



# PLASTICITÉ 2016

Poitiers, 11-13 avril

## Recueil des résumés



# PLASTICITÉ 2016

11-13 avril, Poitiers

## Comité d'organisation

Joël	Bonneville
Sandrine	Brochard
Julien	Durinck
Julien	Godet
Anne	Joulain
Bouzid	Kehdjar
Xavier	Milhet
Béatrice	Péguin
Laurent	Pizzagalli
Jacques	Rabier
Ludovic	Thilly
Christophe	Tromas

Institut Pprime, Département Physique et Mécanique des Matériaux

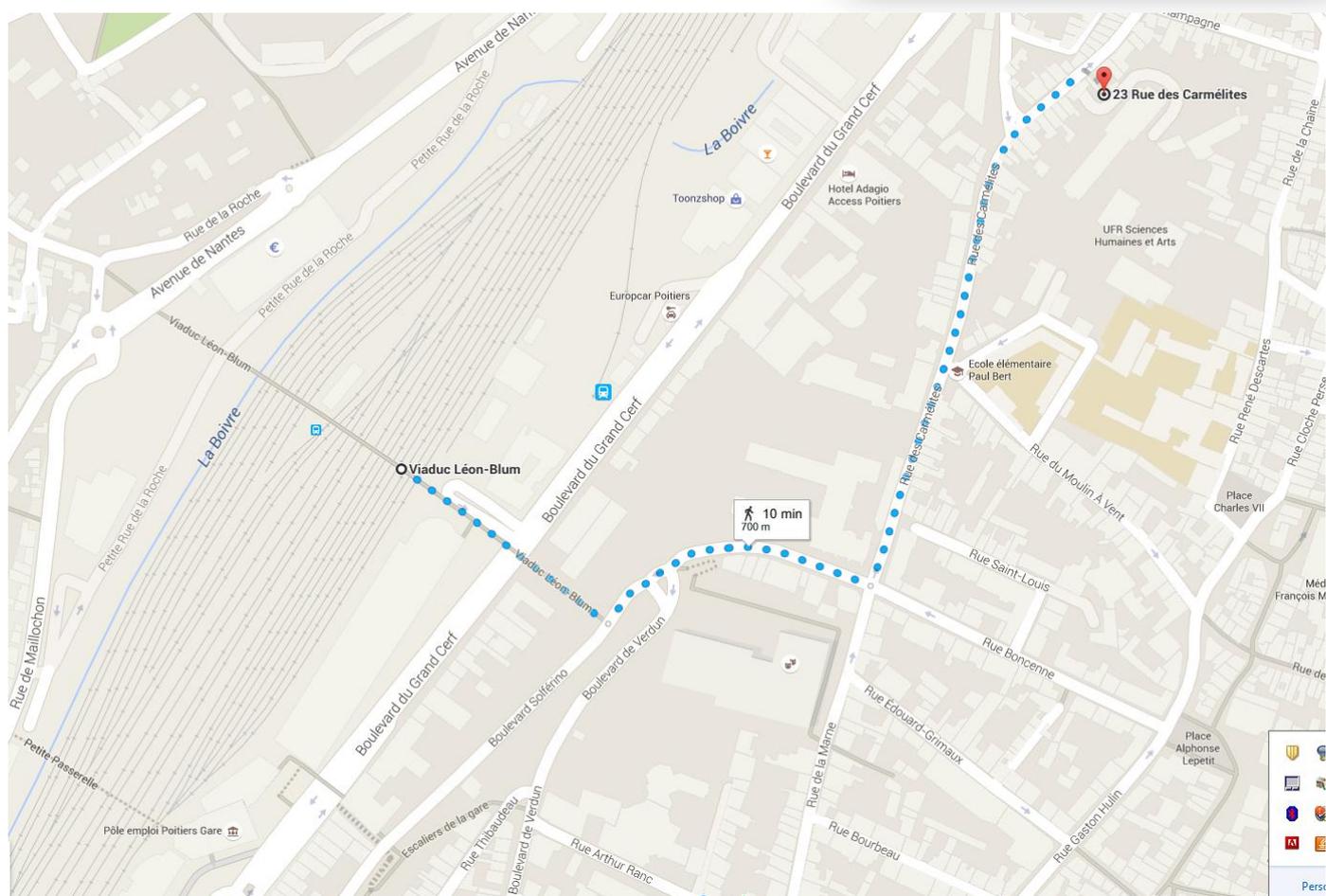
UPR 3346 CNRS - Université de Poitiers - ISAE-Ensma

## QUELQUES ITINÉRAIRES UTILES

Le colloque Plasticité 2016 se tiendra dans l'amphi Descartes de l'UFR Sciences Humaines et Arts (SHA), situé dans le centre-ville de Poitiers.

### POUR SE RENDRE À LA CONFÉRENCE DEPUIS LA GARE DE POITIERS:

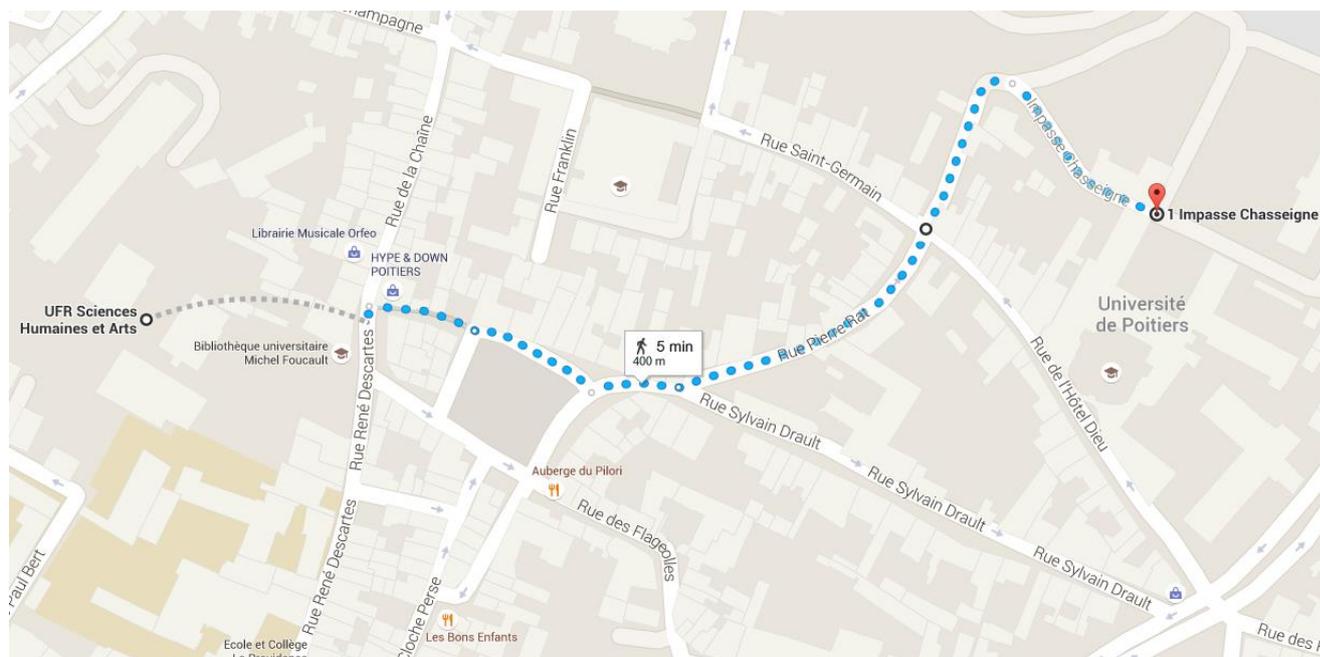
Sortir de la gare par l'espace Toumaï, puis par la passerelle Léon Blum au dernier étage du parking. Suivre le chemin ci-dessous jusqu'au 23, rue des Carmélites





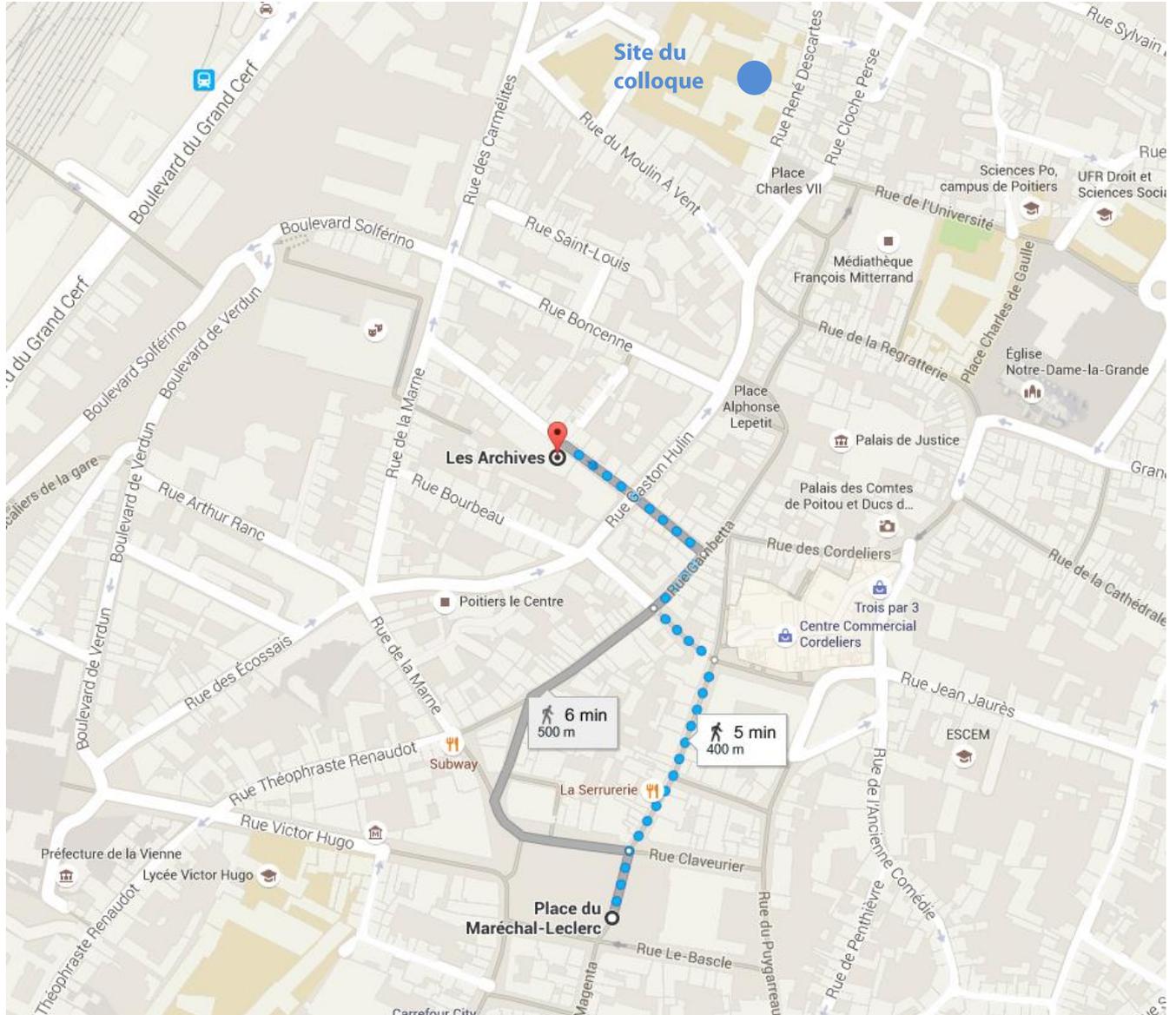
## POUR SE RENDRE AU RESTAURANT ADMINISTRATIF LE MARDI ET LE MERCREDI MIDI

Les déjeuners du mardi et du mercredi auront lieu au restaurant administratif de la présidence de l'Université. Le restaurant est à 5 minutes à pieds du site de la conférence (voir ci-dessous). L'accès au restaurant se fait soit par la cour d'entrée de la présidence, rue de l'Hôtel Dieu), soit par l'impasse Chasseigne ( cf plan). Dans ce dernier cas, l'entrée est à droite de la pyramide en verre (le Louvre, en plus modeste...)

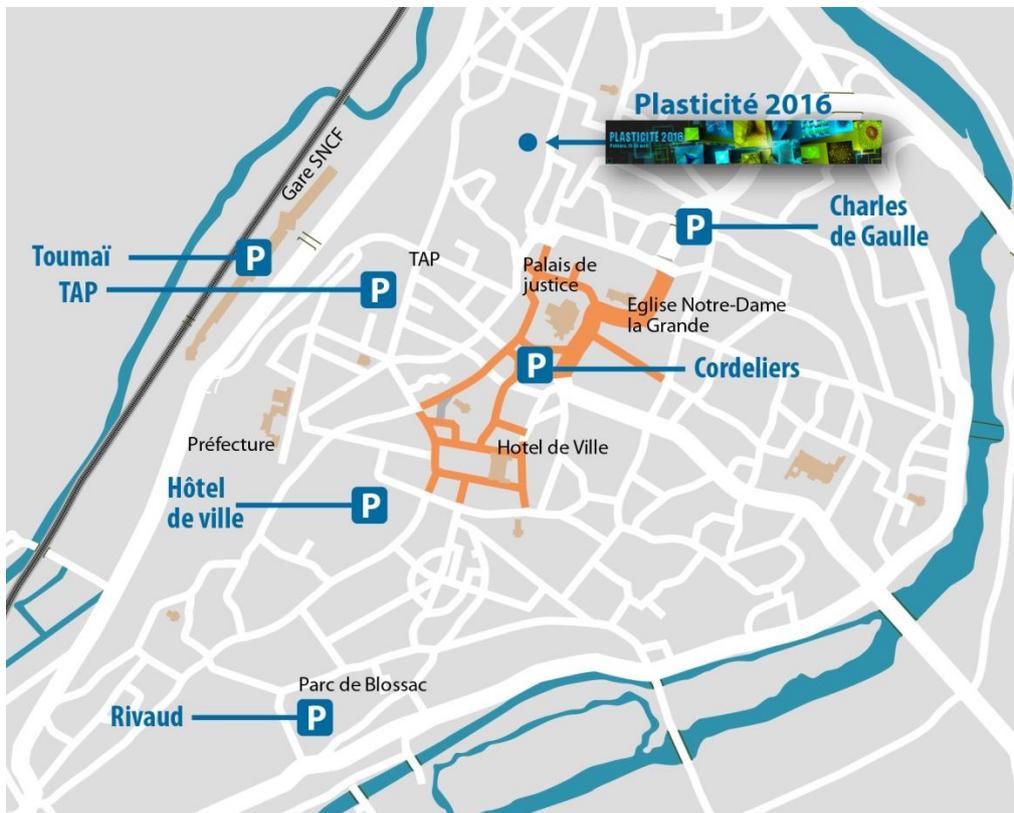
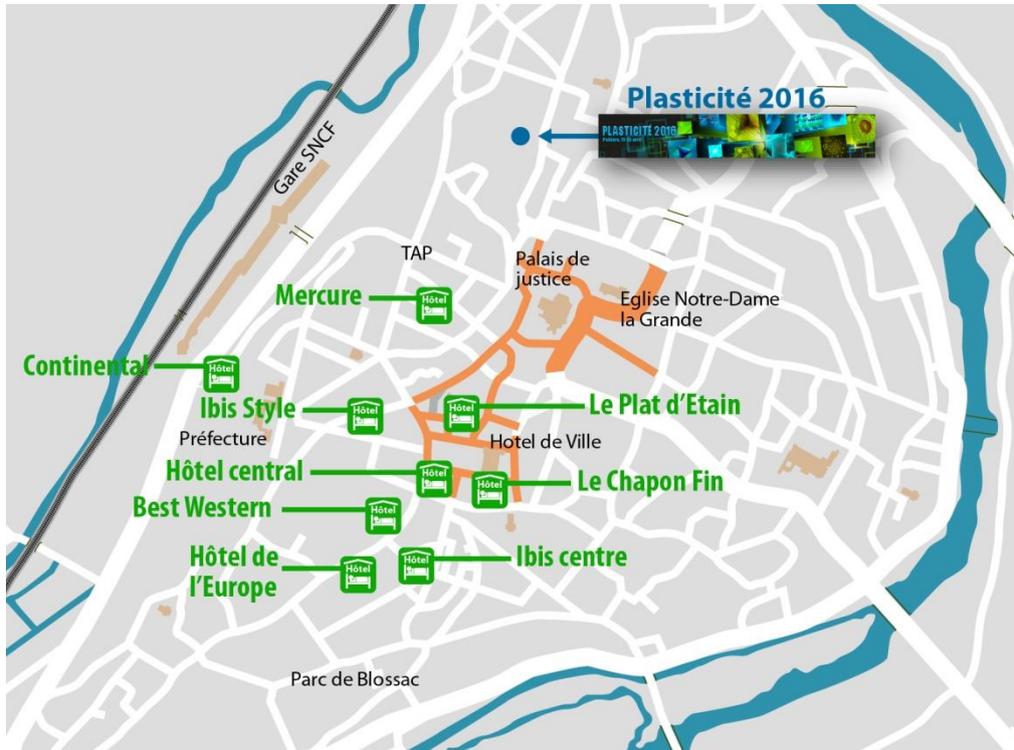


## POUR SE RENDRE AU RESTAURANT LES ARCHIVES POUR LE DINER DU MARDI SOIR

Le restaurant est situé au 14 Rue Édouard-Grimaux, à côté de l'Hôtel Mercure. Le restaurant est à 5 minutes à pieds de la Place du Maréchal Leclerc



## ET SI VOUS AVEZ PERDU VOTRE HÔTEL OU VOTRE VOITURE...



# Programme Plasticité 2016

---

## Communications orales

---

### Lundi 11 avril

---

14h00 : Ouverture colloque

---

- 14h05 : **Emmanuel Clouet (Invité)** - Modélisation ab initio de la mobilité des dislocations vis dans le zirconium et le titane 1
- 14h50 : **Benjamin Douat** - Etude de la configuration de cœur des dislocations vis dans le niobium par microscopie à champ proche 2
- 15h10 : **Frédéric Houllé** - Molecular dynamics study of diffusion along edge dislocations in Al 3
- 15h30 : **Emile Maras** - Étude des mécanismes de formation d'une dislocation coin dans une couche mince Ge/(001)Si par modélisation à l'échelle atomique 4

---

15h50 : Pause café

---

- 16h20 : **Antoine Ruffini** - Méthodes continues pour l'étude de l'annihilation de pores par flux plastique dans des matériaux cubiques à faces centrées 5
- 16h40 : **Nadia Ben Dahmane** - Cloquage des films minces ductiles 6

---

17h00 : Session posters

---

### Mardi 12 avril

- 09h00 : **Thomas Schenk (Invité)** - Plasticité haute température de la phase  $\gamma'$  d'un superalliage monocristallin durant des essais in-situ en rayonnement synchrotron 7
- 09h45 : **Hannah Sommer** - Creep investigation and microstructural evolution in a polycrystalline nickel base superalloy 8
- 10h05 : **Catherine Gardin** - Fermeture induite par plasticité sous chargement cyclique : prédiction numérique de la forme du front de fissure 9
- 10h25 : **Gulzar Seidametova** - AFM topographic investigation of the cyclic plasticity of martensitic steel 10

---

10h45 : Pause café

---

- 11h15 : **Olivier Hardouin Duparc** - Les origines des notations dans le mâclage mécanique 11
- 11h35 : **Romuald Béjaud** - Simulation numérique de la formation et l'extension de macle dans des films minces métalliques 12
- 11h55 : **Pierre Hirel** - De glissile vers sessile : la transition ductile-fragile dans les perovskites 13

<b>12h15</b> : <b>Jonathan Amodeo</b> - Simulation multi-échelles et polycristalline de la déformation de MgO à haute-pression	14
<hr/>	
<b>13h00</b> : Repas restaurant administratif	
<hr/>	
<b>14h30</b> : <b>Laurence Ramos(Invitée)</b> - Plasticity and onset of yielding of a soft colloidal gel	15
<b>15h15</b> : <b>Tarik Sadat</b> - Comportement mécanique de structures harmoniques Ti-6Al-4V	16
<b>15h35</b> : <b>Nicolas Gueninchault</b> - Etude tridimensionnelle des premiers stades de la plasticité dans un polycristal par toptomographie synchrotron et simulation par éléments finis	17
<b>15h55</b> : <b>Lu Tuan Le</b> - Un modèle de plasticité cristalline considérant le transport des dislocations géométriquement nécessaires sur les systèmes de glissement : application aux mono- et multi-cristaux de glace	18
<hr/>	
<b>16h15</b> : Pause café	
<hr/>	
<b>16h45</b> : <b>Pascale Corne</b> - Etude des mécanismes de dégradation au sein des implants dentaires	19
<b>17h05</b> : <b>Emmanuel Bertrand</b> - Mécanismes de déformation d'un alliage de titane à mémoire de forme	20
<b>17h25</b> : <b>Sameh Guellouz</b> - Etude du comportement plastique des matériaux en feuilles en acier 18-10 soumis à des sollicitations particulières	21
<hr/>	
<b>17h45</b> : <b>Session posters</b> / Temps libre	
<hr/>	
<b>20h00</b> : Repas de Gala	
<hr/>	

### Mercredi 13 avril

<b>09h15</b> : <b>Andreas Mortensen(Invité)</b> - Déformation de microfils en aluminium coulé	22
<b>10h00</b> : <b>Wilgens Sylvain</b> - Plasticité du monocristal de phase MAX par déformation aux petites échelles	23
<b>10h20</b> : <b>Amina Merabet</b> - Etude des défauts étendus produits par la compression de nanopiliers de silicium à température ambiante	24
<b>10h40</b> : <b>Diana Courty</b> - L'implantation de Ga, un facteur qui limite l'évaluation de contraintes par une méthode de FIB	25
<hr/>	
<b>11h00</b> : Pause café	
<hr/>	
<b>11h30</b> : <b>Akrum Abdul-Latif</b> - Mechanical behavior of heterogeneous polycrystals and their size dependency	26
<b>11h50</b> : <b>Laurent Korzeczek</b> - Etude Mésoscopique en 3D de la Mécanique des Fissures Courtes dans les Matériaux Ductiles	27
<b>12h10</b> : <b>Xavier Feaugas</b> - Plasticité/hydrogène dans les métaux c.f.c. impact sur l'hétérogénéité et la localisation de la déformation	28
<hr/>	
<b>13h00</b> : Repas restaurant administratif	
<hr/>	

---

## Posters

---

<b>Anne-Sophie Vaillant</b> - Effet des recouées successives sur le comportement mécanique d'alliages dentaires de type Co-Cr	29
<b>Philippe Castany</b> - Origine du maillage $\{332\}$ $\langle 113 \rangle$ dans les alliages de titane $\beta$ -métastable	30
<b>Christophe Coupeau</b> - Les traces de glissement : signature fiable de la plasticité des matériaux cristallins?	31
<b>Romain Boijoux</b> - Influence de l'élasticité du substrat sur l'endommagement en front de délaminage des structures de cloquage de films minces	32
<b>Guillaume Laplanche</b> - Maillage dans l'alliage de haute entropie CrMnFeCoNi	33
<b>Olivier MacKain</b> - Étude à l'échelle atomique des disconnexions dans le zirconium	34
<b>Aurélié Joseph</b> - Etude de la microstructure et des propriétés mécaniques de composites Al/Al-Cu-Fe synthétisés par frittage flash	35
<b>Selim Bel Haj Salah</b> - Simulation atomistique du comportement de nanoparticules métalliques cubiques à faces centrées sous compression uniaxiale	36
<b>Amel Samet</b> - Etude des mécanismes de recristallisation dans un acier IF-Ti après faible déformation par laminage ou par traction	37
<b>Marc Legros</b> - Plasticité liée au couplage migration/cisaillement dans les joints de grain	38
<b>Abdelali Oudriss</b> - Influence des hétérogénéités de déformation sur la diffusion et le piégeage de l'hydrogène dans le nickel monocristallin (100)	39
<b>Amna Znaidi</b> - Stratégie d'identification des lois de comportement des matériaux métalliques à partir de leurs microstructures	40
<b>Alain Jacques</b> - Contraintes internes, dislocations, et diffraction : un essai de modélisation	41
<b>Sameh Guellouz</b> - Simulation numérique d'anisotropie induite dans les matériaux polycristallins : approche micro-macro	42
<b>Bouid Kedjar</b> - Mise en forme et plasticité des tubes de gainage combustible en acier austénitique 15-15Ti AIM1	43
<b>Claude Fressengeas</b> - Continuous modeling of grain boundaries using a field theory of dislocations and generalized disclinations	44
<b>Yves-Patrick Pellegrini</b> - Fast dislocations in anisotropic media : causality and Mach cones in the Stroh formalism	45
<b>Julien Guérolé</b> - Influence of intrinsic strain on irradiation induced damage	46
<b>Ingrid Proriol</b> - Effet du gallium liquide sur la plasticité de l'alliage d'aluminium 2017 et de l'acier inoxydable 316L	47
<b>Emile Maras</b> - Optimisation globale de chemins de transition appliquée à l'étude de la formation de dislocations dans une couche mince de Ge/(001)Si	48
<b>Ronan Madec</b> - Les interactions entre systèmes de glissement CFC et CC revisités	49
<b>Zhengxuan Fan</b> - Molecular dynamics simulation of surface cyclic slip irreversibility in vacuum and in oxygen environment in fcc metals	50
<b>Nicolas Bello</b> - Un alliage d'aluminium résistant en température pour l'allègement de structure?	51
<b>Bérengère Luthi</b> - Stabilisation du cœur difficile des dislocations vis par des solutés interstitiels dans les métaux cubiques centrés	52
<b>Francesca Boioli</b> - The role of climb in the plastic deformation of Earth's materials	53
<b>Billy Clifton Nzogang</b> - Etude des dislocations dans la cémentite par tomographie électronique	54
<b>Céline Varvenne</b> - Theory of strengthening in high entropy alloys	55
<b>Paul Lafourcade</b> - Modélisation multiéchelle du 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene et exploration de ses mécanismes de plasticité	56
<b>Sylvie Lartigue-Korinek</b> - Interfaces et défauts dans des eutectiques oxyde-oxyde obtenus par solidification dirigée	57

<b>Héloïse Vigié</b> - Comportement mécanique et évolutions microstructurales de l'alliage de Titane b21S après traitements thermiques de vieillissement sous air	58
<b>Julien Dérès</b> - Initiation de la plasticité induite par une bulle d'hélium dans les matériaux covalents	59
<b>Jean-Baptiste Giouse</b> - Mécanismes d'adhésion d'un revêtement obtenu par projection par flamme supersonique (high velocity oxy-fuel HVOF) : étude des propriétés mécaniques et de la microstructure des interfaces	60
<b>Guillaume Hachet</b> - Influence de l'hydrogène sur les propriétés d'élasticité du nickel monocristallin	61
<b>Vanessa Verbeke</b> - Unraveling dislocation collective properties with dislocation dynamics simulations for continuous modeling	62
<b>Pierre-Antoine Geslin</b> - Modélisation multi-échelle de la montée des dislocations	63
<b>Nicolas Pouvreau</b> - Comportement mécanique de films minces Cu/W nano feuillets sous chargement biaxial cyclique ou monotone : Etude in situ par diffraction synchrotron	64
<b>V. Caccuri</b> - Propriétés mécaniques de l'argent fritté nanoporeux au cours du vieillissement	65
<b>Samuel Hémerly</b> - Activation du glissement dans les colonies de Ti-6Al-4V : Rôle des interfaces $\alpha/\beta$	66
<b>Winnie Vultos</b> - Influence de la microstructure sur les mécanismes de déformation en fluage dans le super-alliage polycristallin AD730™	67
<b>Jean-Rony Médy</b> - Evaluation des effets de taille et d'architecture sur les propriétés mécaniques de composites cuivre/niobium filamentaires (Cu/Nb-F) par caractérisation EBSD et tests de déformation in-situ couplés à la diffraction de neutrons	68

# Modélisation ab initio de la mobilité des dislocations vis dans le zirconium et le titane

*E. Clouet<sup>1</sup>, N. Chaari<sup>1</sup> et D. Rodney<sup>2</sup>*

1 - CEA, DEN, Service de Recherches de Métallurgie Physique, F-91191 Gif-sur-Yvette

2 - Institut Lumière Matière, UMR5206 Université de Lyon 1 – CNRS, F-69622 Villeurbanne

Le titane et le zirconium ont un comportement plastique très proche trouvant son origine dans leur structure cristallographique, hexagonale compacte, commune, ainsi que dans une structure électronique voisine. La plasticité dans ces deux métaux de transition est contrôlée par les dislocations vis de vecteur de Burgers  $\langle a \rangle$  glissant principalement dans les plans prismatiques de la maille hexagonale, avec du glissement dévié activé à suffisamment haute température vers les plans pyramidaux et les plans basaux. Une très forte dépendance de la contrainte d'écoulement avec la teneur en oxygène est également observée dans ces deux métaux.

