



22-23-24 AVRIL 2025

COLLOQUE PLASTICITÉ

POITIERS



22-24
AVRIL
2025



Bienvenue au colloque Plasticité 2025

Après avoir accueilli par deux fois le groupe The Cure, Les Rita Mitsouko et Les Béruriers Noirs, l'amphithéâtre Descartes de l'université de Poitiers accueillera du 22 au 24 avril 2025 le rock 'n roll colloque Plasticité !

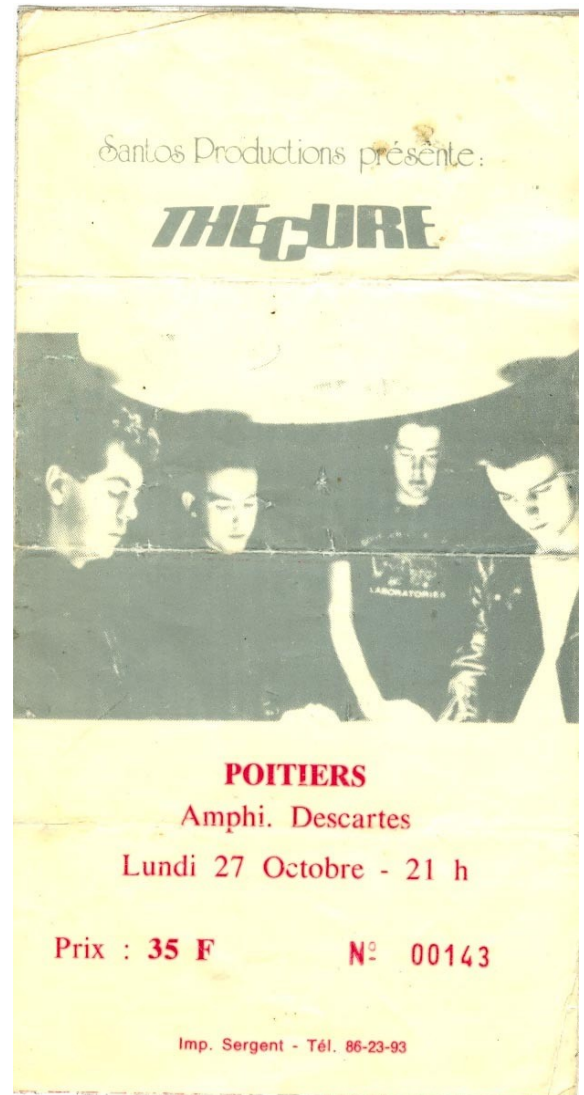
Le colloque Plasticité est depuis plus de 50 ans le rendez-vous annuel de la communauté nationale des chercheurs s'intéressant aux processus physiques gouvernant la déformation plastique des matériaux. Les études présentées concernent tous types de matériaux : les matériaux métalliques (aciers, alliages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

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

Au cours de cette édition, nous aurons le plaisir d'écouter Lucile Joly-Pottuz (MATEIS, Lyon), Guillaume Laplanche (Ruhr Universität, Bochum), Sylvain Patinet (PMMH, ESPCI Paris) et Andrea Tommasi (Géoscience Montpellier, Montpellier) en tant qu'orateurs invités.

L'ensemble du comité d'organisation vous souhaite la bienvenue dans la cité pictave ainsi qu'un excellent colloque Plasticité 2025 !

Nous remercions également l'ensemble de nos sponsors, d'avoir contribué à la réalisation de cet événement.



