamique des dislocations 51

J. Amodeo Nucleation of dislocation in ultra-hard ceramic nanoparticles modelled by molecular dynamics and nudged elastic band simulations 52

M. Guillotte Caractérisation morphologique et mécanique de nanomousses d'or par dynamique moléculaire. 53

A. Metsue Contribution des défauts sur le comportement anisotrope de la diffusion de l'hydrogène dans le nickel monocristallin 54

M. Landeiro Dos Reis Étude du glissement assisté par la montée des dislocations de type coin dans l'aluminium 55

K. S. Eloh Développement d'un nouvel opérateur de Green discret adapté aux méthodes numériques de type FFT pour des matériaux hétérogènes avec déformations libres de contraintes 56

X. Chen Effets de l'anisotropie élastique et de la rigidité des joints de grains sur les empilements de dislocations : calculs théoriques et caractérisations dans des bi-cristaux micrométriques 57

P. Castany Maclage dans les alliages de titane β-métastable superélastiques : particularités et origine 58

B. Nzogang Application de la cartographie d'orientation Haute Résolution en MET à l'étude de la plasticité des phases du manteau inférieur de la terre 59

N. Gey Influence de la répartition des pores intra-granulaires sur le comportement visco-plastique de l'UO_2 60

B. Viguier Etude expérimentale des mécanismes de fermeture des pores par CIC dans un superalliage monocristallin CMSX4 61

Lundi 9 avril – 14h20

Évolutions microstructurales sous déformations plastiques intenses et conséquences sur les propriétés mécaniques

X. Sauvage

Groupe de Physique des Matériaux, Université Rouen Normandie, France

Le niveau de déformation plastique dans les métaux est généralement limité par l'endommagement. Cependant, lorsque la pression hydrostatique est suffisamment élevée il est possible de le limiter et d'atteindre des déformations extrêmes. La production de défauts, tels que les dislocations par exemple, et les phénomènes de restauration ou de recristallisation dynamiques associés engendrent alors des évolutions structurales particulières. On observe ainsi généralement des structures à grains ultrafins (diamètre inférieur au micromètre), mais dans cet exposé nous nous intéresserons plus particulièrement aux matériaux multiphasés et aux mécanismes de co-déformations. Nous verrons comment il est possible d'exploiter les déformations intenses pour générer des nanostructures mais aussi quelles en sont les limites physiques. On s'intéressera notamment aux transformations de phases, à la diffusion accélérée, aux mélanges hors équilibre et aux ségrégations induites par les très grandes déformations. Cet exposé s'appuiera sur différents exemples, incluant des caractérisations à l'échelle atomique par microscopie électronique à transmission et par sonde atomique tomographique. On discutera d'une part de la genèse des nanostructures qu'il est possible d'obtenir, et d'autre part de leurs propriétés mécaniques généralement caractérisées par une très haute limite élastique associée à un faible écrouissage. On terminera par quelques réflexions sur les limites du durcissement par affinement de la taille de grains et de son association au durcissement structural par précipitation.

15h00

Grain Boundary crack openings during metallization aging in power MOSFETs

Roberta Ruffilli[1,3*], Mounira Berkani[2], Philippe Dupuy[3], Stéphane Lefebvre[2], Yann Weber[3], Marc Legros[1]

[1] CEMES-CNRS, 29 rue J. Marvig, Université de Toulouse, 31055 Toulouse, France
[2] Laboratoire SATIE, ENS-Cachan, 61 Avenue du Président Wilson, 94235 Cachan, France
[3] NXP Semiconductors, 24Avenue du Président Eisenhower, 31000 Toulouse, France

Smart power MOSFETs are now found in many fields of automotive, domotics or energy conversion. These devices need to dissipate important energy levels and experience fast temperature gradients. Those gradients can quickly lead to failure [and previous studies have shown that the metallic parts (source top metallization and bond wires) are the main suspects [1-3]. This is expected because they possess the lower yield stress. However, their aging mode is significantly different from bulk metals. This is in part due to their thin film configuration, but also to the mode of stress that include high temperature compression and lower temperature tension.

Microstructure is characterized before and after aging through ion microscopy, electron microscopy and grain structure mapping. We have investigated areas away and under the wire bondings (see fig. 1) that are cold welded prior to aging. In the former area the metallization undergoes an apparent grain shrinkage and cracking along the grain boundaries, probably due to enhanced self-diffusion of Al atoms along the boundaries. In the latter area a strong grain reduction has been observed, due to the initial plastic deformation; cracks propagate along the wire-metallization interface under the bonding because of the presence of Al oxide [4]. The change in the Al grain microstructure at the wire–metallization interface is investigated through in-situ characterization and 3D visualization techniques to understand the physical phenomena behind the metallization degradation.

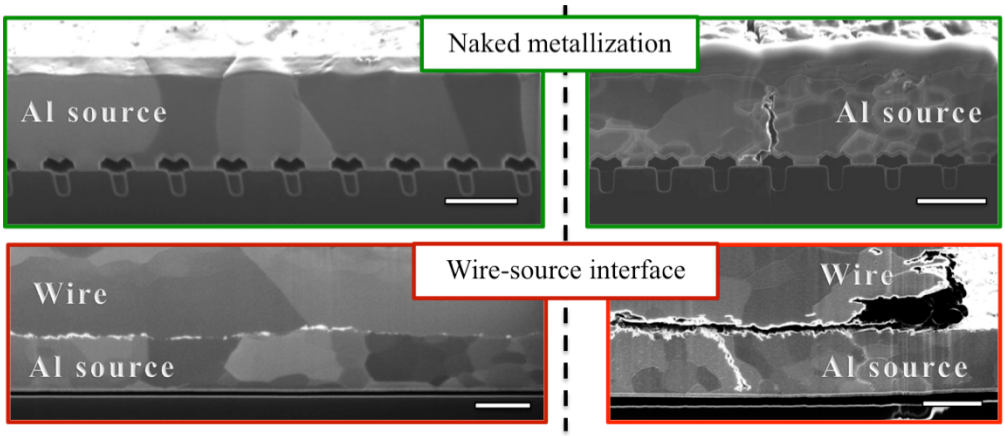


Figure 1 : Focused ion beam (FIB) cross section of naked metallizations (green), wire-source metallization interface (red), in a non aged (left) and aged (130 kcycles, right) module. Scale bar 2.5 µm.

Références

[1] Caccuri V., Milhet X., Gadaud P., Bertheau D., Gerland M.J., *Electron Mater*, 2014, 43, 4510–4

[2] LeHenaff F., Azzopardi S., Deletage J.Y., Woirgard E., Bontemps S., Joguet J., *Microelectron Reliab*, 2012, 52, 2321–5

[3] Glavanovics M., Detzel T., Weber K., *Proceedings of the 34th European Solid-State Device Research Conference*, 2004, 273–6

[4] Ruffilli R., Berkani M., Dupuy P., Lefebvre S., Weber Y., Legros M., *Microelectron Reliab*, 2015, 55 (9-10), 1966-1970

15h20

Déformation par maclage – ou antimaclage ? - d'un monocristal d'alliage de titane β-métastable superélastique

Emmanuel Bertrand[1], Edern Menou[1], Yang Yang[2], Philippe Castany[3], Thierry Gloriant[3]

[1]Institut des Matériaux Jean Rouxel (IMN), CNRS UMR 6502, Université de Nantes, 2 rue de la Houssinière, BP 32229, 44322 Nantes Cedex 3, France.
[2] Fujian Institute of Research on the Structure of Matter, Chinese Academy of Sciences, 155 Yangqiao Road West, Fuzhou, Chine
[3]INSA de Rennes, UMR CNRS 6226 Institut des Sciences Chimiques de Rennes/Chimie-Métallurgie, 20 avenue des Buttes de Coësmes, 35708 Rennes, France

Les alliages de titane β-métastables sont très adaptés aux applications médicales grâce à leur faible module d'élasticité et la possibilité de les élaborer uniquement avec des éléments parfaitement biocompatibles (Nb, Mo, Zr…). Avec une teneur en éléments bétagènes judicieusement choisie, ils peuvent présenter un effet superélastique (transformation martensitique sous contrainte de la phase β cubique centrée en phase α'' orthorhombique C-centrée). Ces alliages présentent également des mécanismes de déformation particuliers comme le système de maclage $\{332\}\langle 113\rangle_{\beta}$ spécifique de ces alliages métastables. Il a été montré récemment que ce système de maclage correspond en réalité à la réversion d'un maclage de la martensite α'' par le système $\{130\}\langle 310\rangle_{\alpha''}$ [1].
La présente étude a été réalisée sur un monocristal d'alliage superélastique de composition chimique Ti-24Nb-4Zr-8Sn (% massique). Des essais de traction *in situ* sous rayonnement synchrotron ont montré :

1- que cet alliage subit une transformation martensitique complète sous contrainte,

2- que le relâchement de la contrainte implique une réversion de la martensite en phase β accompagnée de la formation de phase ω.

Des micrographies optiques accompagnées d'analyses EBSD ont montré que des macles de type $\{112\}\langle 111\rangle_{\beta}$ se forment lors de ce processus. De plus, des analyses MET ont montré que la phase ω formée lors de la réversion de la martensite se forme aux interfaces matrice/macle.
L'analyse des macles à partir d'un calcul du facteur de Schmid a montré que le système de maclage $\{112\}\langle 111\rangle_{\beta}$, typique des structures cubiques centrées, est ici particulier : les variantes qui sont activées ici n'accommoderaient pas de déformation en traction mais en compression. Ceci s'apparente à de l'antimaclage peu favorable énergétiquement du fait du cisaillement important qui l'accompagne.
Il sera montré que l'observation de cet antimaclage correspond en réalité à une séquence de plusieurs mécanismes de déformation analogue à celle déterminée pour le système $\{332\}\langle 113\rangle_{\beta}$ [1] : transformation martensitique sous contrainte avec sélection de variantes, maclage de la martensite, puis réversion en phase β quand la contrainte est relâchée. La sélection de variantes joue alors un rôle fondamental dans l'activation de ce système.

Références

[1] P. Castany, Y. Yang, E. Bertrand and T. Gloriant, Physical Review Letters 117, 245501 (2016).

15h40

Characterization of dislocations in minerals by Scanning Electron Diffraction in the Transmission Electron Microscope

Billy Nzogang[1*], Alexandre Mussi[1] and Patrick Cordier[1]

[1]Université de Lille, CNRS, INRA, ENSCL, UMR 8207-UMET-Unité Matériaux Et Transformations

The development of the diffraction contrast technique is central in TEM and very useful to characterize defects. Conventional TEM based on diffraction contrast has the key advantage to provide information at the microscale and mesoscale of dislocation arrangements and patterning, which play a key role in plasticity. In this technique, image formation as well as most operations, like the so called Weak Beam Dark Field (WBDF) are performed at the microscope and final images are captured by a CCD camera conjugate to the image plane. In case of beam sensitive materials (Bridgmanite, quartz…), the time necessary for adjustments and image optimization might be detrimental and lead to damage the sample before the characterizations are fulfilled. Here we present an alternative technique for dislocation imaging and characterization in the TEM based on Scanning Electron Diffraction (SED) (Rauch & Véron 2014). It consists in recording a data cube of diffraction patterns from which imaging is extracted off-line by post treatments. Application on some important rock-forming minerals, olivine, Phase A and quartz, are presented. The image quality and resolution of dislocations is comparable with those obtained from conventional TEM. The main advantage is the possibility of extracting a large number of images from different diffraction vectors based on a single acquisition with a very short exposure time per pixel.

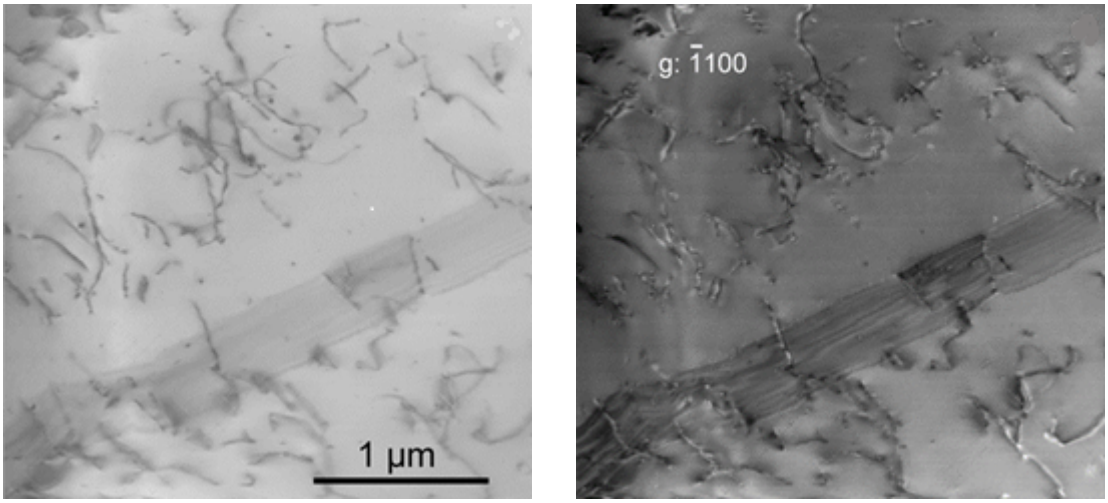


Figure 1: left: Virtual Bright Field of quartz, the sample is oriented close to the $[\bar{1}\,\bar{1}\,2\,0]$ zone axis
Right: Virtual dark-fields with g: $\bar{1}\,100$

References

Rauch, E.F., Véron, M. Automated crystal orientation and phase mapping in TEM, *Materials Characterization* **2014**, 98, 1-9.

16h40

Characterization of the Micromechanical Evolution of Ti-7Al Under Cyclic Loading Using High Energy X-Ray Diffraction Microscopy

Rachel Lim[1], Darren C. Pagan[2], Yufeng Shen[4], Joel V. Bernier[3], Robert M. Suter[4], Anthony Rollett[1*]

[1]Dept. of Materials Science & Engineering, Carnegie Mellon University, Pittsburgh PA 15213, USA
[2]Cornell High Energy Synchrotron Source, 161 Synchrotron Drive, Ithaca NY 14853, USA
[3]Lawrence Livermore Natl. Lab., Livermore CA 94551, USA
[4]Dept. of Physics, Carnegie Mellon University, Pittsburgh PA 15213, USA,

An experiment was conducted at CHESS in which a polycrystalline sample of Ti-7Al was cyclically deformed and mapped using boxbeam nf-HEDM and ff-HEDM [1]. The ff-HEDM shows a decrease in residual elastic strain over the first cycle followed by an increasing build-up of strain. The initial residual strain in each grain was anti-correlated with the change in that same strain component over the first cycle. However, the mechanism for this drop in residual strain has not yet been identified. The distribution in the von Mises stress, which is a scalar measure of shear stresses, broadens with increasing cycles and develops a long tail at the upper end of the distribution. Initially, a graph of hydrostatic stress against stress coaxiality [2] angle shows a positive correlation but after about 65 cycles, the trend-line has rotated to a negative correlation. By cycle 200, the hydrostatic stress vs. stress coaxiality angle is a scatter plot with no obvious trend, Fig. 1. The macroscopic strain stabilizes to less than 1 % change after the first cycle. However, through continual cyclic loading, the grain level strain first stabilizes to 80 % of the grains having less than 1 % change in von Mises strain, but then continues to evolve after cycle 140.

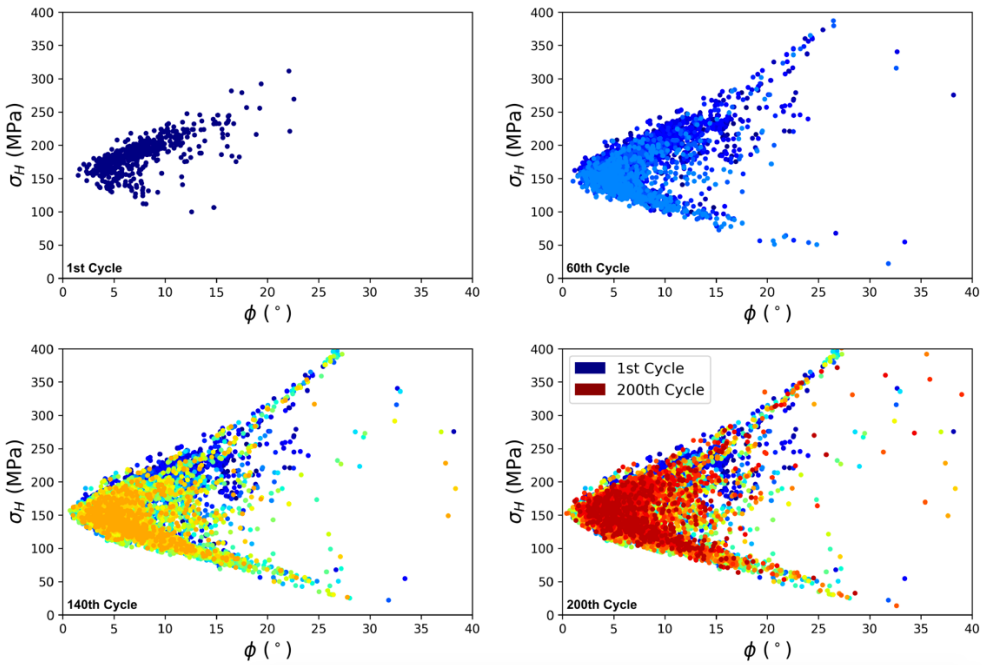


Figure 1 : Plot of the hydrostatic stress, σ_H versus the coaxiality ϕ, for the 1st cycle (top left), the 60th cycle (top right), the 140th cycle (bottom left) and comparing the 1st and 200th cycles (bottom right). At first, the hydrostatic stress and coaxiality angle are positively correlated but the reverse trend becomes apparent after cycling, which is similar to the observations of Schuren et al. [2].

Références [1] – J. V. Bernier *et al.*, J. Strain Analysis Eng. Design, **46** 527 (2011).
[2] – J. C. Schuren *et al.*, Curr. Op. Solid State Matls. Sci., **19** 235 (2015).

17h20

A dislocation-scale characterization of the evolution of deformation microstructures around nanoindentation imprints in TiAl

Antoine GUITTON[1,2*], Hana KRIAA[1,2], Emmanuel BOUZY[1,2], Julien GUYON[1,2] and Nabila MALOUFI[1,2],

[1]LEM3 – UMR CNRS 7239 – Université de Lorraine
[2]Labex Damas – Université de Lorraine

Titanium aluminide (TiAl) alloys have attracted considerable attention due to their unique combination of properties such as high specific strength and stiffness, good creep properties and resistance against oxidation and corrosion, which make them suitable candidate materials for High Temperature (HT) applications [1]. TiAl alloys are brittle at Room Temperature (RT), *i.e.* below their brittle-to-ductile transition temperature which lies between 800°C and 1000°C [2]. Despite intense research, literature suffers from a lack of understanding of their elementary deformation mechanisms and the precise role of microstructures [2].

The investigation presented here focuses on the study of RT deformation mechanisms at the mesoscopic scale. With an original combination of experiments, we investigate the evolution of deformation microstructures at RT in the γ phase of a dual-phase bulk TiAl alloy. Because of the RT brittleness of this material, plastic deformation is induced by nanoindentation. The evolution of the microstructures is characterized by accurate Electron Channeling Contrast Imaging (aECCI) before and after deformation [3]. aECCI is a non-destructive powerful method offering the ability to provide, inside a SEM, TEM-like diffraction contrast imaging of sub-surface defects (at a depth of about one hundred of nanometers) on centimetric bulk specimen [4]. Defects, such as dislocations, can be characterized by applying the TEM extinction criteria [5]. Accommodation of the deformation are reported and a scenario is proposed [3].