Nous avons utilisé les calculs ab initio pour modéliser les propriétés de cœur des dislocations vis dans le titane et le zirconium et étudier leur mobilité. Ces calculs montrent que la dislocation vis peut adopter différentes configurations, se dissociant dans un plan soit prismatique, soit pyramidal, en accord avec les fautes d'empilement existant dans chacun de ces plans [1, 2]. Une inversion de stabilité est observée entre le zirconium et le titane, le cœur le plus stable étant prismatique dans Zr et pyramidal dans Ti. Alors que le cœur prismatique peut facilement glisser dans son plan d'habitat, le cœur pyramidal doit franchir une barrière énergétique importante pour avancer d'une vallée de Peierls. Ceci conduit dès lors à un glissement facile et confiné dans les plans prismatiques à basse température dans Zr, et à un glissement opérant par blocage-déblocage dans Ti, les événements de blocage correspondant à un glissement lent et limité dans les plans pyramidaux et les événements de déblocage à un glissement rapide sur une longue distance dans les plans prismatiques. Ceci est en parfait accord avec les observations réalisées en microscopie électronique à transmission au cours d'essais de traction in situ dans le zirconium et le titane de haute pureté [3].

L'étude ab initio de l'interaction avec un atome d'oxygène a ensuite été entreprise pour chacune des configurations possibles de la dislocation vis. Ces simulations mettent en évidence une forte répulsion, avec l'oxygène repoussant le ruban de faute d'empilement et conduisant ainsi à un événement localisé de glissement dévié. Le même comportement est obtenu avec les autres solutés (C, N et S) pouvant également résider dans les sites interstitiels du zirconium ou du titane.

## Références

- [1] N. Chaari, E. Clouet et D. Rodney, First-principles study of secondary slip in zirconium, *Phys. Rev. Lett.* 112, 075504 (2014).
- [2] N. Chaari, E. Clouet et D. Rodney, First order pyramidal slip of  $1/3 \langle 1-210 \rangle$  screw dislocations in zirconium, *Metall. Mater. Trans. A* 45, 5898 (2014).
- [3] E. Clouet, D. Caillard, N. Chaari, F. Onimus et D. Rodney, Dislocation locking versus easy glide in titanium and zirconium, *Nature Materials* 14, 931 (2015).

# Etude de la configuration de cœur des dislocations vis dans le niobium par microscopie à champ proche

*B. Douat, C. Coupeau, J. Bonneville, M. Drouet, J. Durinck, J. Colin et J. Grillé*

INSTITUT P', Université de Poitiers - UPR 3346 CNRS - ISAE-ENSMA - SP2MI - Téléport 2 - 11 Bd M. et P. Curie, BP 30179 F86962 FUTUROSCOPE CHASSENEUIL Cedex

Bien qu'étudiée depuis plus d'un demi-siècle, la déformation plastique des matériaux cubiques à corps centré (bcc) est encore actuellement l'objet de nombreux débats et controverses. Il semble maintenant bien établi que celle-ci résulte d'un mécanisme de paire de décrochements contrôlant le mouvement des dislocations vis, les dislocations coins étant toujours plus mobiles. Il est clair que ce mécanisme est intimement lié à la structure de cœur de ces dislocations. Les simulations atomistiques, *ab-initio*, suggèrent que les dislocations vis ont une structure de cœur non-dégénéré. Cette structure semble cependant pouvoir changer avec la contrainte et les impuretés, notamment en une structure de cœur dégénéré. Les paires de décrochements ne se forment a priori que sur les plans  $\{110\}$ , mais suivant la configuration de cœur de la dislocation vis ceux-ci se forment successivement sur le même plan (110), cas du cœur non-dégénéré, ou alternativement sur deux plans  $\{110\}$  en zone, cas du cœur dégénéré, conduisant ainsi respectivement soit à des traces de glissement correspondant à des plans  $\{110\}$  soit  $\{112\}$ . La hauteur des paires de décrochements étant de l'ordre du paramètre de réseau, seules des observations réalisées à l'échelle atomique peuvent permettre de distinguer les deux situations.

Dans ce contexte, des monocristaux de niobium ont été déformés en compression à différentes températures : 120 K, 200 K et 300 K, et observés *in situ* sous contrainte par microscopie champ proche (STM) sous ultra-vide (UHV). La surface d'observation de type  $\{111\}$  présente une reconstruction  $(2 \times 2)$  qui a été entièrement caractérisée et modélisée [1]. A noter que la résolution atomique ainsi obtenue nous permet de déterminer le vecteur de Burgers des dislocations à l'origine des traces de glissement par la mesure des composantes de cisaillement dans le plan et hors plan qui leurs sont associées. Les traces de glissement peuvent ici être directement référencées par rapport à la structure cristallographique de la surface. Bien qu'à toutes les températures les traces de glissement correspondent majoritairement à des plans de type  $\{110\}$ , cet effet étant plus marqué aux basses températures, il apparaît cependant que, même à l'échelle atomique, les traces de glissement présentent un caractère sinueux qui ne permet pas une discrimination univoque entre les deux possibilités de traces (voir figure ci-dessous). La connaissance de la structure de cœur des dislocations devrait permettre de lever cette ambiguïté. Toutefois, la reconstruction de surface ne nous permet pas d'accéder à cette dernière à partir du relevé des positions atomiques. Pour pallier à cette difficulté, nous traitons les positions atomiques obtenues par STM afin de déterminer le champ de déplacement induit dans le plan de la surface par le cœur des dislocations et remonter ainsi à leur géométrie intime. Dans un premier temps, nous appliquons cette technique à des dislocations ayant un vecteur de Burgers  $[111]$  perpendiculaire à la surface de l'échantillon ( $m=0$ ). Ces analyses sont actuellement en cours.

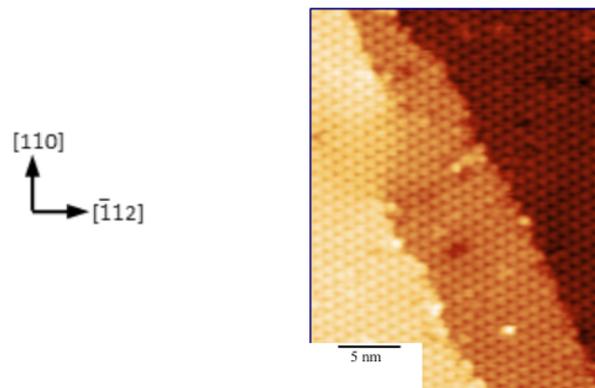


FIGURE 1 – Traces de glissement sur la surface (111) d'un monocristal de Nb déformé plastiquement à 200K ( $\gamma = 5.5\%$ ) sous une contrainte projetée de 68 MPa.

## Références

- [1] C. Coupeau et al., Surf. Sci. 632 (2015) 60-63.

# Molecular dynamics study of diffusion along edge dislocations in Al

*F. Houllé, E. Bitzek*

Universität Friedrich-Alexander Erlangen-Nürnberg, Materials Science & Engineering, Institute I

Resistance to creep deformation is essential for metallic materials used in high temperature applications like Ni-base superalloys. Dislocation diffusion, or pipe diffusion, plays a key role in creep mechanisms such as dislocation climb [1]. Diffusion processes have seldom been studied by molecular dynamics simulations, notably due to the short timescales typically achievable by the simulation method. Other simulation techniques such as nudged elastic band can be used to calculate the activation energies of specific diffusion processes [2]. These are related directly to the rate at which a process occurs, which can then be used as an input parameter for other simulation methods at the atomic scale, such as kinetic Monte Carlo simulations. This allows for the description of the evolution of a system in which decoupled diffusion processes are occurring with rate-dependent probabilities, but it cannot be used to unearth new elementary mechanisms. Using semi-empirical interatomic potentials such as those described by the embedded atom method, molecular dynamics simulations at high temperature allow for the study of the time-evolution of a system in which diffusion occurs. The relevant mechanisms can thus be studied concurrently to deepen our understanding of diffusion processes at the atomic scale [1]. By measuring atomic mean squared displacements over long periods of time, diffusion coefficients for bulk diffusion and diffusion along dislocation cores can be calculated. Here we present recent work on high temperature molecular dynamics simulations of diffusion in aluminum along the core of an edge dislocation and of a vacancy. The simulations use large simulation cells and are run over long durations (30 ns minimum). We show that dislocation glide and fluctuations complicate the measure of atomic mean squared displacements and bring into question the calculation of accurate diffusion coefficients using this method. Results are presented with the outlook of continued work on the topic performed using more advanced simulation methods e.g. adaptive kinetic Monte Carlo [3].

## Références

- [1] G. P. Purja Pun, Y. Mishin, A molecular dynamics study of self-diffusion in the cores of screw and edge dislocations in aluminum, *Acta Materiala* 57 (18), (2009) 5531-5542.
- [2] G. Mills, K. W. Jacobsen, K. H. Jonsson, Nudged elastic band method for finding minimum energy paths of transitions in *Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations*, (1998) 385.
- [3] G. Henkelman and H. Jonsson, Long time scale kinetic Monte Carlo simulations without lattice approximation and predefined event table, *J. Chem. Phys* 129, (2008) 114104.

# Étude des mécanismes de formation d'une dislocation coin dans une couche mince Ge/(001)Si par modélisation à l'échelle atomique

*E. Maras*<sup>1</sup>, *L. Pizzagalli*<sup>2</sup>, *Tapio Ala-Nissilä*<sup>1</sup> et *H. Jónsson*<sup>1,3</sup>

1 - Department of Applied Physics, Aalto University, Finland

2 - Institut P', Université de Poitiers, France

3 - Faculty of Science, University of Iceland, Reykjavík, Iceland

La déposition d'une couche mince de  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  sur un substrat de Si peut permettre de miniaturiser les technologies CMOS [1]. Cela requiert néanmoins l'obtention de films contenant très peu de défauts. Or la différence de paramètre cristallin entre le germanium et le silicium induit la formation de dislocations qui détériorent fortement les propriétés électroniques du système sauf si celles-ci se trouvent uniquement à l'interface  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ . Dans ce système, il y a principalement deux types de dislocations qui diminuent la contrainte dans le film. Les dislocations coins ont la plus forte capacité de relaxation du film mais elles sont sessiles. Les dislocations  $60^\circ$  sont moins efficaces pour relaxer le film mais elles sont mobiles. Expérimentalement il est possible de former un dépôt de Ge/(001)Si entièrement relaxé grâce à la présence d'un réseau dense et organisé de dislocations coins à l'interface Ge/Si [2]. Nous nous proposons d'utiliser une modélisation à l'échelle atomique de ce système afin d'étudier le mécanisme de formation de ce réseau qui reste encore largement incompris et spéculatif.

La longue portée des effets élastiques des dislocations nécessite l'utilisation d'un système de grande taille qui ne peut être modélisé entièrement par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). A notre connaissance, il n'existe pas de potentiel empirique permettant de modéliser précisément à la fois les interactions Ge-Ge, Si-Si et Ge-Si en présence ou non d'une dislocation. Nous utilisons donc une approche multi-échelle qui consiste à corriger des résultats obtenus à partir d'un potentiel empirique à l'aide de calculs DFT. Nous utilisons le potentiel de Stillinger-Weber (SW) [3, 4] qui reproduit bien les propriétés élastiques du germanium et du silicium mais qui surestime significativement l'énergie de cœur d'une dislocation. Par comparaison avec des calculs en DFT réalisées sur des systèmes de petites tailles contenant des dislocations linéaires, nous estimons cette erreur pour différentes orientations d'une dislocation. Cela nous permet ensuite de corriger les résultats obtenus à l'aide du potentiel SW. Nous modélisons un film mince (19 mono-couches) de Ge déposé sur un substrat de Si. Nous utilisons une méthode d'optimisation globale de chemins de transition pour trouver les chemins ayant la plus faible énergie d'activation entre une configuration pseudo-morphique et une configuration contenant une dislocation coin à l'interface. Nous identifions deux mécanismes pour la formation de dislocations coins qui étaient jusqu'à présent inconnus.

Nous montrons en particulier que l'orientation des dislocations traversantes associées aux dislocations d'interface  $60^\circ$  dépend de la contrainte dans le film. Ainsi aux fortes contraintes ces dislocations traversantes sont des dislocations  $60^\circ$  alors qu'à plus faible contrainte elles ont une orientation vis. Ce changement d'orientation des dislocations traversantes modifie le mécanisme de formation des dislocations coins. En conséquence, le mécanisme principal de formation des dislocations coins dépend de la contrainte initiale dans le film et donc de sa composition en Ge.

## Références

- [1] Y. B. Bolkhovityanov et al., *Semiconductors*, 42, 1 (2008).
- [2] T. F. Wietler, E. Bugiel, and K. R. Hofmann, *Appl. Phys. Lett.*, 87, 182102 (2005).
- [3] F. H. Stillinger and T. A. Weber, *Phys. Rev. B*, 31, 5262 (1984).
- [4] M. Laradji et al., *Phys. Rev. B*, 51, 4894 (1995).

# Méthodes continues pour l'étude de l'annihilation de pores par flux plastique dans des matériaux cubiques à faces centrées

*A. Ruffini, A. Finel et Y. Le Bouar*

Laboratoire d'Étude des Microstructures, CNRS-ONERA, Châtillon, FRANCE

En science des matériaux, l'une des difficultés omniprésentes est de décrire l'évolution de microstructures dont les propriétés physico-mécaniques sont intimement contrôlées par des mécanismes nécessitant une description à petite échelle. Par exemple, les superalliages à base nickel monocristallins utilisés pour les aubes de turbine en aérospatiale peuvent présenter des micropores agissant comme des sources potentielles pour la rupture en fatigue. Ces pores peuvent être supprimés par pression isostatique à chaud (HIP). Le problème est de modéliser la physique de l'annihilation des pores qui reposent sur un très grand nombre de mécanismes d'échelle microscopique (dislocation, microfissure...) [1].

Numériquement, dans les stratégies qui consistent à décrire quelques uns de ces processus, les simulations atomistiques ne permettent généralement pas l'étude des systèmes à des échelles d'espace et de temps adaptées. Les méthodes continues telles que le champ de phase apparaissent ainsi comme des alternatives potentiellement prometteuses. À ce titre, nous avons récemment proposé un modèle qui couple explicitement des dislocations et des microfissures individuelles [2, 3]. En outre, ce modèle nous permet de décrire la nucléation et l'évolution des entités physiques à leur échelle de temps caractéristique, au sein d'une formulation numérique qui permet la gestion de surfaces libres complexes.

Dans le travail exposé, le modèle actuel étendu à la géométrie cubique à faces centrées sera présenté et illustré dans le contexte de l'annihilation des pores par flux plastique dans les superalliages à base nickel monocristallins.

## Références

- [1] A. Epishin, B. Fedelich, T. Link, T. Feldmann, I. L. Svetlov, Pore annihilation in a single-crystal nickel-base superalloy during hot isostatic pressing : Experiment and modeling, *Mater. Sci. and Eng. A*, 586 (2013) 342.
- [2] A. Ruffini, A. Finel, Phase-field model coupling cracks and dislocations at finite strain, *Acta Mater.*, 92 (2015) 197.
- [3] A. Ruffini, A. Finel, J. Colin, J. Durinck, Effect of interface plasticity on circular blisters, *Scripta Mater.*, 113 (2016) 222.

# Cloquage des films minces ductiles

*Nadia Ben Dahmane*<sup>1</sup>, *Guillaume Parry*<sup>1</sup>, *Rafael Estevez*<sup>1</sup>, *Christophe Coupeau*<sup>2</sup>

1 - SIMaP, Univ. Grenoble Alpes-CNRS, Grenoble

2 - Intitut P<sup>2</sup>, Université de Poitier-CNRS-ENSMA, FUTUROSCOPE-Chasseneuil

Les revêtements de couches minces à faible énergie d'adhésion soumis à de fortes contraintes de compression peuvent subir un phénomène de flambage et de délaminage simultané appelé « cloquage ». Le mécanisme de formation et de propagation des rides droites et des cloques circulaires a bien été décrit dans la littérature dans le cadre des équations d'équilibre des plaques minces de Föppl-Von Kärman [1, 2]. Cependant, le caractère non-linéaire de ces équations rend difficile la résolution analytique permettant de déterminer la forme d'équilibre de la cloque en « régime post-critique » (lorsque la contrainte appliquée est supérieure à la contrainte critique de cloquage) et ce, même en découplant le flambage du délaminage.

L'implémentation numérique d'un modèle couplant une plaque géométriquement non linéaire pour représenter le revêtement, et un modèle de zone cohésive pour représenter le comportement mécanique de l'interface a pu être réalisée [3]. Cette approche a permis d'éclaircir les relations entre la morphologie des structures cloquées et l'adhésion. Cependant dans le cadre de cette étude, le comportement du film a été considéré comme élastique linéaire et l'effet de la plasticité sur la propagation et l'équilibre de telles cloques n'a pas encore été pris en compte.

Dans notre étude, un modèle de plaque géométriquement non linéaire d'un film ductile sur un substrat rigide couplé à un modèle de zone cohésive a été utilisé pour étudier en quoi le développement de la plasticité au sein du film modifie l'équilibre de flambage des cloques. Il sera ici principalement question du cas de la ride droite.

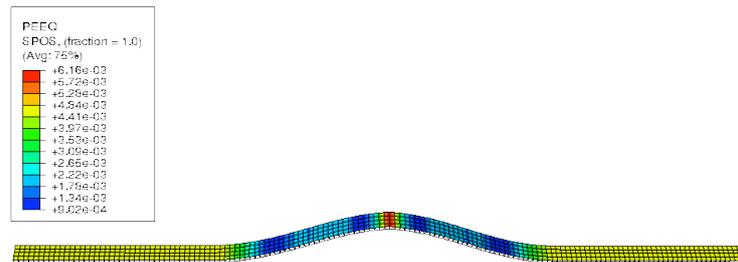


FIGURE 1 – Cloquage en ride droite résultant du délaminage d'un film élasto-plastique sur substrat rigide ( $\sigma_{\text{appliquée}} = 900 \text{ MPa}$ ,  $\sigma_y = 780 \text{ MPa}$ ). La déformation plastique équivalente est représentée.

## Références

- [1] L.D. Landau, and E.M. Lifchitz, Theory of Elasticity (3rd ed., Pergamon, New York, 1986).
- [2] J.W. Hutchinson, Z.Suo, Adv. in Appl. Mech. 29 (1992) 63.
- [3] J.-Y Faou, G. Parry, S. Grachev, E. Barthel, PRL, 108, 116102 (2012).

# Plasticité haute température de la phase $\gamma'$ d'un superalliage monocristallin durant des essais in-situ en rayonnement synchrotron

R. Tréhorel<sup>1</sup>, A. Jacques<sup>1</sup>, T. Schenk<sup>1</sup>, L. Dirand<sup>1</sup>, J. Cormier<sup>2</sup> et JB. Le Graverend<sup>3</sup>

1 - Institut Jean Lamour, CNRS UMR 7198, Nancy, France

2 - Institut Pprime, CNRS UPR 3346, Poitiers, France

3 - Texas A&M University, Texas, USA

Pendant le stade secondaire du fluage haute température, un superalliage monocristallin peut être décrit comme un composite formé de couches alternées  $\gamma$  (cfc) et  $\gamma'$  (L12) perpendiculaires à l'axe de traction [001]. Lors de la déformation plastique des dislocations viennent se déposer à l'interface  $\gamma/\gamma'$  et modifient le désaccord paramétrique perpendiculaire à l'axe de traction. De la mesure de ce désaccord par diffraction haute résolution toutes les 250 secondes en rayonnement synchrotron, et avec un modèle composite en série, on peut déduire les contraintes internes et les déformations plastiques de chacune des phases. On peut donc suivre in-situ l'évolution du matériau dans des conditions stationnaires, ou sa réponse à des sauts de contrainte ou de température [1, 2].

Les dislocations présentes dans  $\gamma$  peuvent se déplacer si la contrainte de Von Mises (contrainte appliquée  $\sigma_{zz}$  moins la contrainte interne  $\sigma_{xx}$ ) qu'elles subissent est supérieure à la contrainte d'Orowan, qui dépend entre autres, de la largeur de la couche  $\gamma$ . Après un incrément de la contrainte appliquée, de nouvelles dislocations vont se déplacer dans les couloirs  $\gamma$  tout et laisser aux interfaces des dislocations supplémentaires. La contrainte de Von Mises est ainsi relaxée jusqu'à revenir à la contrainte d'Orowan.

La déformation plastique de la phase  $\gamma'$  a lieu par la montée de dislocation de types  $a' \langle 100 \rangle$ . Celles qui ont un vecteur de Burgers parallèle à l'axe de traction [001] sont sensibles à la contrainte appliquée  $\sigma_{zz}$  et émettent des lacunes. Les dislocations ayant un vecteur de Burgers perpendiculaire  $a'[100]$  et  $a'[010]$  absorbent ces lacunes, et sont sensibles à la contrainte interne  $\sigma'_{xx} = \sigma'_{yy}$ , plus faible que la précédente. A structure et mobilité égale, elles se déplacent plus lentement. L'équilibre de la concentration en lacunes impose alors une densité plus grande de dislocations  $a'[100]$  et  $a'[010]$  que  $a'[100]$ , ce qui est bien observé [3]. La vitesse de déformation des radeaux semble corrélée à la contrainte interne  $\sigma'_{xx}$ , et semble présenter un seuil à  $\sigma'_{xx} = 60$  MPa.

Après une chute de la contrainte appliquée ou une baisse de température, les radeaux continuent à se déformer pendant un temps fini. Cela suggère une relation entre densité des dislocations  $a'[100]$  et  $a'[010]$ , longueur des radeaux, et amplitude de la déformation post décharge. L'entrée des dislocations  $a'[100]$  et  $a'[010]$  (ou leur multiplication) est donc probablement le mécanisme limitant la déformation plastique des radeaux  $\gamma'$ .

## Références

- [1] L. Dirand, J. Cormier, A. Jacques, JP. Chateau-Cornu, T. Schenk, O. Ferry, P. Bastie, Measurement of the effective  $\gamma/\gamma'$  lattice mismatch during high temperature creep of Ni-based single crystal superalloy, *Materials Characterization*, 77, 32-46, 2013.
- [2] JB. Le Graverend, A. Jacques, J. Cormier, O. Ferry, T. Schenk, J. Mendez, Creep of a nickel-based single-crystal superalloy during very high-temperature jumps followed by synchrotron X-ray diffraction, *Acta Materialia*, 84, 65-79, 2015.
- [3] R. Tréhorel Plasticity of a single crystal superalloy during high temperature creep tests : 17th International Conference on the Strength of Materials, August 13, 2015, Brno, Czech Republic.

# Creep investigation and microstructural evolution in a polycrystalline nickel base superalloy

*H. Sommer*<sup>1</sup>, *N. de Boer*<sup>2</sup>, *G. Eggeler*<sup>1</sup>

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

2 - VDM Metals GmbH, Altena, Germany

In the present study a polycrystalline nickel base superalloy, which is used for different stationary components in aero-engines (e.g. combustion chambers, liners, casings, exhaust ducting), is investigated. The creep behavior of the superalloy was studied by creep experiments at constant loads and temperatures in the range of 60-250 MPa and 760-950°C. An Arrhenius relationship is used to describe the minimal creep rate of the creep curves. Hence, the temperature and stress dependence of the minimal creep rate can be determined. As the creep behavior is related to  $\gamma'$  precipitation, particle morphology and distribution, ageing experiments are performed in the absence of load in order to get a better understanding of  $\gamma'$  precipitation and growth kinetics. Ageing experiments were performed in the temperature range of 750-900°C for different ageing times, between 1 and 900 h. The  $\gamma'$  strengthening was subsequently assessed by micro-hardness testing and microstructural features of the  $\gamma'$  precipitates were systematically investigated by scanning and transmission electron microscopy. Special emphasis was placed on the characterization of the  $\gamma'$  particles, i.e. particle growth, Ostwald-ripening and dissolution of the particles.

# Fermeture induite par plasticité sous chargement cyclique : prédiction numérique de la forme du front de fissure

*C. Gardin, C. Sarrazin-Baudoux, S. Fiordalisi, M. Gueguen, J. Petit*

Institut Pprime, CNRS-ENSMA UPR 3346 – Université de Poitiers – ENSMA

Le dimensionnement de nombreux composants de structures nécessite une description précise de la propagation des fissures de fatigue. La propagation des fissures courtes et longues de fatigue a été beaucoup étudiée, et le rôle de la fermeture induite par plasticité a été largement confirmé.

Une courbure du front de fissure est généralement observée lors des essais de fatigue. Néanmoins, la mécanique linéaire de la rupture considère généralement des géométries bidimensionnelles de fissure avec des fronts droits ; très peu d'études considèrent les effets 3D [1].

Les objectifs de cette étude consistent en la mise en place d'un outil numérique 3D de prévision de l'évolution de la courbure du front de fissure pendant la propagation d'une fissure de fatigue, en prenant en compte la fermeture induite par plasticité.

Des essais réalisés sur des éprouvettes CT dans l'acier inoxydable austénitique 304L ont permis d'obtenir la forme stabilisée du front de fissure. Afin d'éviter toute influence de l'histoire du chargement, des valeurs constantes de l'amplitude du facteur d'intensité de contraintes formula ont été appliquées.

Un outil numérique 3D, utilisant le code de calculs Abaqus et le langage de programmation Python a été mis en place. Un contact sans frottement sur le plan de fissuration permet d'obtenir la charge à l'ouverture. Deux calculs parallèles sont réalisés (élastique et plastique), afin de mesurer en chaque nœud du front de fissure la valeur locale formulade l'amplitude effective du FIC, qui a été considéré comme la force motrice pendant toute la propagation. L'avancement qui en découle en chaque nœud permet d'obtenir la forme du front ultérieur, en utilisant différentes interpolations mathématiques. Une procédure de remaillage est alors utilisée, et de nombreux pas sont nécessaire afin d'aboutir à une stabilisation de la forme du front.

Une comparaison des essais et de la prédiction montre globalement un bon accord. Des travaux en cours semblent montrer que l'introduction d'un facteur de confinement, par une amélioration de la prise en compte des effets de bord, devrait permettre une amélioration des résultats.

## Références

- [1] Gardin C, Sarrazin-Baudoux C, Petit J. Wake length and loading history effects on crack closure of through-thickness long and short cracks in 304L : Part II- 3D numerical simulation. Eng. Fract. Mech. 2013 ; 99 :306-323.

# AFM topographic investigation of the cyclic plasticity of martensitic steel

*G. Seidametova, J-B Vogt, I. Proriol Serre*

Unité Matériaux et Transformations, Université Lille 1

The 9-12% Cr martensitic steels are known as high performance materials in the industry. It is mainly due to their complicated and hierarchical microstructure. But there is a little of researches tried to reveal the role of that microstructure hierarchic boundaries in the monotonic or cyclic plasticity of a material [1, 2]. The objective of the presented work is to understand and quantify the role of various types of interfaces in martensitic steel in its cyclic deformation localization by surface analyses using the atomic force microscope as a principal tool of research. The studied material is X19CrMoNbVN11-1 steel quenched after 1 hour solution treatment at 1110°C and then tempered 4 hours at 680°C. The elements of microstructure resulting from this heat treatment are : prior austenite grains, packets, blocks, and laths. The first three elements are known as HAB (high-angle boundaries) structures, and the laths are LAB (low-angle boundaries) structures [3]. The size of each element of this microstructural hierarchy was determined using optical microscopy and transmission electron microscopy. The fatigue tests under total strain control  $\Delta\varepsilon_t = 1.2\%$  were performed on mechanically polished flat specimens at room temperature and in air. The triangular signal at strain rate  $0.4\% s^{-1}$  and strain ratio  $R = -1$  was imposed. The test was interrupted at different life fractions for the surface relief investigation by AFM. As a result the appeared morphology of surface relief was described (Fig. 1). The PSMs (persistent slip markings) classification was proposed and height evolution as a function of applied number of cycles was estimated.

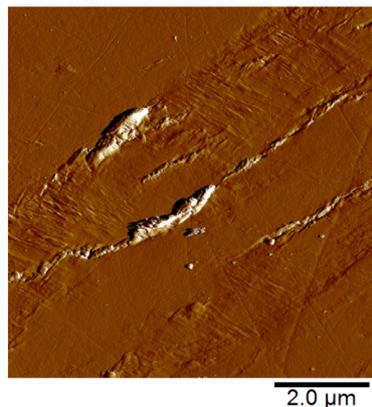


FIGURE 1 – AFM image of different types of extrusions on the sample surface after 500 cycles at  $\Delta\varepsilon_t = 1.2\%$ .