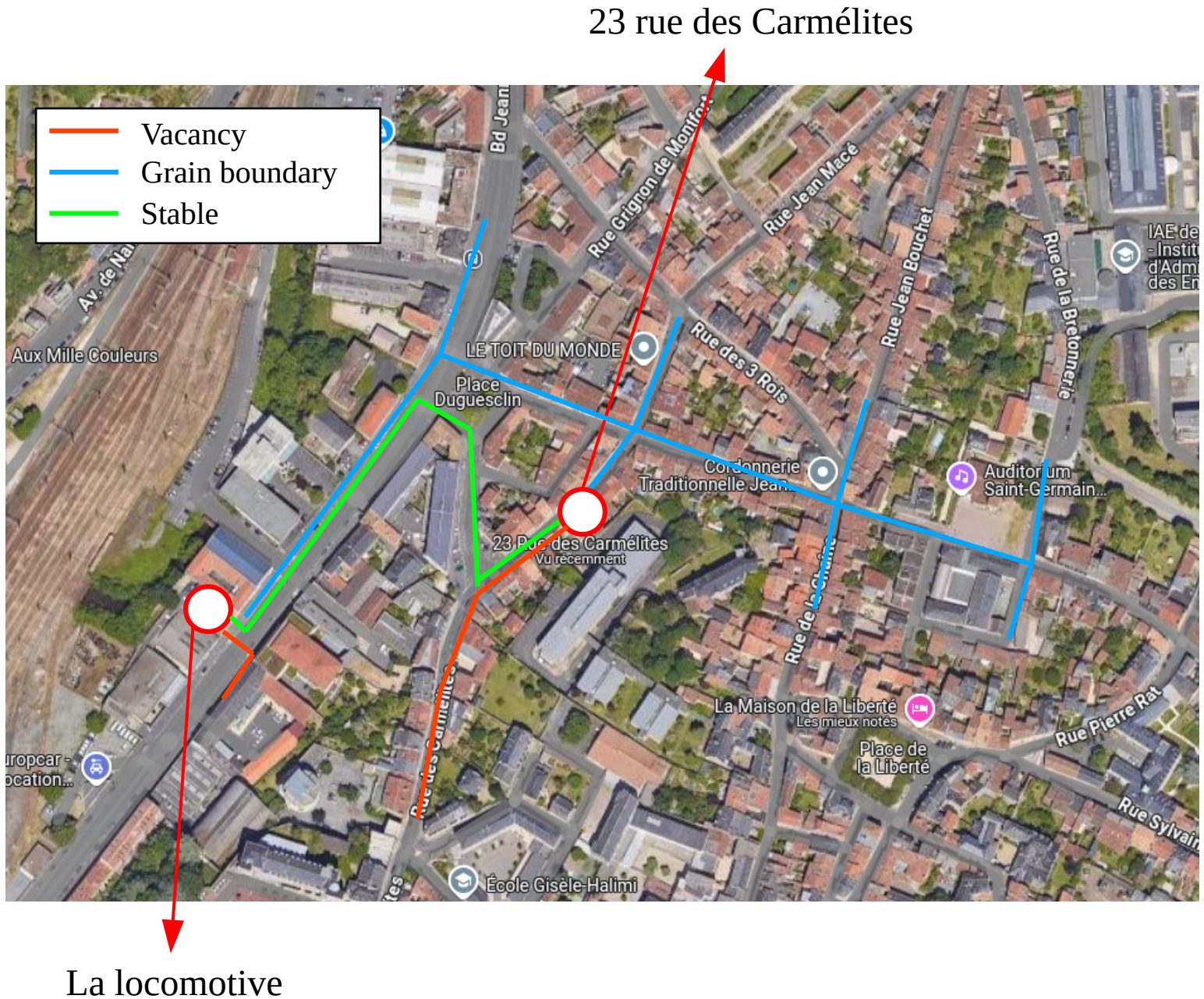
Accès

L'édition plasticité 2025 se tiendra du 22 au 24 avril à Poitiers, les communications auront lieu dans l'**Amphithéâtre Descartes**, au 23 rue des Carmélites 86000 Poitiers dans le centre ville à 15 minutes à pied de la gare de Poitiers.



Session poster

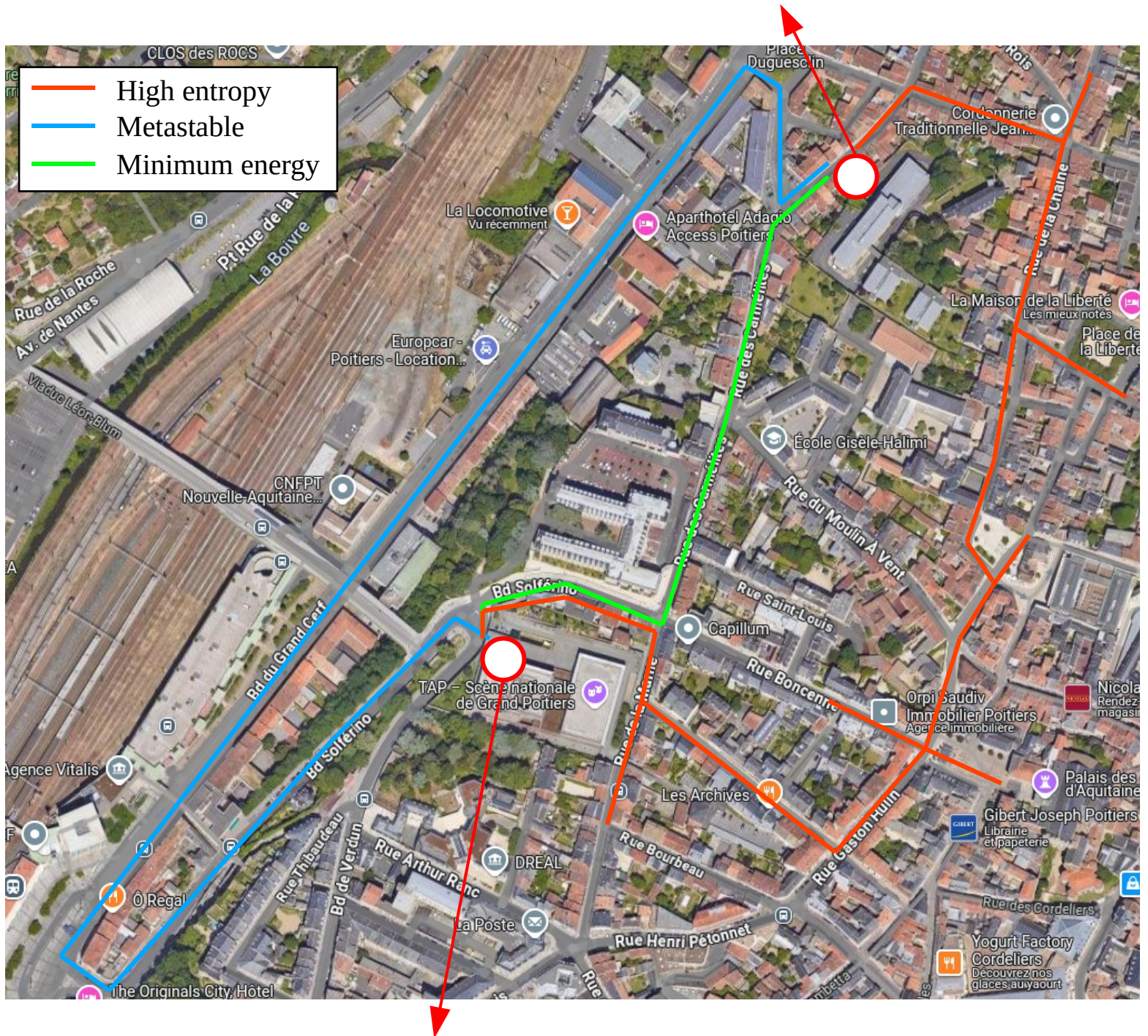
La session poster aura lieu au bar “La Locomotive”, situé au 32 boulevard du Grand Cerf le mardi 22 avril à partir de 18h30 jusqu’à la fermeture du bar. Pour s’y rendre depuis le 23 rue des Carmélites, plusieurs possibilités suivant les appétences scientifiques des participants :



Dîner de gala

Le dîner de gala aura lieu au restaurant “Le Skybar” (aussi appelé Rooftop), situé Boulevard de Verdun le mercredi 23 avril à 20h00. Pour s’y rendre à pied depuis l’hôtel Fumé, encore plusieurs possibilités :

23 rue des Carmélites



Le Skybar/Rooftop

Programme du mardi 22/04 : après-midi

12:00 – 14:00 : Accueil des participants et plateau repas (Amphi Descartes)

14:00 – 14:10 : Ouverture du colloque Plasticité 2025 (Amphi Descartes)

14:10 – 14:50 : Développement d'essais nanomécaniques in situ dans un microscope électronique en transmission pour l'étude de la plasticité des céramiques – Lucile Joly-Pottuz (Invitée)

14:50 – 15:10 : Effect of high temperature exposure in air on the deformation mechanisms of intermetallic γ -TiAl alloys - **Frederic Habiyaremye**