Références

[1] – Y. Kim, D. Dimiduk, JOM **43**, (1991).
[2] – C. Zambaldi, Thèse, Aachen (2010).
[3] – A. Guitton, H. Kriaa, E. Bouzy, J. Guyon, N. Maloufi, Materials **11**, 2 (2018)
[4] – H. Kriaa, A. Guitton, N. Maloufi, Scientific reports **7**, (2017).
[5] – H. Kriaa, A. Guitton, N. Maloufi, *Submitted*

17h40

Etude par MET des micromécanismes de déformation en fluage dans le superalliage AD730

Winnie Vultos[1], Florence Pettinari-Sturmel[1], Muriel Hantcherli[1], Joël Douin[1]
Louis Thébaud[2], Patrick Villechaise[2], Jonathan Cormier[2]

[1]CEMES
[2]ENSMA Pprime Poitiers,

Dans un contexte aéronautique où l'amélioration des propriétés mécaniques des matériaux en conditions réelles d'utilisation demeure un enjeu incontournable, le superalliage base nickel AD730 a été élaboré par Aubert & Duval pour la fabrication des disques de turbines des futurs turboréacteurs pour application civile [1]. Ce superalliage doit satisfaire au cahier des charges correspondant à des chargements de type fatigue, fluage ou plus complexes qui combinent ces deux types de chargement. Cet alliage est constitué d'une matrice γ de structure cfc durcie par des précipités γ' de structure ordonnée $L1_2$, de taille moyenne de 50 nm.
De façon générale, le comportement mécanique des superalliages polycristallins base nickel, a été grandement étudié sur une large gamme de températures et de contraintes mécaniques, notamment dans le cas de l'Udimet, du N18 ou du NR3 [2 – 6]. On peut donc s'attendre, dans le cas de l'AD730, comme cela a été identifié dans d'autres superalliages polycristallins [7-9], à ce que ses propriétés mécaniques en fluage soient très dépendantes de paramètres microstructuraux tels que la taille et la distribution spatiale des grains, et les caractéristiques des précipités durcissants γ'(taille, distribution, chimie).
Afin d'analyser l'influence de ces éléments microstructuraux sur le comportement en fluage à 700°C dans le cas de l'AD730™, différents traitements thermiques ont été réalisés afin de d'identifier les paramètres pertinents qui contrôlent la déformation en fluage. Des analyses conventionnelles en Microscopie Electronique en Transmission ont été menées à la suite des essais de fluage et ont permis de caractériser la microstructure et les micromécanismes de déformation pour différents états microstructuraux. Afin d'analyser également les effets de la contrainte sur le comportement en fluage, des essais de fluage sous différents chargements ont aussi été effectués pour un même état microstructural.
Une synthèse de l'ensemble des résultats des observations MET sera présentée afin de proposer une interprétation des différences de comportements mécaniques observées au cours des différents essais de fluage.

References

[1] A. Devaux *et al.*, AD730™ - A New Nickel-Based Superalloy for High Temperature Engine Rotative Parts, *Superalloys 2012*;911-919
[2] M.P. Jackson and R.C. Reed, "Heat treatment of UDIMET 720Li: the effect of microstructure on properties", *Material Science and Engineering*, A259 (1999), 85-97.
[3]. S. Dubiez et al., *Material Science and Engineering*, A 387-389 p 599-603 (2004),
[4]. G.B. Viswanathan *et al*., *Acta Mater* **53** pp. 3041-3057 (2005)
[5]. V. Provendier-Aubourg et J.L. Strudel, *phys stat. qol. q* (1995)
[6]. T. Billot *et al., International Journal of fatigue* **32,** pp.824-829 (2010)
[7]. B. Flageolet, Thèse Université de Poitiers (2005)
[8]. S. Raujol *et al*., *Materials Science and Engineering A* **387-389**, pp. 678-682 (2004)
[9]. J. Douin *et al., Acta Mat.* **55,** pp. 6453-6458 (2007)

18h00

Etude multi-échelle de l'influence de l'hydrogène sur les structures hétérogènes de dislocations induites par la fatigue du nickel monocristallin

Guillaume Hachet[1*], Arnaud Metsue[1], Abdelali Oudriss[1], Dong Wang[2], Di Wan[2], Tarlan Hajilou[2], Afrooz Barnoush[2], Xavier Feaugas[1]

[1] *Laboratory of Engineering Science for Environment, UMR CNRS 7356, University of La Rochelle, Avenue Michel Crépeau, 17000, La Rochelle, France*
[2]*Department of Mechanical and Industrial Engineering, NTNU Richard Birkelands vei 2b, 7491, Trondheim, Norway*

Les effets de l'hydrogène sur les propriétés mécaniques des métaux ont besoin d'être quantifiés dans l'objectif d'une meilleure compréhension de la fragilisation par l'hydrogène (« hydrogen embrittlement », HE). Actuellement, il existe plusieurs modèles décrivant HE des métaux et plus particulièrement du nickel (HEDE, HELP, SAV…) [1-3]. Cependant, lors de sollicitations complexes comme la fatigue, se développent des structures de déformation hétérogènes qui rendent la caractérisation de HE à l'aide d'un seul modèle plus difficile [4]. En particulier, dans le nickel monocristallin sollicité en glissement simple, il se forme des structures en échelles telles que des bandes de glissements persistantes (PSB) [5]. D'autre part, l'étude de l'écrouissage cyclique de monocristaux de nickel orienté en glissement simple a montré la présence d'un adoucissement en fonction de la teneur en hydrogène sans que pour autant un lien direct avec les microstructures de déformation a été établi [6].

Dans le présent travail, nous proposons une étude multi-échelle des conséquences de l'hydrogène sur le comportement en fatigue du nickel monocristallin orienté en glissement multiple <100>. Dans une première approche macroscopique, nous observons un effet d'adoucissement de l'hydrogène sur les courbes d'écrouissage cyclique. L'analyse des boucles d'hystérésis permet de décomposer la contrainte en termes de contrainte effective et de contrainte interne à longue distance. Cette approche combinée à des observations conduites en TEM et SEM-ECCI a permis de questionner l'interaction hydrogène/défaut à différentes échelles en regard des distributions et densités de dislocations. Enfin, dans une dernière approche, nous avons isolé le comportement des murs et des chenaux en présence ou non d'hydrogène en utilisant la nanoindentation. Ainsi, il a été possible d'isoler le comportement mécanique de ces hétérogénéités à différentes déformations plastiques cycliques et à différentes échelles.

Références

[1] - N. J. Petch ; Philos. Mag. ; 1956
[2] - H. K. Birnbaum ; Technical Report of Office of Naval Research ; 1989
[3] - Y. Fukai ; J. Alloys Compd ; 2003
[4] - X. Feaugas, P. Pilvin ; Adv. Eng. Mater ; 2009
[5] - B. Tippelt, J. Bretscheinder, P. Hahner ; Phys. Stat. Sol. A ; 1997
[6] - T. Magnin, C. Bosch, K. Wolski, D. Delafosse ; Mat Sci Eng A-Struct ; 2001

Mardi 10 avril – 8h40

Imagerie 3D par tomographie sur les polymères semi-cristallins Dialogue expérience/modélisation à l'échelle locale.

L. Laiarinandrasana[1], T.F. Morgeneyer[1], H. Proudhon[1], L. Helfen[2]

[1]PSL Research University, Mines ParisTech, Centre des Matériaux, UMR 7633, BP 87, 91003 Evry Cedex, France
[2]European Synchrotron Radiation Facility, BP 220, 38043 Grenoble Cedex, France
[2]ANKA Karlsruhe Institute of Technology (KIT), D-76344 Eggenstein-Leopoldshafen, Germany

La structure sphérolitique des polymères semi-cristallins favorise l'observation en 3D de l'évolution de la microstructure en cours de déformation. Cependant, avant de procéder à ces observations, il est nécessaire de révéler l'hétérogénéïté régnant dans la microstructure initiale - dont l'effet coeur-peau - trace de la mise en oeuvre du polymère. Les essais classiques permettent de mesurer le champ de déformations en surface donc sur la peau. Les images en 3D obtenues par tomographie/laminographie au synchrotron permettent de confirmer ou d'infirmer les hypothèses jusqu'alors adoptées à partir de ces observations en surface pour des extensions à travers l'épaisseur [1]. De plus, les polymères semi-cristallins observés montrent de la dilatation plastique [2] anisotrope, dont il a été possible de tracer la distribution à travers la section minimale [3]. La comparaison entre les mesures en surface et celles dans l'épaisseur a pu être ainsi établie. Une tentative de modélisation numérique prenant en compte le gradient de déformation locale sera présentée afin d'ouvrir la discussion sur les pistes d'amélioration du dialogue expérience/calcul.

Références :

[1] Laiarinandrasana et al., *Structural versus microstructural evolution of semi-crystalline polymers during necking under tension: Influence of the skin-core effects, the relative humidity and the strain rate*; Polymer Testing 2016 (83): 19-36
[2] Ognedal et al., *Behavior of pvc and hdpe under highly triaxial stress states: an experimental and numerical study* ; Mechanics of Materials 2014 (72):94-108.
[3] Laiarinandrasana et al. *Three dimensional quantification of anisotropic void evolution in deformed semi-crystalline polyamide 6*; International Journal of Plasticity 2016 (83): 19-36

9h20

Étude de la transition fragile/ductile d'une matrice iPP-g-MAH modifiée par différents types de polyétherdiamine

A. Létoffé[1], I. Royaud[1], M. Ponçot[1,2], N. Canilho[3], A. Pasc[3], S. Hopped[4]

[1]Institut Jean Lamour UMR 7198 CNRS–Université de Lorraine, 2, Allée André Guinier, BP 50840, Campus Artem, 54011 Nancy Cedex, France
[2] Excellence laboratory "DAMAS": Design of Metal Alloys for low-mAss Structures, Université de Lorraine-Metz, 57045 Metz, France
[3]SRSMC UMR 7565 CNRS – Université de Lorraine, Boulevard des Aiguillettes, BP 70239, 54506 Vandoeuvre les Nancy cedex, France
[4]Laboratoire Réactions et Génie des Procédés, UPR CNRS 3349, 1 Rue Grandville, B.P. 20451, 54001 Nancy Cedex, France

Les matériaux composites multicouches acier/polymère sont aujourd'hui d'excellents candidats pour répondre aux nouvelles problématiques des industriels dans l'allégement des structures. Le polypropylène greffé par des molécules d'anhydrides maléiques (PP-g-MAH) présente de nombreux avantages tels qu'une faible densité et l'anhydride maléique lui confère une excellente comptabilité avec les surfaces métalliques. Le principal problème posé par cette matrice vient de son comportement mécanique fragile, résultat de la réaction de greffage. Afin de contourner ce problème, un procédé de réticulation est proposé, basée sur la réaction entre une fonction anhydride maléique (MAH) et une fonction amine (NH_2) [1,2]. Deux matrices de PP-g-MAH greffée à 1 et 3 %m de MAH, ont été réticulées dans une extrudeuse bis-vis par deux types de polyétheramine, une double et une triple, pour plusieurs ratios NH_2:MAH allant du 0.33:1 à 2:1.

Les matériaux obtenus ont été étudiés par VidéoTraction™ pour leurs propriétés mécaniques, DSC, SSA et DRX pour leurs microstructures et leur perfection cristalline, par spectroscopie infrarouge et détermination du taux de gel pour étudier l'évolution de la réticulation et des groupements fonctionnels présents.

Un changement complet du comportement mécanique est observé dans le cas de certains ratios NH_2:MAH, avec le passage d'un comportement fragile à un comportement ductile, avec une déformation plastique et un durcissement structural. Cette modification de comportement s'accompagne d'un changement de morphologie semi-cristalline des différents matériaux, variant suivant le taux de greffage de MAH et du type d'agent réticulant employé.

Références

[1] – A.R. Padwa, Y. Sasaki, K.A. Wolske, C.W. Macosko, Journal of Polymer Science: Part A: Polymer Chemistly, Vol. 33,2165-2174 (1995).
[2] – Z. Song, W.E. Baker, Journal of Polymer Science: Part A: Polymer Chemistry Vol.30, p.1589-1600 (1992).

9h40

Mécanismes de déformation en traction de films de PET semi-cristallins orientés étudiés par WAXS/SAXS avec rayonnement synchrotron *in situ*

Martin Donnay[1], Marc Ponçot[1], Jean-Philippe Tinnes[1], Thomas Schenk[1], Olivier Ferry[1], Isabelle Royaud[1]

[1]Institut Jean Lamour, UMR 7198 CNRS-Université de Lorraine, 2 allée André Guinier, 54000 Nancy

La diffusion de rayons X aux petits angles (SAXS) et la diffraction de rayons X aux grands angles ont été utilisées pour étudier les mécanismes de déformation lors d'un essai de traction plane de films de poly(éthylène téréphtalate) semi-cristallins orientés. Ces techniques ont permis d'évaluer en temps réel plusieurs paramètres microstructuraux tels que le taux de cristallinité, l'orientation macromoléculaire des phases amorphes et cristallines, la longue période ainsi que les tailles de lamelles cristallines dans les trois dimensions. Ces essais ont été réalisés sur la ligne SAXS du synchrotron Elettra (Trieste, Italie). De plus, une méthode complémentaire au facteur d'orientation d'Hermans a été utilisée, permettant d'analyser de manière plus précise l'orientation macromoléculaire des deux phases en présence [1,2]

Le traitement automatisé des résultats a permis de détailler les mécanismes responsables de la déformation viscoélastique et plastique de ces matériaux, en les sollicitant de manière longitudinale et transverse à leur orientation initiale. Cette anisotropie initiale n'influence pas de manière significative les mécanismes de déformation dans le domaine viscoélastique. Ce domaine est caractérisé par une élongation de la phase amorphe interlamellaire. L'activation de la plasticité est marquée par des processus de déformation cristallographique des lamelles cristallines menant à leur fragmentation. Ces processus multiples sont mis en évidence dans les trois dimensions de l'espace. Ils s'accompagnent d'une orientation modérée des chaines macromoléculaires des phases amorphes et cristallines. Ils ont également pour conséquence une amorphisation du matériau. Les différences de mécanismes entre échantillons sollicités de manière longitudinale ou transverse (par rapport à leur orientation initiale) sont notables et font l'objet d'une discussion.

Références

[1] P. H. Hermans, A. Weidinger, J. Appl. Phys. **19**, 491 (1948).
[2] E. A Sander, V. H. Barocas, J. Biomed. Mater. Res. Part A, 322 (2008)

10h00

Analyse du comportement en compression d'un cristal moléculaire : Une étude de Dynamique Moléculaire

P. Lafourcade[1], C. Denoual[1], J.-B. Maillet[1]

[1]CEA, DAM, DIF

Le TATB (1,3,5-Triamino-2,4,6-Trinitrobenzene) [1] est un matériau énergétique insensible utilisé dans certaines formulations d'explosifs. Il est composé d'une structure moléculaire essentiellement plane arrangée sous forme de feuillets denses (dans le plan **a-b**, où **a**, **b** et **c** sont les vecteurs unitaires de la maille). Ce type d'empilement lui confère des propriétés physico-chimiques (coefficient d'expansion thermique, conductivité) et mécaniques (constantes élastiques, seuil de plasticité) très anisotropes [2].

Dans le but d'activer et de caractériser de nouveaux mécanismes de la déformation irréversible, une méthode permettant de suivre un chemin quelconque de déformation (y compris non proportionnelle) en dynamique moléculaire a été mise en place [4] et a mis en lumière trois types de mécanismes bien distincts :

- Activation systématique du cisaillement homogène dans le plan basal
- Découverte de nouveaux systèmes de glissement écartés jusqu'à présent
- Déformation de la matière via un système de twinning/buckling non connu

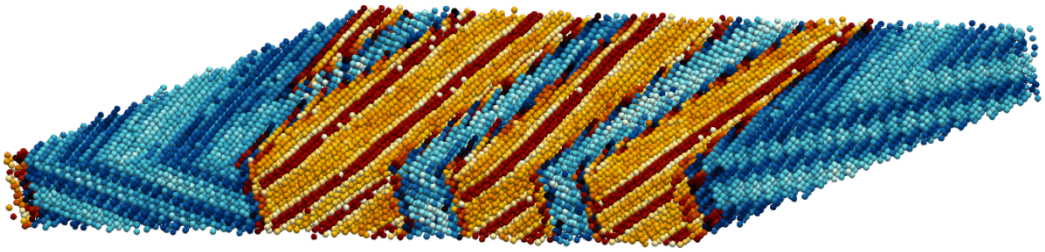


Figure 1 : Déformation locale par molécule de TATB lors d'une compression via des simulations de dynamique moléculaire. Composante F_{13} du tenseur gradient de la déformation **F**.

Une étude approfondie du dernier point est proposée via la dynamique moléculaire. En particulier, un monocristal de TATB est comprimé de manière dynamique afin d'activer la formation de ces chevrons successifs (voir **Figure 1**.). La déformation au sein de ces structures consiste en un couplage entre rotation pure et cisaillement des feuillets moléculaires. Le calcul du tenseur gradient de la déformation locale **F** puis de sa décomposition polaire (**F=R·U**), associé au calcul d'une surface d'énergie de cisaillement homogène (homologue à une γ-surface), permettent de mieux comprendre ce mécanisme de la déformation irréversible qui semble inévitable lorsque la déformation macroscopique appliquée contient une composante de compression majoritaire.

Références

[1] H.H. Cady and A.C. Larson, Acta Cryst. 18 (1965) p.485.
[2] D. Bedrov et al., J. Chem. Phys. 131 (2009) p.224703,
[3] P. Lafourcade; C. Denoual; J.-B. Maillet, J. Phys. Chem. C (2017), 121, 7442–7449
[4] P. Lafourcade; C. Denoual; J.-B. Maillet, 20th APS SCCM Proceedings (2017)

11h00

Mieux enchaîner les icosaèdres dans les carbures de bore pour les renforcer

A. Jay, O. Hardouin Duparc, J. Sjakste et N. Vast

LSI, École Polytechnique, 91128 Palaiseau Cedex
CEA/DSM/IRAMIS et CNRS-UMR 7642, UParisSaclay

Le carbure de bore 'B_4C' est une des céramiques les plus dures et est utilisée en tant que telle. Mais elle est fragile sous choc au delà de sa limite d'élasticité. Sa structure atomique est vraisemblablement faite d'icosaèdres $B_{11}C$ et de chaînes CBC, le défaut lacunaire le moins énergétique consiste en l'éjection du B de la chaîne CBC, ce qui rend alors le matériau peu résistant à une compression directionnelle. Une structure faite de $B_{11}C$ et de chaînes CC ne présente pas cette faiblesse (voir figure). Les calculs ab initio montrent que cette structure peut exister, avec un bon niveau de (méta-)stabilité [1]. Un brevet a été déposé [2]. Des essais de synthèse sont en cours ainsi que des calculs complets du diagramme de phases (x,P,T) de $B_{1-x}C_x$ pour des pressions et des températures allant jusqu'à 80 GPa et 2000 K respectivement, et pour x variant de zéro à un [3].

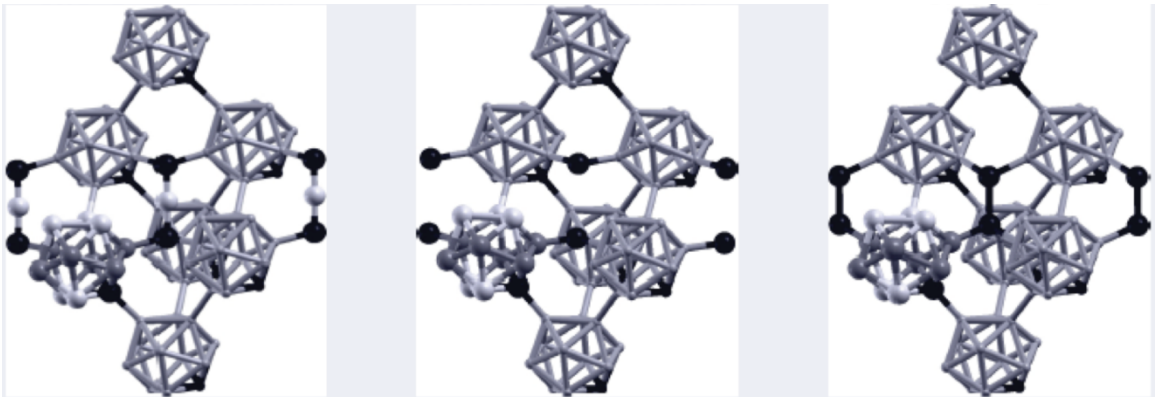


Figure 1 : De gauche à droite : $(B_{11}C)$C-B-C, $(B_{11}C)$C-*lac*-C et $(B_{11}C)$C-C.
'*lac*' dans la structure centrale représente une lacune qui rend cette structure fragile.