## Références

- [1] M.N. Batista, S. Hereñú, I. Alvarez- Armas, The role of microstructure in fatigue crack initiation and propagation in 9-12Cr ferritic-martensitic steels, *Procedia Eng.* 74 (2014) 228–231.
- [2] M. Hayakawa, S. Matsuoka, Y. Furuya, Nanoscopic measurement of local plastic deformation for a tempered martensitic steel by atomic force microscopy, *Mater. Lett.* 57 (2003) 3037–3042.
- [3] B. Fournier, *Fatigue-fluage des aciers martensitiques à 9-12% Cr*, École des Mines de Paris, 2007.

# Les origines des notations dans le mâclage mécanique

*Olivier Hardouin Duparc*

LSI, École Polytechnique, CNRS, CEA, Université Paris-Saclay, 91128 Palaiseau Cedex

Indépendamment du concept de réseau de coïncidence et d'index de coïncidence  $\Sigma$  développé par Georges Friedel pour les macles au tout début du xx<sup>e</sup> siècle (voir [1]), il existe une nomenclature spécifique pour les macles d'origine mécanique également appelées macles de déformation. Cette nomenclature, en  $(K_1, \eta_1, K_2, \eta_2)$ , remonte à Otto Mügge en 1889 [2], suite à des observations de mâclage faites dès 1859 essentiellement en Allemagne (Pfaff, Dove, Reusch). Ces expériences de déformations mécaniques étaient faites sur des cristaux transparents biréfringents en suite naturelle aux observations en biréfringence induite par déformation des verres faites par Biot, Brewster et Seebeck. Mügge trouva que l'on pouvait ranger les macles observées et les modes de déformations dont elles résultaient en deux types qu'il nomma  $\alpha$  et  $\beta$  en leur associant des éléments cristallographiques descriptifs sous la forme de plans  $k_1$  et  $k_2$ , des plans de coupes de cercles d'où la lettre  $k$  de Kreis qui signifie cercle en allemand, et des vecteurs  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  qui signifient des glissements, d'où le symbole grec  $\sigma$  correspondant au  $s$  de Scheibung qui veut dire glissement en allemand (sliding en anglais). Les symboles  $k_1$  et  $k_2$  devinrent  $K_1$  et  $K_2$ , et les  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  devinrent  $\eta_1$  et  $\eta_2$ , au moins dès 1914 dans un article de revue de Arrien Johnsen, un élève de Mügge, tandis que les déformations  $\alpha$  et  $\beta$  étaient naturellement devenues déformations de première et de deuxième espèce, sans doute avec Frédéric Wallérand (la bête noire de Georges Friedel) en 1904, et type I et II chez Johnsen. Mügge est dûment nommé plusieurs fois par Georges Friedel dans le chapitre XVI, Macles mécaniques et glissements, de ses Leçons de cristallographie de 1926 [4] où Friedel ne se prive par ailleurs pas de fustiger les chercheurs allemands chaque fois qu'il le peut.

Cette description est spécialement adaptée aux tentatives de description du mâclage mécanique, comprendre comment ces macles se forment sous déformation (à la différence des macles de cristallisation et des macles de recuit). Cette description est également adaptée à tous les types de réseaux cristallins, cubiques ou non cubiques pour lesquels il n'y a en général pas de réseau de coïncidence comme les hexagonaux et les rhomboédriques ou les tricliniques pour lesquels ils ont d'abord été développés par Mügge car les cristaux transparents qu'il observait n'étaient pas cubiques.

## Références

- [1] O. Hardouin Duparc, A review of some elements in the history of grain boundaries, centered on Georges Friedel, the coincident site lattice and the twin index, Journal of Materials Science 46 (2011) 4116.
- [2] O. Mügge. N. Jahrb. Miner. Geol. Pal. BB6 (1889) 274-304.
- [3] A. Johnsen. Jahrb. der Radioaktivität und Elektronik 11 (1914) 226-262.
- [4] G. Friedel, Leçons de cristallographie, Berger-Levrault, 1926.

# Simulation numérique de la formation et l'extension de macles dans des films minces métalliques

*R. Béjaud, S. Brochard, J. Durinck*

INSTITUT P' - UPR 3346 - Université de Poitiers - CNRS - ISAE ENSMA - SP2MI, 86962 Futuroscope

Plusieurs études ont montré que les matériaux nanostructurés présentent souvent des propriétés physiques différentes de leurs homologues sous forme massive. La compréhension, voire le contrôle de ces propriétés sont cruciaux pour les applications utilisant ces nanostructures. En particulier, les propriétés mécaniques des matériaux nanostructurés suscitent une grande attention. Les métaux nano-maclés ou nano-lamellaires, par exemple, sont connus pour avoir une très bonne résistance aux contraintes mécaniques, en raison des interactions entre les dislocations et une interface ou un joint de macle [1, 2]. Pour étudier les mécanismes de plasticité pouvant influencer sur les propriétés mécaniques, comme le maclage, nous avons utilisé des simulations atomistiques, particulièrement bien adaptées car permettant la visualisation de ces mécanismes à l'échelle atomique.

Alors que de nombreuses études en simulations atomistiques se sont focalisées sur l'interaction entre dislocations et interfaces, notre étude s'intéresse à la formation des macles ; les orientations cristallographiques sont donc choisies pour faciliter la nucléation de macles de déformation. Nous avons alors étudié, dans un film mince métallique cubique à faces centrées, la compétition entre des surfaces libres et une interface pour la nucléation d'une macle de déformation, ainsi que l'influence d'une interface sur l'extension des macles alors nucléées. Les orientations choisies permettent également d'introduire des défauts de surface, capables d'agir sous contrainte mécanique comme des sources de dislocation.

Notre étude met ainsi en évidence le rôle d'un joint de macle et d'une interface bimétallique semi-cohérente sur le maclage mécanique et particulièrement sur l'extension d'une macle. Nous montrons notamment qu'un joint de macle préexistant a pour effet de limiter l'extension d'une macle nouvellement formée et peut entraîner la nucléation d'une dislocation de Lomer. Dans le cas d'une interface bimétallique, la présence de dislocations d'épitaxie est susceptible également d'influencer la croissance de la macle [3].

## Références

- [1] Wang, J, et al., Scripta Materialia, 2011, 64, 1083-1086.
- [2] Wang, J.W., et al., Nature Communications, 2013, 4, 1-8.
- [3] Zheng, S.J., et al., Acta Materialia, 2014, 79, 282-291.

# De glissile vers sessile : la transition ductile-fragile dans les perovskites

*Pierre Hirel, Philippe Carrez, Patrick Cordier*

UMET, Bat. C6, Université de Lille 1, 59655 Villeneuve d'Ascq

Les composés à structure perovskite ont un comportement mécanique tout à fait singulier. Par exemple la déformation du titanate de strontium  $\text{SrTiO}_3$  est caractérisée par une double transition ductile-fragile-ductile [1, 2] : les dislocations  $\langle 110 \rangle$ , qui appartiennent au système de glissement le plus favorable à basse température, perdent leur mobilité au-delà de 1050 K, menant à la rupture fragile. Au contraire, dans d'autres perovskites comme le niobate de potassium  $\text{KNbO}_3$ , les dislocations  $\langle 110 \rangle$  sont toujours présentes et glissiles à haute température. Les mécanismes responsables de la perte ou non de ce système de glissement sont encore mal compris.

Nous avons étudié l'effet de la température sur des dislocations  $\langle 110 \rangle$  à caractère coin dans  $\text{SrTiO}_3$ , au moyen de calculs à l'échelle atomique. Nous montrons que ces dislocations, qui sont dissociées dans leur plan de glissement à basse température, changent de structure de cœur et se dissocient dans leur plan de montée à haute température, devenant sessiles, c'est-à-dire incapables de se mouvoir dans leur plan de glissement. L'analyse du chemin de réaction montre que la dislocation commence par diminuer sa distance de dissociation, et ensuite les deux dislocations partielles se dissocient dans le plan de montée. Ce système de glissement devient alors inopérant, ce qui est directement responsable de la transition ductile-fragile dans  $\text{SrTiO}_3$ . L'application à la bridgmanite  $\text{MgSiO}_3$  montre que ce processus n'est pas particulier à  $\text{SrTiO}_3$ , mais qu'il est commun à plusieurs composés à structure perovskite.

Dans les perovskites déformées à haute température, il existe ainsi une compétition entre la contrainte appliquée, responsable du mouvement des dislocations, et la température qui tend à les rendre sessiles. À faible température et forte vitesse de déformation le glissement des dislocations  $\langle 110 \rangle$  domine, tandis qu'à haute température et faible vitesse de déformation elles tendent à changer de structure de cœur et à devenir sessiles.

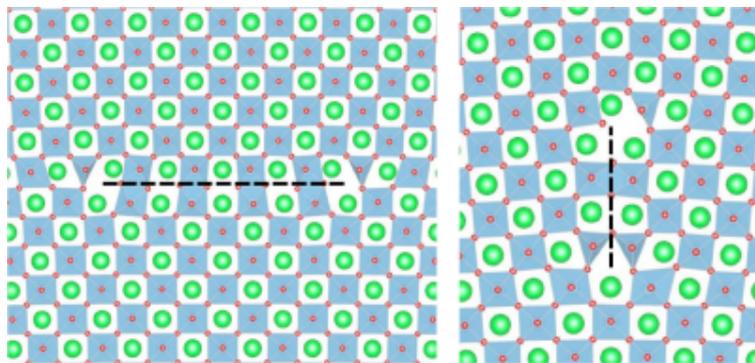


FIGURE 1 – Structures de cœur de la dislocation coin  $[110]$  dans  $\text{SrTiO}_3$  : dissociée dans son plan de glissement (à gauche) et dans son plan de montée (à droite).

*Ce travail est financé par le conseil européen de la recherche (ERC) à travers le septième programme-cadre (FP7), ERC N.290424-RheoMan.*

## Références

- [1] D. Brunner et al., J. Am. Ceram. Soc. 84 (2001) 1161-1163.
- [2] P. Gumbsch et al., Phys. Rev. Lett. 87 (2001) 085505.

# Simulation multi-échelles et polycristalline de la déformation de MgO à haute-pression

*J. Amodeo<sup>1</sup>, S. Dancette<sup>1</sup>, L. Delannay<sup>2</sup>*

1 - Laboratoire MATEIS, UMR5510 CNRS INSA-Lyon Université de Lyon, 69621 Villeurbanne, France

2 - Institute of Mechanics, Materials and Civil Engineering, Université Catholique de Louvain, 1348 Louvain-La-Neuve, Belgique

Ce travail est dédié à la modélisation de la plasticité polycristalline dans des conditions particulières d'extrême pression. Dans MgO, qui est l'un des constituants majeurs du manteau inférieur terrestre, l'activité relative des modes de glissement  $1/2 \langle 110 \rangle \{110\}$  et  $1/2 \langle 110 \rangle \{100\}$  dépend du niveau de pression hydrostatique [1, 2]. Aux petites échelles, l'influence de la pression sur les structures de cœur et sur le comportement collectif des dislocations peut être étudiée respectivement via des calculs à l'échelle atomique et des simulations de Dynamique des Dislocations (DD) [2].

Dans cette étude, nous utilisons les paramètres clés de la plasticité de MgO calculés à ces échelles inférieures afin d'ajuster un modèle de plasticité cristalline, capable de simuler la réponse mécanique de polycristaux jusqu'à 100 GPa de pression hydrostatique. Le modèle est alors confronté à des expériences réalisées en cellule à enclume de diamant, à différentes pressions [3]. Les simulations montrent que mono- et polycristaux ont des réponses mécaniques très différentes lorsqu'ils sont sollicités en compression uniaxiale. De plus, à cause des hétérogénéités observées dans chacun des grains, les résultats des simulations polycristallines dépendent de façon significative de l'hypothèse d'interactions entre grains. Les calculs de plasticité cristalline par éléments-finis (CPFEM) fournissent une meilleure prédiction du développement des textures sous pression.

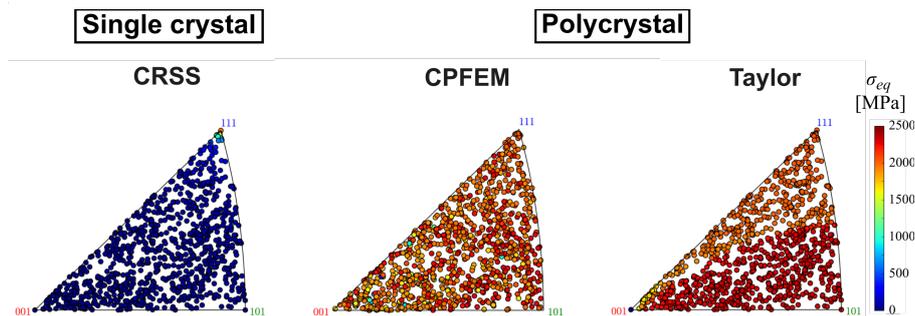


FIGURE 1 – Illustration de la différence de réponse mécanique entre mono- et polycristaux de MgO à basse pression. Chaque panel est composé d'une figure de pole inverse relative à l'axe de compression (CA-IPF) dans laquelle est représentée la contrainte équivalente. Le panel de gauche montre l'évolution de la contrainte de cisaillement critique dans un monocristal en fonction de son orientation. Celle-ci est globalement inférieure à 100 MPa. à droite et pour une même quantité de déformation, les simulations de plasticité cristalline en éléments-finis et dans l'hypothèse de Taylor montrent une contrainte équivalente hétérogène, qui peut atteindre plusieurs GPa dans certains grains du polycristal.

## Références

- [1] J. Girard, J. Chen, P. Raterron, J. Appl. Phys. 111 (2012) 112607-112607-5.
- [2] J. Amodeo, P. Carrez, P. Cordier, Philos. Mag. A. 92 (2012) 1523-1541.
- [3] S. Merkel, H. Wenk, J. Shu, G. Shen, P. Gillet, H. Mao, et al., Journal of Geophysical Research. 107 (2002) 2271-2288.

# Plasticity and onset of yielding of a soft colloidal gel

*Stefano Aimé, Luca Cipelletti, Laurence Ramos*

Laboratoire Charles Coulomb, UMR 5221 CNRS-Université de Montpellier, F-34095 Montpellier

Material failure is ubiquitous on length scales ranging from a few nanometers, as in fracture of atomic or molecular systems, up to geological scales, as in earthquakes. The detection of any precursors that may point to incipient failure is the Holy Grail in many disciplines, from material science to engineering and geology. Material failure is particularly relevant to soft matter systems (colloids, emulsions, polymers etc.), which are an ideal benchmark to investigate how mechanical stress impacts condensed matter. Indeed, soft matter is very susceptible to even modest mechanical loads and most soft materials can be conveniently investigated by powerful optical methods such as microscopy or light scattering. We have built up a shear-cell that allows us to couple rheology to light scattering measurements on soft solids. In this talk I will focus on a fractal colloidal gel produced by in-situ aggregation of silica nanoparticles in water and show how reversible and irreversible (microscopic and macroscopic) deformations, build up when the gel is submitted to a shear stress. Thanks to our set-up, we are able to elucidate the physical processes at play at the onset of yielding.

# Comportement mécanique de structures harmoniques Ti-6Al-4V

*T. Sadat*<sup>2</sup>, *P.O. Renault*<sup>1</sup>, *P. Godard*<sup>1</sup>, *D. Faurie*<sup>2</sup>, *D. Tingaud*<sup>2</sup>, *G. Dirras*<sup>2</sup>, *G. Geandier*<sup>3</sup>,  
*F. Mompiou*<sup>4</sup>, *M. Ota*<sup>5</sup>, *K. Ameyama*<sup>5</sup>

1 - Institut PPRIME – CNRS – Université de Poitiers/ENSMA, Futuroscope, France

2 - LSPM-CNRS – Université Paris 13, Villetaneuse, France

3 - IJL, CNRS – Université de Lorraine, Nancy, France

4 - CEMES-CNRS – Université de Toulouse, France

5 - Department of Mechanical Engineering, Ritsumeikan University, Shiga, Japon

Pour des applications structurelles et concernant le comportement mécanique, le compromis ductilité-résistance mécanique est un dilemme en sciences des matériaux. Le matériau Ti-6Al-4V étudié dans ce travail consiste à combiner les caractéristiques antinomiques précédemment citées. Pour y parvenir, cet alliage de Titane a été élaboré à partir d'un nouveau procédé d'élaboration par métallurgie des poudres en vue d'obtenir une microstructure, dite harmonique, qui présente une distribution en taille bimodale de grains fins "coquille" et larges "cœur" (cf. Fig. 1), répartis de manière régulière formant un réseau 3D interconnecté. Cette microstructure atypique est hétérogène à l'échelle microscopique mais homogène à l'échelle macroscopique [1, 2]. Cette élaboration permet d'aboutir à des propriétés mécaniques combinant une ductilité et une résistance mécanique élevées.

Le principal objectif de ce travail, réalisé dans le cadre d'un projet ANR HighS-Ti (ANR-14-CE07-0003), consiste à comprendre et expliquer le comportement mécanique de cette microstructure inhabituelle. Dans cette présentation, les premiers résultats d'un essai de traction uniaxiale *in situ* sous rayonnement Synchrotron (Diffraction des Rayons X) seront présentés. L'analyse quantitative du déplacement des pics de Bragg a permis de conclure sur le fait que les familles de grains variées requièrent différentes contraintes appliquées pour initier la déformation plastique. Une telle différence peut être attribuée d'une part à l'état de contraintes interne dans chaque grain qui varie du fait de l'anisotropie élastique, et, d'autre part à l'orientation relative des grains par rapport à l'axe de chargement qui diminue ou augmente, selon la probabilité du glissement ou du maclage. L'analyse qualitative de l'évolution du diffractogramme suggère quant à elle une destruction de la structure harmonique à partir d'une déformation voisine de 7% probablement induite par des macles de déformation.

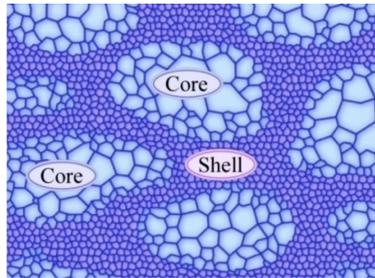


FIGURE 1 – Schéma descriptif de la microstructure Ti-6Al-4V harmonique composée d'un réseau 3D cœur-coquille (core-shell).

## Références

- [1] T. Sekiguchi, K. Ono, et al., *Materials Transactions*. 51 (2006) 427-556.
- [2] S.K. Vajpai, M. Ota, et al., *Metallurgica and Materials Transactions A*, A 46 (2015) 903-914.

# Etude tridimensionnelle des premiers stades de la plasticité dans un polycristal par toptomographie synchrotron et simulation par éléments finis

*N. Gueninchault<sup>1</sup>, S. Forest<sup>1</sup>, W. Ludwig<sup>2</sup>, H. Proudhon<sup>1</sup>*

1 - MINES ParisTech, PSL Research University, MAT - Centre des matériaux

2 - ESRF, The European Synchrotron

Largement étudié en deux-dimensions grâce à l'essor des techniques de surface comme l'EBSD [1] et la corrélation d'images [Heripré 2007], l'observation du comportement local des grains d'un polycristal en trois dimensions se heurte toujours à de fortes difficultés expérimentales. L'apparition de la 3DXRD [2] au début des années 2000 a apporté un nouvel outil puissant pour l'observation du comportement individuel des grains d'un polycristal, mais l'étude des phénomènes locaux est toujours un champ actif de recherches.

La première toptomographie [3] in-situ, sur un cluster de 3 grains situé au coeur d'une éprouvette polycristalline d'un alliage d'aluminium, a été réussie sur la ligne ID-11 de l'ESRF grâce à une machine de traction-fatigue spécifiquement conçue. Les premiers stades de la plasticité ont pu être ainsi observés grâce au changement local de la condition de diffraction [4]. Une forte localisation de la déformation plastique a été observée et l'apparition d'une ou plusieurs bandes de glissement a été capturée, en fonction de la charge appliquée sur l'échantillon et de l'orientation du grain concerné. Une analyse à la fois globale (rocking curves) et locale met en exergue des directions préférentielles de l'activité plastique correspondant aux systèmes à plus forts facteurs de Schmid, mais aussi des événements secondaires où des systèmes à plus faibles FS sont actifs.

Ces informations locales ont été couplées aux données issues de la tomographie par contraste de diffraction (DCT), permettant de connaître la microstructure de tout l'échantillon (localisation, forme, et orientation des grains) [5]. Cette reconstruction a été utilisée pour générer un maillage réaliste de la microstructure polycristalline utilisé pour des calculs par éléments finis [6]. Une loi de plasticité cristalline dans le cadre des grandes déformations est assignée à chaque grain, dépendant de son orientation, et les résultats des calculs permettent d'accéder aux rotations locales du réseau dans chaque grain.

## Références

- [1] Michael D. Sangid, The physics of fatigue crack initiation, IJF (2013).
- [2] H.F. Poulsen, Three-Dimensional X-Ray Diffraction Microscopy, Springer (2004).
- [3] W. Ludwig et al., High-resolution three-dimensional mapping of individual grains in polycrystals by toptomography, J. Appl. Cryst. (2007).
- [4] W. Ludwig et al., Three-dimensional imaging of crystal defects by 'topo-tomography', J. Appl. Cryst. (2001).
- [5] W. Ludwig et al., X-ray diffraction contrast tomography : A novel technique for three-dimensional grain mapping of polycrystals. 1. Direct beam case, J. Appl. Cryst. (2008).
- [6] H. Proudhon et al., Coupling Diffraction Contrast Tomography with the Finite Element Method, AEM (2015).

# Un modèle de plasticité cristalline considérant le transport des dislocations géométriquement nécessaires sur les systèmes de glissement : application aux mono- et multi-cristaux de glace

*L.T. Le*<sup>1,2</sup>, *T. Chauve*<sup>3,4</sup>, *M. Bernacki*<sup>2</sup>, *S. Berbenni*<sup>1</sup>, *M. Montagnat*<sup>3,4</sup>, *T. Richeton*<sup>1</sup>

1 - Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux (LEM3), UMR 7239, CNRS / Université de Lorraine, Ile du Saulcy, 57045 Metz, France

2 - MINES ParisTech, PSL - Research University, CEMEF - Centre de mise en forme des matériaux, CNRS UMR 7635, CS 10207 rue Claude Daunesse 06904 Sophia Antipolis Cedex, France

3 - CNRS, LGGE, UMR 5183, 54 rue Molière, 38401 Grenoble, France

4 - Université Grenoble Alpes, LGGE, 54 rue Molière, 38401 Grenoble, France

La Mécanique des Champs de Dislocations initiée par Acharya [1, 2] permet de prendre en compte le transport des dislocations géométriquement nécessaires (GND) [3] grâce à la résolution de l'équation d'évolution du tenseur densités de dislocations [4]. A une échelle mésoscopique, cette théorie se couple avec la plasticité cristalline due aux dislocations statistiquement distribuées et permet de rendre compte d'un écrouissage cinématique due aux GND [5]. Jusqu'à présent, de tels modèles mésoscopiques ont été construits en considérant un unique tenseur densités de dislocations en chaque point matériel et donc en affectant le même vecteur vitesse à toutes les GND [5]. Cependant, en cas de glissement multiple, le caractère cristallographique de la plasticité est alors partiellement perdu puisque la vitesse d'une dislocation dépend notamment de la cission résolue sur son système de glissement et de la nature de celui-ci.

Nous avons ainsi élaboré un modèle de plasticité cristalline qui considère le transport des GND sur leur système de glissement dans chaque grain et leur transport d'un système à un autre de part et d'autre des joints de grains. Ce formalisme permet également de distinguer les vitesses associées au caractère vis ou coin des GND sur chaque système. Ce modèle a été implémenté dans le code éléments finis *freefem++* [6] et a servi à modéliser le comportement en fluage compression d'un multi-cristal (15 grains) de glace, suivi d'une décharge. Les paramètres du modèle ont d'abord été ajustés par rapport à des essais de torsion directs et inverses de monocristaux de glace de différentes tailles. Les résultats de la simulation ont été comparés aux champs de déformation 2D obtenus par corrélation d'images et ont montré un très bon accord. De plus, cet essai de fluage a été caractérisé par l'apparition de bandes de pliage, par de la migration locale de joints de grains et de la germination localisée de nouveaux grains, qui sont des phénomènes typiques dans la glace au delà de 1% de déformation. Les résultats de la simulation, telle la microstructure de GND obtenue, la désorientation du réseau cristallin ou la distribution de la densité d'énergie élastique, ont servi à interpréter la mise en place de ces mécanismes.

## Références

- [1] A. Acharya, J. Mech. Phys. Solids 49 (2001) 761–784.
- [2] A. Acharya, Proc. R. Soc. Lond. A 459 (2003) 1343–1363.
- [3] M. Ashby, Phil. Mag. 21 (1970) 399–424.
- [4] J. Nye, Acta Metall. 1 (1953) 153–162.
- [5] T. Richeton, G. Wang, C. Fressengeas, J. Mech. Phys. Solids 59 (2011) 2023–2043.
- [6] F. Hecht, J. Num. Math. 20 (2012) 251–266.

# Etude des mécanismes de dégradation au sein des implants dentaires

*P. Corne*<sup>1,2</sup>, *A. Al Saabi*<sup>3</sup>, *A-S Vaillant-Corroy*<sup>1,2</sup>, *J. Geringer*<sup>3</sup>, *F. Cleymand*<sup>2</sup> et *P. De March*<sup>1,2</sup>

1 - Faculté d'Odontologie de Nancy, Université de Lorraine, France

2 - Equipe DOLPHIN, Nanomatériaux pour la vie, Département N2EV, Institut Jean Lamour, UMR 7198, CNRS, Université de Lorraine, France

3 - Mines Saint-Etienne, CIS, STBio, UMR, CNRS 5106, Saint-Etienne, France

La prothèse implantaire en Odontologie ne cesse de se développer et de se démocratiser depuis les travaux de Branemark [1] sur l'ostéointégration du titane pur au niveau des os maxillaires, il y a maintenant 40 ans.

Les prises en charge implantaire sont maintenant de plus en plus complexes et font appel à divers matériaux de reconstitution (titane, alliage de titane (Ti-6Al-4V), zircone yttrée) aux propriétés mécaniques multiples. Les différentes architectures de connexion et les différents couples de matériaux en présence entraînent au sein de la cavité buccale des mécanismes de dégradation responsables d'échecs mécaniques de plus en plus courant en prothèse implantaire allant jusqu'au dévissage voire sa fracture [2]. L'étude des mécanismes de frottement, notamment en fretting-corrosion (frottement sous petits débattements), représente une nouvelle approche dans la compréhension des mécanismes de dégradation entre un implant, son pilier et sa vis. L'utilisation des techniques de tomographie 3D à rayons X permet de visualiser, sans destruction des échantillons, la connexion implantaire et de mieux comprendre les mécanismes de frottement qui s'opèrent aux interfaces. La mise en évidence des mécanismes élémentaires de dégradation de ces matériaux à l'aide de la Microscopie Optique, Microscopie Electronique à Balayage et de l'analyse par micro-raman permet de comprendre les relations entre les mécanismes de déformation et la tenue des implants en service

## Références

- [1] Branemark P-I. Osseo, Integration and its experimental background. J Prosthet Dent. 1983 Sep;50(3) :399-410.
- [2] Shemtov-Yona K, Rittel D. On the mechanical integrity of retrieved dental implants. J Mech Behav Biomed Mater. 2015 Sep;49 :290-9.