15:10 – 15:30 : Les structures de cloquage, une signature pertinente des propriétés mécaniques des systèmes revêtement/substrat - **Christophe COUPEAU**

15:30 – 15:50 : Déformation à basse contrainte et endommagement précoce aux joints de grains de torsion basale dans les alliages de titane – **Samuel Hemery**

15:50 – 16:20 : Pause café (Amphi Descartes)

16:20 – 16:40 : Comparison of bulk vs. surface dislocation elastic fields in GaN: a study for non-destructive near-surface electron diffraction techniques - **Fatin El Ajjouri**

16:40 – 17:00 : Small-Scale Plasticity in ZnO: Combined Experimental and Computational Insights - **Anastasiia Walrave**

17:00 – 17:20 : Influence of σ phase precipitation on high-temperature mechanical properties of a wrought Ni-base superalloy - **Tim Storch**

17:20 – 17:40 : Etude des propriétés mécaniques de nanopiliers de pyrocarbone par dynamique moléculaire – **Julien Durinck**

18:30 : Session poster - Bar la Locomotive (voir plan)

Programme du mercredi 23/04 : matinée

8:40 – 9:20 : Recent developments in the comprehension of mechanical twinning in concentrated solid solutions – Guillaume Laplanche (Invité)

9:20 – 9:40 : Atomic-scale simulations of nanotwinned gold thin films - **Alisha George**

9:40 – 10:00 : Lois d'échelle et complexité des fluctuations de contrainte associées aux modes de déformation monotone et saccadés – **Mikhail Lebedkin**

10:00 – 10:20 : Impact de l'hydrogène sur les dislocations vis dans le tungstène - **Thomas Leveau**

10:20 – 10:50 : Pause café (Amphi Descartes)

10:50 – 11:10 : La dynamique des dislocations dans l'alliage de Cantor étudiée par déformation MET in situ et apprentissage automatique – **Marc Legros**

11:10 – 11:30 : Effet de la teneur en Pu sur les propriétés à rupture du combustible MOX - **Charlélie Chil**

11:30 – 11:50 : Effet du frittage hautes pressions sur la microstructure et les propriétés mécanique et optique d'une spinelle de magnésium (MgAl_2O_4) nanostructurée - **Sandrine Cottrino**

11:50 – 12:00 : Presentation Anton Paar (sponsor) - **Guillaume Berthout**

12:00 – 14:00 : Repas (Restaurant 1431 – 15 rue de l'Hôtel Dieu)

Programme du mercredi 23/04 : après-midi

14:00 – 14:40 : Modelling Plastic Deformation in Amorphous Solids – Sylvain Patinet (Invité)

14:40 – 15:00 : Extraction des surfaces de contraintes seuil d'écoulement dans les matériaux cristallins par application de chemins de déformation en dynamique moléculaire - **Elliott T. Dubois**

15:00 – 15:20 : Modélisation du glissement dévié de la dislocation vis dans UO_2 - **Jules-Elémir Suchorski**

15:20 – 15:40 : Understanding plasticity in Face-Centered Crystals with the Mesoscopic Tensorial Model - **Gaël Tejedor**

15:40 – 16:10 : Pause café (Amphi Descartes)

16:10 – 16:30 : Mixed Climb in Naturally Deformed Quartz and the Effect of Water: Evidence from Electron Tomography - **Timmo Weidner**

16:30 – 16:50 : Relation entre propriétés mécaniques locales et microstructure de conducteurs Cu-Ag nanostructurés obtenus par déformation plastique sévère – **Hanane Idrir**

16:50 – 17:10 : Réflexion sur l'avenir de la plasticité en master - **Discussions**

17:30 – 19:00 : Visite guidée touristique de Poitiers (départ office du tourisme – Place Notre Dame)

20:00 : Dîner de gala - Photo de groupe, Restaurant le Skybar/Rooftop (voir plan)

Programme du mercredi 23/04 : matinée

8:40 – 9:20 : Plasticity: rocks deform like, but not exactly as metals – Andréa Tommasi (Invitée)

9:20 – 9:40 : Mécanismes de déformation plastique dans la phase MAX Cr₂AlC monocristalline : étude des macles et des configurations de dislocations par essais micromécaniques - **Mohamed Akou**

9:40 – 10:00 : Un modèle d'élastoplasticité en petites déformations fondé sur l'incompatibilité : théorie macroscopique et interprétation mésoscopique - **Thiên-Nga Lê**

10:00 – 10:20 : Simulation multi-échelle de l'interaction entre l'hydrogène et les dislocations vis dans le Fer- α - **Margot Lucas**

10:20 – 10:50 : Pause café (Amphi Descartes)

10:50 – 11:10 : Interaction clivage plasticité en fond de fissure : Etude expérimentale des cas de fragilisation du Ti-6Al-4V et Titane Grade 2 par le lithium liquide - **Itza Camila Hittner**

11:10 – 11:30 : Deformation Mechanisms of Talc: Insights from Nanomechanical Testing - **Patrick Cordier**

11:30 – 11:50 : Dislocations dans les perovskites : similitudes et différences - **Pierre Hirel**

11:50 – 12:10 : Stress-induced amorphization is a transformation induced plasticity – **Jean Furstoss**

12:10 – 14:00 : Panier repas (Amphi Descartes)

Recueil des résumés : Invités

Développement d'essais nanomécaniques *in situ* dans un microscope électronique en transmission pour l'étude de la plasticité des céramiques

Lucile Joly-Pottuz^{1*}, Annie Malchère¹, Vincent Garnier¹, Jérôme Chevalier¹, Karine Masenelli-Varlot¹

¹ INSA Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, MATEIS, UMR5510, 69621, Villeurbanne, France

*lucile.joly-pottuz@insa-lyon.fr

Les matériaux céramiques sont connus depuis des siècles pour leur caractère fragile. Les essais mécaniques à petite échelle dans un microscope électronique en transmission ont révélé un comportement totalement inédit pour des nanoparticules d'alumine, celles-ci se déformant comme des crêpes à température ambiante [1]. Ces observations ont été le précurseur du développement d'essais de nanocompression et de traction *in situ* dans un MET pour mieux étudier le comportement plastique des céramiques à petite échelle. Le couplage des essais nanomécaniques *in situ* MET avec des outils de modélisation par éléments finis [2], de simulation numérique [3] a permis d'identifier les mécanismes de plasticité dans des alumines ou des nanocubes de MgO. Les essais de nanocompression et de traction ont montré également une forte plasticité dans des films minces d'alumine amorphe [4]. Le développement de ces essais dans un ETEM (microscope électronique en transmission environnemental) ouvre aujourd'hui de nouvelles perspectives sur l'étude de la plasticité des céramiques. Il est, par exemple, possible de comparer le comportement plastique de nanocubes de CeO₂ ou de Ce₂O₃ ou de tenir compte de l'environnement [5].