Références
[1] A. Jay, N. Vast, J. Sjakste, O. Hardouin Duparc, *Carbon-rich icosahedral boron carbide designed from first principles*. Applied Physics Letters, 105 (2014) 031914.
[2] A. Jay, N. Vast, J. Sjakste et O. Hardouin Duparc, Patent *Boron carbide with increased mechanical stability and production method*. https://www.google.com/patents/WO2015022202A1?cl=en
[3] A. Jay, O. Hardouin Duparc, J. Sjakste and N. Vast, *Theoretical phase diagram of boron carbide at high pressure and temperature*, soumis.

11h20

Modélisation du glissement secondaire des dislocations vis <a> dans le zirconium

Emile Maras[1], Emmanuel Clouet[1]

[1]CEA, DEN, Service de Recherches de Métallurgie Physique, Université Paris-Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette

Le zirconium est utilisé comme matériaux de structure pour les assemblages de combustibles dans l'industrie nucléaire. Il a une structure hexagonale compacte et son comportement plastique est principalement gouverné par le glissement des dislocations vis de vecteur de Burgers <*a*>. Ces dislocations étant dissociées dans le plan prismatique, elles glissent facilement dans ce plan. A haute température, les modes de glissement secondaires dans les plans basaux et pyramidaux sont également activés.

A l'aide de calculs de « nudged elastic band » (NEB) basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité, N. Chaari et al. [1,2] ont montré que dans le cas d'une dislocation rectiligne une forte énergie d'activation doit être surmontée pour les deux modes de glissement secondaires.

Afin d'étudier plus en détail l'activation de ces modes de glissement, nous réalisons des simulations en dynamique moléculaire (DM) basés sur un potentiel EAM [3]. Ces simulations permettent de prendre en compte l'activation thermique en autorisant la germination de doubles décrochements. Nous montrons que le glissement pyramidal se fait selon un mécanisme de Peierls avec germination et propagation d'un double décrochement permettant à la dislocation d'avancer dans la vallée de Peierls située dans le plan prismatique suivant alors que les décrochements se trouvent dans un plan pyramidal dense. Le glissement basal peut s'effectuer soit comme une combinaison de glissement pyramidal et prismatique, soit, à forte contrainte, selon un mécanisme de « unlocking/locking » au cours duquel le cœur de la dislocation se dissocie dans le plan basal puis glisse sans rencontrer de barrière énergétique jusqu'à ce que le cœur de la dislocation se dissocie à nouveau dans le plan prismatique.

Nous réalisons ensuite des calculs NEB et déterminons pour chacun des mécanismes identifiés l'énergie d'activation en fonction de la contrainte. Cela nous permet d'extrapoler les résultats obtenus à forte contrainte en DM à des contraintes expérimentales.

Références

[1] N. Chaari, E. Clouet et D. Rodney, Physical Review Letter 112, 075504 (2014)
[2] N. Chaari, E. Clouet et D. Rodney, Metallurgical Materials Transactions A 45, 5898 (2014)
[3] M. I. Mendelev et G. J. Ackland, Philosophical Magazine Letter 87, 349 (2007)

11h40

Plasticité induite par glissement thermiquement activé dans le dioxyde d'uranium

Aurélien Soulié, Jean-Paul Crocombette, Antoine Kraych, Emmanuel Clouet

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

Nous avons étudié le mécanisme de glissement thermiquement activé des dislocations dans le dioxyde d'uranium (UO_2) à partir de calculs atomistiques utilisant un potentiel empirique à N-corps et à charges variables (le potentiel SMTB-Q : Second Moment Tight-Binding potential with charge equilibration [1]).

Pour déterminer le système de glissement, nous avons d'abord étudié le déplacement de dislocations droites et obtenu la contrainte de Peierls de chaque dislocation. Nous trouvons que les contraintes de Peierls sont les plus faibles pour les plans de glissement {100} et que la composante coin de ces dislocations contrôle la plasticité.

Nous considérons par la suite le déplacement thermiquement activé des dislocations par germination et croissance de paires de décrochements. Les calculs à l'échelle atomique nous permettent de déterminer la structure ainsi que les énergies de formation et de migration de ces paires de décrochements. Les paires de décrochement non-stœchiométriques (voir figure 1) sont plus stables que des paires stœchiométriques.

Nous combinons ces résultats à un modèle introduisant l'enthalpie de formation d'une paire de décrochement de taille critique pour obtenir les vitesses de dislocations et la contrainte de cisaillement critique résolue (CRSS) en fonction de la température. Ces résultats sont comparés aux données expérimentales sur des monocristaux d'UO_2 et montrent que le glissement thermiquement activé des dislocations coins dans les plans {100} fournit une explication à l'évolution expérimentale de la CRSS entre 600°C et 900°C.

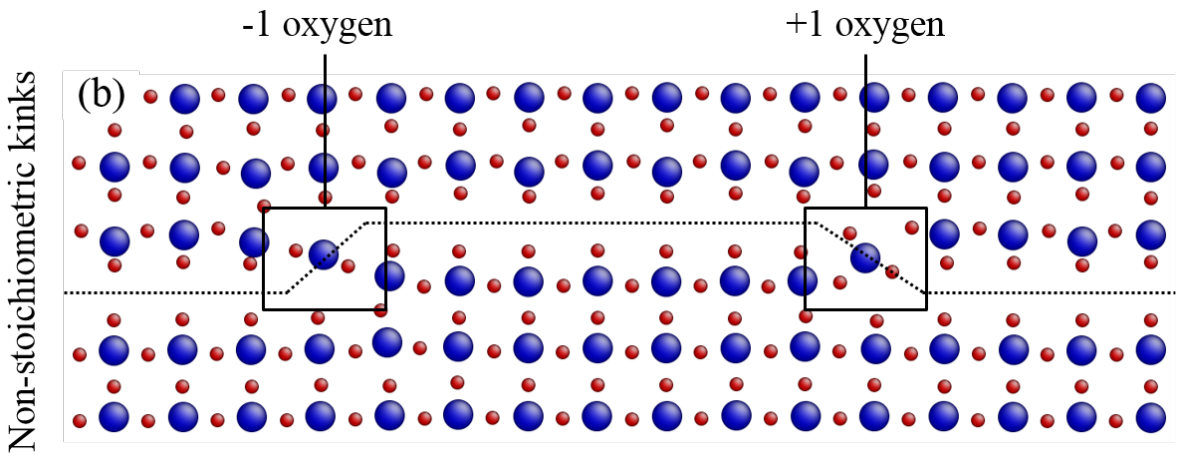


Figure 1: Paire de décrochements non-stœchiométriques dans le dioxyde d'uranium. Les atomes d'uranium sont représentés en bleu et les atomes d'oxygène sont représentés en rouge

Références

[1] G. Sattonnay, R. Tétot, J. Phys. Condens. Matter 25 (2013) 125403.

12h00

Viscoplasticité du monocristal d'UO2 avec matrice d'interaction entre systèmes de glissement calibrée par Dynamique des Dislocations

Luc Portelette[1], Ronan Madec[2], Bruno Michel[1]
[1] CEA, DEN, DEC, SESC, LSC Centre de Cadarache 13108 Saint Paul Lez Durance FRANCE
[2]CEA, DAM, DIF, 91297 Arpajon, FRANCE

Le comportement des céramiques combustibles nucléaires en réacteur est étudié en lien avec l'intégrité mécanique de la première barrière de confinement. Dans ce cadre une modélisation mécanique à l'échelle microstructurale est développée pour le dioxyde d'uranium (UO2) en utilisant la simulation numérique par éléments finis dans la plateforme logicielle PLEIADES du CEA et de ses partenaires.

L'objectif de ce travail est de modéliser le comportement viscoplastique de l'UO_2 avec une loi de glissement des dislocations basée sur les systèmes ½<110>{100}, ½<110>{110} et ½<110>{111} observés dans l'UO_2. Afin de pouvoir prédire l'anisotropie viscoplastique du monocristal dans des situations où plusieurs systèmes et modes de glissement contribuent à la déformation il est nécessaire de prendre en compte l'interaction entre dislocations.

Les interactions entre dislocations peuvent impacter notablement l'activation des différents systèmes de glissement et à l'extrême interdire certaines activations simultanées [1]. Une étude de dynamique des dislocations a donc été réalisée à l'aide du code MobiDiC pour déterminer les coefficients de la matrice d'interaction avec l'ensemble des systèmes de glissement de l'UO_2. Pour cela, on met en présence deux populations de dislocations : un système mobile « i » sous contrainte et un système forêts « j » sans chargement. La contrainte τ_f^{ij} obtenue pour accommoder la vitesse de déformation imposée permet de calculer un coefficient de durcissement a^{ij} propre à l'interaction entre « i » et « j » : $\tau_f^{ij} = \mu b\sqrt{a^{ij}\rho^j}$.

Différentes températures ont été considérées afin de s'assurer que les coefficients ne varient pas du fait de l'évolution des constantes élastiques avec la température : 1373K et 1973K qui encadrent les conditions de fonctionnement d'un réacteur en régime nominal et transitoire incidentel de classe 2, ainsi que 1600K pour laquelle nous disposons de courbes expérimentales de contrainte-déformation. À 1973K, les deux modes de glissement principaux sont presque athermiques et les interactions entre dislocations peuvent jouer un rôle important. À 1600K, on reste proche du cas athermique pour le mode {100} et nous avons évalué par calculs éléments finis l'effet des interactions sur l'activation des systèmes et l'apport quant à la restitution des essais de compression expérimentaux sur monocristaux.

[1] J.L. Dequiedt, C. Denoual, R. Madec, Heterogeneous deformation in ductile FCC single crystals in biaxial stretching: the influence of slip system interactions, JMPS 83, (2015), 301-318.

14h00

Integrated computational mechanics: perspectives

L. Capolungo[1], V. Taupin[2], H. Tummala[1], A. Kohnert[1]

[1]Los Alamos National Laboratory, USA, LEM 3 Metz, LEM 3 Metz
[2]Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3), UMR CNRS 7239, Université de Lorraine, Technopole, 57073 Metz, France

Over the past several decades, the computational materials science community has devoted significant efforts in developing hierarchical multi-scale modeling frameworks (from the atomistic length scales to the engineering scales) to simultaneously predict the microstructure evolution and mechanical response of complex metals. Naturally, one of the pitfalls of hierarchical frameworks lies in the information passage from one scale to another. Such necessarily needs to be statistically representative of the phenomena studied. This presentation discusses the benefits of integrated multi-scale modeling approaches whereby the description of plasticity relies on tracking the individual motion of dislocations, relying on a discrete dislocation dynamics approach, while the questions of mechanical equilibrium, constitutive relationship and compatibility are addressed via the use of spectral methods. The presentation will illustrate how this integrated framework can be validated/ calibrated from experimental observations (i.e. diffraction, TEM), how it can be used to postulate hypothesis vis a vis microstructure evolutions (e.g. hydride foramtion in Zircalloys) and how it can be enhanced to couple materials chemistry and mechanical performance of the material [1,2,3,]. An in depth presentation of the integrated scheme, discussing the key roles of grain boundaries on both plasticity and microstructure evolutions, that vacancies mediated plasticity will be given. For the sake of generality, examples of applications will cover fcc, hcp and bcc metals.

Références

[1] N. Bertin, M.V. Upadhyay, C. Pradalier, L. Capolungo: "A FFT-based formulation for efficient mechanical fields computation in isotropic and anisotropic periodic discrete dislocation dynamics". *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **23**, 065009 (2015).

[2] L. Balogh, L. Capolungo, C.N. Tomé: "On the measure of dislocation densities from diffraction line profiles: A comparison with discrete dislocation methods". *Acta Mater.* **60**, 1467 (2012).

[3] N. Bertin, L. Capolungo 'A FFT-based formulation for discrete dislocation dynamics in heterogeneous media, Journal of Computational Physics 355, 366-384

14h40

Défis techniques et leviers liés à la localisation de la déformation dans les alliages d'aluminium à haute performance

J. Chevy[1]

[1]C-TEC, Constellium Technology Center

Du fait de leur faible densité, les alliages d'aluminium sont présents dans de nombreuses applications industrielles. Un des principaux défis actuels est d'augmenter les performances de ces alliages (résistance mécanique, rigidité) tout en maintenant la capacité du matériau à accommoder la déformation afin d'assurer la formabilité ou la résistance à la rupture.
Il est donc indispensable de comprendre et maîtriser la plasticité de ces alliages et les paramètres qui vont conditionner la localisation de la déformation. Nous illustrons dans cette présentation, par des exemples issus de la caractérisation (EBSD, DIC) et de la modélisation numérique (DDD, CPFEM) [1, 2], l'impact que certains paramètres métallurgiques peuvent avoir sur la localisation de la déformation : effet de taille et de forme des grains, effet de l'orientation cristalline, de l'interaction dislocations/particules, de la solution solide.

Références

[1] S. Gupta, A.J. Beaudoin, J. Chevy, Mater. Sci. Engng. A **683**, 143 (2017).
[2] V. Taupin, J. Chevy, C. Fressengeas, Int. J. Solids Structures **99**, 71 (2016).

15h00

Fast Fourier Transform micromechanical modeling of interfacial defects mechanical fields and applications

Stéphane Berbenni[1] and Vincent Taupin[1]

[1]Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3), UMR CNRS 7239, Université de Lorraine, Technopole, 57073 Metz, France

Interfaces play a critical role on the mechanical properties of many engineering materials. Continuum mechanics-based modeling of interfacial defects is a fundamental issue to predict the mechanical behavior of nanocrystalline materials and to understand the mechanical interactions between bulk and interfacial defects during plastic deformation.

Here, a numerical spectral approach based on the efficient Fast Fourier Transform (FFT) method is developed to solve both dislocation and disclination mechanical fields in heterogeneous media like bi-materials, polycrystals, composite materials. Given a spatial distribution of dislocation and disclination densities in such materials, which can be obtained from experimental data, the incompatible and compatible elastic strains, elastic curvatures as well as the stress fields are obtained without singularities at defect cores from the solutions of Poisson and Lippmann-Schwinger equations in the Fourier space. The defect mechanical fields in the vicinity of the defects are accurately solved by the proposed discrete Fourier transform method, devoid of spurious numerical oscillations inherent to classic spectral approaches. The technical details on the developed numerical spectral method can be found in [1-3].

The applications include the mechanical fields of different observed interfacial defects:

(i) grain boundaries seen as disclination configurations [4,5],
(ii) twin tips present in internally twinned lamellae [6],
(iii) grain boundary solute segregation [7,8],
(iv) grain boundary disconnections [9,10].

References :

[1] S. Berbenni, V. Taupin, K. S. Djaka, C. Fressengeas, Int. J. Solids Struct. 51 (2014) 4157-4175
[2] K. S. Djaka, A. Vilani, V. Taupin, L. Capolungo, S. Berbenni, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 315 (2017) 921-942
[3] V. Taupin, K. Gbemou, C. Fressengeas, L. Capolungo, J. Mech. Phys. Solids 100 (2017), 62-84
[4] J. C. M. Li, Disclination model of high angle grain boundaries, Surf. Sci. 31 (1972) 12-26
[5] V.Y. Gertsman, A. A. Nazarov, A.E. Romanov, R.Z. Valiev, V.I. Vladimirov, Philos. Mag. A 59 (1989) 1113-1118
[6] P. Müllner, A. H. King, Acta Mater. 58 (2010) 5242-5261
[7] W. Cai, R.B. Sills, D.M. Barnett, W.D. Nix, J. Mech. Phys. Solids 66 (2014) 154-171
[8] R. Dingreville, S. Berbenni, Acta Mater. 104 (2016) 237-249
[9] J. P. Hirth, R. C. Pond, Acta Mater. 44 (1996) 4749-4763
[10] J. P. Hirth, R. C. Pond, R. G. Hoagland, X.-Y. Liu, J. Wang, Prog. Mater. Sci. 58 (2013) 749-823

15h20

Correlation of dislocation avalanches in the low strain-rate regime of jerky flow

M.A. Lebyodkin[1*], T.A. Lebedkina[1], Y. Bougherira[2], D. Entemeyer[1], I.V. Shahskov[3]

[1]Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux, CNRS, Université de Lorraine, Arts & Métiers ParisTech, 7 rue Félix Savart, 57073 Metz, France
[2]Unité de recherche en optique et photonique, CDTA, Université de Sétif1, El Bez, Sétif 1900. Algérie
[3]Institute of Solid State Physics RAS, 142432 Chernogolovka, Russia

The acoustic emission accompanying plastic deformation of solids obeys scale-free statistics reflecting intermittent, avalanche-like dislocation motion. As the macroscopic deformation curves of most materials are smooth, the avalanche strengths must be confined to some mesoscopic length scales, most likely related to the microstructure and crystallography of the dislocation glide. Under conditions of the Portevin-Le Chatelier (PLC) effect giving rise to jerky flow of alloys, the intermittency manifests itself on the macroscopic scale of deformation curves. In contrast to the AE, the statistics of stress serrations vary from scale-free power-law distributions at high strain rates to near-Gaussian distributions revealing an inherent scale of deformation processes at low strain rates. Nevertheless, recent studies using an Al-Mg alloy, a model material for the PLC effect, testified that as in the case of smooth plastic flow, the statistics of the AE accompanying the PLC effect is scale-free in all deformation conditions [1]. Moreover, the amplitude of AE events accompanying jerky flow finds itself in the same range at the instants of stress drops and during smooth loading, i.e., the same limitations should apply to the macroscopically unstable deformation. To explain the occurrence of macroscopic serrations and the variation of their statistics, they were supposed to be governed by a transition between the phenomenon of synchronization of dislocations and critical type dynamics leading to scale invariance. In the present work, statistical analysis of various AE subsets is performed to identify the mechanisms underlying the AE events in jerky and smooth regimes of the PLC effect in an AlMg alloy. A crossover in the power-law statistics of AE, indicating the existence of different kinds of correlation between dislocations, is found in the low strain-rate limit (Fig. 1) and ascribed to a transition from chaining to overlapping dislocation avalanches.

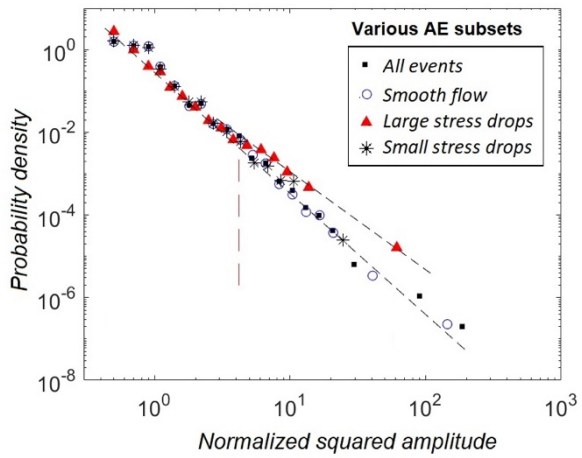


Figure 1: Crossover in the power-law statistics of acoustic events accompanying type *C* PLC instability.

References :
[1] M.A. Lebyodkin, N.P. Kobelev, Y. Bougherira, D. Entemeyer, C. Fressengeas, V.S. Gornakov, T.A. Lebedkina, I.V. Shashkov, Acta Mater. 60, 3729 (2012).