# Mécanismes de déformation d'un alliage de titane à mémoire de forme

*E. Bertrand*<sup>1</sup>, *P. Castany*<sup>2</sup>, *Yang Yang*<sup>2</sup>, *E. Menou*<sup>1</sup>, *T. Gloriant*<sup>2</sup>

1 - Institut des Matériaux Jean Rouxel (IMN), Université de Nantes, CNRS, Rue Christian Pauc, BP 50609, 44306 Nantes Cedex 3, France

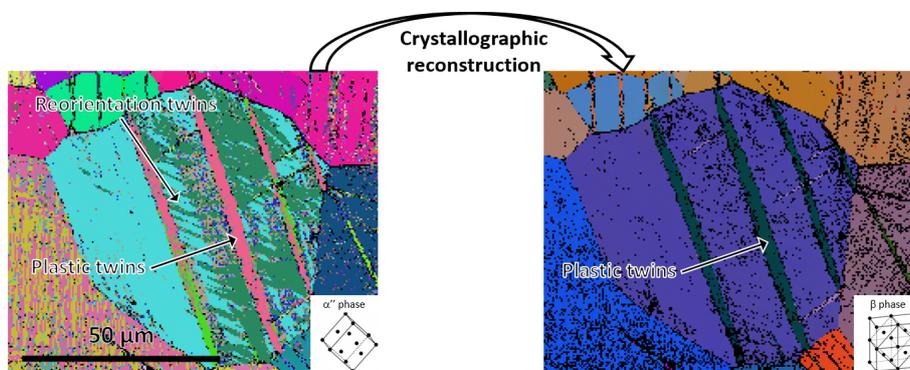
2 - INSA Rennes, Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR CNRS 6226), 20 avenue des Buttes de Coësmes, F-35708 Rennes Cedex 7, France

Les alliages de titane  $\beta$ -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 (Mo, Nb, Ta, ...). Avec une teneur en éléments bêtagènes judicieusement choisie, ils peuvent présenter un effet superélastique (transformation martensitique sous contrainte de la phase  $\beta$  en phase  $\alpha''$ ) ou un effet mémoire de forme (microstructure  $\alpha''$  de trempe). Si les mécanismes de déformation des alliages superélastiques sont beaucoup étudiés [1, 2], ceux des alliages à mémoire de forme sont encore peu connus.

Les mécanismes de déformation par maillage de l'alliage à mémoire de forme Ti-25Ta-20Nb (massique) sont caractérisés par EBSD et MET. Sous l'effet d'une contrainte de traction, la microstructure composée de martensite  $\alpha''$  d'autoaccommodation se déforme dans un premier temps par maillage de réorientation. Les systèmes mis en évidence sont typiques des alliages à mémoire de forme base titane, à savoir  $\{111\}_{\alpha''}$  (type I) et  $\langle 211 \rangle_{\alpha''}$  (type II). Par la suite, le matériau subit une déformation plastique par un nouveau système de maillage  $\{130\} \langle 310 \rangle_{\alpha''}$  mis en évidence pour la première fois dans cette étude [3].

Le calcul de la plus grande déformation de réseau s'avère être un paramètre adéquat pour prédire la variante de martensite qui est favorisée lors du processus de réorientation. A l'inverse, l'analyse par facteur de Schmid est utilisée pour prédire la sélection du système de maillage plastique  $\{130\} \langle 310 \rangle_{\alpha''}$ .

Enfin, une technique originale de reconstruction cristallographique [4] a permis de mettre évidence une analogie entre le système de maillage  $\{130\} \langle 310 \rangle_{\alpha''}$  et le système  $\{332\} \langle 113 \rangle_{\beta}$  caractéristique des alliages de titane  $\beta$ -métastables.



## Références

- [1] H.Y. Kim, Y. Ikehara, J.I. Kim, H. Hosoda, S. Miyazaki, *Acta Mater.* 54 (2006) 2419-2429.
- [2] M. Tahara, H.Y. Kim, T. Inamura, H. Hosoda, S. Miyazaki, *Acta Mater.* 59 (2011) 6208-6218.
- [3] E. Bertrand, P. Castany, Y. Yang, E. Menou, T. Gloriant, *Acta Mater.* 105 (2016) 94-103.
- [4] E. Bertrand, P. Castany, I. Péron, T. Gloriant, *Scripta Mater.* 64 (2011) 1110-1113.

# Etude du comportement plastique des matériaux en feuilles en acier 18-10 soumis à des sollicitations particulières

*S. Guellouz, A. Znaïdi*

El Manar Preparatory Engineering Institute, B.P. 1172, 3018 Tunis, Tunisia  
LR-MAI-ENIT BP37 , National School of Engineers of Tunis, Université de Tunis Manar 1002, Tunisia

D'importants progrès ont été obtenus dans la modélisation du comportement élastoplastique des tôles anisotropes par des méthodes d'homogénéisation (ou calcul micro-macro), qui permettent de reconstituer le comportement polycristal en combinant les données expérimentales sur la texture avec la modélisation des mécanismes élémentaires de la déformation plastique au niveau des grains. D'autre côté, les caractérisations expérimentales du comportement plastique sous diverses sollicitations monotones, (traction uniaxiale, mais aussi traction plane, cisaillement, gonflement hydraulique...) ont été perfectionnées, mais ont été relativement peu évoluées depuis plusieurs décennies.

Une nouvelle voie de caractérisation en cours de développement est celle des méthodes d'identification inverse, qui utilisent des simulations numériques d'essais considérés comme essais homogènes, dans lesquelles la description du comportement du matériau fait appel à un certain nombre de paramètres. Ces paramètres font l'objet d'une procédure d'identification, visant à ce que les résultats numériques s'ajustent sur les résultats expérimentaux. Ces essais sur des éprouvettes de forme complexe permettent d'obtenir des champs de déformation et des trajets de chargement variés dans une seule expérience, ce qui permet de rapprocher des conditions réelles d'emboutissage.

Notre travail s'articule autour de deux points :

Le premier a pour objet de présenter l'état actuel des connaissances sur le comportement plastique des tôles en acier. Des modèles de plasticité des tôles métalliques est analysée, en insistant sur ceux qui visent à rendre compte avec précision de l'anisotropie initiale des matériaux.

Le deuxième point est consacré à la présentation des essais expérimentaux utilisés dans ce travail. La définition et l'interprétation des essais, du point de vue homogénéités des champs de contraintes et de déformations sont précisées. Ainsi, nous présentons une stratégie d'identification de modèle de comportement anisotrope à partir des essais expérimentaux. Un modèle basé sur un critère récent est identifié, permettant de décrire l'érouissage de l'essai de traction hors-axes inhomogène et de prévoir l'évolution de l'écoulement plastique (identification du coefficient d'anisotropie expérimental).

## Références

- [1] Zoubeir, T. Simulation numérique de la mise en forme des tôles, Influence du modèle de plasticité. Thèse de doctorat, Université de Metz, 1995
- [2] A. Znaïdi, O.Daghfas, F. Toussaint, R.Nasri : Strategy for the identification of anisotropic behavior laws for Ti40 sheets . AMPT2015 Madrid SPAIN 2015.
- [3] A.Znaïdi, Stratégie d'identification de lois de comportements anisotropes : Applications aux alliages d'aluminium, Toulouse Plasticité 2010.
- [4] A.Znaïdi, Formulation et identifications des lois de comportements anisotropes d'un alliage d'aluminium 2024T3, Marseille Plasticité 2009.
- [5] Iordache, M. Contribution à la simulation du processus de déformation plastique à froid des tôles. Thèse de l'Université de Pitesti, 2007.

## Déformation de microfils en aluminium coulé

*J. Krebs, S.I. Rao, S. Verheyden, W.A. Curtin et A. Mortensen*

Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Station 12, CH-1015, Lausanne, Suisse

Par infiltration sous pression de moules en chlorure de sodium monocristallin, on peut produire des fils d'aluminium pur monocristallin de diamètre aussi fin que  $6\ \mu\text{m}$  et longs d'un millimètre environ. La déformation de ces monocristaux a lieu, selon leur orientation, par glissement selon un ou plusieurs systèmes comme dans les monocristaux macroscopiques. Elle diffère de ce qu'on observe avec des cristaux macroscopiques par (i) la longueur bien plus grande du Stade I de la déformation et (ii) par le fait que la déformation procède par à-coups, une fraction importante ( $\approx 50\%$ ) de la déformation totale ayant lieu sous forme d'évènement discret de courte durée. La contrainte d'écoulement moyenne de ces microfils monocristallins varie avec l'inverse de leur diamètre, suggérant l'opération de sources à un bras. Ce mécanisme est confirmé par des simulation dislocationnelles 3D de la déformation de tels monocristaux contenant une densité initiale de dislocations analogue à celle des microfils ( $\rho \approx 10^{12}\ \text{m}^{-2}$ ). La distribution statistique de l'amplitude des évènements de déformation rapide suit une loi exponentielle ; les causes sous-jacentes sont discutées au vu des résultats des simulations.

# Plasticité du monocristal de phase MAX par déformation aux petites échelles

*W. Sylvain*<sup>1</sup>, *C. Tromas*<sup>1</sup>, *L. Thilly*<sup>1</sup>, *A. Joulain*<sup>1</sup>, *P. Villechaise*<sup>1</sup>,  
*M. Legros*<sup>2</sup>, *S. Korte*<sup>3</sup>, *C. Zehnder*<sup>3</sup>, *S. Schroders*<sup>3</sup>

1 - Institut Pprime, CNRS, Université de Poitiers, France

2 - Centre d'Élaboration de Matériaux et d'Études Structurales (Cemes)-CNRS, France

3 - Institut für Metallkunde und Metallphysik, RWTH Aachen University, Germany

Les phases MAX sont des matériaux aux caractéristiques étonnantes, combinant certaines propriétés des métaux et des céramiques. Leur application est encore limitée par une transition fragile-ductile observée aux alentours de 900°C. La compréhension du comportement mécanique des phases MAX nécessite une étude à deux échelles. À l'échelle macroscopique tout d'abord, où l'agencement et la forme de ces grains (enchevêtrement des grains sous forme de plaquettes) jouent un rôle important dans le comportement mécanique des phases MAX poly-cristallines en particulier à travers des mécanismes de transferts de charges et de contraintes localisées [1]. À l'échelle microscopique, c'est la structure cristallographique hexagonale des phases MAX qui joue un rôle fondamental. L'étude des mécanismes associés à la structure cristallographique nécessite la mise en œuvre d'essais de déformation à des échelles micrométriques ou sub-micrométriques, afin de sonder la réponse de grains individuels. Dans le cadre de cette étude, nous analysons le cas de la phase MAX  $\text{Ti}_2\text{AlN}$ . Le comportement mécanique de ce dernier a été étudié d'un point de vue macroscopique : essais mécaniques à la température ambiante [1] et essais à haute température [2]. Dans ce travail, nous nous sommes intéressés aux réponses mécaniques de  $\text{Ti}_2\text{AlN}$  d'un point de vue microscopique. Le  $\text{Ti}_2\text{AlN}$  étant synthétisé uniquement sous forme poly-cristalline, les essais mécaniques doivent être effectués à l'échelle du grain. Pour ce faire, deux techniques expérimentales ont été utilisées : 1) la micro-compression et 2) la nano-indentation. L'échantillon de  $\text{Ti}_2\text{AlN}$  a été synthétisé par métallurgie des poudres et par la suite les orientations cristallographiques des grains ont été déterminées par la technique de diffraction des électrons rétrodiffusés. Des micro-piliers ont été usinés par faisceau d'ions focalisés dans des grains d'orientations cristallographiques différentes. Les piliers obtenus ont été déformés avec un indenteur équipé d'un poinçon plat afin de reproduire un essai de compression standard à échelle micrométrique. Des observations post-mortem des piliers ont été observées par microscopie électronique à balayage. Des réseaux d'empreintes, étalés sur un ensemble de grains, ont été aussi réalisés par nano-indentation. Deux types d'indentations ont été effectués : indentation *cyclée* à la température ambiante et l'indentation *monotone* à haute température. Les empreintes résiduelles ont été observées par microscopie à force atomique. Pour l'indentation en température, des lames minces ont été extraites pour des observations par microscopie électronique en transmission afin d'étudier les configurations des dislocations sous l'empreinte.

## Références

- [1] A. Guitton, S. Van Petegem, C. Tromas, A. Joulain, H. Van Swygenhoven, et L. Thilly, Appl. Phys. Lett., vol. 104, no 24, p. 241910, 2014.
- [2] A. Guitton, A. Joulain, L. Thilly, et C. Tromas, Sci. Rep., vol. 4, 2014.

# Etude des défauts étendus produits par la compression de nanopiliers de silicium à température ambiante

A. Merabet<sup>1</sup>, M. Texier<sup>1</sup>, C. Tromas<sup>2</sup>, M. Verdier<sup>3</sup>, A. Talneau<sup>4</sup>, O. Thomas<sup>1</sup>, J. Godet<sup>2</sup>

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

2 - Institut Pprime, UPR3346 CNRS – Université de Poitiers, F-86962 Futurscope – Chasseneuil du Poitou Cedex, France

3 - SIMaP, Université Joseph Fourier, CNRS, UMR5266, F-38402 Saint Martin-d'Hères, France

4 - Laboratoire de Photonique et de Nanostructures, CNRS, F-91460 Marcoussis, France

Au cours des dernières décennies, les progrès technologiques ont permis une évolution considérable des procédés de conception et de fabrication des nanostructures ouvrant de nouvelles perspectives pour l'étude des propriétés des matériaux à l'échelle nanométrique. Des recherches récentes ont montré que les propriétés physiques des matériaux aux petites échelles (optiques, électroniques, mécaniques ...) sont différentes de celles de l'état massif. Ainsi, le silicium, qui est connu pour son comportement fragile à température ambiante, présente dans certaines conditions un comportement ductile inattendu lorsque la taille des échantillons est inférieure à quelques centaines de nanomètres [1]. Néanmoins, les mécanismes responsables de ce changement de comportement demeurent inconnus.

Ce travail vise à étudier, en combinant simulations et expériences, la structure et le comportement des défauts étendus nucléés dans des piliers de silicium de 100 nanomètres de diamètre afin d'identifier l'origine de la transition fragile-ductile observée aux petites échelles.

Les échantillons ont été préparés par le procédé de gravure ionique réactive. Ceux-ci ont été ensuite déformés en compression avec une vitesse de déformation de  $10^{-4} \text{ s}^{-1}$  en utilisant un nano-indenteur équipé d'un poinçon plat et opérant en mode déplacement contrôlé. Les courbes contrainte-déformation obtenues lors des essais de compression témoignent des premiers stades de déformation plastique (*pop in*). Les observations *post mortem* des nanopiliers déformés effectuées par SEM et TEM montrent que la déformation plastique s'accompagne de la propagation de différents types de défauts étendus. La comparaison entre les images expérimentales et simulées en HRTEM met en évidence la propagation simultanée de dislocations partielles et parfaites dans les plans {111}. En outre, des événements plastiques inattendus ont été également observés dans les plans {113}.

*Ce travail est effectué dans le cadre du projet BiDuL "Brittle-to-Ductile Transition in Silicon at Low dimensions" financé par l'Agence Nationale de la Recherche (ANR-12-BS04-0003-01, SIMI4 program).*

## Références

- [1] F.Östlund et al., Brittle-to-Ductile Transition in Uniaxial Compression of Silicon Pillars at Room Temperature, *Adv. Func. Mat.*, 19, p1(2009).

# L'implantation de Ga, un facteur qui limite l'évaluation de contraintes par une méthode de FIB

*Diana Courty*<sup>1</sup>, *Alla S. Sologubenko*<sup>1,2</sup>, *Stephan S. A. Gerstl*<sup>2</sup> et *Ralph Spolenak*<sup>1</sup>

1 - Laboratory for Nanometallurgy, ETH Zurich, Switzerland

2 - Scientific Center for Optical and Electron Microscopy, ETH Zurich, Switzerland

Afin d'évaluer les contraintes dans différents matériaux de manière fiable et flexible une méthode basée sur la sonde ionique focalisée (Focused Ion Beam Microscope (FIB)) a été développée pour obtenir les informations sur les contraintes dans un matériau, spécialement dans les couches minces [1, 2, 3]. Cette méthode nommée "FIB-DIC micron-scale ring-core method" est basée sur l'analyse de la relaxation du matériau pendant le creusement progressif d'un faisceau du FIB. Pour standardiser cette méthode graduelle de FIB-DIC pour évaluer les contraintes intrinsèques à l'échelle sub-micronique, les limites de la méthode doivent être étudiées en détail.

Une des plus importantes questions est la limite de la technique en raison du Ga introduit dans le matériau. Dans la présente étude on caractérise les zones touchées par le Ga et la quantité de Ga ayant pénétré, afin de déterminer la limite de résolution de la méthode due aux zones affectées par les ions. La microscopie électronique en transmission (Transmission Electron Microscopy (TEM)) et la sonde atomique tomographique sont utilisées sur un choix de matériau afin de visualiser et d'évaluer les zones induit de Ga.

Pour une étude systématique de la quantité de Ga, le FIB a été employé avec des paramètres différents pour introduire du Ga dans un Si PSM (pre-sharpened mount), utilisé couramment avec la sonde atomique. De plus l'effet de l'exposition à l'environnement des surfaces affectées par du Ga doit être analysé pour différentes doses d'ions et différents voltages d'accélération (5 kV, 30 kV). La sonde atomique est utilisée pour caractériser la distribution spatiale du Ga en fonction des paramètres d'implantation et pour visualiser et quantifier des gradients de ségrégation et de concentration locaux, qui peuvent être intéressants.

## Références

- [1] [www.istress.eu](http://www.istress.eu).
- [2] Sebastiani et al., 2011, Mater. Sci. Eng. A, 528 :7901–7908.
- [3] Korsunsky et al., 2009, Mater. Lett., 63 :1961–1963.
- [4] Larson et al., 1999, Ultramicroscopy, 79 :287-293.
- [5] Thompson et al., 2007, Ultramicroscopy, 107 :131–139.

# Mechanical behavior of heterogeneous polycrystals and their size dependency

*A. Abdul-Latif*

The nanocrystalline (nc) and ultrafine grained (ufg) materials are one of those materials which receive a particular attention due to its advanced and impressive properties. These materials have average grain sizes vary between the sub-micrometer (100-1000 nm) and nanometer (less than 100 nm). In this work, a micromechanical approach is proposed to predict grain size effect on the enhancement of the mechanical strength of ufg polycrystals according to the Hall-Petch relationship. It deals with the effect of two different ranges of grain size ( $d$ ) especially on the yield strength. The first range varying from  $d > 1000$  nm to 100 nm gives a linear increase of the yield strength with respect to decreasing the inverse square root of grain size decrease, whereas the second range is also linearly varied from  $d < 100$  nm to 10 nm with another slope. The concept of distribution of a random different grains size having a log-normal statistical function is also proposed. The approach is based on a simplified non-incremental inclusion/matrix interaction law describing the non-linear elastic-inelastic behavior of fcc metallic polycrystals. Within the framework of small strain assumption, the granular elastic anisotropy and grain rotation are neglected for simplicity. In this scheme, the heterogeneous inelastic deformation is locally determined using the slip theory. With the effect of random grains size distribution on the mechanical behavior, the new extension describes fairly well the strain-stress behavior of the sub-micrometer nickel and copper materials for different grain sizes.

# Etude Mésoscopique en 3D de la Mécanique des Fissures Courtes dans les Matériaux Ductiles

*L. Korzeczek<sup>1,2</sup>, R. Gatti<sup>1</sup>, A. Ross<sup>2</sup>, B. Devincré<sup>1</sup>*

1 - Laboratoire d'Etude des Microstructures [UMR104 CNRS-ONERA]

2 - Département des Matériaux et Structures Métalliques [ONERA]

La rupture par fatigue des matériaux cristallins ductiles résulte de la propagation d'une fissure sous chargements cycliques à des niveaux de contraintes faibles en comparaison des chargements nécessaires pour propager une même fissure lors de chargements monotones. On vérifie expérimentalement qu'il existe un facteur d'intensité de contrainte en dessous duquel l'endommagement par propagation de fissures est intimement relié aux caractéristiques microstructurales du matériau.

Dans les matériaux ductiles, la stabilisation de la fissure due au développement d'une zone plastique en tête de fissure semble être le mécanisme décisif. Cette stabilisation est l'effet de l'interaction en 3D entre la dynamique des dislocations dans la zone plastique et la fissure via des mécanismes d'érouissage plastique de la pointe de fissure par absorption de dislocations et des mécanismes d'écrantage élastiques associés à une polarisation des contraintes associées aux microstructures de dislocations.

Pour modéliser de façon réaliste le développement de la zone plastique, nous avons réalisé des simulations avec le Modèle Discret-Continu (MDC) [1]. Le MDC repose sur un couplage entre simulations de DD et simulations EF. A l'aide de la théorie des Eigenstrain, ce modèle permet de rendre compte précisément des hétérogénéités de la déformation plastique, pour une géométrie et des conditions de sollicitations complexes comme ceux rencontrés en tête de fissure.

Nos premières simulations réalisées pour le Cu montrent que l'écrantage et l'érouissage en pointe de fissure varient en intensité et en distribution en fonction de l'orientation cristalline d'une fissure. Ainsi, une étude de sensibilité du taux de restitution de l'énergie de déformation sur la fissure en fonction : -de la densité initiale de dislocation, -de l'activité du glissement dévié et -du mode de chargement à été effectué.

Ces simulations sont ensuite comparées avec les outils usuels de la mécanique de la rupture. Pour ce faire, les paramètres d'une loi de plasticité cristalline [2] ont été identifiés afin de reproduire la plasticité d'un monocristal CFC en sollicitation monotone. Une attention particulière a été apportée ici à la sélection des systèmes de glissement activés en fonction de l'orientation cristalline. Comme illustré sur la Figure 1, nos premiers résultats révèlent de fortes différences entre modélisations discrètes et continues à l'échelle de plusieurs dizaines de micromètre.

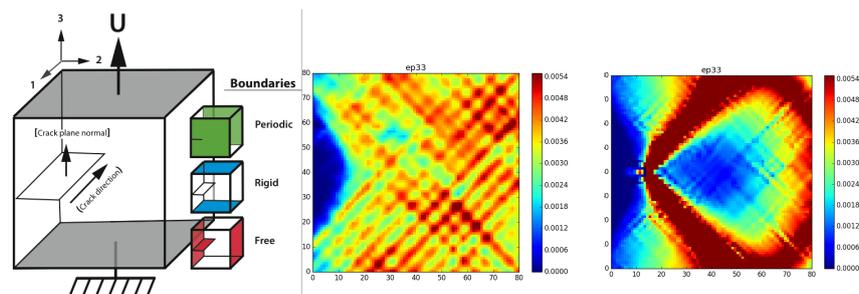


FIGURE 1 – Deformation plastique  $ep_{33}$  cumulé sur un plan ( $yz$ ) lors d'un essai de traction monotone à 0.1% de déformation macroscopique. a) Géométrie avec une fissure d'orientation  $[001]/(100)$ . b) Simulation MDC. c) Simulation Plasticité Cristalline.

## Références

- [1] O. Jamond, R. Gatti, A. Roos, B. Devincré, Consistent formulation for the Discrete-Continuous Model : Improving complex dislocation dynamics simulations, International Journal of Plasticity, Volume 80, May 2016, Pages 19-37.
- [2] C. Gérard, G. Cailletaud, B. Bacroix, Modeling of latent hardening produced by complex loading paths in FCC alloys, International Journal of Plasticity, Volume 42, March 2013, Pages 194-212.

# Plasticité/hydrogène dans les métaux c.f.c. impact sur l'hétérogénéité et la localisation de la déformation

*M. Risbet*<sup>1</sup>, *A. Oudriss*<sup>2</sup>, *A. Metsue*<sup>2</sup>, *D. Delafosse*<sup>3</sup>, *X. Feaugas*<sup>2</sup>

1 - Laboratoire Roberval, UMR CNRS 6253, UTC, Compiègne, France

2 - LaSIE, UMR CNRS 7356, ULR, F-17000 La Rochelle, France

3 - Laboratoire Georges Friedel UMR CNRS 5307, SMS-EMSE, F-42023 Saint-Etienne, France

Cette présentation a pour objet de décrire les différents types de localisation de la déformation plastique à l'échelle des dislocations dans le cadre d'un formalisme représentatif des diverses sollicitations : traction, fatigue et rochet cyclique. La formation des bandes de déformation (DB), des bandes de cisaillement (SB) et des bandes de glissement persistante (PSB) est ainsi discutée en relation avec la déformation plastique cumulée et l'amplitude de déformation plastique (carte de Pedersen). Dans un deuxième temps, nous démontrons l'impact de l'hydrogène sur la localisation de la déformation plastique et discutons des conséquences sur l'érouissage en stade II. Enfin, nous illustrons l'importance de la nature des bandes de déformations sur l'amorçage en fatigue et discutons des possibles implication de l'hydrogène sur ce processus.

## Références

- [1] G. Girardin, C. Huvier, D. Delafosse, X. Feaugas, Correlation between dislocation organization and slip bands : TEM and AFM investigations in hydrogen-containing nickel and nickel-chromium, *Acta Materialia*, 91 (2015) 141-151.
- [2] Ho, H.S., Risbet, M., Feaugas, X., On the unified view of the contribution of plastic strain to cyclic crack initiation : Impact of the progressive transformation of shear bands to persistent slip bands, *Acta Materialia*, 85 (2015) 155-167.

# Effet des recoulées successives sur le comportement mécanique d'alliages dentaires de type Co-Cr

*AS. Vaillant, JP. Jehl, P. De March, S. Fleutot, F. Cleymand*

Equipe DOLPHIN, Nanomatériaux pour la Vie et développement responsable, département N2EV  
Institut Jean Lamour, UMR 7198 CNRS. Université de Lorraine. Parc de Saurupt CS 14234, Nancy

Dans la majorité des cabinets de chirurgie dentaire, pour réaliser des réhabilitations prothétiques fixées, des alliages à base prédominante (type Co-Cr ou Ni-Cr) sont utilisés. Les fabricants d'alliage dentaire recommandent de ne pas réutiliser d'alliage à base prédominante préalablement coulé [1], d'autant que les études montrent l'influence négative des coulées successives en termes de corrosion ou cytotoxicité [2]. Cependant, aucune étude expérimentale et/ou théorique ne peut donner de recommandations concrètes quant à la quantité d'alliage maximale qu'il est possible de réutiliser, ou quant au nombre de coulées maximales qu'il est possible de mettre en œuvre avant que les propriétés mécaniques de l'alliage soient insuffisantes [3].

Nous présentons ici l'étude du comportement mécanique des alliages recoulés en environnement sec, qui nous a permis de définir une loi de comportement, laquelle nous permet ensuite d'établir des recommandations cliniques. Nous présentons ici les résultats obtenus sur des échantillons d'alliage Co-Cr (Ivoclar Vivadent<sup>TM</sup>) : des groupes d'alliages ont été élaborés avec une proportion variable d'alliage neuf inclus (0, 25, 50 et 75%) et un nombre variable de coulées successives (de 1 à 5).

Le comportement mécanique de ces matériaux a été étudié grâce à des tests d'indentation statique (essais de dureté Vickers et essais en nano indentation instrumentée). La méthode inverse de Dao [4] nous permet de définir avec ces résultats une courbe contrainte déformation. Nous corrélons ensuite les résultats obtenus à l'analyse microstructurale et chimique (réalisée en microscopie électronique à balayage) Des phénomènes de ségrégation ont également été mis en évidence, ce qui nous permet de présenter des résultats novateurs dans ce domaine et de formuler des recommandations quant à la coulée d'alliages dentaires.

Les résultats obtenus et le protocole défini seront présentés et discutés dans cette communication.

## Références

- [1] J. Palaskar, DV. Nadgir, I. Shah, Effect of Recasting of Nickel : Chromium Alloy on its Castability. J Indian Prosthodont Soc. 10(3),160-164 (2010).
- [2] M. Walczak, et al, The issue of using remelted CoCrMo alloys in dental prosthetics, Archives of Civil and Mechanical Engineering, Volume 12, Issue 2. Pages 171-177 (2012).
- [3] AS. Vaillant-Corroy , P. Corne , P. De March, S Fleutot, F.Cleymand, Influence of recasting on the quality of dental alloys : A systematic review. J Prosthet Dent. Aug ;114(2) :205-211 (2015).
- [4] H. Dao, N. Chollacoop, K.J. Van Vliet, T.A. Venkatesh, S. Suresh, Computational modeling of the forward and reverse problems in instrumented sharp indentation, Acta Materialia, 49 (19), 3899-3918. (2001).

# Origine du maclage $\{332\} \langle 113 \rangle$ dans les alliages de titane $\beta$ -métastable

*Philippe Castany<sup>1</sup>, Yang Yang<sup>1</sup>, Emmanuel Bertrand<sup>2</sup>, Thierry Gloriant<sup>1</sup>*

1 - INSA Rennes, Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR CNRS 6226), 20 avenue des Buttes de Coësmes, 35708 Rennes Cedex 7, France

2 - Institut des Matériaux Jean Rouxel (IMN), Université de Nantes, CNRS, Rue Christian Pauc, BP 50609, 44306 Nantes Cedex 3, France

Les alliages de titane  $\beta$ -métastable sont de plus en plus utilisés dans de nombreux domaines d'applications allant de l'aéronautique au biomédical. Ces alliages peuvent se déformer par différents mécanismes lorsqu'ils sont soumis à une sollicitation mécanique : glissement de dislocations, transformation martensitique sous contrainte et/ou maclage. Contrairement aux autres métaux de structure cubique centrée qui maclent selon le système  $\{112\} \langle 111 \rangle$ , le maclage dans ces alliages est majoritairement dû au système  $\{332\} \langle 113 \rangle$ .