Cette présentation retrace l'historique des développements des essais nanomécaniques *in situ* pour l'étude de la plasticité dans les céramiques, en décrivant les challenges de cette technique, les solutions trouvées ainsi que les problématiques et questions ouvertes restant à explorer.

- [1] Calvié E.; Joly-Pottuz L.; Esnouf, C., Clement P., Garnier V., Chevalier J., Jorand Y., Malchere A., Epicier T., Masenelli-Varlot K., Real time TEM observation of alumina ceramic nano-particles during compression, Journal of the European Ceramic Society , vol. 32 (10), 2012, pp. 2067-2071
- [2] Calvié E., Réthoré J., Joly-Pottuz L., Meille S., Chevalier J., Garnier V., Jorand Y., Esnouf C., Epicier T., Quirk J.B., Masenelli-Varlot K., Mechanical behavior law of ceramic nanoparticles from transmission electron microscopy in situ nano-compression tests, Materials Letters, 119, 2014, pp. 107-110
- [3] Issa I., Joly-Pottuz L, Amodeo J., Dunstan D, Esnouf C., Réthoré J, Garnier V, Chevalier J, Masenelli-Varlot K., From dislocation nucleation to dislocation multiplication in ceramic nanoparticle, Materials Research Letters, 2021, 9 (6), pp.278-283
- [4] Frankberg E.J., Kalikka J., García Ferré F., Joly-Pottuz L., Salminen T., Hintikka J., Hokka M., Koneti S., Douillard T., Le Saint B., Kreiml P., Cordill M.J., Epicier T., Stauffer D., Vanazzi M., Roiban L., Akola J., Di Fonzo F., Levänen E., Masenelli-Varlot K., Highly ductile amorphous oxide at room temperature and high strain rate, Science, 2019, 366 (6467), 864-869
- [5] Joly-Pottuz L, Zhang R., Albaret T., Epicier T., Jenei I., Cobian M., Stauffer D., Masenelli-Varlot K., CeOx elastic properties: an in situ ETEM nanocompression study, JOM, 2024, 76: 2326-2335
- [6] Remerciements au CLyM pour l'accès aux microscopes. Ces travaux ont été financés par le Labex IMUST (projet Nanodef), l'ANR (projets ANR-18-CE42-0009 et ANR-20-CE08-0008-03), le programme polonium (projet 40530UG), le CSC (bourse de thèse)

Progrès récents dans la compréhension du maclage mécanique dans les solutions solides concentrées

Recent developments in the comprehension of mechanical twinning in concentrated solid solutions

Guillaume Laplanche*

Institute for Materials, Ruhr-University Bochum, Universitätsstr. 150, Bochum 44801, Germany

** Guillaume.laplanche@rub.de*

Le maclage mécanique est un mécanisme de déformation essentiel dans les métaux et alliages cubiques à faces centrées (CFC), car il permet d'accommoder la déformation plastique tout en renforçant le taux d'écrouissage de ces matériaux. Ce mécanisme a été identifié pour la première fois il y a un peu moins de 70 ans dans des monocristaux de cuivre déformés à des températures cryogéniques [1]. Depuis, le maclage mécanique a été observé dans d'autres métaux CFC et alliages binaires, et l'intérêt pour ce mécanisme de déformation s'est accru avec l'avènement des aciers TWIP (TWinning Induced Plasticity) et, plus récemment, des solutions solides concentrées telles que les alliages à haute entropie (HEA : High-Entropy Alloys). Dans ces matériaux, il a été proposé que le maclage mécanique réduit la taille effective des grains en introduisant des joints de macle et en provoquant ainsi un effet Hall-Petch dynamique. Ce dernier permet de maintenir un taux d'écrouissage élevé à des déformations uniformes plus importantes, améliorant ainsi la combinaison résistance-ductilité.

Dans cette présentation en anglais, je présenterai nos travaux à l'université de la Ruhr sur des HEAs du système Cr-Mn-Fe-Co-Ni qui ont été très étudiés dans la littérature et sont connus pour leurs propriétés mécaniques impressionnantes, telles que l'augmentation de la résistance à la traction et de la ductilité à basses températures, influencées par la composition. Nous avons sélectionné une série d'alliages monophasés CFC $\text{Cr}_x\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{20}\text{Ni}_{40-x}$ ($14 \leq x \leq 26$ at. %) et étudié leurs propriétés en traction ainsi que leurs mécanismes de déformation à différentes températures et pour différentes tailles de grains [3-5]. La particularité de ces alliages est que leur énergie de défaut d'empilement varie de manière significative dans la gamme de concentration étudiée, alors que les autres paramètres, influençant par exemple le durcissement par solution solide, restent constants [2, 3]. Ces HEAs peuvent donc être considérés comme des alliages modèles pour étudier l'impact de l'énergie de défaut d'empilement sur le maclage mécanique [5]. Dans la mesure du possible, nos données seront comparées aux données expérimentales et théoriques obtenues avec des matériaux monocristallins, allant des métaux purs aux solutions solides concentrées, en passant par les alliages binaires.

Références :

- [1] T.H. Blewitt, R.R. Coltman, J.K. Redman, Journal of Applied Physics 28 (1957) 651–660.
- [2] C. Wagner et al., Acta Materialia 227 (2022) 117693.
- [3] C. Wagner and G. Laplanche, Acta Materialia 244 (2023) 118541.
- [4] C. Wagner and G. Laplanche, International Journal of Plasticity 166 (2023) 103651.
- [5] C. Wagner, E.P. George, G. Laplanche, Acta Materialia 282 (2025) 120470

Modelling Plastic Deformation in Amorphous Solids

Sylvain Patinet^{1*}

¹*PMMH, CNRS, ESPCI Paris, Université PSL, Sorbonne Université, Université Paris Cité,
75005 Paris, France*

**sylvain.patinet@espci.fr*

Irreversible rearrangements on the particle scale are at the origin of permanent plastic deformations in solids. While our understanding of plasticity has made remarkable progress for crystals, it remains relatively modest for amorphous solids, however ubiquitous in our daily life: foams, gels, toothpaste, glasses, and granular media. The main reason for this uncomfortable situation comes from their disordered structure, preventing the identification of the elementary mechanisms of plastic deformation, such as dislocation glide in crystals.