16h20

A Cosserat crystal plasticity and phase field model for recrystallization

Anna Ask[1], Samuel Forest[1], Benoit Appolaire[2]

[1]MINES ParisTech, PSL-Research University, MAT-Centre des matériaux, CNRS UMR 7633, Paris
[2]Université de Lorraine, Institut Jean Lamour, Nancy, France

Thermomechanical processing induces important microstructure evolution in metallic polycrystals through viscoplastic deformation, grain nucleation and grain boundary (GB) migration. In this work a modeling framework for recrystallization which allows for evolution of crystal orientation at any material point due to both viscoplastic deformation and GB migration is proposed. The Cosserat crystal plasticity theory [1] is a natural modeling framework as it provides orientation (an important descriptor of the microstructure) as a degree of freedom. In order to take into account GB motion, the Cosserat theory is extended with inspiration of the orientation phase field model developed by Kobayashi, Warren and Carter [2]. The resulting modeling framework deals with viscoplasticity and grain boundary migration in a strongly coupled manner. Inside the grains the Cosserat directors, which represent the lattice orientation, are required to follow the elastic rotation due to deformation. In the grain boundaries, this requirement is relaxed so that the theory permits GB mobility. GB motion can be driven by geometrically necessary dislocations associated with the curvature or statistically stored dislocations through a separate energy contribution. The coupled system of equations is solved using finite elements together with local numerical integration of the evolution laws. Numerical studies on small systems demonstrate the capacity of the proposed framework to account for both viscoplastic deformation and GB migration in a unified approach.

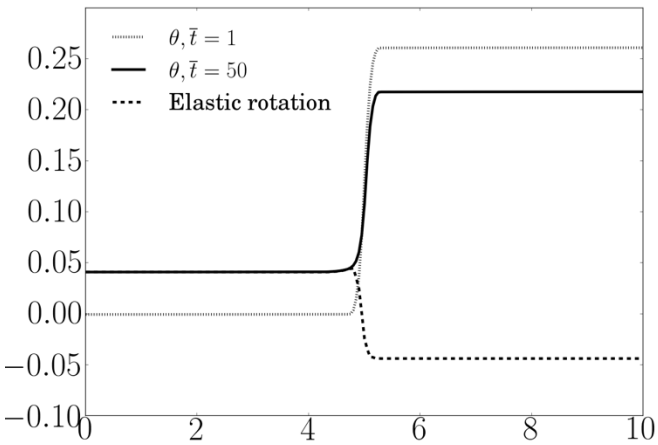


Figure 1 : Evolution of lattice orientation around a GB due to elastic rotation during viscoplastic deformation of a bigrain.

Références
[1] Forest, S., Cailletaud and G., Sievert, R., Archives of Mechanics, 49, 705–736 (1997).
[2] Kobayashi, R., Warren, J. A. and Carter, W. C., Physica D, 140, 141–150 (2000).

16h40

Étude systématique de joints de grains dans MgO et leur évolution à très haute pression

Pierre Hirel[1], Xao-Yu Sun[1], Philippe Carrez[1], Patrick Cordier[1], Vincent Taupin[2], Claude Fressengeas[2]

[1] Université de Lille, Sciences et Technologies, UMR 8207 UMET, 59650 Villeneuve d'Ascq
[2] Université de Lorraine, LEM3, Île du Saulcy, 57045 Metz

L'oxyde de magnésium MgO est un composé céramique couramment utilisé comme substrat, revêtement, ou pour ses propriétés réfractaires. Dans la nature, il peut aussi se former spontanément dans certaines conditions, et la ferropériclase –MgO sous forme minérale enrichie en fer– est un constituant essentiel du manteau inférieur terrestre, entre 700 et 2800 km de profondeur. Les mécanismes de déformation de cette phase, et surtout l'influence de la pression et de la température, restent largement inexplorés. Parmi les défauts impliqués dans la déformation, les joints de grains sont particulièrement sensibles à la pression [1,2].

Nous avons réalisé une étude systématique à l'échelle atomique pour déterminer les propriétés de plus de 200 joints de grains dans MgO. Leur structure atomique est analysée en détail, révélant plusieurs transitions lorsque la pression augmente. Nous avons quantifié les enthalpies de formation et les volumes d'excès, et montrons qu'ils évoluent de façon non linéaire avec la pression. Enfin, les déformations induites par un joint de grain sont traduites dans le formalisme de la mécanique des milieux continus, ce qui permet de les interpréter en termes de distributions de dislocations et de disinclinaisons [3].

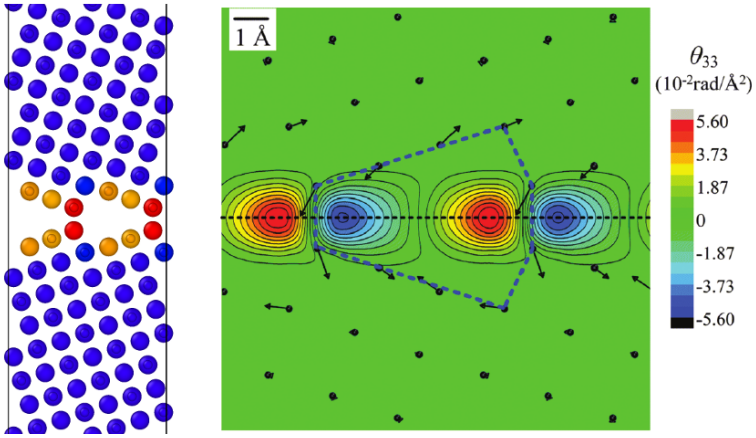


Figure 1 : joint de grain de désorientation {310}[001] dans MgO : représentation atomique (à gauche) et continue (à droite).

Références
[1] D.J. Harris *et al.*, Philos. Mag. A 74 (1996) 407-418.
[2] A.K. Verma and B.B. Karki, Amer. Min. 95 (2010) 1035-1041.
[3] X. Sun *et al.*, Eur. J. Mineral. 29 (2017) 155-165.

17h00

Effet des contraintes non-glissiles sur l'anisotropie plastique du tungstène

Antoine Kraych[1], Lucile Dezerald[2], François Willaime[3], Lisa Ventelon[4], David Rodney[1]

[1]Institut Lumière Matière, Université Lyon 1 - CNRS, F-69622 Villeurbanne, France
[2]Institut Jean Lamour, Université de Lorraine - CNRS, F-54011 Nancy, France
[3]DEN-Département des Matériaux pour le Nucléaire, CEA, Université Paris-Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France

À basse température, la déformation plastique du tungstène et des autres métaux de structure cubique centrée (CC) est anisotrope. La loi de Schmid qui s'applique dans la plupart des autres métaux n'est pas respectée pour les métaux CC. Ce comportement s'explique par la mobilité des dislocations vis de type 1/2<111>. La trajectoire suivie par ces dislocations lorsqu'elles glissent sous l'application d'une contrainte glissile n'est pas droite mais dévie par rapport au plan de glissement. L'angle de cette déviation permet de prédire l'écart à la loi de Schmid dans ces matériaux [1]. Cependant, d'autres types de contraintes, les contraintes non-glissiles, sont connues pour affecter la mobilité des dislocations et l'écart à la loi de Schmid [2]. Ce travail propose d'utiliser des calculs *ab initio* pour déterminer l'influence des contraintes non glissiles sur la mobilité des dislocations dans le tungsten.

Des calculs DFT et la méthode de « nudged elastic band » permettent de calculer le potentiel de Peierls des dislocations sous contrainte. Différents tenseurs de contrainte sont appliqués aux cellules de simulation, afin d'obtenir la sensibilité des potentiels de Peierls aux contraintes non-glissiles, et en déduire la dépendance de la contrainte de Peierls des dislocations. Ces calculs sont utilisés pour ajuster une loi de comportement permettant de prédire la réponse plastique d'un monocristal lors d'un essai mécanique de traction simple, et de prédire les systèmes de glissement activés. Nous discuterons en particulier les implications pour le glissement dit « anomal » prenant place dans des plans peu sollicités.

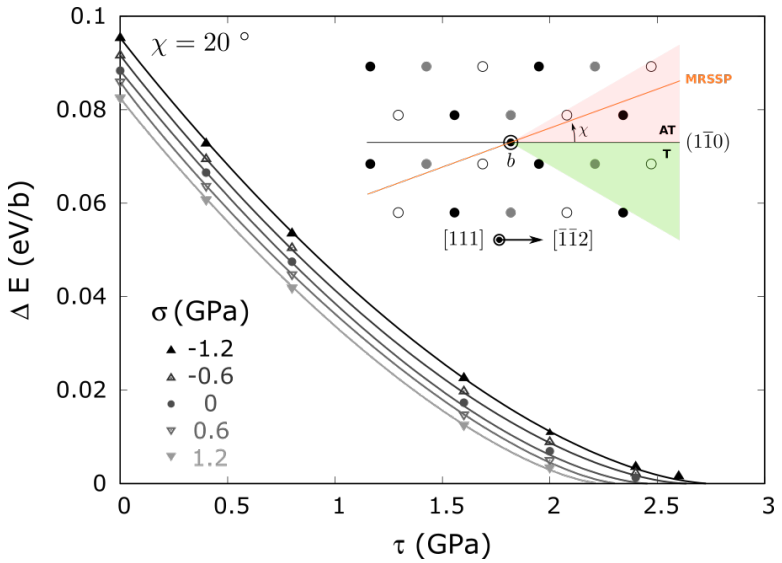


Figure 1 : Evolution de l'énergie maximale du potentiel de Peierls pour différentes contraintes non-glissiles

Références

[1] L. Dezerald, D. Rodney, E. Clouet, L. Ventelon, F. Willaime, Nat. Commun. 7, 11695 (2016)
[2] M. S. Duesbery, Acta Metall. 31, 10 (1982)

17h20

Effet des solutés interstitiels sur la structure de cœur et la mobilité des dislocations dans les métaux cubiques centrés

B. Lüthi[1], L. Ventelon[1], D. Rodney[2], F. Willaime[1]

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

[2]Institut Lumière Matière, CNRS-Université Claude Bernard Lyon 1, 69622 Villeurbanne

L'interaction entre atomes de soluté interstitiels et dislocations vis a été étudiée dans plusieurs métaux cubiques centrés à l'aide de calculs de structure électronique basés sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT).

Dans un premier temps, en considérant les solutés de carbone, nous avons mis en évidence une interaction fortement attractive dans Fe, Mo et W, induite pas une reconstruction spontanée de la structure de cœur vers une configuration de basse énergie où, de manière inattendue, le cœur de dislocation adopte une configuration de cœur difficile [1]. Les atomes de carbone sont au centre de prismes trigonaux réguliers formés par les atomes de métal dans le cœur de dislocation. La préférence des atomes de carbone pour ces sites prismatiques peut être reliée à la similarité avec leur environnement local dans la cémentite Fe_3C et dans les carbures hexagonaux WC et MoC [2]. Nous avons mis en évidence la même reconstruction de cœur avec d'autres solutés interstitiels octaédriques (B, N, O) dans Fe [3], alors que nous avons obtenu un comportement totalement différent pour le carbone dans V, Nb et Ta.

Nous montrons, à l'aide d'un modèle thermodynamique, que cette interaction fortement attractive conduit à basse température à une saturation du cœur par les atomes de soluté, même pour de très faibles concentrations de carbone en volume, comme schématisé sur la figure 1. Nous nous sommes enfin intéressés aux conséquences sur la mobilité de la dislocation dans Fe(C) en nous basant sur les calculs DFT de la formation et migration des doubles-décrochements sur les dislocations décorées.

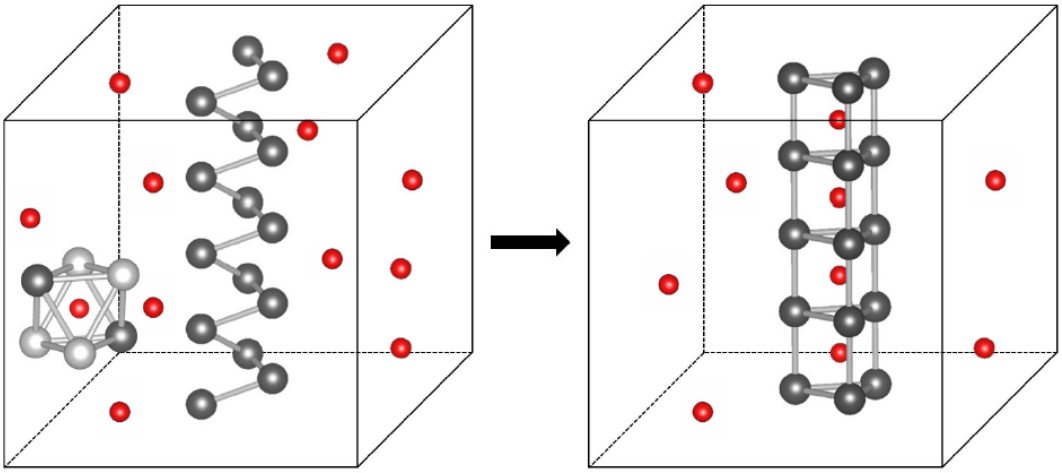


Figure 1: Représentation schématique de la reconstruction de cœur de la dislocation vis dans le fer cubique centré induite par la ségrégation de solutés de carbone. Les atomes de fer sont en gris, les solutés, en rouge. A gauche : cœur facile avec les atomes interstitiels de carbone en solution solide ; l'octaèdre est représenté autour d'un des solutés, avec deux premiers voisins (en gris foncé) et quatre seconds voisins (en gris clair). A droite : cœur reconstruit dans la configuration difficile après ségrégation des atomes de carbone avec une distance de séparation de 1b.

Références

[1] L. Ventelon *et al.*, Phys. Rev. B 91, 220102(R) (2015)
[2] B. Lüthi *et al.*, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 25, 084001 (2017)
[3] B. Lüthi *et al.*, Comput. Mater. Sci. 148, 21 (2018)

Mercredi 11 avril – 8h30

Apport des grands instruments pour l'étude du comportement mécanique des matériaux hétérogènes

David GLOAGUEN

GeM - Institut de Recherche en Génie Civil et Mécanique, UMR CNRS 6183, équipe E3M

La déformation mesurée par diffraction des rayons X ou des neutrons peut être fortement influencée par l'anisotropie plastique. Dans le cas de l'élastoplasticité, l'état de contrainte dépend de toute l'histoire de chargement du matériau. En effet, les contraintes (ou les déformations élastiques associées) sont le résultat de l'ensemble des mécanismes de déformation ayant généré des incompatibilités de déformation. Le déplacement de la raie de diffraction va non seulement dépendre de la contrainte macroscopique mais également de la distribution des contraintes inter et intragranulaire. La diffraction peut donc nous renseigner sur les sollicitations subies par le matériau et sur le comportement de celui-ci au travers d'informations à une échelle intermédiaire entre les échelles macroscopique et mésoscopique (ou microscopique).

Les techniques de diffraction du rayonnement synchrotron et des neutrons nous semblent particulièrement adaptées à nos problématiques actuelles et elles sont complémentaires entre elles. L'atout de ces sources de rayonnements réside dans l'énergie des faisceaux utilisés qui permettent d'avoir accès à une mesure statistique globale mais aussi à une mesure volumique alors que la diffraction X conventionnelle ne donne accès qu'à un champ surfacique, ce qui pose toujours la question de la représentativité de l'observation de la surface vis-à-vis de la caractérisation volumique.

Pour la plasticité, on peut alors avoir des informations sur les mécanismes de déformations activés lors d'une sollicitation au niveau du volume diffractant et de mieux appréhender la complexité des mécanismes pouvant générer ces contraintes. Cette technique constitue donc un outil pertinent pour valider et alimenter les modèles basés sur une démarche micromécanique par changement d'échelles. En retour, ces approches sont nécessaires pour interpréter correctement les données expérimentales obtenues. Dans ces deux démarches, la modélisation ne résulte pas d'une analyse a priori des résultats expérimentaux mais elle est construite dans un dialogue questions-réponses avec l'expérimentation ; modélisation et expérimentation se nourrissant l'une de l'autre.

Au travers de cette présentation, plusieurs exemples issus de travaux récents de l'équipe illustreront cette démarche : l'étude du comportement plastique de matériaux hexagonaux comme les alliages de titane, la caractérisation mécanique du processus de régénération osseuse…

9h10

Insights into deformation mechanism of Ni microwires: synergy between experiment and simulation

Ravi raj purohit PURUSHOTTAM RAJ PUROHIT[1], Abhinav ARYA[2], Girish BOJJAWAR[2], Maxime PELERIN[3], Steven VAN PETEGEM[4], Henry PROUDHON[3], Soham MUKHERJEE[1], Céline GERARD[1], Loïc SIGNOR[1], Satyam SUWAS[2], Atul H. CHOKSHI[2], Ludovic THILLY[1]

[1]Institut Pprime, CNRS – ENSMA – Université de Poitiers, Département Physique et Mécanique des Matériaux, 86961 Futuroscope, France
[2]Department of Materials Engineering, Indian Institute of Science, Bangalore 560 012, India
[3]MINES Paris Tech, Centre des Matériaux, CNRS UMR 7633, BP 87 91003 Evry Cedex, France
[4]Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, Villigen, Switzerland

In-situ deformation (tensile and load-unload cycles) study under synchrotron radiation has been performed to achieve a fundamental understanding of the size effect observed in polycrystalline Ni micro-wires obtained by conventional drawing and thinned down by electropolishing [1]. To get more insights into the mechanical response of different grain families within the micro-wires, X-Ray diffraction (XRD) peaks are followed during deformation providing the possibility to follow the evolution of microstructure (including dislocation storage) and to detect the elastic-plastic transition. The measurements were carried out on several micro-wires with diameter ranging from 100 µm down to 40 µm: a first batch of wires has been thinned down by electropolishing, while a second batch has been cold drawn. Comparison between these two series allows for discriminating the contribution of internal microstructure and external size on the observed mechanical properties.

The local variation in microstructure of the microwire activates successive yielding of different grain families resulting in a delay of strain localization. In microwires with homogeneous microstructure such deformation mechanism is not reached causing an early onset of necking and failure. Subsequently, a way to retain ductility and strength in nickel microwire is highlighted in the current research. Crystal plasticity finite element simulations on statistically representative 3D microstructure are carried out in the framework of small perturbation assumption to get a better understanding of the stress and plastic strain field on a gradient microstructure.

References

[1] N. Warthi et al., Scripta Mat., 68 (2013) 225-228

9h30

Localisation de la déformation plastique dans une plaque en traction biaxiale : apport de la plasticité cristalline

J.L. Dequiedt, C. Denoual

CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon France

La localisation de la déformation plastique sous forme de strictions dans des plaques métalliques en traction s'interprète classiquement à l'échelle macroscopique par l'existence de modes d'instabilités de la déformation homogène de la structure [1]. L'apparition de ces modes instables est corrélée avec la saturation de l'écrouissage et avec un effet géométrique de concentration des contraintes dans les zones amincies.

Toutefois, l'influence possible de phénomènes opérant à l'échelle de la microstructure a été peu analysée. Dans ce travail, des simulations ont été réalisées au moyen d'un code de plasticité cristalline [2] en représentant les plaques sous forme d'agrégats polycristallins.

Ces simulations mettent en évidence des champs de déformations évoluant progressivement d'une hétérogénéité à l'échelle de la microstructure vers des fluctuations à plus grande échelle (figure 1) qui peuvent être les prémices d'un phénomène de localisation à l'échelle macroscopique. La concentration progressive de la déformation semble emprunter des chemins joignant des grains qui développent des déformations importantes dès le début du chargement. En revanche, elle précède la saturation de l'écrouissage à l'échelle microscopique, c'est-à-dire celle des cissions critiques des systèmes de glissements actifs.