Le but de cette étude est d'apporter des éléments de compréhension sur l'origine de ce système de maclage particulier. Nous avons choisi un alliage modèle de composition Ti-27Nb (% atomique) qui a été élaboré au laboratoire et dont la microstructure a été optimisée par différents traitements thermo-mécaniques. Compte tenu de sa composition chimique, cet alliage est supposé être superélastique : c'est à dire qu'il est le siège d'une transformation martensitique sous contrainte réversible qui lui permet d'obtenir une déformation recouvrable de l'ordre de 2%. L'observation des macles a été faite par EBSD et MET à partir d'éprouvettes déformées en traction jusqu'à 5% de déformation.

Les analyses EBSD montrent alors un maclage massif dû à l'activation du système  $\{332\} \langle 113 \rangle$  uniquement. Les observations au MET confirment ces résultats (Figure ci-dessous). Cependant, des essais de traction in situ sous rayonnement synchrotron confirment la superélasticité de cet alliage et montrent que la transformation de la phase  $\beta$  vers la martensite  $\alpha''$  (orthorhombique) est totale : la microstructure est totalement transformée en phase  $\alpha''$  à partir de 3% de déformation. Autrement dit, lorsque les macles se forment, la microstructure n'est plus constituée de phase  $\beta$ . Les macles  $\{332\} \langle 113 \rangle$  observées après déformation sont donc la résultante de macles formées alors que la microstructure est entièrement constituée de martensite  $\alpha''$  sous contrainte. Elles se sont ensuite transformées à nouveau en phase  $\beta$  suite à la transformation martensitique inverse lorsque la contrainte a été relâchée. A partir de reconstructions cristallographiques, nous discuterons donc de l'origine du système de maclage  $\{332\} \langle 113 \rangle$  dans les alliages de titane  $\beta$ -métastable, et plus particulièrement du rôle de la transformation martensitique  $\beta$ - $\alpha''$ .

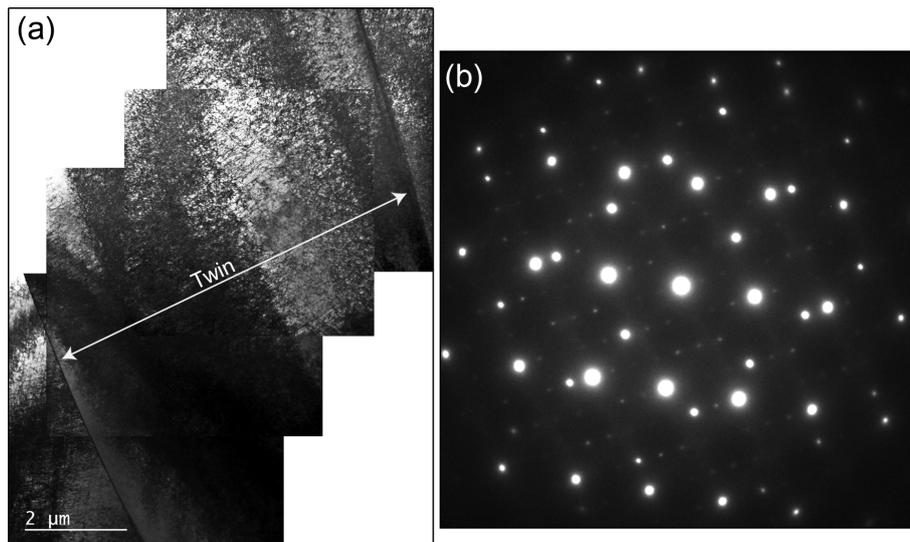


FIGURE 1 – Image MET en champ clair d'une macle dans l'alliage Ti-27Nb déformé à 5% (a) et cliché de diffraction électronique correspondant (b).

# Les traces de glissement : signature fiable de la plasticité des matériaux cristallins ?

*C. Coupeau, J. Bonneville, J. Colin, M. Drouet, J. Durinck, J. Grilhé*

Institut Pprime, UPR 3346 CNRS, Dpt de Physique et Mécanique des Matériaux, Université de Poitiers/CNRS/ENSMA, France

La déformation plastique des matériaux cristallins conduit à l'apparition en surface de marches atomiques liées au mouvement des dislocations émergentes. La hauteur des marches correspond à la composante normale à la surface du vecteur de Burgers des dislocations, tandis que leur orientation est intimement liée à leur plan de glissement. L'analyse fine de ces traces de glissement apporte ainsi des informations importantes sur les mécanismes élémentaires de plasticité, en complémentarité des observations MET en volume.

Des monocristaux d'Au ont été déformés à basse température (180 K). Les traces de glissement générées en surface par le processus d'émergence des dislocations conduisent à la création d'une structure en 'damier', par cisaillement des marches vicinales (Fig. 1a). La configuration morphologique élémentaire formée par l'intersection entre une marche vicinale et une trace de glissement est constituée de 4 niveaux de terrasses autour du point d'intersection, comme visualisé dans le carré blanc (Fig. 1) pour plusieurs terrasses. Les monocristaux ont ensuite subi un recuit à 300 K, autorisant la diffusion atomique en surface. Il est alors expérimentalement constaté une déstabilisation de la structure en 'damier' initiale et l'apparition d'un 'pont' entre les deux terrasses de même niveau (Fig. 1b). Ces résultats suggèrent un phénomène de diffusion des atomes d'Au de long des marches atomiques, du point d'intersection vers l'extérieur du côté de la terrasse supérieure et de l'extérieur vers le point d'intersection au niveau de la terrasse inférieure (schémas en Fig. 2). Une modélisation basée sur des considérations énergétiques a permis de montrer que cette déstabilisation était toujours favorable, quel que soit l'angle d'intersection entre la marche atomique vicinale et la trace de glissement, en bon accord avec les observations expérimentales STM.

Bien que ce processus puisse constituer une nouvelle voie de nanostructuration de surfaces, il apparaît fortement préjudiciable pour l'étude des mécanismes élémentaires de plasticité, dans la mesure où les traces de glissement peuvent partiellement disparaître, voire être totalement effacées.

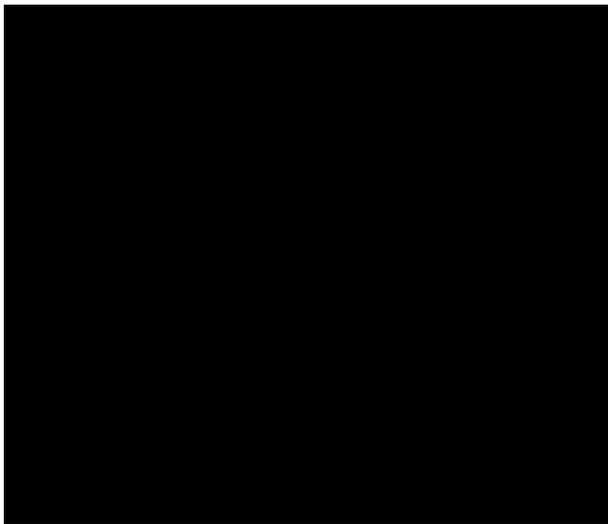


FIGURE 1 – Monocristal d'Au{111} déformé à 180 K. Une trace de glissement élémentaire est observée (dislocation arrêtée au point X). Observations STM (a) à  $T = 180$  K (b) à  $t = 1\text{h}37'$  durant un recuit à 300 K.

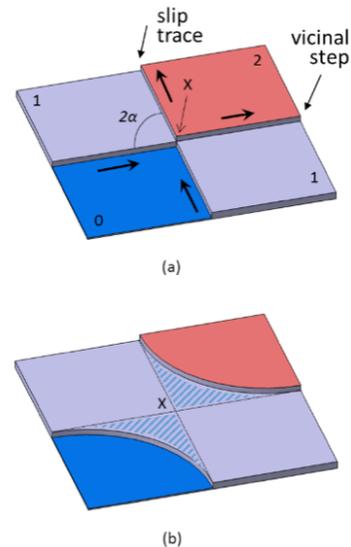


FIGURE 2 – Scénario de la déstabilisation de la structure de surface. (a) Structure initiale en 'damier'. (b) Structure finale résultant de la diffusion atomique (flèches noires) et aboutissant à des marches curvilignes.

# Influence de l'élasticité du substrat sur l'endommagement en front de délaminage des structures de cloquage de films minces

R. Boijoux<sup>1,2</sup>, G. Parry<sup>1</sup>, R. Estevez<sup>1</sup>, C. Coupeau<sup>2</sup>

1 - SIMaP – Dpt. Phys. du Métal, Grenoble-INP - CNRS - Université Joseph Fourier, 1130 rue de la piscine, Domaine Universitaire BP75, 38402 Saint-Martin d'Hères

2 - Institut P' – Dpt. Phys. & Méca. des Matériaux, CNRS - Université de Poitiers - ENSMA, UPR 3346, SP2MI - Téléport 2, BP 30179, 86962 FUTUROSCOPE Chasseneuil Cedex

Les films minces sont de nos jours utilisés dans des domaines applicatifs variés (revêtements biocompatibles pour les utilisations médicales, électronique flexible, photovoltaïque...). En conditions de service, ces matériaux revêtus sont parfois soumis à de fortes contraintes pouvant provoquer leur endommagement par cloquage et aboutissant à une éventuelle perte de leurs propriétés fonctionnelles. Il est dorénavant bien connu que l'élasticité du substrat occasionne un changement de morphologie des structures cloquées. Cet effet peut clairement influencer, par couplage, le comportement en rupture du front de délaminage, et par conséquent la croissance/propagation de ces structures cloquées. Dans ce contexte, une approche associant essais expérimentaux *in situ* et simulations numériques par éléments finis a été adoptée pour mieux appréhender les mécanismes élémentaires mis en jeu.

Des films minces (Ni, Cu, W, Zr, Au d'épaisseur de 100 à 400 nm) sont déposés par pulvérisation ionique (PVD) sur des substrats de polycarbonate ( $E_s = 2,4$  GPa). Ces échantillons revêtus sont ensuite soumis à une compression uni-axiale sur un banc adapté couplé à un AFM, permettant des scans *in situ* pendant la déformation [1]. Le profil des cloques générées en surface, en forme de "mexican hat" caractéristique de l'élasticité du substrat est mis en évidence (Fig. 1.a). Cette géométrie particulière influence la propagation et les interactions entre cloques, par le biais des champs mécaniques transmis via le substrat souple (Fig. 1.b). Des simulations numériques par éléments finis sont réalisées en utilisant une loi d'interaction cohésive pour modéliser l'interface film/substrat [2]. La rupture de l'interface est considérée comme irréversible et l'influence de la mixité modale (rapport entre composante de cisaillement et composante normale de la traction interfaciale) sur la ténacité de l'interface est prise en compte. On montrera que le modèle proposé offre des résultats tout à fait comparables à ceux obtenus dans le cadre de la mécanique de la rupture élastique linéaire pour la configuration de ride droite sur substrat rigide [3]. Les résultats numériques obtenus pour différents contrastes élastiques entre le film et le substrat seront ensuite présentés et confrontés aux morphologies déterminées expérimentalement par AFM.

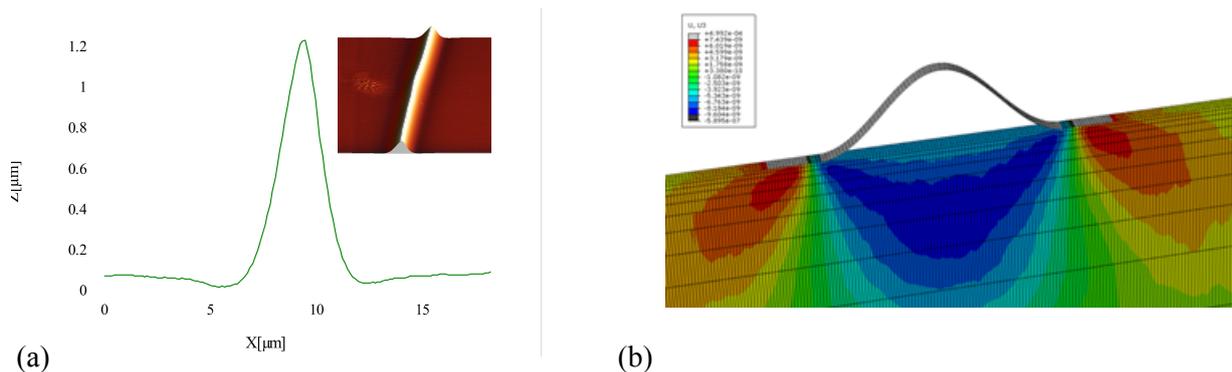


FIGURE 1 – (a) Profil caractéristique d'une structure cloquée sur substrat souple présentant un léger enfoncement en front de cloque. (b) Cartographie de la composante normale à la surface du champ de déplacement dans le cas d'un cloquage sur substrat souple (simulations FEM).

## Références

- [1] F. Cleymand, C. Coupeau, J. Colin, J. Grilhé – J. Phys. IV, 10, 2000
- [2] JY. Faou, G. Parry & al., PRL 108, 2012
- [3] J. Hutch & Z. Suo, Advances in Applied Mechanics, vol. 29, 1992

# Maclage dans l'alliage de haute entropie CrMnFeCoNi

*G. Laplanche, A. Kostka, O. Horst, G. Eggeler, E.P. George*

Institut für Werkstoffe, Ruhr-Universität Bochum, 44801 Bochum, Germany

De récentes études ont montré que le maclage à l'échelle nanométrique procure un mécanisme de déformation supplémentaire au glissement de dislocation dans l'alliage CFC de haute entropie CrMnFeCoNi [1]. Dans cette étude, des essais de traction, réalisés à température ambiante (293 K) et à la température de l'azote liquide (77 K), sont interrompus à différents niveaux de déformation pour caractériser l'évolution microstructurale par microscopie électronique en transmission. En particulier, les contraintes et déformations critiques conduisant à l'apparition du maclage à 293 K et 77 K sont déterminées. De plus, l'évolution des densités de dislocations ainsi que des distances moyennes entre les macles sont évaluées de manière quantitative afin de déterminer leurs contributions relatives à la contrainte d'écoulement. Les résultats apportent de nouveaux éléments de compréhension des mécanismes de déformation de l'alliage CrMnFeCoNi qui sont responsables de leur ductilité, résistance à la fracture et taux d'écroutissage élevés.

## Références

- [1] F. Otto, A. Dlouhy, C. Somsen, H. Bei, G. Eggeler, E.P. George, *Acta Mater.* 61 (2013) 5743.

# Étude à l'échelle atomique des disconnexions dans le zirconium

*Olivier MacKain<sup>1</sup>, Maeva Cottura<sup>1</sup>, David Rodney<sup>2</sup>, Emmanuel Clouet<sup>1</sup>*

1 - CEA, DEN, Service de Recherches de Métallurgie Physique, F-91191 Gif-sur-Yvette

2 - Institut Lumière Matière, UMR 5206, Université de Lyon 1 – CNRS, F-69622 Villeurbanne

La plasticité du zirconium, ainsi que celle des métaux hexagonaux compacts en général, est principalement contrôlée par le glissement de dislocations ayant un vecteur de Burgers selon la direction  $\langle a \rangle$  de la maille. Ces dislocations ne peuvent cependant pas conduire à une déformation le long de l'axe  $\langle c \rangle$ . Pour accommoder une telle déformation, il devient indispensable de tenir compte des dislocations  $\langle c + a \rangle$  ou du maclage. Ce dernier est le mécanisme prédominant aux basses températures et reste actif à température ambiante même s'il n'est plus majoritaire. Dans ce travail, nous nous sommes intéressés tout particulièrement aux mécanismes contrôlant la croissance des macles. Pour cela, une approche à l'échelle atomique a été réalisée en utilisant un potentiel atomique de type EAM et des calculs *ab initio*. Quatre systèmes de maclage peuvent être activés dans le zirconium, selon la température et la nature de la contrainte (tension ou compression) le long de l'axe  $\langle c \rangle$ . Nous avons simulé dans un premier temps les joints de macles parfaits. Cette étude préliminaire montre la capacité des potentiels EAM à prédire les bonnes structures et énergies relatives si l'on prend les calculs *ab initio* comme référence. Dans un second temps, nous nous intéressons aux disconnexions, c'est-à-dire les dislocations d'interfaces qui glissent le long des joints de macles et transmettent le cisaillement nécessaire à la croissance de la macle. Pour un système de maclage donné, il peut exister des disconnexions non seulement de vecteur de Burgers et de hauteur différents, mais aussi avec diverses structures de cœur. Pour chacune de ces configurations et pour chacun des systèmes de maclage, nous avons entrepris d'étudier la stabilité (énergie de formation) et la mobilité (énergie de migration) de la disconnection. De plus, une approche élastique a été développée afin de soustraire des simulations atomistiques l'énergie élastique stockée dans la boîte de simulation afin d'extraire pour chaque disconnection l'énergie de cœur, c'est-à-dire l'énergie d'excès intrinsèque à la disconnection ne dépendant pas de son environnement et donc des conditions de simulation. Cette étude exhaustive nous donne les informations nécessaires au développement d'un modèle cinétique de croissance des macles par germination de disconnection, permettant ainsi d'étudier la compétition entre les différents modes de croissances des macles hors et sous contrainte.

# Etude de la microstructure et des propriétés mécaniques de composites Al/Al-Cu-Fe synthétisés par frittage flash

*A. Joseph<sup>1</sup>, A. Joulain<sup>1</sup>, V. Gauthier-Brunet<sup>1</sup>, C. Tromas<sup>1</sup>, J. Bonneville<sup>1</sup>, S. Dubois<sup>1</sup>, J-P. Monchoux<sup>2</sup>*

1 - INSTITUT P' - CNRS - Université de Poitiers – ISAE ENSMA - UPR 3346 – 11 Boulevard Marie et Pierre Curie, BP 30179, 86962 Futuroscope Chasseneuil Cedex

2 - CEMES - CNRS – 29 rue Jeanne Marvig, BP 94347, 31055 Toulouse

Les matériaux composites à matrice aluminium renforcée par des particules d'alliage Al-Cu-Fe sont des matériaux prometteurs pour remplacer les matériaux à renforts céramiques généralement très coûteux. Les alliages intermétalliques Al-Cu-Fe associent facilité d'élaboration et excellentes propriétés mécaniques (dureté, module d'élasticité et contrainte à la rupture élevés) et tribologiques. Ce type de renfort devrait, de plus, permettre d'obtenir une bonne adhésion au niveau des interfaces métal/métal entre renfort et matrice.

L'objectif de cette étude est d'optimiser les propriétés mécaniques des composites Al/ $\omega$ -Al<sub>70</sub>Cu<sub>20</sub>Fe<sub>10</sub> par le contrôle de leur microstructure. Cela nécessite une bonne compréhension des propriétés mécaniques à partir d'une analyse fine des microstructures en lien avec les mécanismes de déformation.

Les composites Al/ $\omega$  sont produits par frittage flash (SPS) à  $T = 823$  K, à partir de poudre d'aluminium et de particules quasi-cristalline Al-Cu-Fe. A cette température, les particules de renfort subissent une transformation de phase de la structure quasi-cristalline icosaoédrique (i-Al<sub>63,5</sub>Cu<sub>24</sub>Fe<sub>12,5</sub>) à une structure cristalline tétragonale ( $\omega$ -Al<sub>70</sub>Cu<sub>20</sub>Fe<sub>10</sub>). Les paramètres de synthèse ont été optimisés afin de produire des composites denses présentant une distribution spatiale uniforme des particules de renfort.

Les tests de compression macroscopiques ont été réalisés à vitesse de déformation constante et à différentes températures ( $273 < T < 823$  K) sur les composites Al/ $\omega$  optimisés élaborés par SPS. Les courbes contrainte-déformation obtenues ont été comparées à celles de composites synthétisés par SPS sans optimisation ainsi qu'à ceux synthétisés, lors d'une précédente étude, par Compression Isostatique à Chaud (CIC). Les résultats montrent que l'optimisation des paramètres de synthèse permet d'obtenir des composites dont les contraintes d'écoulement sont non seulement supérieures aux composites SPS non optimisés mais également aux composites CIC. L'analyse microstructurale réalisée par MET révèle la présence de précipités Al<sub>2</sub>Cu dans la matrice Al, dont les stades de précipitation diffèrent pour les composites SPS et CIC.

Sachant que le comportement plastique du composite se situe essentiellement au niveau de la matrice Al, une caractérisation locale des propriétés mécaniques de la matrice a été réalisée par nano indentation au sein du composite SPS ainsi que des observations MEB couplées aux analyses EDXS. Les courbes force-déplacement dans la matrice Al montrent des instabilités caractéristiques de l'interaction dynamique entre dislocations et solutés mobiles. La comparaison des cartographies ainsi que l'analyse quantitative des courbes de déformation indique une forte corrélation entre hétérogénéités chimiques et propriétés mécaniques de la matrice Al.

# Simulation atomistique du comportement de nanoparticules métalliques cubiques à faces centrées sous compression uniaxiale

*Selim Bel Haj Salah, Céline Gerard, Laurent Pizzagalli*

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

La réponse mécanique de nanoparticules métalliques présente un intérêt particulier en raison de leurs propriétés spécifiques comparées à leurs homologues massifs. Cependant, ce type de nano-objets a été beaucoup moins étudié que les autres systèmes de faible dimension comme les nanofils et les nanopiliers. Pour améliorer notre compréhension actuelle dans ce domaine, des simulations par dynamique moléculaire ont été conduites afin de modéliser la compression uniaxiale de nanoparticules métalliques cubiques à faces centrées (CFC). Les potentiels EAM (Embedded Atom Method) ont été utilisés pour décrire les interactions interatomiques d'Al, Ni, Cu et Ni<sub>3</sub>Al. L'accent est particulièrement mis sur la dépendance du comportement mécanique à différents paramètres tels que la taille, l'orientation de la nanoparticule, et la température.

Ce travail caractérise tout d'abord l'effet de taille sur le module d'élasticité des nanoparticules métalliques CFC par rapport à leurs homologues massifs. Les mécanismes de déformation plastique sont ensuite analysés en détail. Dans tous les cas, des dislocations partielles nucléent au niveau des surfaces de contact de la nanosphère, puis se propagent au travers de la nanoparticule. En fonction de l'orientation cristallographique de la nanoparticule, le processus de nucléation peut entraîner, ou non, la formation temporaire d'une structure pyramidale. Plusieurs matériaux CFC ont été testés afin d'envisager les effets de l'énergie de défaut d'empilement sur les mécanismes de déformation plastique. Les mécanismes de déformation passent ainsi d'un mécanisme de glissement-dislocation prédominant à celui du maclage avec la diminution de l'énergie de défaut d'empilement.

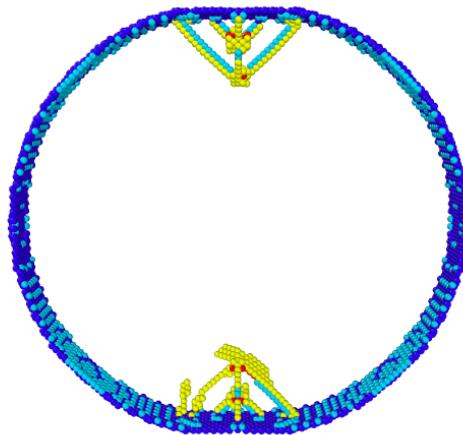


FIGURE 1 – Formation d'une structure pyramidale au cours de la compression uniaxiale d'une nanoparticule monocristalline (Représentation du nombre de coordination).

# Etude des mécanismes de recristallisation dans un acier IF-Ti après faible déformation par laminage ou par traction

*A. Samet, A-L. Etter et T. Baudin*

Institut préparatoire aux études d'ingénieur de Tunis El Manar- Tunisie  
Université d'Orsay, LPCES, paris-Orsay- France

Les aciers à faibles taux de carbone et les Interstitial Free (IF-Ti, Nb,...) sont largement utilisés dans l'industrie automobile grâce à leur très bonne formabilité. Cette propriété est surtout utilisée pour la mise en forme par emboutissage des tôles de voitures, elle est assurée par la présence de la fibre  $\gamma$  après recuit. L'enjeu scientifique est donc de déterminer les paramètres clés qui favorisent la formation de la fibre  $\gamma$  (texture recherchée au niveau industriel). Deux principaux paramètres, en étroite relation, influencent les mécanismes de recristallisation : les sous-structures de déformation et l'énergie stockée au cours de la déformation à froid. Ces deux paramètres sont largement discutés dans le cadre de ce travail. L'objectif principal est de donner une fine caractérisation (par microscopie électronique en transmission) des sous-structures de déformation et d'estimer l'énergie stockée pour chaque famille d'orientation cristallographique à partir des différentes sous-structures observées. A l'issue de ces résultats et de leur discussion, différents mécanismes de recristallisation seront alors proposés. Le travail se concentrera sur les faibles taux de déformation. Ces derniers ont été choisis car les cinétiques de recristallisation sont ralenties, ce qui permet de suivre les processus mis en jeu au cours des premiers stades de recristallisation. Deux modes de déformation seront étudiés : le laminage et la traction. Ainsi, l'influence de la texture et de la microstructure de déformation sur la texture de recristallisation sera abordée. Une estimation multi-échelle (RX, Indice de qualité par mesure EBSD et calcul basé sur les sous-structure de déformation) de l'énergie stockée au cours de déformation est aussi développée.

## Références

- [1] A. Samet-Meziou, Thèse doctorat , Orsay (2005)
- [2] T. Baudin, A.L. Etter, P. Gerber, A. Samet-Meziou, R. Penelle and C. Rey, Material science forum, Vol. 405-497, p : 129.
- [3] A. Samet-Meziou, A-L. Etter, T. Baudin, R. Penelle, (ICOTOM 7), Material science Forum, p. 323
- [4] A. Samet-Meziou, A. L. Etter, T. Baudin and R. Penelle, Materials Science and Engineering, Volume A 473, p : 342.(2008)

# Plasticité liée au couplage migration/cisaillement dans les joints de grain

*N. Combe, F. Momprou, M. Legros*

CEMES-CNRS, 29 rue Jeanne Marvig, Toulouse

Depuis que l'homme a apprivoisé le feu et les bovidés, les métaux à grains nanocristallins (nc) ( $\leq 100$  nm) présentent une résistance à la déformation plastique largement supérieure au même matériau à taille de grains conventionnelle. Une des spécificités de ces nanocristaux est qu'ils ne contiennent pratiquement pas de dislocations. Plusieurs expériences ont montré que dans ces matériaux, les joints de grains eux-même participaient de façon prépondérante à la déformation plastique [1, 2] par un mécanisme de couplage entre migration et contrainte de cisaillement.

Ce mécanisme de migration couplée au cisaillement est mal connu car peu de gens l'ont étudié, de façon expérimentale ou théorique. Nous avons pu montrer qu'il était basé sur le déplacement de défauts linéaires appelés disconnexions qui sont spécifiques aux joints de grains. Comme pour les dislocations dans les cristaux, les propriétés de ces disconnexions semblent guider le mécanisme de déformation par couplage. Pour arriver à cette conclusion, nous avons à la fois mené des expériences en MET in situ et des simulations en dynamique moléculaire à l'aide de la technique NEB (Nudged Elastic Band). Des études supplémentaires ont été commandées à d'éminents scientifiques [3] afin de renforcer encore cette conclusion, mais leur réponse se fait attendre

## Références

- [1] F. Momprou, M. Legros, D. Caillard, *Pour La Science* 370 (2008) 82.
- [2] F. Momprou, *Bulletin de L'Union Des Physiciens* 879 (2005) 125.
- [3] I. Bogdanov, *Topological origin of inertia*, *Czechoslov. J. Phys.* 51 (2001) 1153

# Influence des hétérogénéités de déformation sur la diffusion et le piégeage de l'hydrogène dans le nickel monocristallin (100)

*A. Oudriss, A. Mestsue, X. Feaugas*

LaSIE, CNRS-UMR 7356 Université de la Rochelle, F-17042 La Rochelle, France

Dans le cadre de cette étude, nous nous sommes intéressés à l'influence des hétérogénéités de déformation plastique sur les processus de transport et de ségrégation de l'hydrogène dans le nickel. Cette démarche vise une meilleure compréhension des interactions de l'hydrogène avec les défauts cristallins tels que les dislocations et les lacunes dans un matériau c.f.c. Ces interactions constituent des facteurs déterminant dans les mécanismes d'endommagement assisté par l'hydrogène. Dans cette optique, une caractérisation multi-échelles selon une approche statistique a été entreprise pour déterminer l'évolution des hétérogénéités de déformation et la distribution des défauts cristallins qui y sont associées en fonction des conditions de chargement mécanique. Ces hétérogénéités ont été ensuite confrontées aux mécanismes de diffusion et de piégeage de l'hydrogène grâce à des essais de perméation électrochimique et thermo-désorption. Les résultats obtenus montrent que la ségrégation et le transport de l'hydrogène sont très dépendants des densités et distributions des défauts cristallins et que certaines configurations peuvent favoriser la diffusivité de l'hydrogène, probablement par un mécanisme lacunaire, alors que d'autres sont susceptibles de la ralentir par des effets de piégeage.