Our numerical work addresses this challenge by developing a method to compute the local yield stress field in model glasses. This technique allows us to efficiently sample the local plastic rearrangement thresholds non-perturbatively, for different loading directions, and on well-controlled length scales. We show that this local yield stress method is highly helpful in capturing the barrier dependencies to glass preparation, shear banding, and induced anisotropy. It is, therefore, an ideal tool for documenting what happens “inside” an amorphous solid and better characterizing the relationship between structure and plasticity. From a practical point of view, we show that it makes it possible to envision more quantitative multi-scale modelling strategies.

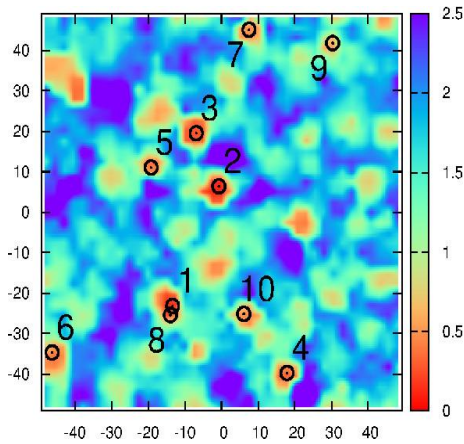


Fig.1: Local yield stress maps in a model glass. Plastic event (open symbols) occur in soft regions.

Plasticity: rocks deform like, but not exactly as metals

Andréa Tommasi^{1*}

¹*Géosciences Montpellier, CNRS & Université de Montpellier, France*

**andrea.tommasi@umontpellier.fr*

The interior of the Earth, except the outer core (2850-5100 km depth), is solid and deforms continuously at very slow rates (10^{-12} to 10^{-16} s⁻¹). The rocks that compose the solid envelopes of the Earth (and other rocky planets or satellites): the plates, the convecting mantle, and the inner core - are polycrystalline materials. At the high temperatures ($T/T_m = 0.5-1$) and pressures that prevail in most of the planet, they deform by crystal plasticity processes, like metals or ceramics. Knowledge on these processes is therefore essential, not for tailoring rocks with "ideal" mechanical properties, but for unravelling the record and modeling planetary dynamics. The basic processes are the same: dislocation glide and climb, grain boundary shearing and migration, recrystallization... However, geological systems have particularities, which add 'spice' to the exercise. First, most rock-forming minerals are silicates, with complex atomic structures containing both covalent and ionic bonds, and by consequence, low symmetries and strong elastic and viscoplastic anisotropies (few slip systems with different critical resolved shear stresses). Second, most rocks are polymineralic, being composed of multiple minerals with contrasted strengths. These two characteristics result in viscoplastic strain incompatibility and stress concentrations at the polycrystal scale, which systematically trigger recrystallization. Recrystallization may, depending on the temperature and strain rate, result in major changes in the microstructure, which may or not lead to changes in dominant deformation processes or strain localization. Finally, geological systems are usually open (the composition may change) and, since the deformations are large, the pressure and temperature conditions may evolve during a deformation event. In this presentation, I will review the state of the art and the main open questions on the viscoplastic deformation of rocks and show some applications of these results for unravelling the planetary dynamics.

Recueil des résumés : Oraux

Effect of high temperature exposure in air on the deformation mechanisms of intermetallic γ -TiAl alloys

Frederic Habiyaremye^{1*}, Daniel Monceau², Marc Thomas³, Pierre Sallot⁴; Jean-Philippe Monchoux¹

¹CEMES-CNRS UPR 8011, 29 rue J. Marvig, BP 94347, CEDEX 4, 31055 Toulouse, France.

²Université Toulouse III—Paul Sabatier, 118 Route de Narbonne, CEDEX 9, 31062 Toulouse, France.

³CIRIMAT, Université de Toulouse, CNRS, INPT, UPS, ENSIACET, 4 Allée Emile Monso BP-44362, 31030, Toulouse Cedex 4, France.

⁴ONERA, 29 Avenue de la Division Leclerc, 92322, Chatillon, Cedex, France

⁵Safran Tech, Materials and Processes, Rue des Jeunes Bois, Châteaufort, 78114, Magny-Les-Hameaux, France.

*frederic.habiyaremye@cemes.fr

High-temperature exposure of γ -TiAl based intermetallic alloys to air results in a loss of ductility, with the underlying causes of this degradation still being poorly understood. This study hypothesizes that embrittlement may stem from the evolution of subsurface microstructure and compositional changes due to diffusion of certain elements. To investigate this hypothesis, fractured and polished tensile specimens were observed before and after heat treatment in a controlled environment of 80% argon and 20% of 16-oxygen using scanning electron microscopy-based techniques. Additionally, lamellae were lifted out at specific sites using a focused ion beam and analyzed by transmission electron microscopy to examine deformation mechanisms in the subsurface layer and center of fractured specimens. Results revealed the formation of Cr-rich precipitates and a recrystallized zone up to a depth of 15 μm after exposure. The morphology of dislocations in the subsurface layer differed from the center, indicating oxygen diffusion in solid solution. The combination of ultrafine grains due to recrystallization, precipitates interacting with dislocations, and pinning of dislocations by oxygen clusters may individually or collectively contribute to the strengthening of the surface layer, potentially initiating tensile specimen failure in this region. These findings offer new insights that may help eliminate embrittlement in intermetallic γ -TiAl alloys.