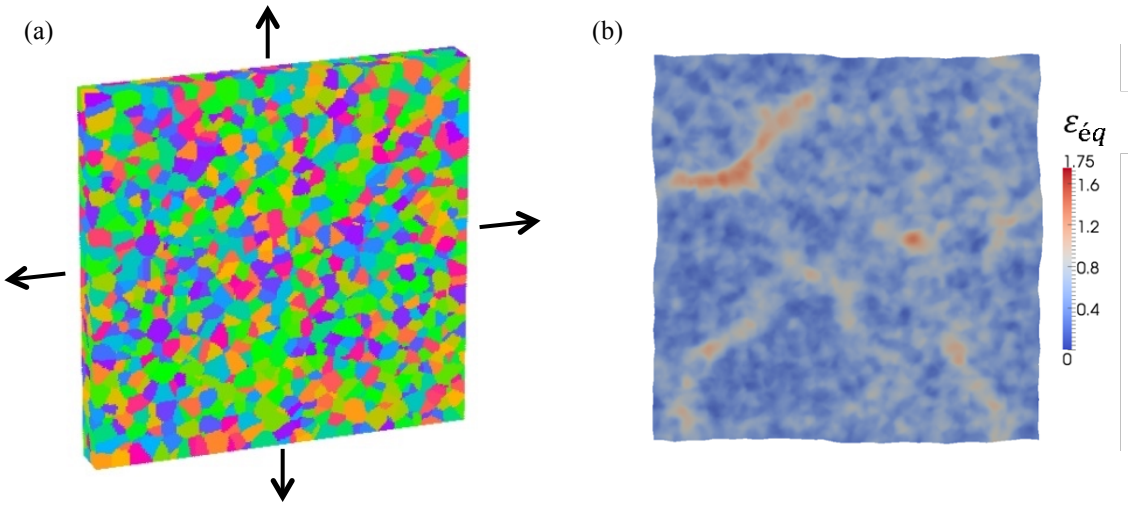


Figure 1 : Simulation d'une plaque en traction biaxiale (a) agrégat de 4000 grains (b) champ de déformation dans le plan médian pour une déformation biaxiale moyenne de 50%.

Références

[1] D. Jouve, Eur. J. Mech. A/ Solids 39, 180-196 (2013).

[2] C. Denoual, R. Madec, Y.P. Pellegrini, H. Troadec, Chocs – Revue scientifique de la direction des applications militaires 33, 70-78 (2006).

9h50

Couplage entre plasticité et rupture : le rôle des transformations de phase dans la rupture des aciers austénitiques induite par un métal liquide

Thierry Auger[1], L. Cassayre[2], B. Barkia[3], E. Perrin[3]

[1] PIMM/ENSAM-CNRS-CNAM, UMR 8006, 151 Bld de l'hôpital 75013 Paris, France.
[2] Laboratoire de Génie Chimique, Université de Toulouse, CNRS, INPT, UPS, 4, Allée Emile Monso, F-31030 Toulouse, France
[3] MSSMAT, Ecole CentraleSupélec, UMR CNRS 8579, Paris-Saclay, France

La rupture environnementale (ici spécifiquement la fragilisation par les métaux liquides) est peu souvent mise en relation avec la déformation plastique et est plutôt traitée comme un cas extrême de rupture fragile [1]. Nous montrerons plusieurs cas de rupture induite par les métaux liquides où la transformation de phase induite par plasticité (γ vers α') que l'on observe avec les aciers austénitiques joue un rôle déclencheur sur la rupture. Nous montrerons également sur des observations de fissures arrêtées que la rupture et les surfaces de rupture ne s'expliquent que dans le cadre d'une compréhension à très fine échelle de la plasticité [2]. Des prélèvements de lame MET contenant des fissures arrêtées au niveau des surfaces de rupture par FIB (Focused Ion Beam) ont été réalisés suivi d'une analyse en MET par cartographie d'orientation (système ASTAR [3]). Un couplage est alors observé entre la rupture intergranulaire et les interfaces formées lors de la déformation plastique. Ces analyses, confirmées par fractographie aux rayons X, montrent l'importance de prendre en compte les changements microstructuraux sous-jacents (hétérogénéités de la déformation de la microstructure initiale, recristallisation et transformation de phase). On soulignera les défis actuels posés aux modélisations multi-échelles par cette classe de phénomène pour décrire la propagation de fissure dans une microstructure en évolution lors de la déformation plastique.

Références

[1] M. H. Kamdar, *Progress in Material Science* 15 (1973) 289-374
[2] B. Barkia, T. Auger, J.L Courouau, J. Bourgon, *Corrosion Science* 127 (2017) 213–221
[3] E.F. Rauch, M. Véron, J. Portillo, D. Bultreys, Y. Maniette, S. Nicolopoulos, *Microsc. Anal. Nanotechnol. Suppl*. 22 (2008) 5–8.

10h50

Influence du carbone sur une boucle d'auto-interstitiels dans le fer par simulations à l'échelle atomique

R. Candela[1,2], N. Mousseau[3], R. Veiga[4], C. Domain[2,5], C.S. Becquart[1,2]

[1]Univ.Lille, CNRS, INRA, ENSCL, UMR 8207, UMET, Unité Matériaux et Transformations, F 59 000 Lille, France
[2] Laboratoire commun EDF-CNRS Etude et Modélisation des Microstructures pour le Vieillissement des Matériaux (EM2VM), France
[3] Département de physique, Université de Montréal, Case postale 6128, succursale centre-ville, Montreal, QC H3C 3J7, Canada
[4] Universidade Federal do ABC, Center for Engineering, Modeling, and Social Applied Sciences (CECS), Av. dos Estados, 5001, Santa Terezinha, CEP 09210-580, Santo André/SP, Brazil
[5] EDF-R&D, Département Matériaux et Mécanique des Composants (MMC), Les Renardières, F-77818 Moret sur Loing Cedex, France

Les alliages ferritiques sont largement utilisés dans l'industrie nucléaire et en particulier dans les cuves de réacteurs nucléaires à eau pressurisée. La durée de vie d'un réacteur nucléaire est en général liée à celle de sa cuve, c'est pourquoi l'étude de l'évolution microstructurale des matériaux constituant cette cuve est de première importance. Sous irradiation, des défauts apparaissent dans la microstructure des aciers et en particulier des auto-interstitiels (SIA) qui s'organisent en boucles de dislocations. La boucle i19 étudiée est constituée de 19 SIA qui forment 19 crowdions alignés dans la direction ⟨111⟩. Ces boucles sont connues pour avoir une grande mobilité et sont donc des défauts qui peuvent interagir avec d'autres défauts, comme par exemple dans le cas du mécanisme présenté par Xu et al. [1] entre deux boucles ⟨111⟩ qui conduit à la formation d'une boucle ⟨100⟩. La présence de carbone interstitiel influe largement sur les propriétés notamment des aciers car le carbone manifeste une forte interaction avec les défauts de la matrice et influence leur mobilité.

Une étude statique et dynamique de l'influence du carbone sur la boucle i19 a été conduite par simulations atomiques. Les calculs statiques d'énergie d'interaction ont été effectués dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT en anglais) ainsi qu'à l'aide d'un potentiel empirique. Comme la présence de la boucle i19 déforme localement très fortement le cristal de fer, l'approximation usuelle des Monte-Carlo cinétiques qui consiste à placer les atomes sur un réseau rigide ne peut pas être appliquée. Nous avons donc utilisé Kinetic Activation Relaxation Technique (k-ART) [2], un Monte-Carlo cinétique sur réseau relaxé pour étudier la dynamique d'un système comprenant une boucle i19 et un ou deux atomes de carbone à 300 K et 600 K. Ces simulations ont permis de mettre en évidence la présence d'une zone de stabilité pour l'atome de carbone à la périphérie extérieure de la boucle. Ainsi, un ou plusieurs atomes de carbone peuvent tourner autour de la boucle tout en l'épinglant. En effet, un atome de carbone à la périphérie extérieure de la boucle se liera fortement avec un de ses crowdions empêchant la migration de la boucle. Le temps d'épinglage de la boucle par le carbone a également été estimé et ces résultats devraient permettre une meilleure compréhension du vieillissement des aciers de cuve des réacteurs nucléaires à eau pressurisée.

Références

[1] Xu, H. et al., *Solving the Puzzle of ⟨100⟩ Interstitial Loop Formation in bcc Iron*, Physical Review Letters 110, 265503 (2013).
[2] El-Mellouhi, F. et al., *Kinetic activation-relaxation technique: An off-lattice self-learning kinetic Monte Carlo algorithm*, Physical Review B 78, 153202 (2008).

11h10

Modélisation champ de phase du comblement des pores par montée de dislocations dans les superalliages à base nickel

A. Ruffini[1], B. Dabas[2], Y. Le Bouar[2], A. Finel[2], A. I. Epishin[3], B. Fedelich[4], T. Feldmann[4], A. Charmi[4], B. Viguier[5], D. Poquillon[5], M. F. Ijaz[5]

[1]UMET – Université de Lille – CNRS, Villeneuve d'Ascq, France
[2]LEM – ONERA – CNRS, Châtillon, France
[3]TU, Berlin, Allemagne
[4]BAM, Berlin, Allemagne
[5]CIRIMAT – Université de Toulouse – CNRS, France

Les aubes de turbines des réacteurs d'avion sont constituées de superalliages à base nickel tels que le CMSX-4 qui se présente alors sous forme monocristalline. Après solidification et traitement d'homogénéisation, de nombreux pores sont formés qui agissent comme des sites de nucléation pour les microfissures conduisant finalement le matériau à sa ruine. Pour y remédier, ce dernier est compressé de façon isostatique à une température T=1288°C proche de son point de fusion ce qui provoque l'annihilation d'un grand nombre de pores corrélée à une augmentation significative de sa durée de vie [1]. Le problème est que les mécanismes physiques mis en jeu lors de cette étape ne sont pas encore bien compris. En effet, dans ces conditions extrêmes, l'annihilation des pores constitue une situation complexe qui couple des phénomènes multi-échelle variés (dislocations, diffusion de lacune…) qui présentent un défi pour la modélisation.

En utilisant un modèle de champ de phase développé antérieurement pour décrire le glissement des dislocations dans un monocristal cubique à faces-centrées [2], nous montrerons comment les lignes de dislocations s'organisent autours d'un pore et nous caractériserons plus précisément le rôle de l'anisotropie élastique (très forte pour l'alliage étudié) sur cette organisation. Les résultats décrivant le glissement des dislocations seront ensuite utilisés comme point de départ à la simulation du processus de montée des dislocations.

Pour cela, nous présenterons un nouveau modèle de champ de phase qui décrit à la fois la diffusion des lacunes, la montée des dislocations et l'énergie de surface d'un pore. Les caractéristiques de ce modèle seront présentées (équations constitutives en lien avec les grandeurs physiques, implémentation numérique dans l'espace de Fourier…) suivies des simulations qui décrivent la cinétique d'annihilation des pores à partir du mécanisme de montée. Les résultats seront comparés à des résultats expérimentaux qui concernent le CMSX-4 à 1288°C.

Références

[1] A. Epishin, B. Fedelich, T. Link, T. Feldmann, I. L. Svetlov, Mater. Sci. and Eng. A, 586, 342-349 (2013).
[2] A. Ruffini, Y. Le Bouar, A. Finel, J. Mech. Phys. Sol., 105, 95-115 (2017).

11h30

On the role of amorphous shells on mechanical properties of fcc Ni nanoparticles under compression

A.M. Goryaeva[1,2], C. Fusco[1], M. Bugnet[1], J. Amodeo[1]

[1]Université de Lyon, INSA-Lyon, MATEIS, UMR 5510 CNRS, 69621 Villeurbanne, France
[2]CEA Paris-Saclay, DEN/DANS/DMN/SRMP, 91191 Gif-sur-Yvette, France

Nano-objects, such as nanoparticles, nanowires, nanopillars *etc*., 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, *in situ* nano-compression experiments in the TEM occasionally report the presence of amorphous overlay at the top of nano-objects [1], while theoretical atomic scale studies are mainly focused on perfect crystalline systems [2, 3, 4].

Here we present a Molecular Dynamics (MD) study that aims to investigate the influence of amorphous shells on 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 20 nm 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.

References

[1] W. Han *et al.*, Advanced Materials 27, 3385 (2015)
[2] J.-J. Bian & G.-F. Wang, J Comput Theor Nanosci 10, 2299 (2013)
[3] D. Mordehai *et al*., Acta Materialia 59, 5202 (2011)
[4] S. Bel Haj Salah *et al*., Comput Mater Sci 129, 273 (2017)

11h50

Etude du comportement mécanique de nanofils coeur@coquille or@silicium au cours de cycles traction-compression par dynamique moléculaire.

M. Guillotte, J. Godet, L. Pizzagalli

Département de physique et mécanique des matériaux, institut P', CNRS-université de Poitiers UPR 3346, SP2MI, BP 30179, F-86962 Futuroscope Chasseneuil Cedex, France

Il est désormais bien établi que les propriétés mécaniques aux petites échelles peuvent s'avérer très différentes de celles des matériaux massifs, en particulier du fait de la prédominance des surfaces et interfaces. Il est donc envisageable et souhaitable d'utiliser ces dernières pour contrôler les mécanismes de déformation. Dans cette optique, nous avons cherché à comprendre le rôle d'une coquille de silicium amorphe sur la déformation plastique d'un nanofil d'or FCC. Pour cela nous avons dans un premier temps étudié l'effet de quatre cycles traction-compression sur un nanofil d'or orienté <110>, servant de référence pour déterminer l'influence de la coquille. Puis nous avons effectué six cycles traction-compression sur un système coeur@coquille Au[110]@a-Si. Les interactions or-silicium sont ici modélisées par un potentiel MEAM que nous avons optimisé [1].

Nos simulations montrent que les mécanismes de déformation plastique du nanofil d'or sont le maclage puis le glissement pur. La surface étant initialement sans défaut prononcé, le maclage et le glissement pur sont localisés dans la longueur du fil et créeent ainsi de grandes marches à la surface, ce qui explique pourquoi la morphologie du nanofil d'or est très sensible à la déformation. Le cyclage accentue légèrement les défauts de surfaces ce qui abaisse la limite d'élasticité et facilite la nucléation des premiers évènements plastiques au même endroit à chaque cycle.

Contrairement au nanofil d'or, le nanofil coeur@coquille tend vers un comportement élastoplastique parfait. En effet, l'interface or-silicium favorise la nucléation de plusieurs dislocations partielles délocalisées. Cette délocalisation, due à la coquille de silicium, empêche la formation de grandes marches et préserve la morphologie cylindrique du coeur d'or. Contrairement au nanofil d'or non recouvert, le coeur se déforme via la croissance de plusieurs macles et sans glissement pur. Le cyclage dégrade légèrement l'interface ce qui abaisse la limite d'élasticité. En revanche, les défauts à la surface de la coquille s'accumulent au cours du cyclage. A basse température, la coquille est plus fragile et la délocalisation des dislocations dans le coeur est moins évidente.

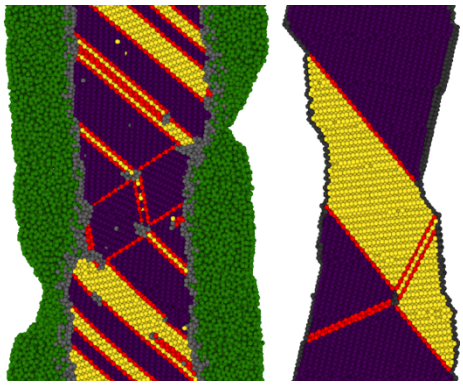


Figure 1 : Vue en coupe du nanofil coeur@coquille (à gauche) à 30 % de déformation pendant le 6ème cycle et du nanofil d'or (à droite) à 30% de déformation pendant le 4ème cycle.

Références : [1] J. Godet et. al., Uniform Tensile Elongation in Au-Si Core-Shell Nanowires, Extreme Mechanics Letters (2016).

Poster

Etude et modélisation des alliages de titane par une stratégie d'identification : application biomécanique

R. HARBAOUI [1], A. ZNAIDI[1,2], R. NASRI [1]

[1] LR-MAI-ENIT, University Tunis El Manar,
National School of Engineers of Tunis BP37 Le Belvedere 1002 TUNISIE
[2] IPEIEM University Tunis El Manar
BP244 CP 2092, University Tunis El Manar,

Les applications des alliages de titane sont traditionnellement présentes dans le domaine de transport, notamment au niveau des moteurs et des turboréacteurs. L'avantage majeur de ces alliages est principalement lié à leur comportement mécanique exceptionnel regroupant une bonne résistance mécanique dans différentes conditions de sollicitations, une importante durée de vie associée à une faible densité, paramètres capitaux pour de telles applications. D'où vient l'idée de l'utilisation du titane dans le domaine de la biomécanique notamment l'utilisation orthopédique dans la conception des prothèses osseuses plus particulièrement la prothèse totale de la hanche(PTH) nécessitant tous ces critères avantageux.

Le présent travail s'intéresse à l'étude du comportement de la tige fémorale de la prothèse totale de la hanche en alliage de titane. Pour arriver à cette finalité, une étude de modélisation suivie par une nouvelle stratégie d'identification s'impose. Ainsi, l'utilisation d'une loi de comportement tenant compte de l'état microstructural du titane demeure indispensable pour arriver à fournir un modèle fiable pour une prochaine implémentation dans les logiciels d'éléments finis et ceci dans le but de présenter des pièces à hautes précisions. Les résultats trouvés à partir de la modélisation et de l'identification serviront par la suite à l'étude du comportement mécanique de ce matériau lorsqu'il est soumis à plusieurs sollicitations.

Références :

[1] O.Daghfas, A.Znaidi, R.Nasri
Experimental and numerical study on mechanical properties of aluminum alloy under uniaxial tensile test. International Journal of technology. (2017).
[2] O.Daghfas, A.Znaidi, R.Nasri
Experimental study on mechanical properties of aluminum alloy under uniaxial tensile test- Rennes, Plasticité (2017).
[3] O.Daghfas, A.Znaidi, R.Nasri
Stratégie d'identification des lois de comportement des matériaux métalliques à partir de de leurs microstructures. Poitiers, Plasticité (2016).
[4] R.Harbaoui, A.Znaidi, R.Nasri Modélisation des alliages de titane par une stratégie d'identification: Application biomécanique. Revue des composites et des matériaux avancés 2017. DOI:10.3166/rcma. Lavoisier Volume 27- n°1-2/(2017).
[5] R.Harbaoui, A.Znaidi, R.Nasri Anisotropic study of behavior of titanium alloy thin sheets using identification strategy, CMSM-TUNISIA (2017)

Poster

Stratégie d'identification des lois de comportement des alliages Al2024 Dialogue modèle-expérience

O. DAGHFAS [1], A. ZNAIDI [1,2], R. NASRI [1]
[1] LR-MAI-ENIT, University Tunis El Manar,
National School of Engineers of Tunis BP37 Le Belvedere 1002 TUNISIE
[2] IPEIEM University Tunis El Manar
BP244 CP 2092 , University Tunis El Manar,

Une grande majorité des pièces métalliques est actuellement obtenue par une mise en forme au cours de laquelle le matériau est déformé plastiquement. Pour pouvoir optimiser ces procédés de mise en forme, les industriels ont de plus en plus recours à la simulation numérique pour décrire le comportement du matériau. La nature des matériaux utilisés et les sollicitations appliquées nécessitent une formulation prenant en compte le comportement élastoplastique, l'évolution du coefficient de Lankford et l'anisotropie du matériau, ainsi que l'évolution de la surface de charge décrit par le type d'écrouissage (isotrope, cinématique). Les alliages d'aluminium sont de plus en plus utilisés dans l'industrie, notamment automobile et aéronautique, du fait de leurs bonnes propriétés mécaniques, de leurs tolérances au dommage et de leur bon rapport résistance/masse. L'objectif principal de ce travail est d'étudier le comportement des alliages Al2024 utilisés particulièrement dans la conception de fuselage des Airbus. Tout d'abord, on s'intéresse à la mise en place d'une plateforme expérimentale qui permettra par la suite l'étude du comportement de ce matériau. La partie expérimentale s'articule essentiellement autour d'une campagne d'essais et d'une série de visualisation optique et électronique. Cette compagne d'essais mécaniques sera réalisée afin de caractériser leurs comportements mécaniques et leurs réponses sous divers modes de déformation : des essais monotones de traction hors axes et de cisaillement hors axes. Par la suite, une série d'essais de cisaillement cycliques s'étant réalisés sur ce matériau pour la mise en évidence de l'effet de Bauschinger et pour faire intervenir le phénomène d'écrouissage cinématique. Puis, ces résultats sont interprétés par rapport à la microstructure de l'alliage étudié à l'aide de microscopie électronique à transmission (MET). Deuxièmement, l'anisotropie plastique est ensuite modélisée en utilisant une stratégie d'identification qui dépend d'un critère de plasticité, d'une loi d'écrouissage et d'une loi d''évolution. Le présent travail vise à analyser la formabilité des tôles grâce à plusieurs modèles d'écrouissage isotrope et cinématique.