# Stratégie d'identification des lois de comportement des matériaux métalliques à partir de de leurs microstructures

*A. Znaidi , O.Daghfas and R.Nasri*

El Manar Preparatory Engineering Institute, B.P. 1172, 3018 Tunis, Tunisia  
LR-MAI-ENIT BP37 , National School of Engineers of Tunis, Université de Tunis Manar 1002 TUNISIE

Les matériaux à structures cubiques à faces centrées et hexagonales compactes comme les alliages d'Aluminium [1] et les alliages de Titane [2] sont fortement utilisés aujourd'hui en particulier, dans l'industrie aéronautique. Cette tendance est principalement due à la forte performance du comportement mécanique de ces matériaux. De ce fait, l'objectif principal de ce travail est la modélisation du comportement élastoplastique, en grandes déformations, de ces matériaux couramment utilisés dans divers domaines industriels [3, 4].

Ce travail propose une formulation d'un modèle de comportement élastoplastique anisotrope en grandes déformations ainsi que son implémentation numérique. Une théorie de plasticité non associée et non normale (non normale par rapport au critère de plasticité) est utilisée pour mieux décrire l'anisotropie. Pour assurer l'objectivité du modèle nous avons utilisé des critères de plasticité compatibles avec l'état microstructural du matériau [5, 6].

Une fois que le modèle de comportements utilisés ainsi que les paramètres mis en jeu sont analysé, cette phase est dédiée à la présentation de sa stratégie d'identification en plaçant plusieurs hypothèses :

Dans un premier temps :

- Chargement monotone
- Etat de contrainte planes

Dans un deuxième temps :

- Chargement complexe
- Etat de contrainte planes

En considérant dans les deux cas :

- Un écrouissage isotrope
- Un écrouissage cinématique

## Références

- [1] O.Daghfas, A. Znaidi, R.Nasri : « Anisotropic behavior of mild steel subjected to isotropic and kinematic hardening, 6th International Conference on Advances in Mechanical Engineering and Mechanics (ICAMEM2015) ID : 128». Hammamet, (Tunisia).
- [2] A. Znaidi, O.Daghfas, F. Toussaint, R.Nasri : «Strategy for the identification of anisotropic behavior laws for Ti40 sheets ». AMPT2015 Madrid SPAIN 2015.
- [3] A.Znaidi, Stratégie d'identification de lois de comportements anisotropes : Applications aux alliages d'aluminium, Toulouse Plasticité 2010.
- [4] A.Znaidi, Formulation et identifications des lois de comportements anisotropes d'un alliage d'aluminium 2024T3, Marseille Plasticité 2009.
- [5] O. Cazacu, B. Plunkett, and F. Barlat«Orthotropic yield criterion description of anisotropy in tension and compression of sheet metals ». Int. J. Plasticity, vol. 24 (2008), p. 847-866,.
- [6] B. Plunkett , O. Cazacu, and F. Barlat« Orthotropic yield criterion for hexagonal closed packed metals». Int. J. Plasticity, vol. 22 (2006), p. 1171-1194.

# Contraintes internes, dislocations, et diffraction : un essai de modélisation

*A. Jacques, G. Ribarik*

Institut Jean Lamour, CNRS UMR 7198, Nancy, France

Le but de la recherche en « Plasticité » est de comprendre les mécanismes physiques de la déformation plastique, et de construire des lois de comportement à base physique susceptibles d'alimenter les modèles utilisés par les Mécaniciens. Les matériaux réels sont cependant complexes : polycristallins, polyphasés. . . et le comportement d'une phase ou d'un grain au sein d'une microstructure donnée peut être très différent de celui d'un monocristal du même matériau.

Une loi de comportement peut contenir un grand nombre de paramètres ajustables, alors que la seule donnée expérimentale sur laquelle on puisse l'ajuster est souvent la déformation (ou la vitesse de déformation) moyenne d'une éprouvette. Des techniques d'investigation complémentaires telles que la diffraction des Rayons X peuvent être utilisées pour mesurer l'état de contrainte moyen d'une phase, parfois en temps réel grâce au rayonnement synchrotron.

A l'inverse, si nous comprenons les mécanismes de déformation d'un matériau, il devrait être possible de calculer directement la distribution des contraintes internes dues aux variations locales de composition chimique, de déformation plastique (taille de grains), et à la présence de dislocations. A partir d'une telle carte, on devrait pouvoir générer un diagramme de diffraction théorique, et comparer celui-ci à un diagramme expérimental. Sans garantir l'exactitude du modèle mécanique, cette comparaison pourrait permettre d'éliminer une grande partie des modèles erronés.

Nous proposons ici une méthode de simulation des pics de diffraction basée sur l'utilisation intensive de la Transformée de Fourier Rapide (FFT) à la fois pour déterminer l'état de contrainte d'un matériau à l'échelle d'un Volume Élémentaire Représentatif de quelques micromètres cubes et générer les pics de diffraction correspondants. On prendra l'exemple d'un superalliage monocristallin : diffraction par une microstructure en cuboïdes, et durant la mise en radeaux.

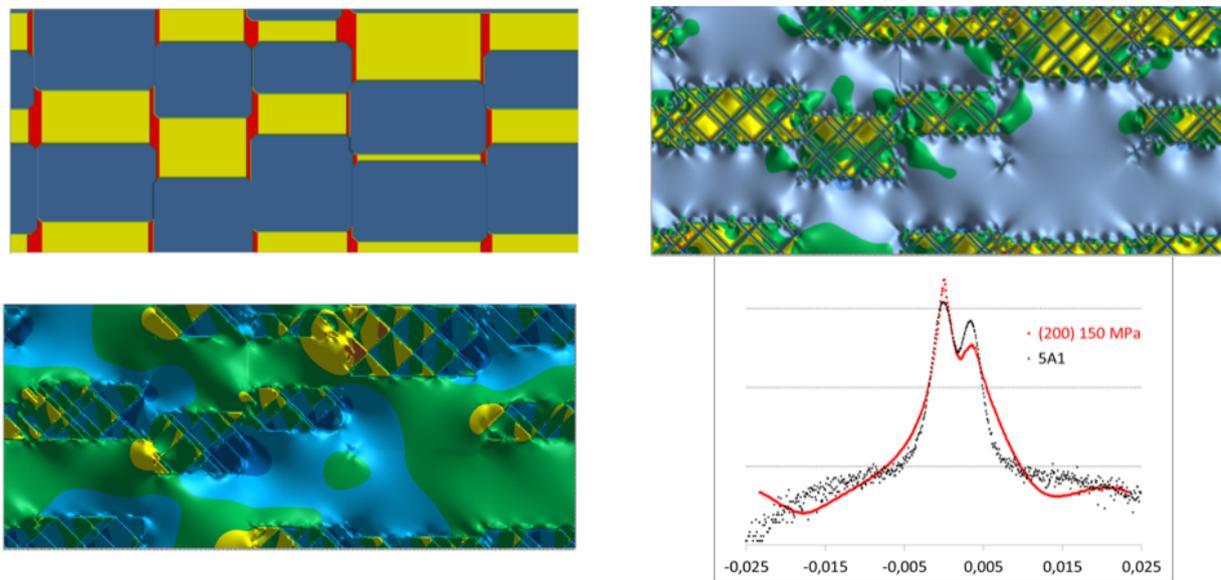


FIGURE 1 – Vue en coupe d'une microstructure, du champ de déformation, du champ de déplacement, et comparaison d'un pic simulé (ligne rouge) et d'un pic expérimental (points).

# Simulation numérique d'anisotropie induite dans les matériaux polycristallins : approche micro-macro

*Sameh Guellouz, Olivier Debordes*

LMAI, ENIT, Tunisie

Le travail s'inscrit dans le cadre de la plasticité cristalline et celui de changement d'échelle micro-macro [1]. Il s'agit d'un modèle écrit dans le cadre de l'élastoplasticité parfaite en grandes transformations obéissant à une loi de Schmid. deux types d'applications sont traités :

- Des calculs portant sur les éléments de volume macroscopiques, dans la mesure où un rapport d'échelles géométriques concernées est tel qu'une modélisation directe n'est pas envisageable. Nous proposons donc une approche utilisant l'homogénéisation périodique pour définir une échelle intermédiaire praticable au niveau de la structure, ce qui suppose qu'on peut définir un 'volume élémentaire représentatif' (v.e.r), des orientations et la répartition spatiale des grains dans le matériau polycristallin.
- Des calculs de structure, qui permettent d'utiliser directement le modèle obtenu pour évaluer les champs de contraintes et de déformations globaux et locaux dans une éprouvette ou une pièce industrielle.

## Références

- [1] Sameh Elbououni : Thèse de doctorat « Simulation numérique d'anisotropie induite dans les matériaux polycristallins ». Octobre 2002, thèse en cotutelle entre l'Université d'Aix Marseille et l'ENIT.

# Mise en forme et plasticité des tubes de gainage combustible en acier austénitique 15-15Ti AIM1

*B. Kedjar<sup>1</sup>, L. Courtin<sup>2</sup>, P. Olier<sup>2</sup>, L. Thilly<sup>1</sup>*

1 - Institut Pprime, CNRS-Université de Poitiers-ENSMA, Poitiers

2 - CEA, DEN, SRMA, LTMEx, 91191 Gif-sur-Yvette cedex

Pour répondre à la demande croissante en énergie, l'industrie nucléaire vise à construire une nouvelle génération de réacteurs plus performants et moins polluants. Le CEA développe un réacteur prototype de IVème génération appelé ASTRID (Advanced Sodium Technological Reactor for Industrial Demonstration). Le choix du gainage combustible au cœur du réacteur s'est porté sur l'acier austénitique 15-15Ti – AIM1 (Austenitic Improved Material).

Cette étude s'inscrit dans une démarche qui vise à optimiser la gamme de mise en forme à froid du gainage tout en améliorant sa résistance au gonflement sous irradiation. L'optimisation concerne aussi les traitements thermiques appliqués, i.e. la température de traitement, le temps de maintien ainsi que la vitesse de refroidissement. Une approche comparative a ainsi été adoptée pour trois modes de mise en forme : l'étirage, le martelage et le laminage HPTR (High Pressure Tube Reduction). Les propriétés mécaniques des tubes obtenus ont ensuite été analysées compte tenu des observations microstructurales réalisées à différentes échelles. Les paramètres tels que la taille, la morphologie et la distribution des grains et des précipités ont été analysés par microscopie optique et/ou par microscopie électronique à balayage (MEB). La composition chimique des précipités a été analysée au MEB en utilisant les spectrométries EDS (Energy Dispersive Spectrometry) et WDS (Wavelength Dispersive Spectrometry). A l'échelle des dislocations et des macles, la microscopie électronique en transmission (MET) a notamment permis de comparer la densité de ces défauts pour les différents taux d'écroutissage. Dans certaines configurations, leur interaction mutuelle a été mise en évidence ainsi que leurs interactions avec les populations de précipités.

Ce travail a permis de valider et compléter les spécifications requises pour l'application visée mais soulève aussi des interrogations quant aux mécanismes de déformation de cet acier complexe, notamment en conditions de service.



FIGURE 1 – Forte densité de dislocations et deux systèmes de macles en interaction dans un échantillon laminé (formula 25%).

# Continuous modeling of grain boundaries using a field theory of dislocations and generalized disclinations

*C. Fressengeas*

Laboratoire d'Etude des Microstructures et de Mécanique des Matériaux, Université de Lorraine/CNRS, Ile du Saulcy, 57045 Metz Cedex, France

The duality existing between the discontinuity of the elastic displacement vector and distortion (rotation and strain) tensor fields and the incompatibility of the second-order elastic distortion tensor field is used to introduce smooth dislocation and generalized disclination fields in a crystalline body [1]. Beyond Volterra's defects (dislocations and disclinations), generalized disclinations are line defects accommodating discontinuities of the elastic distortion tensor across bounded surfaces in the body. In atomistic descriptions, the discontinuity of the elastic displacement vector and distortion tensor occurring across grain boundaries and interphases is accommodated by the periodic arrangement of atoms in structural units. In the present work, a crossover between such a description and the continuous representation of boundaries using dislocation and generalized disclination fields is carried out, at the same resolution length scale, by building on the discrete atomic positions generated by molecular dynamics simulations [2]. Examples of symmetric tilt boundaries in various materials are provided. A comprehensive description of the boundaries structure in terms of elastic strain and second-order distortion is derived from the theory of dislocation and generalized disclination density fields. Such continuous modeling of grain boundaries at inter-atomic scale proves attractive, not only for providing a mechanical description of the lattice defects, but also for paving the way for coarse-grained dynamic representations of polycrystalline media. The theory provides a dissipative dynamic framework for plasticity and phase transformation through dislocation and generalized disclination motion, on the basis of conservation laws for the plastic displacement and distortion discontinuities across arbitrary patches. It is capable of addressing elastic interactions between dislocations and grain boundaries/interphases, as well as concurrent interphase motion and dislocation/grain boundary-mediated plasticity in a body along arbitrary loading paths.

## Références

- [1] A. Acharya and C. Fressengeas, Coupled phase transformation and plasticity as a field theory of crystal defects, *Int. J. Fracture*, 174, 87–94 (2012).
- [2] X.Y. Sun, V. Taupin, C. Fressengeas and P. Cordier, Continuous description of the atomic structure of a grain boundary using dislocations and generalized-disclination density fields, *Int J. Plasticity*, 77, 75-89 (2016).

# Fast dislocations in anisotropic media : causality and Mach cones in the Stroh formalism

*Y.-P. Pellegrini*

CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon Cedex, France

Although direct experimental confirmation of their existence as such is still lacking in three dimensions, dislocations moving at velocities faster than wavespeed have now been routinely produced in two-dimensional simulations for about 15 years. Many of the available results concern anisotropic metals, for which an extension of existing analytical theories is needed to the purpose of extending to elastodynamics two-dimensional Dislocation-Dynamic simulations. Nowadays, such truly dynamic simulations [1] are restricted to isotropic media and motion at velocities lower than the shear wavespeed.

At motion faster than wavespeed, V-shape Mach cones emitted from the dislocation line forms in the surrounding medium, whereby energy is radiated in the surrounding medium. The build-up of a forward-pointing cone has a causal character.

Starting from an analysis of causality requirements the purpose of this talk is to examine a suitable extension of the Stroh formalism [2] to compute fields emitted by a Somigliana-Eshelby flat dislocation with finite core size, in uniform motion in an anisotropic medium, at arbitrary velocity including faster-than-wave speeds. Existing expositions of the Stroh formalism ignore the question of causality. As a consequence, Mach cones cannot be produced from the formulas of the literature, unless envision as special cases. By contrast, the present theory allows one to compute Mach cones in anisotropic media from expressions valid indifferently at arbitrary velocities.

Application of the results to the steady-motion extension of the Peierls-Nabarro model (i.e., Weertman's equation [3]) in anisotropic media, and to a fully dynamic version of the latter, which extends previous work on dislocation equations of motion with reaction-radiation effects [4], will be discussed.

## Références

- [1] B. Gurrutxaga-Lerma et al., Attenuation of the dynamic yield point of shocked aluminum using elastodynamic simulations of dislocation dynamics, *Physical Review Letters* 114 (2015) 174301.
- [2] A.N. Stroh, Steady state problems in anisotropic elasticity. *J. Math. Phys. (Cambridge, MA)* 41 (1962) 77-103.
- [3] J. Weertman, Stress dependence on the velocity of a dislocation moving on a viscously damped slip plane. In A.S. Argon (ed.), (M.I.T. press, 1969), pp. 75-83.
- [4] Y.-P. Pellegrini, Equation of motion and subsonic-transonic transitions of rectilinear edge dislocations : A collective-variable approach. *Phys. Rev. B* 90 (2014) 054120.

# Influence of intrinsic strain on irradiation induced damage

*J. Guénolé, E. Bitzek*

Department of Materials Science and Engineering, Institute I, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), 91058 Erlangen, Germany

Over the last decade, focused ion beam (FIB) machining has become a widely used technique in the material science community, in particular with respect to micro- and nano-mechanical testing. Recently, it was proposed to measure intrinsic stresses by FIB-milling of specific geometries and determining the resulting strain relaxation by digital image correlation (DIC) [1]. Irradiation induced defects are known to influence the properties of the milled samples. The extent and type of defect is known to depend, amongst others, on the material, the ion type and energy, and the angle of incidence. However, an unexpected influence of the strain on irradiation induced damage has recently been observed [2]. This impact of intrinsic strain on the formation of the damage could influence the FIB machining process itself and thus requires further study.

Here we present detailed atomistic simulations to study the impact of strain on two material properties that are crucial for irradiation processes : the threshold displacement energy (TDE) and the surface binding energy (SBE). Considering different materials (Si, Al, Ni . . . ) and inter-atomic potentials, the TDE and SBE are calculated at several strain states. Whereas the well-established global averaging of the TDE over all crystallographic directions is successfully used, a statistical approach to compute the SBE is proposed. This numerical study also addresses the critical question of the subjective ZBL-potential joining described in the literature [3], in the context of strained materials.

These results are of prime importance for a better understanding of the formation of irradiation induced damage. They also have implications for meso-scale models of irradiation damage. For example, the TDE and SBE being key parameters in SRIM/TRIM calculations [4], the accuracy of such approaches might be improved.

## Références

- [1] Korsunsky et al., *Materials Letters* 63 (2009).
- [2] Guénolé et al., to be submitted (2016).
- [3] Nordlund et al., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B* 246 (2006).
- [4] Ziegler et al., *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B* 268 (2010).

# Effet du gallium liquide sur la plasticité de l'alliage d'aluminium 2017 et de l'acier inoxydable 316L

*I. Proriol Serre, J-B. Vogt*

Unité Matériaux et Transformations – UMR CNRS/ENSCL/INRA/Université Lille – Cité scientifique, 59655 Villeneuve d'Ascq Cedex, France

La présence d'un métal liquide (sodium, zinc, eutectique plomb-bismuth, gallium ...), peut provoquer une modification du comportement mécanique des alliages métalliques : perte totale ou partielle de ductilité avec présence d'une rupture fragile (fragilisation par les métaux liquides - FML), modification de l'endommagement et de la plasticité sans présence de rupture fragile (endommagement accéléré par les métaux liquides – EAML). Connus et étudiés depuis longtemps, les mécanismes mis en jeu lors de ces deux phénomènes ne sont pas complètement explicités et dépendent largement des alliages métalliques étudiés et des conditions de sollicitations mécaniques. En effet, il est maintenant admis que la sensibilité d'un alliage métallique au contact d'un métal liquide n'est pas une propriété intrinsèque mais dépend de facteurs tels la vitesse de sollicitation, la température, l'état métallurgique de l'alliage, l'état de surface, les impuretés présentes dans le métal liquide. . . . Ainsi l'importance de ces facteurs les uns vis-à-vis des autres est étudiée pour l'étude des mécanismes de FML et EAML. De même, depuis quelques années, des observations et analyses de plus en plus fines (MET et ToF-SIMS notamment) de l'endommagement des matériaux sollicités en métal liquide permettent d'identifier les différents mécanismes probables à l'échelle nanométrique.

Lors de la présente étude, nous nous sommes intéressés au comportement mécanique de deux alliages métalliques (alliage d'aluminium 2017 et acier inoxydable 316L) en présence de gallium liquide dont la température de fusion basse (29,7°C) facilite les essais mécaniques mais aussi les analyses post-mortem des surfaces. Un montage de flexion 4 points sur micro-éprouvettes entaillées a été réalisé afin de faire des essais à l'air et en gallium liquide, à une température de 35°C. Avant essai, les faces latérales des échantillons (20×3,5×2 mm) sont polies miroir pour de futures observations au microscope électronique à balayage (MEB) et au microscope à force atomique (AFM), notamment au niveau de l'entaille.

Les essais à l'air montrent un comportement ductile des deux matériaux étudiés. En gallium liquide, l'alliage 2017 présente un comportement fragile avec une force à rupture proche de zéro. Le faciès de rupture en gallium est mixte : clivage et intergranulaire. La rupture intergranulaire s'explique par le fait que lorsque l'aluminium est en contact avec du gallium, les joints de grains de l'alliage d'aluminium sont remplacés par des films minces riches en gallium, ce qui provoque la rupture de l'alliage.

En gallium liquide, l'acier 316L présente un comportement ductile. Cependant un effet du gallium sur le comportement mécanique est observé. En effet le domaine de linéarité (force/déplacement) est modifié : la limite en effort entre domaine linéaire et non linéaire est augmentée en présence de métal liquide. Cet effet pourrait être dû à une déformation plastique facilitée en milieu gallium liquide, notamment en fond d'entaille et en début de test. Des essais interrompus à l'air et en gallium ont alors été menés et les surfaces latérales des échantillons ont été observées au MEB, au profilomètre optique et à l'AFM. Sont comparés le nombre de grains comportant des lignes, la hauteur et l'espacement des lignes de glissement, la présence de deux systèmes activés, la déformation intergranulaire, la présence de micro-fissures. Il est alors montré que la présence de gallium favorise non seulement la déformation intergranulaire mais aussi intragranulaire.

# Optimisation globale de chemins de transition appliquée à l'étude de la formation de dislocations dans une couche mince de Ge/(001)Si

*E. Maras<sup>1</sup>, Tapio Ala-Nissilä<sup>1</sup> et H. Jónsson<sup>1,2</sup>*

1 - Department of Applied Physics, Aalto University, Finland

2 - Faculty of Science, University of Iceland, Reykjavík, Iceland

En chimie et en physique de la matière condensée, il est courant de ne connaître que l'état initial et l'état final d'une transition. L'objectif est alors d'utiliser des approches numériques pour trouver les chemins de transition les plus probables et déterminer leur énergie d'activation. Cela permet en plus d'estimer les fréquences de transition, de comprendre les mécanismes gouvernant une transition et ainsi d'aider à modifier le système pour favoriser ou inhiber une transition. La méthode "Nudged Elastic Band" (NEB) est très souvent utilisée pour relaxer un chemin initial vers un Chemin de Minimum d'Énergie (CME) [1]. Cela peut être suffisant pour des systèmes très simples. En revanche pour des systèmes plus complexes il peut exister un grand nombre de CME. L'objectif est alors de trouver le CME ayant la plus petite énergie d'activation.

Notre approche [2] consiste à générer des configurations intermédiaires à l'aide de transformations héréditaires telles qu'utilisées dans des algorithmes génétiques d'optimisation globale de configuration. Ces configurations intermédiaires sont ensuite utilisées pour générer un grand nombre de chemins qui sont systématiquement relaxés par NEB. Cette approche est utilisée pour étudier la formation de dislocations dans un film de Ge/Si(001).

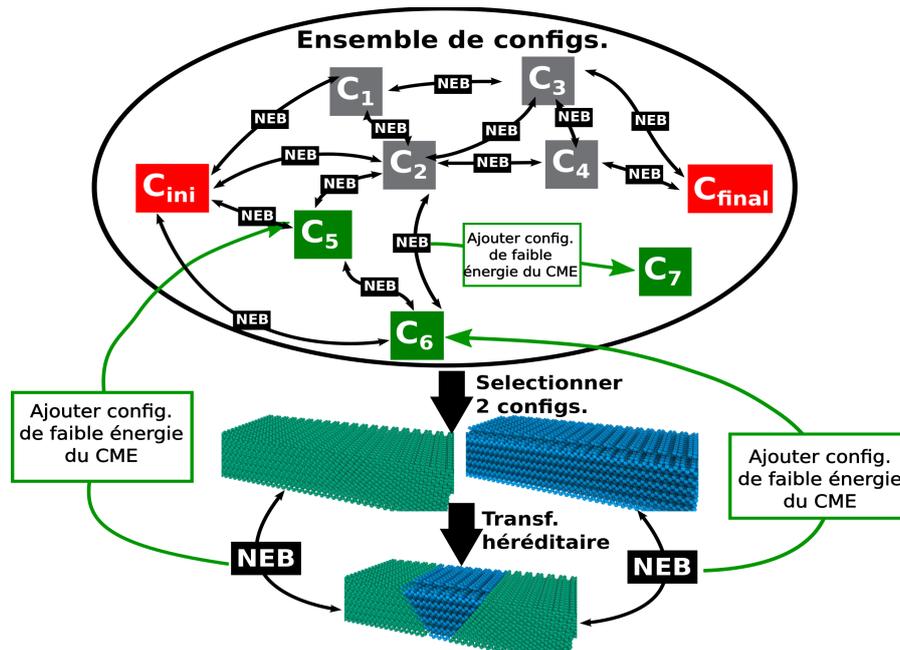


FIGURE 1 – Illustration de la méthode d'optimisation globale entre une configuration initiale et une configuration finale. Un ensemble de configurations intermédiaires ( $C_i$ ) est généré à l'aide de transformations héréditaires et de calculs de NEB. Un grand nombre de chemins de transition peuvent ainsi être générés.

## Références

- [1] G. Henkelman and H. Jónsson, J. Chem. Phys., 113, 9978 (2000).
- [2] <http://arxiv.org/abs/1601.06597>.

# Les interactions entre systèmes de glissement CFC et CC revisitées

*R. Madec*<sup>1</sup>, *L. Kubin*<sup>2</sup>

1 - CEA, DAM, DIF F-91297 Arpajon

2 - LEM (CNRS/ONERA) 29 avenue de la Division Leclerc, BP 72, 92322 Châtillon Cedex

A haute température, l'écroissage des métaux cubiques centrés (CC) est analogue à celui des métaux cubiques à faces centrées (CFC) et nous adaptons pour ces métaux le modèle de stockage-restauration généralisé jusqu'ici dédié aux CFCs [1].

Des coefficients d'interaction entre systèmes de glissement ont été mesurés par simulations de dynamique des dislocations pour les CFCs [2] et CCs [3, 4, 5], mais jusqu'ici, pour ces derniers, sans prendre en compte les systèmes de glissement  $\{112\}$ . Par ailleurs, que ce soit pour les CFC ou les CC, deux effets, qui s'avèrent importants pour de nombreux coefficients, n'ont pas non plus été pris en compte. Le premier est l'effet d'asymétrie par échange des systèmes de glissement, et le second est l'influence du facteur d'anisotropie élastique. On montre que l'asymétrie peut faire substantiellement varier la valeur mesurée d'un coefficient, et que le classement des coefficients dépend du matériau considéré. C'est en particulier le cas pour les jonctions des métaux cubiques centrés qui sont toutes produites par des réactions semblables conduisant à des jonctions de type  $a[001]$ .

## Références

- [1] Kubin L., Devincré B. and Hoc T., *Acta Materialia* 56 (2008) 6040-6049.
- [2] Devincré B., Kubin L. and Hoc T., *Scripta Materialia* 54 (2006) 741-746.
- [3] Madec R., Kubin L.P., 3rd International Conference Computational Modeling and Simulation of Materials Part A 671-678, Vincenzini P. and Lami A. (Eds), Techna Group Srl (2004).
- [4] Queyreau, S., Monnet, G. and Devincré, B., *Int. J. Plast.* 25 (2009) 361.
- [5] Madec, R. and Kubin, L.P., *Scripta Mater.* 58 (2008) 767.

# Molecular dynamics simulation of surface cyclic slip irreversibility in vacuum and in oxygen environment in fcc metals

Zhengxuan Fan<sup>1,2</sup>, Olivier Hardouin Duparc<sup>1</sup>, Maxime Sauzay<sup>2</sup> and Boubakar Diawara<sup>3</sup>

1 - LSI, École Polytechnique, CNRS, CEA, Université Paris-Saclay, 91128 Palaiseau Cedex

2 - CEA/DEN/DMN/SRMA/LC2M, CEA Saclay, 91190 Gif sur Yvette

3 - IEE, IRCP, Chimie ParisTech, 75005 Paris

Fatigue is one of the major damage mechanisms of metals. It is characterized by strong environmental effects and wide lifetime dispersions which should be better understood to allow for predictions. The mechanical behaviour of surface steps naturally created by the glide of dislocations subjected to cyclic loading is assessed using molecular dynamics simulations in vacuum and in oxygen environment. Different face centred cubic metals : Al, Cu, Ag and Ni are analyzed. An atomistic reconstruction phenomenon is observed at these surface steps which can induce strong irreversibility. The irreversibility cumulates and a micro-notch is produced whose depth increases cyclically.