Les structures de cloquage, une signature pertinente des propriétés mécaniques des systèmes revêtement/substrat

Christophe COUPEAU^{1*}, Julien DURINCK¹, Jérôme COLIN¹, Guillaume PARRY²

¹*Institut P', UPR 3346 CNRS, Université de Poitiers/CNRS/ENSMA, France*

²*SIMaP, UMR 5266 CNRS, Université de Grenoble-Alpes, France*

**christophe.coupeau@univ-poitiers.fr*

La qualité d'un revêtement destiné à un usage pratique est grandement influencée par son comportement mécanique et sa stabilité. Le niveau de contraintes, l'épaisseur et l'adhérence sont les principaux facteurs qui déterminent la stabilité du couple revêtement/substrat et par la suite sa durée de vie. Il est ainsi indispensable lors de l'utilisation industrielle de ces systèmes que la bonne tenue mécanique de l'ensemble soit, d'une part réalisée dès l'élaboration en évitant les décohésions spontanées du dépôt sur son substrat, et d'autre part préservée lors de sollicitations mécaniques ultérieures au cours de leur utilisation.

Ces revêtements développent souvent de fortes contraintes résiduelles au cours du processus de dépôt, parfois de l'ordre de quelques GPa en compression. De tels niveaux de contrainte en compression peuvent provoquer la nucléation/croissance de structures de cloquage (Fig. 1), entraînant généralement la perte des propriétés fonctionnelles initialement conférées à ces composites film/substrat. L'objectif de nos études est ainsi de mieux comprendre le phénomène de cloquage, en identifiant les paramètres pertinents pour le prévenir, le limiter, voire le contrôler.

Le phénomène de cloquage a été largement étudié par le passé, à la fois de manière analytique dans le cadre de la théorie des plaques minces de Foppl-Von Karman et de manière numérique par des simulations en éléments finis. L'influence des paramètres mécaniques, tels que l'épaisseur ou les contraintes internes/externes, a été clairement identifiée. Des études récentes permettent dorénavant de comprendre le rôle d'autres points spécifiques : écart de pression entre l'intérieur et l'extérieur du film, désaccord des propriétés élastiques entre le film et son substrat, événements plastiques pouvant avoir lieu au sein même de revêtements ductiles, D'un point de vue expérimental, l'étude fine, à l'échelle nanométrique, de la morphologie des structures de cloquage apparaît ainsi d'un grand intérêt afin d'extraire qualitativement, voire quantitativement, certains paramètres physiques/mécaniques des films associés. Enfin, la dynamique de leur croissance permet également de fournir des informations intéressantes sur les propriétés d'adhésion film/substrat.

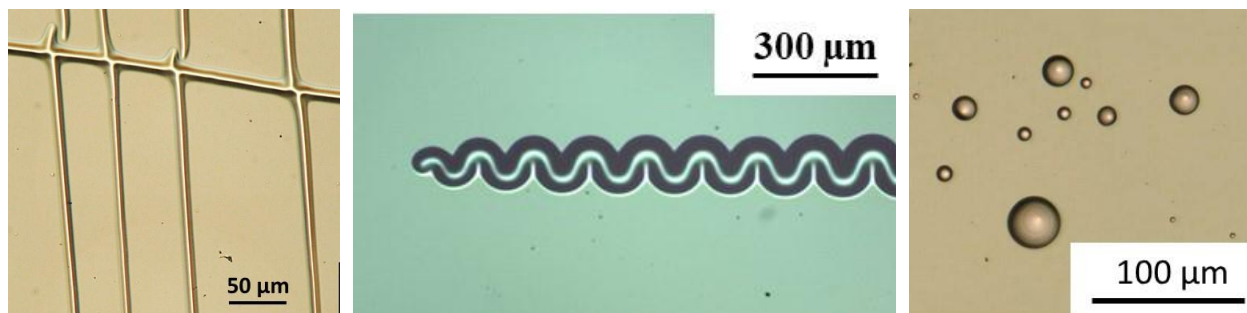


Figure 1. Principaux types de structures de cloquage observées expérimentalement par microscopie optique (a) Rides droites sur film de Ni (200 nm) sur polycarbonate (b) Cordon de téléphone sur film de Ta (240 nm) sur Si (c) Bulles circulaires sur film d'Au (150 nm) sur Si.

Déformation à basse contrainte et endommagement précoce aux joints de grains de torsion basale dans les alliages de titane

Thomas Yvinec¹, Djafar Iabadden², Valéry Valle¹, Florence Hamon¹, Julien Guénolé², Samuel Hemery^{1*}

¹ Institut Pprime, ISAE-ENSMA, Université de Poitiers, CNRS UPR 3346, Téléport 2, 1 avenue Clément Ader, BP 40109, Futuroscope-Chasseneuil Cedex, 86961 France

² CNRS, Université de Lorraine, Arts et Métiers ParisTech, LEM3, 57070 Metz, France

* samuel.hemery@ensma.fr

Les alliages de titane sont des matériaux essentiels pour de nombreuses applications, en particulier dans le domaine aéronautique. Dans ce contexte, les sollicitations en service impliquent souvent des chargements mécaniques cycliques, et exigent ainsi de connaître avec précision les durées de vie de fatigue. Le développement de modèles de la plasticité cristalline a ouvert de nouvelles perspectives pour prendre en compte l'influence de la microstructure sur le comportement de ces matériaux. Cependant, ceci repose sur deux prérequis : une identification des configurations de microstructure critiques vis-à-vis de l'amorçage des fissures de fatigue, et une caractérisation avancée du comportement local. Les configurations de microstructure critiques ont été revisitées récemment avec la découverte de l'implication des joints de grains de torsion basale dans l'amorçage de fissures de fatigue. Cependant, les informations quant au comportement local sont encore très parcellaires. L'objectif de l'étude présentée est ainsi de fournir une caractérisation de la déformation à l'échelle de la microstructure et contribuer à une meilleure compréhension des mécanismes impliqués.

Un alliage Ti-6Al-4V avec une microstructure nodulaire a été déformé in-situ dans un microscope électronique à balayage. Les champs cinématiques à l'échelle de la microstructure ont été caractérisés par la méthode HR-DIC, en se focalisant sur l'étude des joints de grains de torsion basale. En particulier, le formalisme H-DIC a été utilisé pour mieux décrire les discontinuités cinématiques associés aux événements de déformation plastique. Pour ce faire, une caractérisation préalable a été effectuée par la technique EBSD, et un outil d'identification de ces arrangements spécifiques de microstructure a été développé, puis appliqué. Certaines de ces zones d'intérêt ont montré une déformation plastique localisée très précoce. Une attention particulière a été portée sur les caractéristiques du joint de grain (composantes de torsion, de flexion, longueur, orientation) et les interactions avec la microstructure environnante. Des simulations atomistiques ont été utilisées en complément pour étudier la structure et le comportement de ces configurations de microstructure. Les grandes tendances observées ont ainsi pu être reproduites et expliquées, notamment via l'analyse des caractéristiques du réseau de dislocations interfaciales. Enfin, les observations in-situ ont également fourni la preuve d'un endommagement précoce, qui paraît essentiel au rôle de ces éléments de joints de grains dans la rupture prématurée sous un large spectre de conditions de chargement.