Références :

[1] O.Daghfas, A.Znaidi, R.Nasri, Experimental and numerical study on mechanical properties of aluminum alloy under uniaxial tensile test. International Journal of technology. (2017).
[2] O.Daghfas, A.Znaidi, R.Nasri, Experimental study on mechanical properties of aluminum alloy under uniaxial tensile test- Rennes, Plasticité (2017).
[3] O.Daghfas, A.Znaidi, R.Nasri, Stratégie d'identification des lois de comportement des matériaux métalliques à partir de de leurs microstructures. Poitiers, Plasticité (2016).

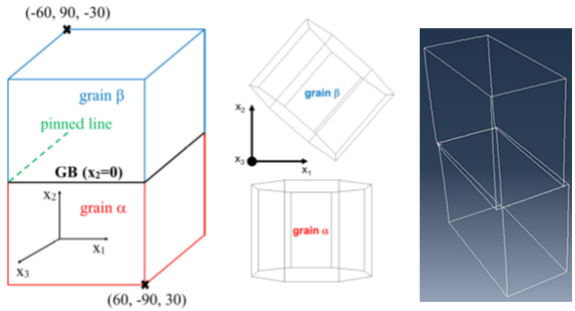
Poster

Contraintes internes dues au glissement au joint de grains : effets de l'élasticité anisotrope, de la plasticité et des jonctions triples

Thiebaud Richeton[1]

[1]Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3 UMR 7239), CNRS, Université de Lorraine, 7 rue Félix Savart, 57073 Metz, France

Quand il est non-uniforme, le glissement au joint de grains peut induire des incompatibilités de déformation et de rotation, même dans le cas théorique d'interfaces parfaitement planes [1]. Dans ce travail, les expressions analytiques explicites des sauts de contrainte et de rotations élastiques ont été déterminées à une interface plane en présence de glissement au joint et de distorsions plastiques dans les grains, tout en considérant un cadre thermo-élastique anisotrope hétérogène [2]. Les deux champs élastiques dépendent directement des gradients du glissement au joint de grains dans le plan de l'interface. Il est également montré que le glissement au joint est un mécanisme qui peut relaxer les contraintes d'incompatibilité d'origine élastique, plastique et thermique bien que ces dernières ne soient pas résolues dans le plan de l'interface. Cette relaxation peut être une force motrice pour le glissement au joint en complément des cissions locales résolues dans le plan du joint traditionnellement considérées. Par ailleurs, les expressions analytiques obtenues ont été vérifiées grâce à des simulations par éléments finis (EF) de cisaillement de bi-cristaux. Dans ces simulations, le glissement interfacial est autorisé sauf au niveau d'une ligne censée représenter l'effet d'une jonction triple. Un très bon accord quantitatif est obtenu sur les sauts des champs élastiques entre les valeurs issues des solutions analytiques et celles calculées par simulations EF. Enfin, ces simulations soulignent tout particulièrement le rôle du glissement au joint de grains comme une source possible d'importantes contraintes internes proche des jonctions triples en raison des forts gradients de glissement interfacial qui s'y trouvent [2].



	A (-40,0,0) EF / Analytic	B (0,0,0) EF / Analytic	C (40,0,0) EF / Analytic
$[\![\sigma_{11}]\!]$	−0.1 / −0.1	0.0 / 0.0	0.0 / 0.0
$[\![\sigma_{33}]\!]$	0.2 / 0.2	0.2 / 0.2	0.2 / −0.3
$[\![\sigma_{31}]\!]$	265.8 / 265.6	161.9 / 160.2	88.9 / 87.4
$[\![\omega^e_{32}]\!]$	0.02 / 0.03	0.01 / 0.02	0.00 / 0.01
$[\![\omega^e_{13}]\!]$	0.13 / 0.13	−0.08 / −0.08	−0.04 / −0.04
$[\![\omega^e_{21}]\!]$	0.00 / 0.00	0.00 / 0.00	0.00 / 0.00

Figure 1 : Cisaillement d'un bi-cristal de Zn avec glissement au joint par simulation EF et comparaison avec les solutions analytiques des sauts de contrainte et de rotation élastique en 3 points de l'interface.

Références

[1] Mussot P., Rey C., Zaoui A., Res Mechanica 14 (1985), 69–79
[2] Richeton T., Crystals 7 (2017), 203 (1-14)

Poster

Plasticity in Laves phases: an atomistic approach

Fatim-Zahra Mouhib[1], Christoffer Zehnder[1], Julien Guenole[1], Blazej Grabowski[2], Sandra Korte-Kerzel[1]

[1] Institute of Physical Metallurgy and Metal Physics, RWTH Aachen University, Germany
[2] Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, D-40237 Düsseldorf, Germany

The strengthening mechanisms in magnesium alloys are strongly related to the complex intermetallic precipitates that spread all over the microstructure. In particular, the hard and brittle Laves phases [1] commonly observed in such alloys exhibit a complex atoms stacking with largely unknown plasticity mechanisms [2].

We propose here a numerical atomistic approach at the cross-road of experiments and *ab initio* simulations, to shed light on the possible mechanisms responsible for the plasticity in hexagonal Mg_2Ca (C14) Laves Phases. Molecular dynamics/statics simulations with an MEAM interatomic potential are performed to study the propagation of dislocations. In particular, the propagation of <a> dislocations in the basal plane by the so called synchroshear mechanism [3,4] is investigated at the atomic scale. Our goal is to propose a complete description of this mechanism and its occurrence based on activation energy calculations. Similarly, to elucidate the activation of non-basal slips observed in experiments, cross-slip and dislocation glide in other slip systems is also addressed.

Références

[1] F. Laves and H. Witte, Metallwirtsch. Metallwiss. Metalltech. **15**, 840 (1936).
[2] M.F. Chisholm, *et al.,* Science **307**, 701 (2005)
[3] P.M. Hazzledine *et al.*, MRS Proceedings **288**, 591 (1992).
[4] P.M. Hazzledine and P. Pirouz, Scripta metallurgica et materialia **28**, 1277 (1993).

Poster

Interaction dislocation – hydrogène dans le zirconium

T. Soyez, E. Clouet

CEA/DANS/DEN/DMN/SRMP

Le zirconium est un matériau de structure important dans l'industrie nucléaire où ses alliages sont utilisés en particulier pour fabriquer les gaines du combustible nucléaire dans les réacteurs à eau pressurisée. Au cours du fonctionnement du réacteur, la réaction d'oxydation avec l'eau à la surface de la gaine conduit à une prise d'hydrogène par l'alliage de zirconium. Nous nous sommes intéressés à l'influence de cette prise d'hydrogène sur les propriétés mécaniques du zirconium en traduisant cette prise d'hydrogène par une solubilisation de ce dernier dans la matrice métallique. Comme dans tout matériau cristallin, le comportement mécanique du zirconium est principalement déterminé par le glissement des dislocations, et plus principalement des dislocations <a>. Dans le cadre de cette étude nous avons utilisés des simulations atomiques afin de précisément décrire le cœur des dislocations par le biais de calculs ab initio. Lorsque l'on modélise une dislocation, cette dernière se dissocie en deux partielles suivant un plan donné avec une configuration plus stable lorsque la dissociation se fait dans le plan prismatique, qui est le plan de glissement principal des dislocations <a> dans le zirconium. Lors du glissement d'une dislocation suivant un plan donné, la dissociation de la dislocation s'oriente en fonction de ce plan [1]. L'objet de cette étude a donc été de déterminer l'interaction d'une dislocation dissociée dans le plan prismatique avec un atome d'hydrogène dissous dans la matrice dans le but d'intégrer cette interaction à des outils de simulation du comportement mécanique d'échelle supérieure. Dans le cadre de cette étude, l'hydrogène en solution a été déposé dans les sites tétraédriques de la maille de zirconium, sites connus pour être leur lieu d'habitat habituel [2]. L'interaction entre l'hydrogène et la dislocation a été calculée pour différentes position de l'hydrogène au voisinage du centre de la dislocation, que cela soit pour les sites tétraédriques présents avant l'insertion de la dislocation ou les sites créés avec l'introduction de cette dernière. Les résultats montrent globalement des interactions attractives entre la dislocation et l'hydrogène, sans que l'hydrogène ne modifie la structure de cœur de la dislocation comme ce qui avait été observé lors de l'étude de l'interaction entre l'oxygène et la dislocation dissociée dans le plan prismatique [3] favorisant ainsi le glissement dévié. Amenant donc à conclure que soit l'hydrogène va ségréger vers le centre de la dislocation, soit ancrer la dislocation sans changer le plan de glissement de la dislocation, menant dans les deux cas à une diminution de la mobilité de la dislocation dans le zirconium.

Références

[1] E. Clouet, D. Caillard, N. Chaari, F. Onimus et D. Rodney, Dislocation locking versus easy glide in titanium and zirconium, Nature Mater. 14, 931 (2015).

[2] R Khoda-Bakhsh and D K Ross. Determination of the hydrogen site occupation in the α phase of zirconium hydride and in the α and β phases of titanium hydride by inelastic neutron scattering. J. Phys. F: Met. Phys., 12:15, 1982.

[3] N. Chaari, D. Rodney and E. Clouet, Oxygen - Dislocation interaction in zirconium from first principles, Acta Mater.416-424, 132, 2017

Poster

Dynamic strain aging, strain localization and fracture in Al-Cu-Li alloys

Satyapriya Gupta[1], Vincent Taupin[1*], Claude Fressengeas[1], Juliette Chevy[2]

[1] LEM3, UMR CNRS 7239, 7 rue Augustin Fresnel, 57073 Metz, France
[2] Constellium Technology Center, 725 Rue Aristide Bergès, 38341 Voreppe, France

Recently developed Al-Li-Cu alloys are the result of increasing demand of light-weight alloys which are essential to cut the fuel consumption and enhance the overall performance of the aircraft. Efficient usage of these alloys and extension in their application areas need some intensive research on microstructure-property and failure relationship. Therefore, we investigated the influence of crystallographic and morphological texture on the formation of early deformation bands, localization and subsequent failure of Al-Li-Cu alloys. To that end, we have adopted a crystal plasticity field dislocation mechanics model enabled with disconnection fracture mechanics [1]. Since the localization being significantly influenced by DSA observed in these alloys, plastic instabilities caused by dislocation solute interactions are taken into account by implementing a DSA module [2] into the crystal plasticity and fracture framework. All the field equations are implemented within finite element solver provided by FreeFem++ software [3]. Finite element simulations are performed on both starting from simplified to realistic RVEs. Simulation results suggested a significant influence of texture and morphology on the early strain localization in presence of DSA in Al-Cu-Li alloys.

Références

[1] C. Fressengeas, V. Taupin, J. Mech. Phys. Solids **68**, 45 (2014).
[2] C. Fressengeas, A.J. Beaudoin, M. Lebyodkin, L.P. Kubin, Y. Estrin, Mater. Sci. Engng.: A **400–401**, 226 (2005).
[3] Hecht, F, J. Numer. Math. **20**, 251 (2012).

Poster

Disconnections, dislocations and generalized disclinations in grain boundary ledges

Xiao-Yu Sun[1], Claude Fressengeas[2], Vincent Taupin[2], Patrick Cordier[1], Nicolas Combe[3]

[1]Unité Matériaux et Transformations, Université de Lille1/CNRS, 59655 Villeneuve d'Ascq, France
[2]Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux,
Université de Lorraine/CNRS, 7 rue Félix Savart, 57073 Metz Cedex 3, France
[3]Centre d'Elaboration de Matériaux et d'Etudes Structurales, CNRS/Université de Toulouse,
29 rue J. Marvig, BP 94347, 31055 Toulouse Cedex 4, France

The structure of ledges in otherwise symmetrical tilt boundaries built from atomistic simulations is investigated in copper in terms of continuous dislocation and generalized disclination fields. A "discrete-to-continuum" crossover method is used to build the relevant kinematic and defect density fields on the basis of discrete atomic displacements appropriately defined in the boundary area. The resulting structure of incompatibility is compared with the so-called disconnection model of boundary ledges. In addition to their dislocation content, which captures the elastic displacement discontinuity across the boundary, the ledges appear to be characterized by discontinuities of the elastic rotation and dilatation fields, which are reflected by non-vanishing generalized disclination density fields.
The spatio-temporal evolutions of the all these fields can be deduced from the set of partial differential equations of the theory of dislocation and generalized disclination density fields [1,2] and can be found as solutions to boundary value problems. As a natural consequence, the motion of the dislocation and step components of ledges is governed by dynamic laws of a similar nature.

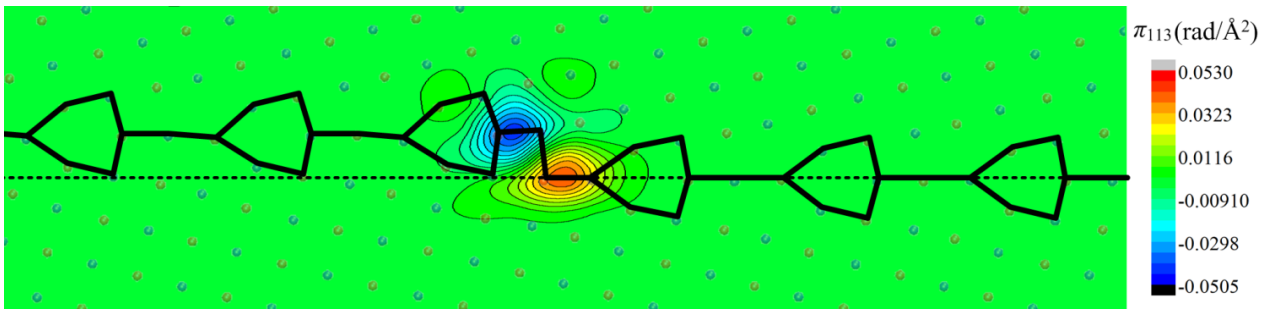


Figure 1: Ledge in tilt boundary and generalized disclination dipole π_{113}

Références :
[1] Acharya, A., Fressengeas, C., 2012. *Coupled phase transformations and plasticity as a field theory of deformation incompatibility*, Int. J. Fract. **174**, 87-94
[2] Acharya, A., Fressengeas, C., 2015. *Continuum mechanics of the interactions between phase boundaries and dislocations in solids*, in Differential Geometry and Continuum Mechanics, Eds.G.Q. Chen, M. Grinfeld, R.J. Knops, Springer Proceedings in Mathematics and Statistics, **137**, 125-168.

Poster

Atomic scale study of twinning in hcp metals

Olivier Mackain[1], David Rodney[2], Emmanuel Clouet[1]

[1] DEN–Service de Recherches de Métallurgie Physique, CEA, Université Paris-Saclay, F-91191, Gif-sur-Yvette, France
[2] Institut Lumière Matière, CNRS–Université Claude Bernard Lyon 1, F-69622 Villeurbanne, France

Plasticity in hcp metals is controlled by the glide of dislocations with <a> Burgers vectors. Those dislocations can however not explain any deformation along the <c> axis and at low temperatures twinning is activated to accommodate such a strain. We investigate twin growth in these hcp metals by modeling at an atomic scale the various disconnections that can exist on twin boundaries. These line defects are twinning dislocations which are responsible of the twin thickening. For a given twinning system, several disconnections of different Burgers vectors and different heights exist. Using an EAM potential representative of hcp zirconium, we study both their formation and migration [1,2]. Thanks to a coupling with elasticity theory, disconnection core energies are extracted and the formation energy of isolated disconnection dipoles is defined. For twin systems where several disconnections can exist, because of this core contribution, the most stable disconnection is not always the one with the smallest Burgers vector. Crystallographic parameters of the disconnection with the lowest formation energy correlate well with twin modes observed experimentally. On the other hand, disconnection migration, characterized here by computing their migration energy and Peierls stress, does not appear critical for twin-mode selection.

The modeling approach is then applied to ab initio calculations to study twinning in various hcp metals, in particular Zr, Ti and Mg [2]. We thus obtain disconnections formation energies for the different twinning systems and show that the different twinning activities observed experimentally in these hcp metals can be well rationnalized by these formation energies.

Reference

[1] O. Mackain, M. Cottura, D. Rodney, and E. Clouet, *Atomic-scale modeling of twinning disconnections in zirconium*, Phys. Rev. B **95**, 134102 (2017)
[2] O. Mackain, *Modélisation du maclage à l'échelle atomique dans les métaux hexagonaux : germination et migration de disconnections dans le zirconium, le titane et le magnésium*, thèse Univ. Lyon (2017).

Poster

Déformation rapide des métaux par dynamique des dislocations

R. Madec[1]

[1]CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

Lors d'une déformation rapide et quand la plasticité à base de dislocations domine, la densité de dislocations mobiles s'ajuste pendant un transitoire dont l'étendue varie en fonction du matériau, des conditions expérimentales ou de simulation et, notamment, de la densité initiale de dislocations. Ce transitoire peut atteindre plusieurs dizaines de pourcent de déformation comme c'est le cas en dynamique moléculaire [1]. La densité totale augmente elle aussi fortement et continue à augmenter tant que l'écrouissage ne sature pas

Quand on s'intéresse à des déformations rapides mais inferieures à $10^6 s^{-1}$, la dynamique moléculaire n'est pas adaptée en raison des temps de simulation nécessairement brefs et des très petits volumes considérés. La dynamique des dislocations apparaît alors comme la méthode de simulation idéale pour couvrir les vitesses de déformation allant de quasi-statique à des vitesses proches de celles accessibles en dynamique moléculaire.

Les premières études par dynamique des dislocations de la déformation rapide ont été menées dans de très petits volumes (2μm de côté maximum) sans optimiser les flux de dislocations et jusqu'à des déformations dans ces conditions trop limitées (<1%) pour couvrir le transitoire pendant lequel la densité de dislocations mobiles évolue fortement. Ces études, qui portent exclusivement sur le cuivre, soulignent l'importance de la prise en compte des effets d'inertie à partir de vitesses de déformation de $10^4 s^{-1}$ [2] et le rôle essentiel du glissement dévié à partir du moment où des systèmes de même vecteur de Burgers ont des facteurs de Schmid importants [3-5].

L'augmentation des capacités de calcul, les progrès en matière de parallélisme des codes de dynamique des dislocations et d'algorithmes [6] permettent dans des volumes plus grands d'atteindre des déformations suffisantes pour franchir le transitoire, au moins pour les vitesses de déformation jusqu'à $10^4 s^{-1}$. Nous présenterons des résultats préliminaires sur le cuivre et le tantale.