Simulations are also carried out in oxygen environment. Oxygen molecules are adsorbed on metal surface and dissociate into oxygen atoms which are absorbed. This locally generates high-temperature areas. The temperature and the oxygen gas pressure have effects on the surface oxygen diffusion depth. Yet, probably because oxygen atoms are very lightweight compared to metal atoms, absorption of oxygen has no significant effect on the surface step reconstruction and does not impede the gliding of dislocations towards the surface as shown in the Figure. Oxygen will thus not increase the step irreversibility and have no major effect on the surface roughness. This holds only for surface relief evolution and agrees with experimental observations [1].

A rough estimation of surface irreversibility for pure edge dislocations gives an irreversibility fraction  $p$  between 0.5 and 0.75 in copper. An analysis coupling surface mechanisms with the classical EGM bulk slip irreversibility model [2] gives an irreversibility fraction of 0.62 in copper for pure screw dislocations [3]. The values of  $p$  we evaluated are much larger than the value estimated by the EGM II model where a value of 0.4 was found considering pure screw dislocations, and even smaller for edge dislocations. Our value is much closer to the experimental AFM carried out on nickel in air where  $p$  is about 0.8 [4].

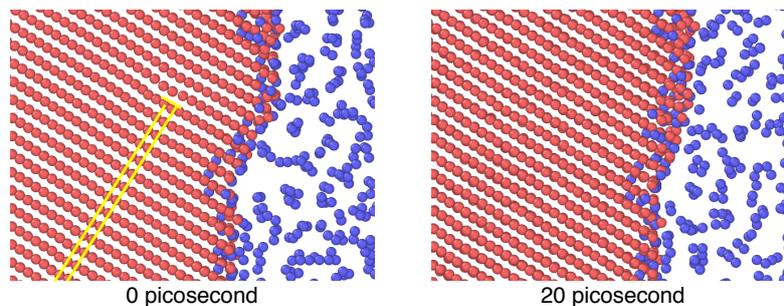


FIGURE 1 – Oxygen effect for the gliding of dislocations towards the surface at 300 K in Ni.

## Références

- [1] Z.S. Basinski, S.J. Basinski, *Progr. Mat. Sci.* 36 (1992) 89.
- [2] K. Differt, U. Essmann, H. Mughrabi, *Phil. Mag. A* 54 (1986) 237.
- [3] Z. Fan, O. Hardouin Duparc, M. Sauzay, *Acta Materialia*, 102 (2016) 149.
- [4] A. Weidner, M. Sauzay, W. Skrotzki, *Key Eng. Mat.* 465 (2011) 223.

# Un alliage d'aluminium résistant en température pour l'allègement de structure ?

*N. Bello<sup>1,2</sup>, J. Douin<sup>2</sup> et C. Larignon<sup>1</sup>*

1 - IRT Saint Exupéry, 118 route de Narbonne, CS44248, 31432 Toulouse cedex 4

2 - CEMES-CNRS (UPR8011), 29 rue Jeanne Marvig, BP94347, 31055 Toulouse cedex 4

Les alliages d'aluminium, largement utilisés dans le domaine aéronautique, intéressent les industriels pour leurs propriétés mécaniques, leurs faibles densités et leur excellente usinabilité. Pour aller encore plus loin dans l'allègement de structure, les industriels développent de nouvelles nuances offrant des caractéristiques mécaniques améliorées en température. En effet, d'autres alliages métalliques sont utilisés comme pièces de structure uniquement pour des raisons de températures trop élevées pour les alliages d'aluminium conventionnels [1].

Au cours de ce travail effectué à l'IRT Saint Exupéry et au Centre d'Elaboration des Matériaux et d'Etudes Structurales (CEMES), une attention particulière est portée à l'étude du comportement mécanique et au vieillissement d'alliages d'aluminium plus ou moins récents comme le 2219, le 2618 ou le 2050. Ces alliages présentent en effet d'intéressantes propriétés à des températures modérées [2, 3, 4] et seraient susceptibles d'être utilisés à la place d'alliages de titane, conduisant à des gains de masse et de coûts significatifs pour l'industrie aéronautique et spatiale (matière première et usinage).

Afin d'apporter les premières réponses à la durabilité à température modérée de pièces en alliage d'aluminium, quelques résultats seront présentés en s'appuyant sur des essais mécaniques réalisés avant et après un vieillissement de 1000 h à 200°C. Ces essais sont complétés par des observations multi-échelles afin de comprendre les différents phénomènes mis en jeu dans le vieillissement microstructural de ces matériaux. Dans un second temps, l'interaction des dislocations avec les différentes natures de précipités dans la matrice d'aluminium sera étudiée afin de préciser les mécanismes de plasticité et de viscoplasticité mis en jeu dans la déformation de ces alliages en lien avec leur état de vieillissement.

## Références

- [1] K.-H. Rending and M. Niedzinski, Airbus and Current Aircrafts Metal Technologies, in The February meeting of the Polish-American Engineers Association, 2006.
- [2] P. N. Raju, K. S. Rao, G. M. Reddy, M. Kamaraj, and K. P. Rao, Microstructure and high temperature stability of age hardenable AA2219 aluminium alloy modified by Sc, Mg and Zr additions, *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 464, pp. 192–201, 2007.
- [3] R. Yoshimura, T. J. Konno, E. Abe, and K. Hiraga, Transmission electron microscopy study of the evolution of precipitates in aged Al – Li – Cu alloys : the theta prime and T1 phases, *Acta*, vol. 51, pp. 4251–4266, 2003.
- [4] J. Wang, D. Yi, X. Su, and F. Yin, Influence of deformation ageing treatment on microstructure and properties of aluminum alloy 2618, *Mater. Charact.*, vol. 59, no. 7, pp. 965–968, Jul. 2008.

# Stabilisation du cœur difficile des dislocations vis par des solutés interstitiels dans les métaux cubiques centrés

*B. Lüthi<sup>1</sup>, L. Ventelon<sup>1</sup>, D. Rodney<sup>2</sup>, F. Willaime<sup>3</sup>*

1 - CEA, DEN, SRMP, 91191 Gif-sur-Yvette, France

2 - Institut Lumière Matière, Université Lyon 1, CNRS, UMR 5306, 69622 Villeurbanne, France

3 - CEA, DEN, DMN, 91191 Gif-sur-Yvette, France

Afin de mieux appréhender la plasticité des alliages métalliques, il est important de comprendre l'origine à l'échelle atomique de l'effet des interactions entre dislocations et solutés sur leurs propriétés mécaniques. L'étude de la structure de cœur des dislocations vis dans les métaux de transition cubique centré (CC) a été l'objet de nombreux travaux et débats depuis plusieurs décennies. Grâce en particulier aux calculs en Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), il est maintenant admis que la dislocation adopte une configuration symétrique, la configuration facile, centrée sur trois colonnes atomiques  $\langle 111 \rangle$  et où l'hélicité est inversée par rapport au cristal parfait. Les autres configurations – le cœur asymétrique, le cœur difficile et le cœur dissocié – sont toutes instables dans les métaux CC [1].

La structure de cœur de la dislocation en présence de solutés n'a cependant été que peu étudiée. Dans ce travail nous nous intéressons à l'effet des atomes de solutés interstitiels sur les dislocations vis de vecteur de Burgers  $b = 1/2 \langle 111 \rangle$  en utilisant des méthodes de calculs de structure électronique ab initio. En considérant dans un premier temps le système fer-carbone, nos calculs DFT montrent que lorsqu'une colonne d'atomes de carbone est insérée au voisinage du cœur de la dislocation, les atomes de soluté et le cœur se reconstruisent spontanément vers une structure de basse énergie, où, de manière inattendue, le cœur de la dislocation adopte la configuration difficile, instable dans les métaux purs (Fig. 1). Les atomes de soluté se placent au cœur de prismes trigonaux réguliers formés par les atomes de fer des trois colonnes atomiques  $\langle 111 \rangle$ , une configuration qui est localement comparable à la cémentite  $\text{Fe}_3\text{C}$ . L'interaction fortement attractive associée peut conduire à une ségrégation qui sature complètement le cœur de la dislocation, même à température ambiante [2]. Nous obtenons la même reconstruction de cœur pour des atomes de carbones séparés de plusieurs fois le vecteur de Burgers, pour d'autres solutés (B, N O) dans le fer ainsi que pour le carbone dans d'autres métaux CC des groupes V et VI. Des calculs de barrière d'énergie montrent que la mobilité des dislocations décorées est très faible. Ce résultat est en accord avec de récentes observations MET in-situ, qui montrent que dans le régime de vieillissement dynamique des aciers, la mobilité des dislocations est fortement réduite [3].

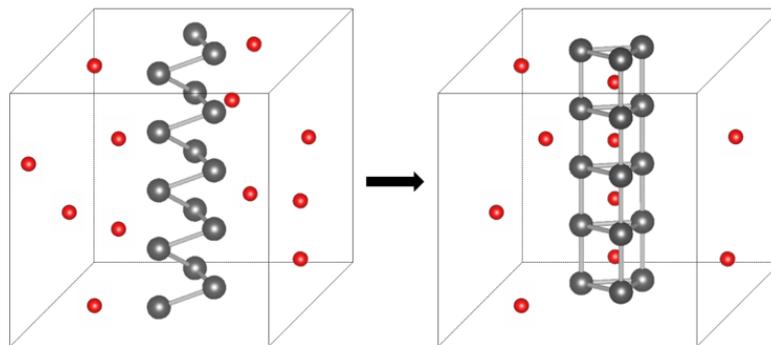


FIGURE 1 – Illustration schématique de la reconstruction du cœur de la dislocation vis dans le fer (atomes en gris) en présence de carbone (atomes en rouge). A gauche : cœur facile de la dislocation en présence d'atomes interstitiels de carbone en solution solide. A droite : cœur reconstruit en structure difficile, après ségrégation des atomes de carbone.

## Références

- [1] L. Dézerald et al., Phys. Rev. B 89, 024104 (2014).
- [2] L. Ventelon et al., Phys. Rev. B 91, 220102(R) (2015).
- [3] D. Caillard et J. Bonneville, Scripta Mater. 95, 15 (2015).

# The role of climb in the plastic deformation of Earth's materials

*Francesca Boioli<sup>1</sup>, Benoit Devincere<sup>2</sup>, Philippe Carrez<sup>1</sup>, Patrick Cordier<sup>1</sup>*

1 - Unité Matériaux et Transformations, Université Lille1, Villeneuve d'Ascq, France

2 - Laboratoire d'étude des microstructures, Onera/CNRS, Châtillon, France

Dislocation climb is a key mechanism in the deformation of crystals. Although it is generally accepted that climb strongly affects dislocation microstructure and evolution at high temperature, the effect of climb on creep behavior is still poorly known in many materials. Recently, creep power-law in Al has been successfully described by including climb in a dislocation dynamics (DD) model [1]. We expect climb to have a strong influence also on the plastic behavior of materials characterized by high lattice resistance, such as olivine and other Earth's mantle minerals.

In this work we present 2.5-dimensional (2.5D) DD simulations coupling climb with the glide dislocation motion to model the creep behavior of some important phases of the Earth's mantle. First, we employ this method to determine the creep strain rates in olivine, a mayor phase of the Earth's mantle. Climb emerges as a key recovery process that allows to attain steady state creep rates [2]. Moreover, we find a creep power-law in agreement with experimental results and we provide a model based on Orowan's law to predict the creep strain rates in the high temperature regime. Second, we show that, at geological strain rates, the interplay between glide and climb leads to steady state deformation conditions even at low/intermediate temperatures [3]. Finally, we show that for some high-pressure phases characterized by an extremely high lattice resistance, dislocation glide is inhibited and climb can turn into an effective strain producing mechanism.

## Références

- [1] Keralavarma et al., Phys. Rev. Lett. 109, 265504 (2012).
- [2] Boioli et al., Phys. Rev. B 92, 014115 (2015).
- [3] Boioli et al., Earth Planet. Sci. Lett. 432, 232 (2015).

# Etude des dislocations dans la cémentite par tomographie électronique

*B.C.Nzogang*<sup>1</sup>, *A.Mussi*<sup>1</sup>, *P. Cordier*<sup>1</sup>, *S. Ghosh*<sup>2,3</sup>, *N. Garvik*<sup>1</sup>, *P. Carrez*<sup>1</sup>

1 - Université de Lille 1, UMET-UMR 8207

2 - Institut für Geochemie und petrologie, ETH, Zürich, Switzerland

3 - Present address : Department of geology and geophysics, IIT Kharagpur-India

La plasticité des aciers perlitiques aux grandes déformations pose la question du comportement plastique de la cémentite. Le tréfilage de ces aciers génère des taux de déformations élevés ( $> 1$ ) et, dans ces conditions, en dépit de sa grande dureté ( $HV \approx 700$  à  $800$ ), la cémentite peut subir des déformations plastiques. Malgré le nombre important d'études réalisées sur les aciers perlitiques, notre compréhension des mécanismes de déformation de la cémentite reste incomplète, particulièrement en ce qui concerne les systèmes de glissements.

Ici nous présentons une étude de caractérisation des dislocations, des plans de glissement et de dissociation dans la cémentite (sous forme d'agrégats polycristallins synthétisés et déformés à  $10$  GPa,  $1250^\circ\text{C}$  dans une presse multi-enclumes) réalisée à l'aide de différentes techniques de microscopie électronique en transmission (technique des franges d'Ishida [1], LACBED [2] et tomographie électronique [3]). Les micrographies ont été réalisées au microscope FEI<sup>®</sup> Tecnai G<sup>2</sup>-20-Twin (équipé d'un filament LaB<sub>6</sub>) en champ sombre et faisceau faible. Les volumes 3D ont été générés grâce au plug-in tomoJ du logiciel ImageJ, à l'aide de l'algorithme de rétroprojection filtrée. De structure orthorhombique et de groupe d'espace *Pnma*, la maille élémentaire de Fe<sub>3</sub>C ( $a = 5.03$  Å,  $b = 6.71$  Å,  $c = 4.53$  Å) contient 12 atomes de Fer et 4 atomes de carbone. Des dislocations [100] et [001] ont été observées, avec une majorité de [100] qui semblent se dissocier en  $1/2[100] + 1/2[100]$ . Aucune dislocation de type [010] n'a été observée comme suggéré par [4, 5]. Nous avons montré, grâce à la tomographie électronique que les dislocations [001] glissent dans les plans (100) et (010), et, d'après la figure ci-dessous, que les [100] se dissocient dans le plan (010) avec une distance de dissociation de  $12$  nm environ (Garvik et al. [6] ont trouvé une distance de dissociation d'à peu près  $7$  nm par des calculs *ab initio*).

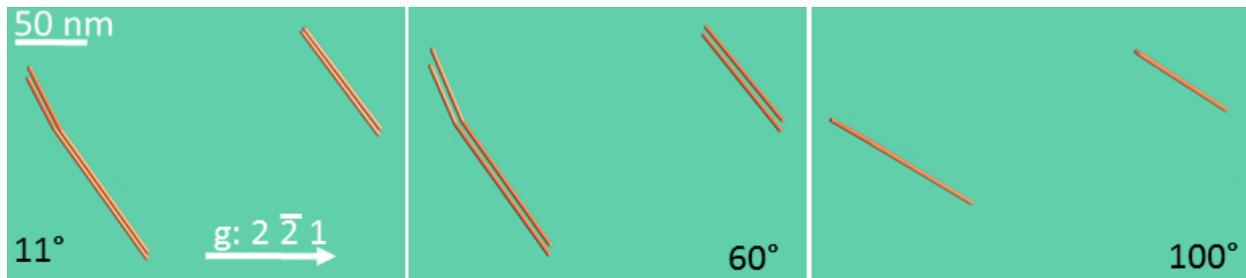


FIGURE 1 – Dislocation dissociée [100] projetée à partir du volume 3D pour différents angles.

## Références

- [1] Y. Ishida, N. Miyamoto and K. Kohra Journal of Applied Crystallography 9 240-241 (1976).
- [2] D. Cherns and A.R. Preston, Journal of Electron Microscopy Technique 13 111-122 (1989).
- [3] A. Mussi, P. Cordier, S. Demouchy and C. Vanmansart, Phys Chem Minerals 41 537-545 (2014).
- [4] A. Inoue, T. Ogura, T. Masumoto, Scripta Metallurgica 11 1-5 (1977).
- [5] A. Koréeda and K. Shimizu, Philosophical magazine 17 1083-1086 (2006).
- [6] N. Garvik, P. Carrez, S. Garruchet and P. Cordier 99 61-64 (2015).

# Theory of Strengthening in High Entropy Alloys

*C. Varvenne*<sup>1</sup>, *A. Luque*<sup>2</sup>, *W. A. Curtin*<sup>2</sup>

1 - Centre Interdisciplinaire des Nanosciences de Marseille, AMU-CNRS

2 - Laboratory for Multiscale Mechanics Modeling, EPFL

High-entropy alloys (HEA) represent a new class of advanced materials with unique properties that cannot be achieved by microalloying processes. In particular, mechanical strength and toughness are usually seen to be improved by increasing the number  $N$  of alloy components [1]. The origins of strengthening in these alloys remain uncertain, and there have been no theories that predict the observed trends. Here, we develop a rigorous strengthening model for multicomponent fcc solid solutions at arbitrary compositions, that is a generalization of the predictive model of Leyson et al. [2] for dilute cases. A key aspect in the development is to adopt an effective medium approach, where each elemental constituent is seen as a “solute” embedded into the effective “matrix” of the surrounding material. We validate this model against extensive MD simulations performed on model  $\text{Fe}_{(1-x)/2}\text{Ni}_{(1-x)/2}\text{Cr}_x$  alloys. The theory is then applied to predict yield stresses in the Ni-Co-Fe-Cr family of fcc HEAs using only available experimental data, demonstrating the origins of the high strength, high-temperature plateau strength, and detailed trends with composition and number of component in agreement with experiments [3]. A simplified version of the model enables clear identification of the important materials parameters in determining the strength, paving the way towards informatics-type design of HEAs. Possibility to include short-range order effects and multiparticle fluctuations are finally discussed.

## Références

- [1] Y. Zhang, T.T. Zuo, Z. Tang, M.C. Gao, K.A. Dahmen, P.K. Liaw, Z.P. Lu, *Prog. Mat. Sci.* 61, 1 (2014).
- [2] G.P.M. Leyson, L.G. Hector Jr, W.A. Curtin. *Acta Materialia* 60, 3873 (2012).
- [3] C. Varvenne, A. Luque and W. A. Curtin, submitted.

# Modélisation multiéchelle du 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene et exploration de ses mécanismes de plasticité

*P. Lafourcade, C. Denoual, J.-B. Maillet*

CEA, DAM, DIF

Le TATB (1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene) 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 (plans  $a$ - $b$ , où  $a$ ,  $b$ ,  $c$  sont les vecteurs unitaires de la maille). Ce type d'empilement lui confère des propriétés physico-chimiques (coefficient d'expansion thermique, conductivité), et mécaniques très anisotropes [1, 2, 3].

Nous présentons une modélisation multiéchelle du TATB en nous basant sur des résultats récents obtenus en dynamique moléculaire. À l'échelle moléculaire, nous effectuons un calcul du tenseur de raideur complet à  $T = 0$  K et  $P = 1$  atm ainsi que des gamma-surfaces du matériau pour les plans de glissement considérés.

L'association du tenseur de raideur et des gamma-surfaces sont des données d'entrée pour un calcul de structure de cœur de dislocation en utilisant la méthode de Peierls-Nabarro Galerkin [4], pour différents plans de glissement et plusieurs vecteurs de Burgers.

Cette étude met en évidence d'une part la forte anisotropie des propriétés mécaniques du TATB via la forme de son tenseur de raideur, cohérent avec son arrangement cristallin, et d'autre part l'importance l'anisotropie élastique pour le calcul de la structure de cœur des dislocations. On montre en particulier qu'une dislocation selon le vecteur de Burgers ' $a$ ' se dissocie en trois partielles séparées de plusieurs ' $b$ ' si l'on intègre l'anisotropie, et deux partielles seulement pour un matériau isotrope équivalent. Les dislocations étant très étalées dans le plan dense, leur rôle sur le comportement plastique semble mineur pour le TATB.

## Références

- [1] H.H. Cady and A.C. Larson, Acta Crystallogr. 18 (1965), p485.
- [2] N. Mathew and T.D. Sewell, Phylos. Mag. 95, 424 (2015).
- [3] D. Bedrov, O. Borodinm G.D. Smith, T.D. Sewell, D.M. Dattelbaum and L.L. Stevens, J. Chem. Phys. 131 (2009) p.224703.
- [4] C. Denoual, Phys. Rev. B 70, 024106 (2004).

# Interfaces et défauts dans des eutectiques oxyde-oxyde obtenus par solidification dirigée

*L. Londaitzbehere, S. Lartigue-Korinek, L. Mazerolles*

Institut de Chimie et des Matériaux Paris-Est, UMR 7182 CNRS-Université Paris Est, 2 rue Henri Dunant, 94320 Thiais, France

Les céramiques eutectiques oxyde-oxyde sont envisagées comme candidats potentiels pour des applications thermomécaniques à haute température telles les aubes de turbine. Elles associent l'alumine alpha et une phase pérovskite ( $\text{SmAlO}_3$ ) ou une phase grenat ( $\text{RE}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ , RE= Er, Y). La microstructure consiste en deux phases monocristallines interconnectées formant un réseau interpénétré à trois dimensions [1]. L'ajout d'une phase zircon stabilisée permet une augmentation significative de la ténacité. Ce matériau présente une résistance exceptionnelle au fluage. Des essais de fluage par compression à des températures de 1450°C et 1550°C ont été réalisés sous des contraintes de 100 et 200 MPa. Les mécanismes de déformation ont été analysés essentiellement pour les eutectiques  $\text{Al}_2\text{O}_3$ - $\text{RE}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$  (RE= Er, Y)- $\text{ZrO}_2$  : Les trois phases présentent une déformation plastique, beaucoup plus marquée sous forte contrainte (Figure 1). Des différences dans les micromécanismes de déformation selon la contrainte appliquée sont mises en évidence dans l'alumine. Sous 200 MPa, Les dislocations sont de type basal ou rhomboédrique et sont arrangées en réseaux, ce qui traduit l'intervention de processus de montée. L'activation du système de glissement pyramidal révèle la présence de contraintes élevées aux interfaces. Pour une contrainte de 100 MPa, les défauts présents sont majoritairement des défauts plans et des micromacles. Dans la mesure où les interfaces jouent un rôle prédominant dans l'activation du glissement, une analyse de leur structure à l'échelle atomique a été entreprise. Les interfaces alumine/zircon sont constituées de facettes parallèles à des plans denses des deux phases (Figure 2), le désaccord paramétrique est accommodé par des dislocations ou disconnections. L'étude de leur structure après déformation est en cours.



FIGURE 1 – Image en champ clair de dislocations dans les phases alumine et zircon.

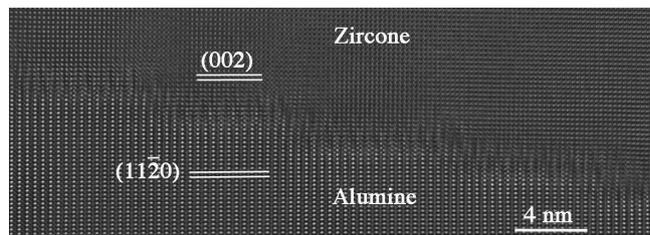


FIGURE 2 – Image en haute résolution (ARM, Cs corrigé) d'une interface alumine-zircon (axe de projection  $[1\bar{1}00]$  dans l'alumine).

## Références

- [1] Mazerolles L., Perrière L., Lartigue-Korinek S., Piquet N. and Parlier M, J. Eur. Ceram. Soc., 28 (2008)2301-2308.

# Comportement mécanique et évolutions microstructurales de l'alliage de Titane $\beta$ 21S après traitements thermiques de vieillissement sous air

*H. Vigié<sup>1,2</sup>, B. Viguier<sup>1</sup>, A. Soula<sup>2</sup>*

1 - Institut Carnot CIRIMAT, ENSIACET-INPT Université de Toulouse, 4 allée Emile Monso – BP 74233 - 31030  
Toulouse Cedex 4, France

2 - Safran Aircelle, rue des Jeunes Bois – CS 80112, 78772 Magny-Les-Hameaux, France

L'alliage de titane  $\beta$ 21S présente une structure  $\beta$  métastable, il est utilisé dans l'industrie aéronautique en raison de ses propriétés mécaniques élevées à hautes températures et de sa faible densité. En effet, cet alliage est durci par précipitation de phase  $\alpha$  dans la matrice  $\beta$ , et sa teneur élevée en Mo lui prodigue une bonne résistance à la corrosion. L'objectif de cette étude est de déterminer les effets du vieillissement thermique sur les propriétés métallurgiques et mécaniques du Ti- $\beta$ 21S.

Différents traitements thermiques sous air sont réalisés à haute température ( $> 450^\circ\text{C}$ ) et pour diverses durées. Pour chaque traitement thermique, l'évolution de la microstructure est étudiée à différentes échelles. De plus, des essais de traction et de fatigue sont menés à température ambiante et à haute température. Les premiers résultats mettent en évidence des évolutions de propriétés mécaniques significativement différentes entre vieillissement à basse et haute température. Ceux-ci sont mis en relation avec l'évolution de la microstructure.

# Initiation de la plasticité induite par une bulle d'hélium dans les matériaux covalents

*J. Dérès, M-L. David, L. Pizzagalli*

Institut P', CNRS UPR 3346, Université de Poitiers - ENSMA, FRANCE

Dans les matériaux, la très faible solubilité de l'hélium rend généralement la formation de bulles plus favorable qu'une dilution homogène. Ces dernières peuvent, une fois vidées, agir comme un piège à impuretés métalliques, rendant ainsi le matériau plus pur [1]. Cela peut avoir un intérêt dans le domaine de l'électronique afin d'élaborer des matériaux semi-conducteurs avec de meilleures propriétés. Dans un contexte nucléaire, ces bulles peuvent avoir un aspect négatif. En effet, les bulles d'hélium peuvent présenter des pressions internes énormes (de l'ordre de plusieurs GPa), pouvant induire du gonflement et une dégradation des propriétés mécaniques du matériau. En fonction des conditions (température, densité d'hélium), il est également observé la rupture de la matrice au voisinage des bulles. Toutefois, nous avons peu d'informations sur le déclenchement et les mécanismes mis en oeuvre.

Nous avons donc effectué des calculs par dynamique moléculaire afin d'étudier l'initiation de la plasticité due à la présence de bulles d'hélium. Nous avons considéré le silicium et le carbure de silicium, l'un étant le matériau covalent modèle, et l'autre ayant un intérêt applicatif important, en particulier dans le domaine nucléaire. Les potentiels utilisés ont été ajustés de façon à décrire l'hélium sous de fortes pressions [2].

Nous avons fait varier la taille de la bulle, la densité initiale d'hélium dans la bulle et la température afin de déterminer et d'analyser l'apparition de la plasticité. Nous avons trouvé un lien entre la densité initiale d'hélium dans la bulle et la température concernant l'initiation de la plasticité. Une comparaison avec le modèle de Trinkaus [3] a également été effectuée. Enfin, nous avons essayé de caractériser le champ de déformation autour de la bulle, pour différents taux de remplissage de la bulle et différentes températures.

## Références

- [1] V. Raineri et al., Gettering of metals by He induced voids in silicon, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B 96 (1995).
- [2] L. Pizzagalli et al., Molecular dynamics simulation of the initial stage of He bubbles formation in silicon, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 21 (2013).
- [3] H. Trinkaus, Energetics and formation kinetics of helium bubbles in metals., Radiation effects 78 (1983).

# Mécanismes d'adhésion d'un revêtement obtenu par projection par flamme supersonique (high velocity oxy-fuel HVOF) : étude des propriétés mécaniques et de la microstructure des interfaces

*J.-B. Giouse<sup>1,2</sup>, C. Tromas<sup>1</sup>, K. White<sup>2</sup>*

1 - Institut Pprime, UPR 3346 CNRS - Université de Poitiers - ENSMA

2 - Department of mechanical engineering at the University of Houston

Cette étude se focalise sur un revêtement  $\text{Cr}_3\text{C}_2\text{-NiCr}$  (80-20), utilisé pour ses propriétés tribologiques et anticorrosion, déposé par projection par flamme supersonique (high velocity oxy-fuel HVOF) sur un substrat en acier 17-4PH (voir figure 1). Le substrat est préalablement grenaille avec des particules d'alumine pour préparer la surface au dépôt et améliorer l'ancrage mécanique.