Comparison of bulk vs. surface dislocation elastic fields in GaN: a study for non-destructive near-surface electron diffraction techniques

Fatin El Ajjouri^{1*}, Arka Mandal¹, Vincent Taupin¹, Antoine Guitton¹

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

*fatin.el-ajjouri@univ-lorraine.fr

Dislocations are linear crystalline defects that induce long-range elastic fields inside materials. Dislocations can significantly alter the positions of atoms in their neighborhood, enabling their detection through near surface electron diffraction techniques, such as electron backscatter diffraction (EBSD), High-Resolution Electron Backscatter Diffraction (HR-EBSD), or electron channeling contrast imaging (ECCI). In this contribution, we explore the effect of free surfaces on dislocation elastic fields, by comparison with bulk signatures, in order to assess the possible influence of free surfaces on dislocation detection and characterization using near surface electron diffraction techniques. To this end, we employ a field dislocation mechanics (FDM) model numerically approximated by a fast Fourier transform (FFT) algorithm, which allows to model any dislocation configuration with the effect of free surfaces. In addition to strain, rotations and stress fields, the model is further used to generate virtual curvature and associated geometrically necessary dislocation (GND) density maps that can be typically measured in EBSD to characterize dislocations. We apply the workflow to threading dislocations (TDs) in GaN semiconductor [0001] layers deposited on a Si substrate. As a model material system featuring mostly straight dislocations, GaN allows for the assessment of the possible applicability of EBSD, HR-EBSD and ECCI to characterize dislocations near the surface. Our findings reveal that the simulated fields can differ significantly between the surface and the bulk, which can lead to potential misinterpretation in dislocation characterization when using experimental surface-based techniques like EBSD. Additionally, the necessary metrics required for the unambiguous characterization and classification of dislocations are established.

Keywords: Threading dislocations, field dislocation mechanics (FDM), fast Fourier transform (FFT) GaN semi-conductor, electron channeling contrast imaging (ECCI), dislocation elastic fields, electron backscatter diffraction (EBSD), high-resolution electron backscatter diffraction (HR-EBSD), geometrically necessary dislocation (GND), free surfaces.

References:

- [1] BERTIN. N., *International Journal of Plasticity*, (2019), vol. 122, p. 268-284.
- [2] DJAKA. K.S *et al.*, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, (2017), vol. 315, p. 921-942.
- [3] MANDAL. A *et al.*, *Microscopy and Microanalysis*, (2024).

Small-Scale Plasticity in ZnO: Combined Experimental and Computational Insights

Anastasiia Walrave^{1*}, Jonathan Amodeo¹, Solène Comby-Dassonneville¹, and Michaël Texier¹

¹*Aix Marseille Univ, Univ Toulon, CNRS, IM2NP UMR 7334, 13397 Marseille, France*

**anastasiia.walrave@univ-amu.fr*

Zinc oxide (ZnO) is a compound semiconductor widely recognized for its electronic, optical, and piezoelectric properties, which enable diverse applications from optoelectronics to energy harvesting. Like other II-VI semiconductors, ZnO exhibits intriguing interactions between its electronic and structural properties, particularly regarding dislocation behavior (electroplasticity, photoplasticity, dislocation currents, etc.). While the structure of grown-in defects in ZnO has been extensively studied [1-3], the formation mechanisms of extended defects under external load remain poorly understood [4]. In particular, questions persist about the relative activities of the different slip systems and their role in strain accommodation – knowledge crucial for manipulating dislocation populations and thereby controlling ZnO's properties.

This work investigates elementary deformation mechanisms in ZnO, focusing on prismatic and pyramidal slip systems through combined experimental and numerical approaches. We performed compression tests on FIB-machined micropillars with various crystallographic orientations using a displacement-controlled nanoindenter with a flat punch. This methodology enables precise control over loading conditions while allowing systematic study of orientation-dependent deformation behavior. The deformed specimens were characterized using both conventional and high-resolution transmission electron microscopy (TEM) to identify active slip systems and analyze dislocation microstructures. In parallel, atomistic simulations of generalized stacking fault (GSF) energies were conducted and a model was proposed to better interpret experimental observations.

References:

1. Nakamura et al., Crystals 8, 127 (2018)
2. Iwanaga et al., Phys. Status Solidi A 38, K119 (1976)
3. Li et al., Acta Mater. 175, 457 (2019)
4. Sung et al., Appl. Phys. Lett. 102, 241904 (2013)

Influence of σ phase precipitation on high-temperature mechanical properties of a wrought Ni-base superalloy

Tim Storch^{1*}, Gunther Eggeler¹, Guillaume Laplanche¹

¹*Institute for Materials, Ruhr-University Bochum, Universitätsstr. 150, Bochum 44801, Germany*

**tim.storch@rub.de*

The wrought Ni-base superalloy investigated in this study was designed to operate at temperatures above 900 °C [1] in automotive, aerospace, and power generation applications [2, 3]. In general, achieving high temperatures is of major interest, as the efficiency of combustion engines is linked to the gas inlet temperature. One way to optimize the high-temperature properties of wrought superalloys is by fine-tuning their compositions. For instance, Cr and W concentrations have been increased to improve the creep resistance of the solid solution and its oxidation behavior. However, adding refractory elements, such as Cr and W, also leads to the formation of undesired topologically close-packed (TCP) phases, which are reported to degrade mechanical properties [2, 3]. The most common TCP phase in engineering alloys is the σ phase, which is brittle and hard [4, 5]. It mainly consists of refractory elements (Cr, Mo, and W) and depletes the matrix in these elements while precipitating. Therefore, the overall creep behavior and oxidation resistance may be degraded, as these missing elements no longer contribute to inhibiting dislocation climb.