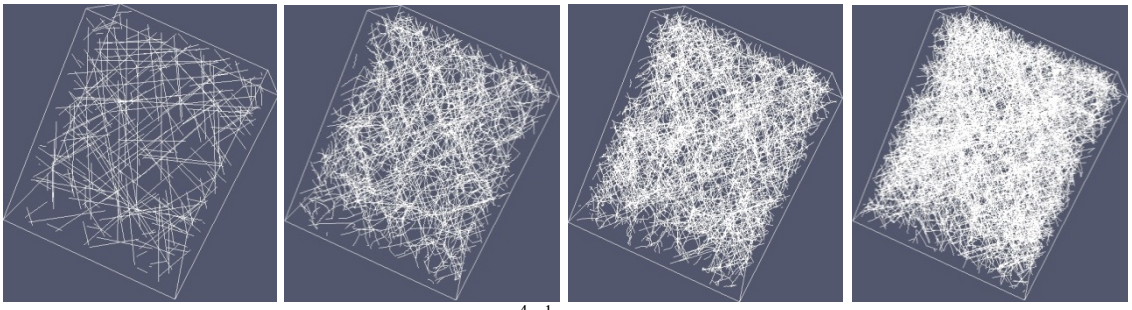


Figure 1 : Cu déformé selon [001] à $10^4 s^{-1}$ dans un volume de 10μm de côté. ε = 0.5%.

Références

[1] L. Zepeda-Ruiz, A. Stukowski, T. Oppelsturp, V.V. Bulatov, Nature 550 p 492-495 (2017)
[2] Z.Q. Wang, I.J. Beyerlein, R. Lesar, Phil. Mag. 87 :16 2263-2279 (2007)
[3] Z.Q. Wang, I.J. Beyerlein, R. Lesar, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 15 675-690 (2007)
[4] Z.Q. Wang, I.J. Beyerlein, R. Lesar, Phil. Mag. 88 :9 1321-1343 (2008)
[5] Z.Q. Wang, I.J. Beyerlein, R. Lesar, Int. Journal of Plasticity 25 26-48 (2009)
[6] R.B. Sills PhD dissertation Stanford University (2016)

Poster

Nucleation of dislocation in ultra-hard ceramic nanoparticles modelled by molecular dynamics and nudged elastic band simulations

Jonathan Amodeo[1], Emile Maras[2]

[1] MATEIS, Université Lyon 1 CNRS INSA-Lyon, F-69621 Villeurbanne, France
[2]Service de Recherches de Métallurgie Physique, DEN, CEA F-91191 Gif-sur-Yvette, France

Micro- and nano-sized structures have attracted substantial interest due to their special mechanical behavior: they generally show an increased yield strength compared with the bulk material as well as an improved ductility. Among them, nanoparticles (NPs) which are generally used for their shape-dependent functional properties also appear as perfect candidates for submicronic plasticity investigations due to their broad range of sizes and their variety of shapes. While metallic and silicon NPs have been widely investigated since almost two decades, less is known about the strength of ceramic NPs maybe due to the brittleness of their bulk counterparts.

In the light of recent but preliminary in situ TEM observations, we investigate here the mechanical behavior of <100>-oriented MgO nanocubes. First, incipient plasticity mechanisms are investigated using molecular dynamics simulations (MD) of virtual nanocompression tests at constant strain rate. Results show that the plastic deformation of MgO nanocubes starts with the nucleation from the surface of perfect 1⁄2<110>{110} dislocations under ultra-high stresses, one order of magnitude larger than what is generally observed in fcc metals. However, as MD simulations can only be carried out at strain rates several orders of magnitude larger than experimental ones, we used the nudged-elastic-band method to calculate the activation energy for the nucleation of the dislocation as a function of stress, particle size and dislocation nucleation site. With the help of the transition state theory, the nucleation stress can then be estimated as a function of temperature and experimental strain rate. We find that due to the large stiffness of the activation energy *vs.* stress curve, the strain rate has a much smaller influence on the nucleation stress than what is found for metallic nanocrystals [1] and therefore, that the nucleation stress estimated using MD is close to that corresponding to experimental strain rate.

Références :
[1]T. Zhu, J. Li, A. Samanta, A. Leach, K. Gall, Temperature and Strain-Rate Dependence of Surface Dislocation Nucleation, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 025502. doi:10.1103/PhysRevLett.100.025502.

Poster

Caractérisation morphologique et mécanique de nanomousses d'or par dynamique moléculaire.

M. Guillotte, J. Godet, L. Pizzagalli

Département de physique et mécanique des matériaux, institut P', CNRS-université de Poitiers UPR 3346, SP2MI, BP 30179, F-86962 Futuroscope Chasseneuil Cedex, France

Les matériaux nanostructurés ont un intérêt certain dans divers domaines de la physique notamment pour leurs propriétés de surface. En particulier, les nanomousses d'or peuvent être utilisés pour la catalyse, l'optique mais aussi comme actuateur ou capteur, etc... Le diagramme d'Ashby montre qu'il existe une proportionnalité entre la densité et la résistance mécanique d'un matériau. Les nanomousses sont des candidats potentiels pour compléter le diagramme parmi les matériaux résistants et peu denses. Ils sont caractérisés par des ligaments et des pores ayant pour dimension caractéristique quelques dizaines de nanomètres. Récemment il a été montré que leur tenue en temperature pouvait être largement améliorée lorsqu'ils sont recouverts d'un dépôt d'oxyde amorphe [1]. Dans cette étude nous souhaitons déterminer et comprendre comment ces dépôts peuvent également modifier les propriétés mécaniques de telles nanostructures.

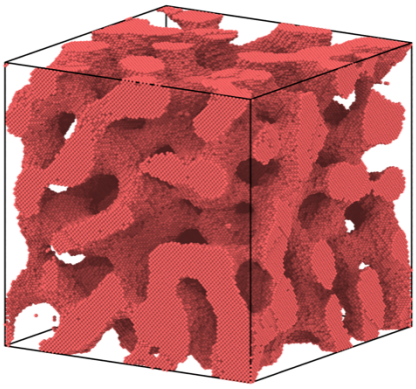


Figure 1 : Vue en 3D d'un nanomousse modélisée par notre méthode

Nous avons utilisé la dynamique moléculaire pour pouvoir accéder directement aux mécanismes élémentaires de la plasticité, et avons choisi l'or comme matériau FCC modèle. Cependant, les oxydes étant relativement compliqués à modéliser par les potentiels classiques, nous avons choisi le silicium pour simuler l'effet d'un revêtement dur sur l'or, profitant également du fait qu'un potentiel MEAM a été préalablement optimisé pour décrire les intéractions or-silicium [2].
Il existe plusieurs méthodes pour modéliser des mousses métalliques (champ de phase, expansion de la boîte de simulation). Nous présenterons une nouvelle méthode que nous avons développée qui consiste à mélanger des atomes d'or et d'argent puis à démixer les deux phases. Pour accélerer le processus de démixion nous avons modifié le potentiel interatomique Au-Ag. La caractérisation morphologique et topologique des mousses nous a permis de vérifier que notre méthode produit des mousses comparables aux mousses expérimentales. Actuellement, nous faisons des tests mécaniques sur différents systèmes, nous présenterons également ces premiers résultats.

Références

[1] Biener et. Al., ALD Functionalized Nanoporous Gold: Thermal Stability, Mechanical Properties, and Catalytic Activity, NanoLetters (2011).
[2] J. Godet et. al., Uniform Tensile Elongation in Au-Si Core-Shell Nanowires, Extreme Mechanics Letters (2016).

Poster

Contribution des défauts sur le comportement anisotrope de la diffusion de l'hydrogène dans le nickel monocristallin

Arnaud METSUE, Guillaume HACHET, Abdelali OUDRISS and Xavier FEAUGAS

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

Il a été prouvé que la présence et la diffusion de l'hydrogène contribuent significativement à l'endommagement des pièces métalliques. En particulier, de nombreuses études expérimentales ont montré que l'hydrogène favorise la formation de défauts et en particulier de lacunes. Une étude récente a mis en évidence un comportement anisotrope de la diffusion du soluté dans le nickel monocristallin libre de tout effort extérieur [1]. Il a alors été suggéré que la présence de défauts incluant les clusters de lacunes et leurs champs de déformation associés étaient responsables du comportement anisotrope observé expérimentalement.

Nous mettons en œuvre des calculs *ab initio* basés sur la DFT pour étudier la diffusion de l'hydrogène dans le champ de déformation induit par la présence de lacunes, de clusters de lacunes et du soluté lui-même. Les effets de la température sont pris en compte par extension du calcul à l'énergie libre en tenant compte des vibrations du réseau cristallin et des excitations électroniques. Nous déterminons le tenseur d'élasto-diffusion dans lequel nous implémentons le tenseur de déformation associé au défaut. Ce dernier est calculé en élasticité anisotrope en se basant sur les travaux de Larché et Cahn [2]. Nous montrons que les champs de déformation associés au soluté et aux monolacunes ne sont pas suffisants pour reproduire l'anisotropie de diffusion observée expérimentalement. Nous nous tournons alors sur les effets des clusters de lacunes assimilés à des bulles de gaz dans le matériau et qui sont observés par microscopie électronique en transmission suite à l'introduction d'hydrogène [3]. La présence de ces bulles permet de reproduire le tenseur des coefficients de diffusion expérimental et démontre ainsi la contribution de ces défauts sur l'anisotropie de la diffusion.

Références :

[1] J. Li, A. Oudriss, A. Metsue, J. Bouhattate, X. Feaugas, Scientific Reports, vol. 7, 45041, 2017
[2] F. C Larché et J. W Cahn, Acta Metallurgica, vol. 30, p. 1835-1845, 1982
[3] G. Hachet, A. Metsue, A. Oudriss, X. Feaugas, Acta Materialia, vol. 148, p. 280-288, 2018

Poster

Étude du glissement assisté par la montée des dislocations de type coin dans l'aluminium

Marie Landeiro Dos Reis[1], Laurent Proville[1], Maxime Sauzay[2]

[1]DEN-Service de Recherches de Métallurgie Physique, CEA, Université Paris-Saclay, F-91191, Gif-sur-Yvette, France
[2]DEN-Service de Recherches de Métallurgie Appliquée, CEA, Université Paris-Saclay, F-91191, Gif-sur-Yvette, France

De nombreuses expériences de microscopie électronique en transmission ont montré la présence de défauts de type amas de lacunes dans les métaux déformés à température ambiante ou subissant une trempe à hautes températures [1-6]. Ces défauts peuvent être présents en grand nombre [6] et gênent la propagation des dislocations dans les métaux. Il est donc primordial d'étudier l'interaction d'une dislocation avec ce type d'obstacle afin de déduire l'impact de ces amas sur le glissement des dislocations.

Nous avons donc dans un premier temps caractérisé l'interaction locale d'une dislocation avec un unique amas. Pour ce faire nous utilisons la statique moléculaire afin de déterminer les enthalpies d'activation et les forces d'ancrage associées à différents amas en fonction de leurs tailles. Nous obtenons un accord satisfaisant entre nos simulations et le modèle théorique élaboré par Bacon, Kocks et Scattergood [7-8]. Afin d'étudier le comportement d'une dislocation dans une distribution aléatoire d'amas nous utilisons un modèle de ligne élastique [9]. La dislocation est donc modélisée par une ligne élastique interagissant avec les obstacles via les forces d'ancrages préalablement calculées par simulation atomique. Lorsque la contrainte appliquée est inférieure à une contrainte seuil alors la dislocation va s'ancrer. Nous supposons alors que le mécanisme de montée de dislocation via la diffusion de lacunes intervient afin de désancrer la ligne. Nous pouvons ainsi déterminer la distance moyenne entre configurations ancrées.

Finalement, nous modélisons la vitesse de déformation via un modèle standard de glissement assisté par la montée [10] en s'abstenant de l'utilisation de paramètres ajustables. Nous comparons ensuite ce modèle théorique à des expériences de traction et de fluage stationnaire [11-16]. Nous obtenons un bon accord avec l'expérience pour une large gamme de contraintes et températures.

Références

[1] M. Kiritani, Journal of Nuclear Materials 276, 41 (2000).
[2] M. Kiritani, Materials chemistry and physics 50, 133 (1997).
[3] S. Kojima *et al*. Philosophical Magazine A 59, 519 (1989).
[4] M. Loretto *et al*., Philosophical Magazine 11, 459 (1965).
[5] L. Clarebrough *et al.*, Acta Metallurgica 15, 1007 (1967).
[6] Y. Dai *et al.*, Acta Materialia 45, 3495 (1997).
[7] R. Scattergood *et al.*, Philosophical Magazine 31, 179 (1975).
[8] D. J. Bacon *et al.*, Philosophical Magazine 28, 1241 (1973).
[9] L. Proville *et al.*, Physical Review B 82, 054115 (2010).
[10] J. Hirth *et al.*, Theory of dislocations, Wiley, New York (1982).
[11] C. Ahlquist *et al.*, Acta Metallurgica 19, 373 (1971).
[12] C. Barrett *et al.*, Materials Science and Engineering 10, 33 (1972).
[13] A. Ardell *et al.*, Acta Metallurgica 34, 2411 (1986).
[14] S. Raj, Materials Science and Engineering 96, 57 (1987).
[15] S. Straub *et al.*, Scripta Metallurgica et Materialia 24, 1837 (1990).
[16] A. Airod *et al.*, Journal of Materials Processing Technology 134, 398 (2003).

Poster

Développement d'un nouvel opérateur de Green discret adapté aux méthodes numériques de type FFT pour des matériaux hétérogènes avec déformations libres de contraintes

Komlavi Senyo ELOH[1,2], Alain Jacques[1], Stéphane Berbenni[2]

[1]IJL, CNRS/ Université de Lorraine, LABEX DAMAS, 2 allée André Guinier, 54011 Nancy, France
[2]LEM3, CNRS/ Université de Lorraine, LABEX DAMAS ,7 Rue Félix Savart, 57073 Metz, France

Du fait de leur efficacité en temps de calculs et mémoire, les méthodes numériques basées sur la transformée de Fourier rapide (FFT : « Fast Fourier Transform » en anglais) sont de plus en plus utilisées pour calculer les champs locaux (contraintes, déformations, déplacements) dans les matériaux hétérogènes pour des microstructures périodiques. On remarque néanmoins que l'utilisation de ces algorithmes pour les matériaux hétérogènes soumis à des champs extérieurs et/ou à des déformations libres (dislocations, déformation thermique,...) introduit des oscillations numériques et donc des imprécisions sur les champs mécaniques proche des discontinuités physiques matérielles comme les joints de grains ou de phases. On montre tout d'abord que ces oscillations sont dues à l'opérateur de Green modifié continu, qui est classiquement implémenté dans les schémas itératifs [1,2]. Pour supprimer ces oscillations, deux nouveaux opérateurs de Green discrets périodiques sont développés pour les solutions en déformations et en déplacements. Ces opérateurs discrets permettent un calcul très précis des champs locaux tout en ne modifiant pas la convergence du schéma itératif pour ce type de problèmes. Pour illustration, le calcul numérique des contraintes et des déplacements (Figure) en élasticité homogène ou hétérogène est reporté pour des morphologies d'inclusion cubique ou sphérique et différentes déformations libres, Les résultats trouvés avec ces nouveaux opérateurs de Green discrets sont discutés et comparés aux solutions numériques [3] et analytiques [4,5].

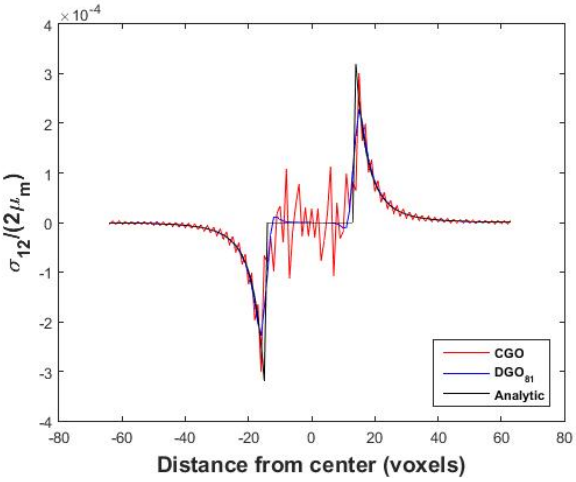


Figure 1 : Composante $\sigma_{12}/(2*\mu)$ du champ de contrainte suivant un axe central parallèle à l'axe x, due à une inclusion sphérique hétérogène contenant une déformation libre de contrainte $\varepsilon_{ij}^*(\varepsilon_{ij}^* = 0\ sauf\ \varepsilon_{11}^* = \varepsilon_{22}^* = \varepsilon_{33}^* = 0.005)$. Solution analytique, solution numérique avec opérateurs de Green continus (CGO) et discrets (DGO). Calculs avec 128×128×128 voxels.

Références

[1] H. Moulinec, P. Suquet, C. R. Acad. Sci Paris II 318, 1417-1423 (1994).
[2] H. Moulinec, P. Suquet, Comp. Meth. Appl. Mech. Eng. 157, 69-94 (1998).
[3] B.S. Anglin, R.A. Lebensohn, A.D. Rollet, Comp. Mater. Sci. 87, 209-2017 (2014).
[4] J. P. Hirth, J. Lothe, Theory of dislocations, Wiley, New York (1982).
[5] T. Mura, Micromechanics of Defects, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1987)

Poster

Effets de l'anisotropie élastique et de la rigidité des joints de grains sur les empilements de dislocations : calculs théoriques et caractérisations dans des bi-cristaux micrométriques

Xiaolei Chen[1,2], Stéphane Berbenni[1], Christian Motz[2], Thiebaud Richeton[1]

[1.] Laboratoire d'Étude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3), CNRS / Université de Lorraine, Metz, France

[2.] Department of Materials Science and Engineering, Saarland University, Saarbruecken, Germany

Cette étude concerne une approche analytique basée sur le formalisme de Stroh [1,2] qui fournit les champs élastiques pour des dislocations droites et différentes configurations d'empilement de dislocations dans des métaux et alliages anisotropes (Nickel, Cuivre, Laiton-α) homogènes, demi-espaces (cristal avec surface libre ou rigide), bi-cristaux et tri-matériaux [3] en élasticité anisotrope. En particulier, la configuration de tri-matériau est intéressante car elle permet de considérer une épaisseur non-nulle et une rigidité spécifique pour le joint de grains par rapport au simple bi-cristal pour étudier le mécanisme de transmission du glissement au joint en fonction de différentes anisotropies élastiques. Le calcul des positions de dislocations coins dans les empilements est effectué à l'aide d'un schéma de relaxation itératif qui minimise la force de Peach-Koehler sur chaque dislocation (voir Figure 1). Les effets de l'élasticité anisotrope, de l'orientation cristallographique, de la rigidité des joints de grains et des contraintes appliquées sont étudiés. En parallèle, des essais micromécaniques in situ de bi-cristaux micrométriques et des observations couplant MEB, AFM et EBSD sont réalisées. Tout d'abord, la méthode FIB (« focused ion beam » en anglais) est utilisé pour découper différents bi-cristaux CFC à partir de plaques poly-cristallines. Ensuite, les échantillons sont entaillés et déformés mécaniquement pour produire des bandes de glissement interagissant avec les joints de grain. Alternativement, la méthode de fissure de fatigue de stade I est utilisée pour tester les interactions entre dislocations et joint de grains (voir Figure 2). La distribution des dislocations est obtenue par mesure AFM des hauteurs de glissement. En comparant les calculs théoriques avec les résultats expérimentaux pour des métaux ayant des anisotropies élastiques différentes, les concentrations de contraintes en pointe d'empilement ainsi que la résistance de différents joints de grains peuvent être estimées et le rôle de l'élasticité anisotrope sur la transmission du glissement au joint de grains mieux compris.