Cette étude porte sur la caractérisation, en coupe transverse, des propriétés mécaniques locales du substrat à proximité de l'interface. En effet, si le traitement de grenailage améliore l'ancrage mécanique du revêtement déposé, il a aussi pour effet de modifier les propriétés mécaniques à la surface du substrat. Celles-ci jouent un rôle fondamental dans l'adhésion du revêtement [1, 2].

Pour mener cette étude, la méthode de cartographie de propriétés mécaniques par nanoindentation a été mise en œuvre. Elle consiste à effectuer un large réseau régulier d'empreintes de nanoindentation à l'interface dans le but de reconstruire par interpolation une carte de dureté et de module d'élasticité.

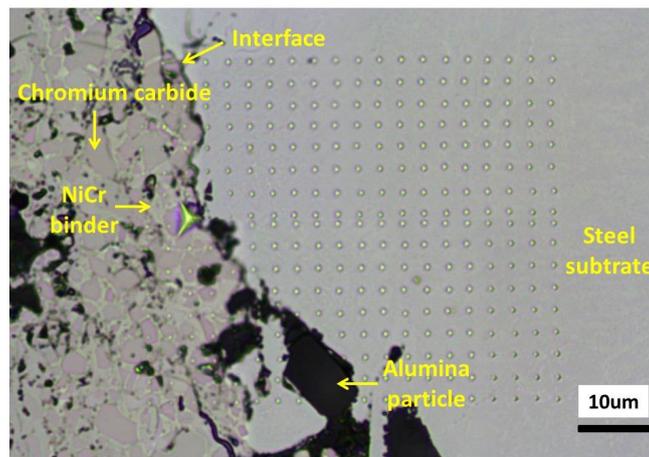


FIGURE 1 – Image de microscopie optique en coupe transverse de l'échantillon. La partie gauche correspond au revêtement (carbures de chrome et matrice Ni-Cr) et la partie droite au substrat. L'alumine résiduelle provenant du grenailage est également visible en bas de l'image. Enfin on observe le réseau régulier d'empreintes obtenu par nanoindentation ( $20 \times 17$  empreintes espacées chacune de  $3\mu\text{m}$ ).

## Références

- [1] Trompetter, W., Hyland, M., McGrouther, D., Munroe, P. & Markwitz, A. Effect of substrate hardness on splat morphology in high-velocity thermal spray coatings. *Journal of Thermal Spray Technology* 15, 663–669.
- [2] Fauchais, P., Vardelle, A., Vardelle, M. & Fukumoto, M. Knowledge concerning splat formation : An invited review. *Journal of Thermal Spray Technology* 13, 337–360.

# Influence de l'hydrogène sur les propriétés d'élasticité du nickel monocristallin

*G. Hachet, A. Oudriss, A. Metsue, and X. Feaugas*

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

Dans nos études, nous analysons l'influence de l'incorporation de l'hydrogène sur les propriétés d'élasticité du nickel monocristallin. Nos approches combinent des études expérimentales et numériques. Nous utilisons ainsi l'analyse mécanique dynamique et des mesures de vitesse de propagation d'ondes élastiques pour déterminer les constantes d'élasticité  $C_{ij}$  isothermes et adiabatiques de ce matériau pour différentes températures. Ces mêmes constantes sont déterminées par calcul *ab initio* (ici la DFT) à température finie par le calcul de l'énergie libre d'un cristal déformé pour différentes concentrations d'hydrogène. L'énergie libre est exprimée comme la somme de l'énergie interne, des contributions vibrationnelles et électroniques qui sont déterminées à partir de la courbe de dispersion des phonons et de la densité d'états électroniques. Pour nos simulations, l'hydrogène est inséré dans les sites octaédriques d'une supercellule de nickel car il a été montré que ces sites sont les plus préférentiels à l'incorporation de H. Cette étude est une première étape sur la détermination complète des effets de l'hydrogène sur les propriétés mécaniques du nickel monocristallin. En particulier, nous utilisons ces résultats pour discuter de la stabilité des dipôles de dislocation formés pendant des tests de fatigue.

# Unraveling dislocation collective properties with dislocation dynamics simulations for continuous modeling

*V. Verbeke<sup>1</sup> , S. Sandfeld<sup>2</sup> and B. Devincere<sup>1</sup>*

1 - Laboratoire d'Etude des Microstructures, UMR 104 CNRS-ONERA, Châtillon, France

2 - Institute for Materials Simulation (WW8), University Erlangen-Nürnberg, Germany

Predicting and understanding the collective evolution of dislocation microstructures under cyclic loads with the resulting mechanical properties is a long-goal of physically based multi-scales modeling. Despite many years of investigations, dislocation patterning is still an unsolved problem and a major issue since heterogeneity in the dislocation density causes strain gradient and therefore kinematic hardening.

Recent studies emphasized the key contribution of short-range dislocation interactions in patterning processes. In multi-slip conditions, forest interactions and junction formation are the main features controlling dislocation storage and the formation of dislocation microstructures with specific crystallographic orientations. In single-slip condition the picture is less direct, but patterning seems to be controlled by collinear annihilations taking places between mobile dislocations and complex dislocation loop debris with collinear superjog, i.e. edge segments in the cross-slip plane. Those annihilations give an explanation for the accumulation of edge dipolar loops and the formation of dislocation bundles and walls in cyclic deformation.

In the present study, precise direction-dependent interaction coefficients accounting for junction strengthening and collinear annihilation are determined from 3D-DD simulations. Such coefficients are thought to be essential parameters for continuous modeling of dislocation dynamics such as CDD or PF simulations since they control the driving forces leading to the formation of dislocation density heterogeneities.

# Modélisation multi-échelle de la montée des dislocations

*P.A Geslin<sup>1,2</sup>, B. Appolaire<sup>1</sup>, A. Finel<sup>1</sup>*

1 - Laboratoire d'Étude des Microstructures, Onera - CNRS, 29 avenue de la Division Leclerc, 92322 Chatillon, France

2 - Institut Lumière Matière, Université Lyon 1 - CNRS, 69622 Villeurbanne, France

Lors de la déformation plastique alliages métalliques à haute température, la montée des dislocations par absorption/émission de lacunes est thermiquement activée. Le mécanisme de montée facilite le contournement d'obstacles et joue un rôle clé dans le fluage des matériaux.

Les approches précédentes de la montée [1] ainsi que les lois utilisées dans les approches numériques récentes [2, 3] reposent sur plusieurs hypothèses qui peuvent s'avérer grossières dans certains cas. En particulier, nous discuterons les deux hypothèses suivantes : (i) le processus de montée est supposé se dérouler de manière homogène le long de la ligne de dislocations alors que, dans les matériaux cubiques à faces centrées, l'absorption/émission de lacunes s'effectue uniquement au niveau de crans, défauts le long de la ligne de dislocations. (ii) Les profils de diffusion de lacunes autour des dislocations sont supposé cylindriques et indépendants les uns des autres. Les interactions entre les profils de diffusion autour des dislocations voisines peuvent venir modifier significativement la vitesse de montée.

Nous proposons ici une approche multi-échelle de la montée des dislocations [4]. Dans un premier temps, nous avons dérivé la solution analytique du problème de diffusion des lacunes autour d'une dislocation présentant une faible densité de crans. Cette solution incorpore aussi l'influence de la diffusion accélérée dans le cœur de la dislocation ainsi que la barrière d'énergie associée à l'absorption d'une lacune dans le cœur. Cette solution analytique est utilisée pour dériver l'énergie d'activation du processus de montée qui dépend fortement de la densité de crans.

Dans un deuxième temps, nous proposons un modèle champ de phase de la montée des dislocations. L'analyse asymptotique du modèle permet d'obtenir analytiquement la vitesse de montée en fonction de la force motrice et d'un paramètre cinétique introduit dans le modèle. Dans une approche multi-échelle, ce paramètre est alors choisi pour reproduire quantitativement la mobilité des dislocations faiblement crantées. Ceci permet d'étudier la vitesse de montée d'un ensemble de dislocations interagissant entre elles via leur champ de contraintes élastiques et le champ de diffusion de lacunes, ce qui permet de discuter la validité de l'hypothèse (ii).

## Références

- [1] J.P. Hirth, J. Lothe, Theory of dislocations, 1982.
- [2] D. Mordehai, E. Clouet, M. Fivel, M. Verdier, Introducing dislocation climb by bulk diffusion in discrete dislocation dynamics, *Phil. Mag.* 88, p. 899-925, 2008.
- [3] S.M. Keralavarma, T. Cagin, A. Arsenlis, A.A. Benzerga, Power-law creep from discrete dislocation dynamics, *Phys. Rev. Lett.* 109, p. 265504, 2012.
- [4] P.-A. Geslin, B. Appolaire, A. Finel, Multiscale theory of dislocation climb, *Phys. Rev. Lett.* 115, p. 265501, 2015.

# Comportement mécanique de films minces Cu/W nano feuillets sous chargement biaxial cyclique ou monotone : Etude in situ par diffraction synchrotron

N. Pouvreau<sup>1,2</sup>, R. Guillou<sup>1</sup>, E. Le Bourhis<sup>1</sup>, P. Goudeau<sup>1</sup>, P.-O. Renault<sup>1</sup>, P. Godard<sup>1</sup>, C. Mocuta<sup>2</sup>, D. Thiaudière<sup>2</sup>

1 - Institut PPRIME – CNRS/Université de Poitiers/ENSMA, Futuroscope, France

2 - Synchrotron SOLEIL, Gif sur Yvette, France

Les propriétés mécaniques des films minces sont d'un intérêt majeur pour bon nombre d'applications technologiques comme la microélectronique étirable. Le comportement mécanique des films minces dépend de sa microstructure (texture cristallographique, taille des grains, défauts etc.). Dans le but de se rapprocher des conditions de chargement en service, nous avons réalisé des tests de déformations bi-axiales contrôlées sur des composites formés d'un film métallique déposé sur un substrat de polyimide (Kapton<sup>®</sup>). Nous présentons ici les résultats obtenus pour un chargement équi-biaxial sur deux films minces nanocomposites Cu/W dans le but d'analyser l'influence des contraintes résiduelles. Ces films minces, élaborés par pulvérisation ionique, ont une épaisseur de 150 nm ( $7 \times (18 \text{ nm Cu} + 6 \text{ nm W})$ ). Les contraintes résiduelles en tension ou en compression dans le film sont obtenues en ajustant la pression de gaz dans la chambre de dépôt. Les contraintes résiduelles intra-granulaires ainsi obtenues sont élevées : +2.0 GPa en tension et -3.6 GPa en compression. Pour réaliser l'essai de déformation, nous avons utilisé la machine de traction biaxiale disponible sur la ligne DiffAbs du synchrotron SOLEIL [1]. Les déformations macroscopiques appliquées ainsi que les déformations intra-granulaires sont mesurées simultanément et in situ au cours de l'essai par corrélation d'image numérique et diffraction des rayons X synchrotron respectivement [2].

Ces graphiques mettent en lumière l'effet très significatif des contraintes résiduelles sur le comportement mécanique des multicouches Cu/W. En effet, la présence d'une contrainte résiduelle de compression retarde le déclenchement de la plasticité (plateau pour le cuivre) et permet au W et au Cu d'emmagasiner deux fois plus de déformations élastiques.

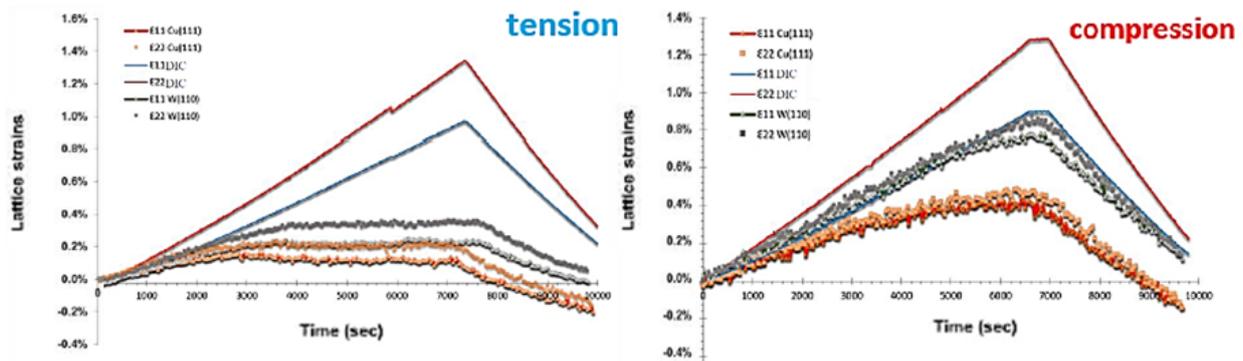


FIGURE 1 – Ces graphiques mettent en lumière l'effet très significatif des contraintes résiduelles sur le comportement mécanique des multicouches Cu/W. En effet, la présence d'une contrainte résiduelle de compression retarde le déclenchement de la plasticité (plateau pour le cuivre) et permet au W et au Cu d'emmagasiner deux fois plus de déformations élastiques.

*Ce travail a été financé par le programme «investissements d'avenir» du gouvernement français (LABEX INTERACTIFS, référence ANR-11-LABX-0017-01).*

## Références

- [1] G. Geandier, D. Thiaudière, et al., Rev. Sci. Instrum. 81 (2010) 103903.
- [2] S. Djaziri, P.-O. Renault, F. Hild, E. Le Bourhis, Ph. Goudeau, D. Thiaudière, D. Faurie, J. Appl. Cryst. 44 (2011) 1071-1079.

# Propriétés mécaniques de l'argent fritté nanoporeux au cours du vieillissement

*V. Caccuri<sup>1</sup>, P. Gadaud<sup>1</sup>, D. Bertheau<sup>1</sup>, J. Carr<sup>2</sup>, X. Milhet<sup>1</sup>*

1 - Institut Pprime UPR CNRS 3346, Department of Physics and Mechanics of Materials, ENSMA - Université de Poitiers, 1 avenue Clément Ader, Téléport 2, 86960 Chasseneuil-Futuroscope

2 - Henry Moseley X-ray Imaging Facility, 3.309 Alan Turing Building, The University of Manchester, Oxford Road, Manchester, M13 9PL, UK

La technologie de report de puces dans l'électronique de puissance est en pleine mutation. En effet, la volonté d'augmenter la puissance utile impose une augmentation sensible de la température dégagée par les composants. Les solutions actuelles, basées sur des alliages à base de Pb ou Sn-Ag-Cu, ne seront pas en mesure de les supporter. Le frittage de pâte d'Ag est une solution prometteuse car l'Ag présente une température de fusion élevée (961°C), une très bonne conductivité thermique ainsi qu'une excellente conductivité électrique. Néanmoins, si les propriétés fonctionnelles sont bien connues, les propriétés mécaniques quant à elles sont moins bien abordées dans la littérature. Les propriétés rapportées sont très souvent incomplètes, sans référence à la microstructure et provenant d'essais avec des géométries assez complexes.

Une étude systématique des propriétés mécaniques en traction en fonction de l'évolution de la structure nanoporeuse de la pâte d'Ag frittée a été menée en développant une méthode d'élaboration originale permettant d'obtenir des échantillons massifs représentatifs. Nous montrons que si la distribution de pores nanométriques est homogène après frittage, la situation change après vieillissement avec une croissance des pores selon le mûrissement d'Oswald. Si cela ne provoque pas de modification du comportement élastique, les propriétés plastiques en traction sont affectées.

# Activation du glissement dans les colonies de Ti-6Al-4V : Rôle des interfaces $\alpha/\beta$

*S. Hémerly, L. Signor, P. Villechaise*

ISAE-ENSMA, Institut Pprime, UPR CNRS 3346, département de Physique et mécanique des matériaux

La durée de vie en fatigue oligocyclique dépend essentiellement de la phase d'amorçage des fissures qui est généralement contrôlée par les premiers stades de plasticité dans la phase  $\alpha$ . Par conséquent, une bonne compréhension de la formation des premières bandes de glissement est une nécessité. Pour caractériser l'activation du glissement à l'échelle microscopique, des essais de traction in-situ sous MEB ont été effectués sur des éprouvettes contenant une unique colonie dans la partie utile. Des analyses EBSD ont permis de prendre en compte les orientations cristallographiques des phases  $\alpha$  et  $\beta$  dans l'identification des systèmes de glissement activés. De plus, des calculs préliminaires par éléments finis ont permis d'évaluer les contraintes d'interaction aux interfaces  $\alpha/\beta$  liées à l'anisotropie élastique des deux phases. Les premiers stades de plasticité au sein des colonies de Ti-6Al-4V sont discutés en regard de ces résultats expérimentaux et numériques.

# Influence de la microstructure sur les mécanismes de déformation en fluage dans le superalliage polycristallin AD730<sup>TM</sup>

Winnie Vultos<sup>1</sup>, Florence Pettinari-Sturmel<sup>1</sup>, Muriel Hantcherli<sup>1</sup>, Joël Douin<sup>1</sup>,  
Patrick Villechaise<sup>2</sup>, Jonathan Cormier<sup>2</sup> and Alexandre Devaux<sup>3</sup>

1 - CEMES-CNRS, BP 94347, 29 rue Jeanne Marvig, 31055 Toulouse cedex 4, France

2 - Institut Pprime, UPR CNRS 3346, CNRS – Université de Poitiers – ISAE-ENSMA, Physics and Mechanics of Materials Department, ISAE-ENSMA, 1 avenue Clément Ader, BP 40109, 86961 Futuroscope - Chasseneuil, France

3 - Aubert & Duval, Site des Ancizes BP1, 63770 Les Ancizes Cedex, France

Depuis plus de 30 ans, de nombreuses études ont été réalisées afin de comprendre et d'améliorer les propriétés mécaniques des superalliages à base de nickel. Dans un contexte aéronautique où la compréhension du comportement des matériaux en conditions réelles d'utilisation devient un enjeu incontournable, un nouveau superalliage polycristallin base nickel a été élaboré en 2009 par Aubert & Duval (AD730<sup>TM</sup>) pour la fabrication des disques de turbines des futurs turboréacteurs pour application civile. Ces pièces sont soumises à des sollicitations de type fatigue, fluage ou qui combinent ces deux types de chargement à des températures supérieures à 700°C [1].

Le comportement mécanique des superalliages polycristallins à base de nickel a été étudié sur une large gamme de température et de contraintes mécaniques [1, 2, 3]. En revanche, à cause de son récent développement, il existe peu de données à l'échelle microscopique pour l'AD730<sup>TM</sup>. On peut néanmoins s'attendre à ce que ses propriétés mécaniques soient très dépendantes de paramètres microstructuraux tels que la taille et la distribution spatiale des grains, et des caractéristiques des précipités durcissants  $\gamma'$  (taille, distribution, chimie). Les études réalisées sur les alliages NR3 et Udimet<sup>TM</sup> 720Li ont montré qu'au cours du vieillissement dans le domaine de température 700-800°C, on observait une augmentation de la taille des précipités et de la largeur des couloirs entre précipités [4, 5, 6].

Les travaux présentés portent sur la caractérisation microstructurale de l'AD730<sup>TM</sup>. Des observations MET post mortem et in situ ont été réalisées afin de caractériser la microstructure obtenue après différents traitements thermiques et d'identifier les micro-mécanismes de déformation pertinents qui contrôlent la déformation à l'échelle macroscopique.

## Références

- [1] A. Devaux et al., AD730<sup>TM</sup> - A New Nickel-Based Superalloy for High Temperature Engine Rotative Parts, Superalloys (2012).
- [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).
- [3] J. Mao et al., Cooling precipitation and strengthening study in Powder Metallurgy Superalloy U720Li, Metallurgical and Materials Transactions, 32A (2001).
- [4] S. Raujol, Influence du vieillissement sur le comportement en fluage d'un superalliage pour disques de turbines, Thèse de l'INSA, Toulouse, (2004).
- [5] M.P. Jackson and R.C. Reed, Heat treatment of UDIMET 720 Li : the effect of microstructure on properties, Mater. Sci. Eng. (1999); A259 :85-97.
- [6] T. Billot, P. Villechaise, M. Jouiad and J. Mendez., Creep-fatigue behavior at high temperature of a UDIMET 720 nickel-base superalloy, Int. J. Fatigue. (2010).

# Evaluation des effets de taille et d'architecture sur les propriétés mécaniques de composites cuivre/niobium filamenteux (Cu/Nb-F) par caractérisation EBSD et tests de déformation in-situ couplés à la diffraction de neutrons

*J.R. Médy*<sup>1</sup>, *V. Klosek*<sup>2</sup>, *P. Villechaise*<sup>1</sup>, *P.-O. Renault*<sup>1</sup>, *F. Lecouturier*<sup>3</sup>, *L. Thilly*<sup>1</sup>

1 - Institut Pprime, CNRS-Université de Poitiers-ENSMA, SP2MI, 86962 Futuroscope, France

2 - Laboratoire Léon Brillouin, CEA Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette, France

3 - Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses, CNRS, 31400 Toulouse, France

Les nano-composites cuivre/niobium sont d'excellents candidats pour la fabrication de bobines générant des champs magnétiques pulsés intenses ( $B \geq 100$  T) et de longue durée. Les conducteurs étudiés durant cette thèse (Cu/Nb-F, F pour filamenteux) sont fabriqués par Accumulative Drawing and Bundling (ADB), une technique de déformation plastique sévère consistant en une série de cycles d'extrusion-étirage-découpe-réempilement. Cette technique produit un matériau final constitué de renforts continus de niobium dans une matrice multi-échelles de cuivre (cf. figure 1) [1, 2, 3]. Ces travaux de thèse rentrent dans le cadre d'un projet ANR visant le couplage de résultats expérimentaux et de simulations en vue d'évaluer les effets de taille et d'architecture sur les propriétés mécaniques et électriques des conducteurs composites Cu/Nb. L'objectif principal de ces travaux consiste à caractériser macroscopiquement et localement ces conducteurs à chaque étape de la fabrication. Pour ce faire, différentes techniques de caractérisation sont utilisées : Tests de conductivité électrique et de traction (à l'ambiante et à la température de l'azote liquide, 77 K), Diffraction des rayons X pour l'analyse macroscopique de texture, Diffraction des électrons rétrodiffusés (EBSD) pour l'analyse de la texture locale, Déformation in-situ sous diffraction de neutrons. Cette présentation se focalise sur les résultats obtenus par EBSD et déformation in-situ couplée à la diffraction de neutrons pour deux échantillons ( $N = 85^2$  et  $N = 85^3$ ,  $N$  étant le nombre de filaments continus de niobium dans la matrice multi-échelles de cuivre et les exposants 2 et 3 correspondant au nombre de cycles d'ADB). Une analyse de la texture des renforts de niobium et de chaque échelle de cuivre sera présentée suivie du comportement mécanique des familles de grains de chaque phase (Cu et Nb). On terminera par une comparaison des données in-situ avec les informations de la texture locale en vue d'évaluer l'effet de taille et/ou de l'architecture multi-échelles de la microstructure sur les propriétés mécaniques des composites Cu/Nb-F.

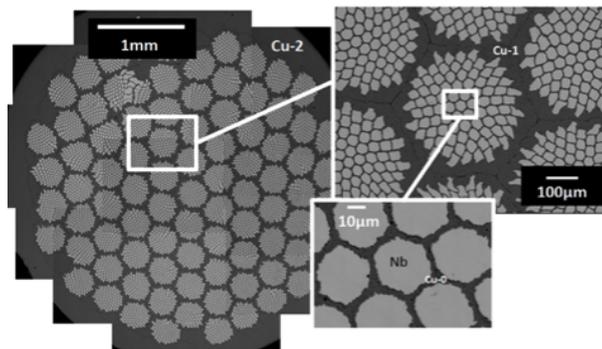


FIGURE 1 – Micrographies MEB (mode BSE) montrant la structure multi-échelles de la matrice de cuivre et les renforts de niobium d'un conducteur Cu/Nb-F  $N = 85^2$  obtenu après 2 cycles ADB (coupe transverse,  $d = 4,5$  mm).

## Références

- [1] L. Thilly, M. Véron, O. Ludwig, F. Lecouturier, Materials Science and Engineering A, Vol. 309-310, 2001.
- [2] L. Thilly, M. Véron, O. Ludwig, F. Lecouturier, Materials Science and Engineering A, Vol. 309-310, 2001.
- [3] L. Thilly, F. Lecouturier, J. Von Stebut, Acta Materialia, vol. 50, p. 5049-5065, 2002.

## Lundi 11

- 11h00-12h30 *Accueil des Participants - Installation des posters*
- 12h30-13h30 *Buffet sur le site du colloque*
- 14h00-14h05 Ouverture du colloque
- 14h05-14h50 **Emmanuel Clouet** (Invité): Modélisation ab initio de la mobilité des dislocations vis dans le zirconium et le titane
- 14h50-15h10 **Benjamin Douat**: Étude de la configuration de cœur des dislocations vis dans le niobium par microscopie à champ proche
- 15h10-15h30 **Frédéric Houllé**: Molecular dynamics study of diffusion along edge dislocations in Al
- 15h30-15h50 **Émile Maras**: Étude des mécanismes de formation d'une dislocation coin dans une couche mince Ge/(001)Si par modélisation à l'échelle atomique
- 15h50-16h20 *Pause café*
- 16h20-16h40 **Antoine Ruffini**: Méthodes continues pour l'étude de l'annihilation de pores par flux plastique dans des matériaux cubiques à faces centrées
- 16h40-17h00 **Nadia Ben Dahmane**: Cloquage des films minces ductiles
- 17h00-19h00 **Session posters**

## Mardi 12

- 9h00-9h45 **Thomas Schenk** (invité): Plasticité haute température de la phase  $\gamma'$  d'un superalliage monocristallin durant des essais in-situ en rayonnement synchrotron
- 9h45-10h05 **Hannah Sommer**: Creep investigation and microstructural evolution in a polycrystalline nickel base superalloy
- 10h05-10h25 **Catherine Gardin**: Fermeture induite par plasticité sous chargement cyclique : prédiction numérique de la forme du front de fissure
- 10h25-10h45 **Gulzar Seidametova**: AFM topographic investigation of the cyclic plasticity of martensitic steel
- 10h45-11h15 *Pause café*
- 11h15-11h35 **Olivier Hardouin Duparc**: Les origines des notations dans le mûlage mécanique
- 11h35-11h55 **Romuald Béjaud**: Simulation numérique de la formation et l'extension de macles dans des films minces métalliques
- 11h55-12h15 **Pierre Hirel**: De glissile vers sessile : la transition ductile-fragile dans les perovskites
- 12h15-12h35 **Jonathan Amodeo**: Simulation multi-échelles et polycristalline de la déformation de MgO à haute pression
- 13h00-14h00 *Repas restaurant administratif*
- 14h30-15h15 **Laurence Ramos** (invitée): Plasticity and onset of yielding of a soft colloidal gel
- 15h15-15h35 **Tarik Sadat**: Comportement mécanique de structures harmoniques Ti-6Al-4V
- 15h35-15h55 **Nicolas Gueninchant**: Etude tridimensionnelle des premiers stades de la plasticité dans un polycristal par topomographie synchrotron et simulation par éléments finis
- 15h55-16h15 **Ju Tuan Le**: Un modèle de plasticité cristalline considérant le transport des dislocations géométriquement nécessaires sur les systèmes de glissement : application aux mono- et multi-cristaux de glace
- 16h15-16h45 *Pause café*
- 16h45-17h05 **Pascale Corne**: Étude des mécanismes de dégradation au sein des implants dentaires
- 17h05-17h25 **Emmanuel Bertrand**: Mécanismes de déformation d'un alliage de titane à mémoire de forme
- 17h25-17h45 **Sameh Guellouz**: Étude du comportement plastique des matériaux en feuilles en acier 18-10 soumis à des sollicitations particulières
- 17h45-19h00 **Session posters / temps libre**
- 20h00 *Repas de gala*

## Mercredi 13

- 9h15-10h00 **Andreas Mortensen** (Invité): Déformation de microfils en aluminium coulé
- 10h00-10h20 **Wilgens Sylvain**: Plasticité du monocristal de phase MAX par déformation aux petites échelles
- 10h20-10h40 **Amina Merabet**: Étude des défauts étendus produit par la compression de nanopiliers de silicium à température ambiante
- 10h40-11h00 **Diana Courty**: L'implantation de Ga, un facteur qui limite l'évaluation de contraintes par une méthode de FIB
- 11h00-11h30 *Pause café*
- 11h30-11h50 **Akrum Abdul-Latif**: Mechanical behavior of heterogeneous polycrystals and their size dependency
- 11h50-12h10 **Laurent Korzeczek**: Étude mésoscopique en 3D de la mécanique des fissures courtes dans les matériaux ductiles
- 12h10-12h30 **Xavier Feaugas**: Plasticité/hydrogène dans les métaux c.f.c. impact sur l'hétérogénéité et la localisation de la déformation
- 13h00-14h00 *Repas restaurant administratif*