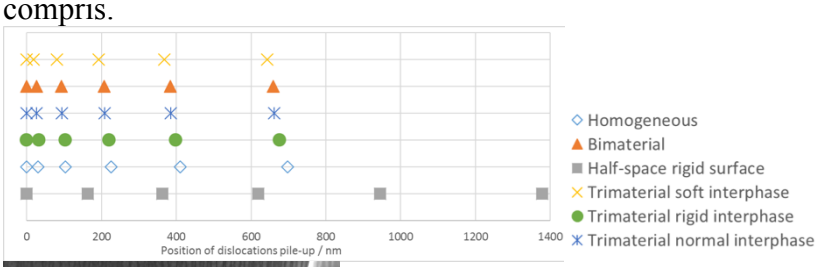


Figure 1 : Distribution des positions des dislocations pour un empilement de dislocations en milieu élastique anisotrope (Ni)

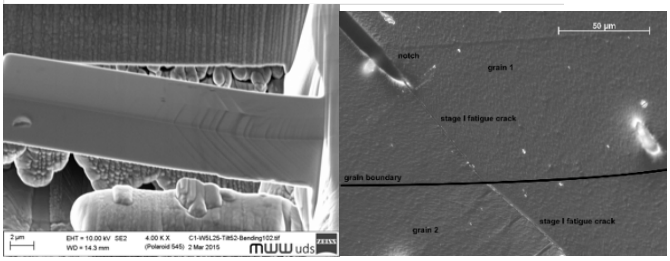


Figure 2 : (a) Poutre en porte-à-faux (cantilever) de bi-cristal micrométrique présentant des traces de glissement dans les deux grains et (b) fissure de fatigue de la phase I pénétrant dans un joint de grain et induisant une déformation plastique fortement localisée pour étudier la transmission du glissement

Références

[1] Stroh, A. N. Philos. Mag. 3, 625–646 (1958).
[2] Ting, T. C. T. Anisotropic Elasticity. Theory and Applications. Oxford University Press 1996.
[3] Choi, S. T. & Earmme, Y. Y. Int. J. Solids Struct. 39, 943–957 (2002).

Poster

Maclage dans les alliages de titane β-métastable superélastiques : particularités et origine

Philippe Castany[1], Emmanuel Bertrand[2], Edern Menou[2], Yang Yang[3], Thierry Gloriant[1]

[1]INSA de Rennes, UMR CNRS 6226 Institut des Sciences Chimiques de Rennes/Chimie-Métallurgie, 20 avenue des Buttes de Coësmes, 35708 Rennes, France, philippe.castany@insa-rennes.fr
[2]Institut des Matériaux Jean Rouxel (IMN), CNRS UMR 6502, Université de Nantes, 2 rue de la Houssinière, BP 32229, 44322 Nantes Cedex 3, France
[3]Fujian Institute of Research on the Structure of Matter, Chinese Academy of Sciences, 155 Yangqiao Road West, Fuzhou, Chine

Les alliages de titane β-métastable sont des matériaux prometteurs pour les applications biomédicales de part leur excellente biocompatibilité chimique et mécanique. Dans ces alliages, la phase β du titane, de structure cubique centrée, est retenue à température ambiante par l'ajout d'éléments d'addition betagènes choisis parmi ceux ne présentant pas de toxicité pour l'organisme (Nb, Ta, Zr, Mo…). Selon leur teneur, l'alliage obtenu peut être métastable et présenter des propriétés superélastiques dues à une transformation martensitique sous contrainte de la phase β vers la phase α" (orthorhombique C-centrée).
Lors de leur déformation plastique, ces alliages sont fréquemment sujet au maclage, avec la particularité de présenter un système de maclage original, le système {332}<113> qui ne se trouve pas dans les autres métaux et alliages de structure cubique centrée qui maclent selon le système {112}<111>. La raison de cette particularité a récemment été démontrée comme étant due à la réversion de macles se formant dans la martensite α" [1]. Néanmoins, de récents travaux sur un monocristal déformé en traction ont aussi montré la formation de macles {112}<111> [2], mais selon des variantes qui ne devraient pas se former en traction.
Par une combinaison de différentes techniques (essais de traction *in situ* sous rayonnement synchrotron, EBSD, MET), nous allons montrer que ces deux systèmes de maclage sont dus à la réversion de macles formées sous contrainte dans la phase α", ce qui explique leurs particularités. De plus, une fine couche de phase ω a systématiquement été observée le long des parois de macle. Nous avions supposé initialement que cette phase se formait lors de la transformation inverse α" vers β afin d'accommoder les fortes contraintes générées lors de cette transformation, ce que nous avons pu confirmer récemment à partir d'essais de traction cyclique *in situ* sous rayonnement synchrotron sur monocristal.

Références

[1] P. Castany, Y. Yang, E. Bertrand and T. Gloriant, Physical Review Letters **117**, 245501 (2016).
[2] Y. Yang, P. Castany, E. Bertrand, M. Cornen, J.X. Lin, T. Gloriant, Acta Materialia, in press.

Poster

Application de la cartographie d'orientation Haute Résolution en MET à l'étude de la plasticité des phases du manteau inférieur de la terre

Billy Nzogang [1], Jérémie Bouquerel[1], Alexandre Mussi[1], Jennifer Girard[2], Shun-Ichiro Karato[2], Patrick Cordier[1]

[1]UMET, Université de Lille/ENSCL, Villeneuve d'Ascq France
[2]Yale University, New Haven, USA

Les vastes mouvements de convection qui brassent l'intérieur de notre planète, impliquent l'écoulement à l'état solide des minéraux qui la constitue. Le manteau inférieur composé de roches solides sous haute pression, s'étend jusqu'à 2900 Km de profondeur et est constitué majoritairement d'un silicate de magnésium et de fer (ou Calcium) de structure pérovskite qu'on appelle couramment bridgmanite, accompagnée d'un oxyde de magnésium et de fer, le ferropériclase. Les développements récents dans le domaine de l'expérimentation sous haute pression ont permis récemment de réaliser les premières expériences de déformation plastique, en torsion, d'assemblages de bridgmanite et de ferropériclase dans les conditions du manteau inférieur (Girard *et al.* 2016). Ici nous présentons l'analyse d'un échantillon déformé à 27 GPa et 2130K.Les forts taux de déformation impliqués dans cet échantillon (proches de 100%) ainsi que la forte sensibilité à l'irradiation électronique ne permettent pas une étude classique des microstructures de déformation par les techniques classiques de microscopie électronique en transmission. Pour pallier à ce problème, nous analysons des cartographes orientations haute résolution à partir d'acquisitions réalisées via le système ASTAR-Nanomegas en MET. Nous utilisons ensuite des cartes de désorientations locales développées en EBSD pour étudier les phénomènes locaux de plasticité.

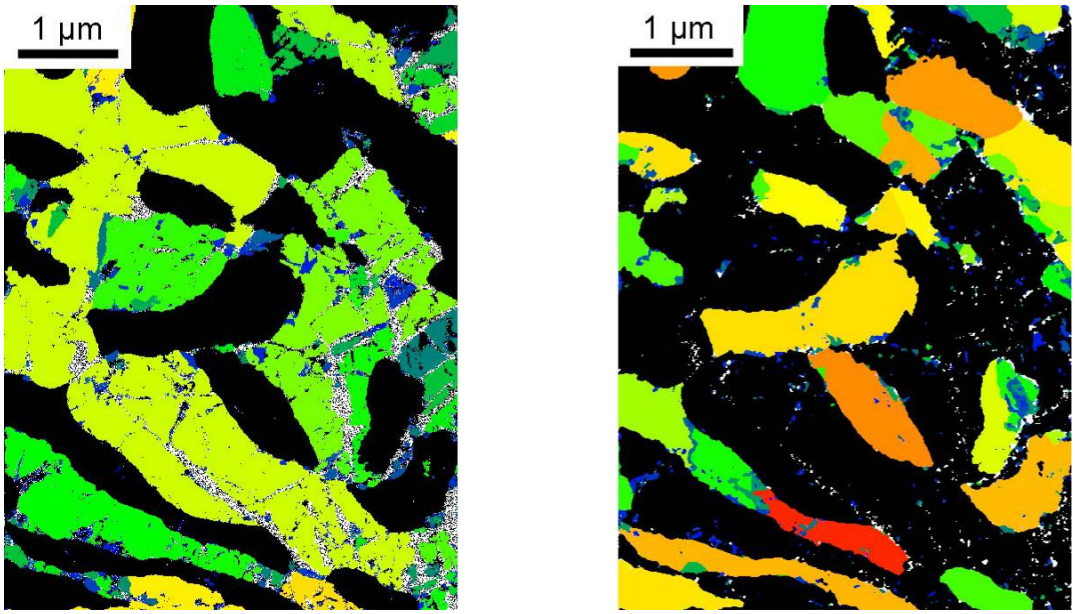


Figure 1 : GOS (Grain Orientation Spreading) comparatives des deux phases : bridgmanite à gauche et ferropériclase à droite.

Références

Jennifer Girard, George Amulele, Robert Farla, Anwar Mohiuddin, Shun-ichiro Karato (2016) Shear deformation of bridgmanite and magnesiowüstite aggregates at lower mantle conditions. Science, 08 Jan 2016: 144-147

Poster

Influence de la répartition des pores intra-granulaires sur le comportement visco-plastique de l'UO_2

Mariem Ben Saada[1,2], Nathalie Gey[1], Benoit Beausir[1], Xavière Iltis[2], Nabila Maloufi[1]

[1] Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3), UMR CNRS 7239, Université de Lorraine, 57045 Metz Cedex 1, France
[2] CEA, DEN, DEC, Cadarache, 13108 Saint-Paul-Lez-Durance, France

Le dioxyde d'uranium (UO_2) est utilisé en tant que combustible nucléaire, sous forme de pastilles élaborées par métallurgie des poudres. Dans les réacteurs nucléaires, lors de transitoires de puissance, le centre des pastilles est le siège de mécanismes de déformation viscoplastique pouvant être partiellement reproduits, hors irradiation, par des essais de fluage en compression uniaxiale à haute température (typiquement 1500°C) [1]. Diverses études pointent l'influence des conditions de sollicitation et de la microstructure initiale des pastilles d'UO_2 sur leur comportement mécanique macroscopique. Cependant, parmi les paramètres microstructuraux, le rôle de la porosité et surtout sa distribution au sein des grains a été peu étudié. Plus largement, les mécanismes de déformation à l'échelle d'un ensemble de grains restent à approfondir.

Aussi l'objectif de cette étude a été d'évaluer le rôle des pores intragranulaires sur le comportement visco-plastique de l'UO_2. Deux lots de pastilles de même taille de grains et de même fraction volumique de pores, mais avec un ratio « pores intra-/inter-granulaires » différent ont été fabriqués et soumis à des essais de fluage. Les microstructures de déformations ont été caractérisées par une méthodologie originale développée récemment pour l'UO_2. Elle associe deux techniques complémentaires : l'EBSD (Electron Back Scattered Diffraction) et l'imagerie des défauts cristallins sur matériau massif par ECCI (Electron Channeling Contrast Imaging) [2]. L'EBSD a permis de détecter de manière fiable les sous-joints de grains de très faibles désorientations créés lors de la déformation, et de mener une étude statistique de l'évolution de la sous-structure en lien avec la porosité intragranulaire. De plus, l'ECCI a permis d'imager les dislocations induites par la déformation au sein d'un grand nombre de grains ainsi que leur arrangement en sous-joints en interaction avec les pores (Figure 1).

Les résultats montrent que, pour des conditions identiques de sollicitation, le lot à forte porosité intragranulaire présente une vitesse de fluage plus faible. Il se particularise aussi par des différences en terme de nombre et de répartition des sous-joints au sein des grains. Ces différences seraient liées à un effet d'épinglage des dislocations par les pores.

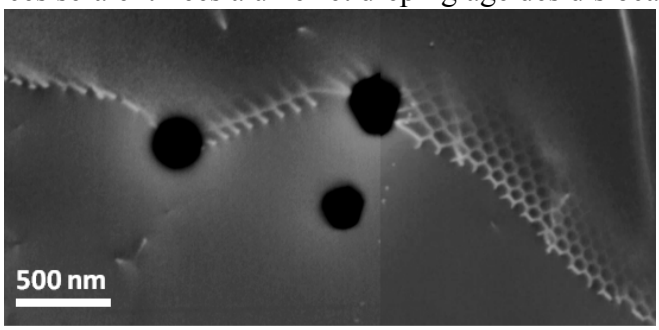


Figure 1 : *Micrographie ECCI illustrant les interactions entre pores et sous-joints de grain.*

Références :
[1] X. Iltis, N. Gey, C. Cagna, A. Hazotte, Ph. Sornay, J. Nucl. Mat. 456 (2015) 426-435.
[2] M. Ben Saada, N. Gey, B. Beausir, X. Iltis, H. Mansour, N. Maloufi, Mater. Charact., 133 (2017) 112–121.

Poster

Etude expérimentale des mécanismes de fermeture des pores par CIC dans un superalliage monocristallin CMSX4

M. F. Ijaz[1], B. Viguier[1], D. Poquillon[1], A. Epishin[2], B. Fedelich[3], T. Feldmann[3], A.Ruffini[4], Y. LeBouar[5], A. Finel[5]

[1] CIRIMAT/ Université de Toulouse, France ;
[2] Technical University of Berlin, Germany
[3] Federal Institute for Materials Research and Testing (BAM), Berlin, Germany
[4] UMET, Université de Lille, France
[5] Laboratoire d'Etude des Microstructures, CNRS/ONERA (LEM), Châtillon, France

Les aubes de turbines à gaz utilisées en particulier pour les turboréacteurs de l'aéronautique sont élaborées par fonderie en superalliage monocristallin à base de nickel. Le procédé de fonderie, ainsi que les traitements thermique d'homogénéisation réalisés à très haute température, induisent la présence de pores au sein des pièces qui affectent les propriétés mécaniques et la durée de vie des aubes. Afin de réduire cette porosité les motoristes effectuent un traitement de compression isostatique à chaud (CIC) au cours duquel la porosité diminue par fermeture des pores. Afin de mieux comprendre les mécanismes impliqués au cours du traitement de CIC, nous avons lancé un programme de recherche dans le cadre du projet ERA-Net MICROPORE. La modélisation par champ de phase des mécanismes en jeu est présentée au cours de ce colloque [1]. Nous présentons dans cette affiche un des volets de la caractérisation expérimentale du projet.

Des échantillons de superalliage CMSX4 sont observés après traitement de mise en solution et CIC sous 103 MPa à 1288°C pour différentes durées. Les pores présents sont caractérisés par microscopie électronique à balayage (MEB) afin de suivre l'évolution du taux de porosité au cours du traitement. Une caractérisation plus détaillée de pores partiellement refermés est menée par MEB et grâce à la diffraction des électrons rétrodiffusés (EBSD). Une vision tridimensionnelle de ces défauts est obtenue par des coupes métallographiques effectuées par découpe ionique (FIB).

Le projet ERA – Net MICROPORE est financé en Allemagne par la DFG (projects EP 136/1-1 and FE933/2-1) et en France par l'ANR (projects ANR15-MERA-000-03 and ANR15-MERA-0003-04).

Références

[1] A. Ruffini et al., présentation orale, ce colloque (2018).

Colloque PLASTICITE 2018 - Nancy, 9-11 Avril

Lundi 9

10:00-12:00 *Accueil*
12:00-14:00 *Déjeuner*

14:00-14:20 **Ouverture du colloque**, Mots de bienvenue de T. Belmonte et L. Toth
14:20-15:00 **X. Sauvage (invité)** Evolutions microstructurales sous déformations plastiques intenses et conséquences sur les propriétés mécaniques
15:00-15:20 **M. Legros** Grain Boundary crack openings during metallization aging in power MOSFETs
15:20-15:40 **E. Bertrand** Déformation par maclage – ou antimaclage ? - d'un monocristal d'alliage de titane β-métastable superélastique
15:40-16:00 **B. Nzogang** Characterization of dislocations in minerals by Scanning Electron Diffraction in the TEM

16:00-16:40 *Pause café*

16:40-17:20 **A. Rollett (invité)** Characterization of the Micromechanical Evolution of Ti-7Al Under Cyclic Loading Using High Energy X-Ray Diffraction Microscopy
17:20-17:40 **A. Guitton** A dislocation-scale characterization of the evolution of deformation microstructures around nanoindentation imprints in TiAl
17:40-18:00 **F. Pettinari-Sturmel** Etude par MET des micromécanismes de déformation en fluage dans le superalliage AD730
18:00-18:20 **G. Hachet** Etude multi-échelle de l'influence de l'hydrogène sur les structures hétérogènes de dislocations induites par la fatigue du nickel monocristallin

18:20-20:00 **Session posters**

Mardi 10

8:30-8:40 Mot de F. Rousseau
8:40-9:20 **L. Laiarinandrasana (invité)** Imagerie 3D par tomographie sur les polymères semi-cristallins, dialogue expérience/modélisation à l'échelle locale.
9:20-9:40 **A. Létoffé** Étude de la transition fragile/ductile d'une matrice iPP-g-MAH modifiée par différents types de polyétherdiamine.
9:40-10:00 **M. Donnay** Mécanismes de déformation en traction de films de PET semi-cristallins orientés étudiés par WAXS/SAXS avec rayonnement synchrotron *in situ*
10:00-10:20 **P. Lafourcade** Analyse du comportement en compression d'un cristal moléculaire : Une étude de Dynamique Moléculaire

10:20-11:00 *Pause café*

11:00-11:20 **O. Hardouin Duparc** Mieux enchaîner les icosaèdres dans les carbures de bore pour les renforcer
11:20-11:40 **E. Maras** Modélisation du glissement secondaire des dislocations vis <a> dans le zirconium
11:40-12:00 **A. Soulié** Plasticité induite par glissement thermiquement activé dans le dioxyde d'uranium
12:00-12:20 **L. Portelette** Viscoplasticité du monocristal d'UO2 avec matrice d'interaction entre systèmes de glissement calibrée par Dynamique des Dislocations

12:20-14:00 *Déjeuner*

14:00-14:40 **L. Capolungo (invité)** Integrated computational mechanics: perspectives.
14:40-15:00 **J. Chevy** Défis techniques et leviers liés à la localisation de la déformation dans les alliages d'aluminium à haute performance
15:00-15:20 **S. Berbenni** Fast Fourier Transform micromechanical modeling of interfacial defects mechanical fields and applications
15:20-15:40 **M.A. Lebyodkin** Correlation of dislocation avalanches in the low strain-rate regime of jerky flow

15:40-16:20 *Pause café*

16:20-16:40 **A. Ask** A Cosserat crystal plasticity and phase field model for recrystallization
16:40-17:00 **P. Hirel** Étude systématique de joints de grains dans MgO et leur évolution à très haute pression
17:00-17:20 **A. Kraych** Effet des contraintes non-glissiles sur l'anisotropie plastique du tungstène
17:20-17:40 **F. Willaime** Effet des solutés interstitiels sur la structure de cœur et la mobilité des dislocations dans les métaux cubiques centrés

17:40-18:40 **Visite IJL** (sur inscription)

20:00 **Diner de Gala**

Mercredi 11

8:30-9:10 **D. Gloaguen (invité)** Apport des grands instruments pour l'étude du comportement mécanique des matériaux hétérogènes
9:10-9:30 **R. Purushottam Raj Purohit** Insights into deformation mechanism of Ni microwires: synergy between experiment and simulation
9:30-9:50 **J. L. Dequiedt** Localisation de la déformation plastique dans une plaque en traction biaxiale : apport de la plasticité cristalline
9:50-10:10 **T. Auger** Couplage entre plasticité et rupture : le rôle des transformations de phase dans la rupture des aciers austénitiques induite par un métal liquide

10:10-10:50 *Pause café*

10:50-11:10 **R. Candela** Influence du carbone sur une boucle d'auto-interstitiels dans le fer par simulations à l'échelle atomique
11:10-11:30 **A. Ruffini** Modélisation champ de phase du comblement des pores par montée de dislocations dans les superalliages à base nickel
11:30-11:50 **A. M. Goryaeva** On the role of amorphous shells on mechanical properties of fcc Ni nanoparticles under compression
11:50-12:10 **M. Guillotte** Etude du comportement mécanique de nanofils coeur@coquille or@silicium au cours de cycles traction-compression par dynamique moléculaire
12:10-12:20 **Fermeture du colloque**
12:20-14:00 *Déjeuner*