In this contribution, we investigate the effect of the σ phase on the creep behavior of a wrought superalloy between 900 and 1000 °C at stresses ranging from 60 to 80 MPa. To this end, a sequence of heat treatments was applied to establish two microstructural states with similar γ/γ' microstructure but different σ phase volume fractions prior to testing. By systematically comparing the microstructure in the head and gauge length of the crept specimens, we show how plastic deformation affects the precipitation and dissolution kinetics of the σ phase depending on the applied temperature, and how this influences the creep behavior of the alloy.

Keywords: Ni-base superalloy; Microstructure; Sigma phase, TCP phase; Precipitation; Mechanical properties; Creep

Références:

- [1] J. Hunfeld et al., *Materials and Design* **Vol. 211** (2021) 110174
- [2] R.Bürgel et al., *Handbuch: Hochtemperatur Werkstofftechnik* **Vol. 4** (2011)
- [3] R.C. Reed, *The superalloys: Fundamentals and application* **Vol. 1** (2006)
- [4] R.C. Reed et al., *Materials Science and Engineering: A* **Vol. 448** (2007), p.88-96
- [5] J.-M. Joubert et al., *Acta Materialia* **Vol. 259** (2023) 119227

Etude des propriétés mécaniques de nanopiliers de pyrocarbone par dynamique moléculaire

Julien Durinck^{*1}, Laurent Pizzagalli¹, Paul Lafourcade², Jean-Marc Leyssale³

¹*Institut P', Université de Poitiers*

²*CEA-DAM, Arpajon*

³*Institut des Sciences Moléculaires, Université de Bordeaux*

**julien.durinck@univ-poitiers.fr*

Les pyrocarbones, ou carbones pyrolytiques, sont des matériaux carbonés synthétisés par pyrolyse d'hydrocarbures gazeux ou liquides. Certaines de leurs propriétés, telles que la conductivité électrique, la stabilité thermique et la biocompatibilité, en font des matériaux de choix dans divers domaines industriels tels que le nucléaire (pour le gainage de combustibles), la microélectronique (comme électrode) ou le biomédical (comme revêtements d'implants).

La microstructure des pyrocarbones peut être décrite comme un empilement désorienté de couches de graphène, typique des carbones turbostratiques sans cohérence cristalline dans la direction [002], contrairement au graphite dont les feuillets présentent un empilement régulier AB. La présence de défauts ponctuels et linéaires, intra- et inter-feuillets, limite la cohérence cristalline à quelques nanomètres, aussi bien dans le plan des feuillets que dans la direction de leur empilement. Ces domaines sont désorientés les uns par rapport aux autres avec une distribution des orientations [002] généralement centrée autour de la direction de croissance.

Cette complexité microstructurale rend difficile l'établissement de relations claires entre la microstructure des pyrocarbones et leur comportement mécanique sous de grandes déformations. Pour approfondir cette question, nous avons mené des simulations de dynamique moléculaire de compression de nanopiliers de pyrocarbones, à partir de modèles réalistes construits à partir d'une méthode de reconstruction guidée par des observations expérimentales [1]. Trois types de pyrocarbones et trois axes de sollicitation différents ont été étudiés. Les courbes contrainte-déformation obtenues ont été analysées en corrélation avec les modifications structurales observées au cours de l'essai numérique (évolution de l'orientation des feuillets et de la population de défauts, cisaillement et déformation hydrostatique locaux). Les résultats obtenus mettent en évidence une diversité des mécanismes de déformation en fonction de l'axe de compression appliqué, tels que le flambage des feuillets de graphène et la formation de « kink bands » et de « shear bands ».

[1] F.Polewczyk, P.Lafourcade, JP. Da Costa, G.Vignoles, JM.Leyssale, Carbon 212, 118109 (2023)

Atomic-scale simulations of nanotwinned gold thin films

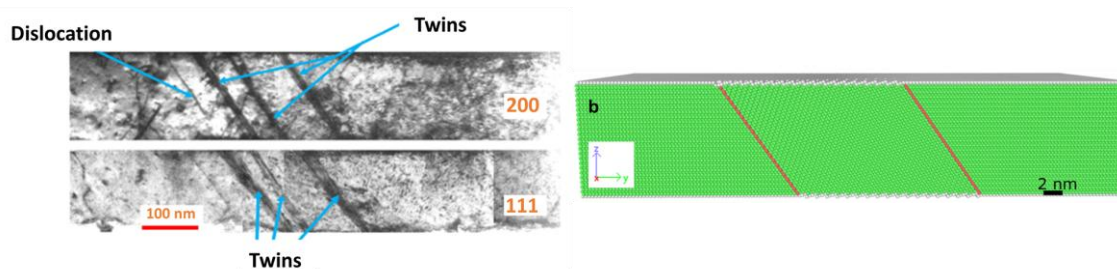
Alisha George^{*}, Pierre Godard, Sandrine Brochard

Université de Poitiers, ISAE-ENSMA, CNRS, PPRIME, Poitiers, France

^{*}alisha.george@univ-poitiers.fr

Mechanical strength of the material is an important property which is often sought after for many applications. Hence, many methods are employed to improve the strength like refining grain size, solid solution alloying etc. However, these methods lead to a loss of electrical properties due to more electron scattering and they also reduce ductility. We need to find a way to improve mechanical strength without sacrificing other important properties. Introducing twin boundaries into the material is one such method, which strengthens the material by impeding the motion of dislocations but also maintains ductility [1]. Nanotwinned materials are also observed to possess electrical properties similar to the coarse grain counterpart [2].

In this context, we performed atomic scale simulations on a single crystalline gold thin film containing a finite twin constructed with coherent and incoherent twin boundaries (see Figure below). We chose gold as it has properties such as corrosion resistance and is chemically inert, which makes it a good choice for many applications. Moreover, because of its low stacking fault energy, it is easier to observe twinning in gold. We have constructed the structure according to the initial structure of experimental samples in which tensile tests are performed and growth of twins is observed in certain loading directions. Two interatomic potentials which have the gamma curve in close correspondence with the gamma curve obtained from ab initio calculations are used to perform the simulations. We performed deformation of the gold thin film, in the direction similar to the experimental one, to better understand the deformation mechanisms. The preliminary observations show motion of partial dislocations along the coherent twin boundaries and detachment of dislocations from the junction between coherent and incoherent twin boundaries.



References:

- [1] L. Zhang W. Mao, Y. Shibuta, *Mechanical response and plastic deformation of coherent twin boundary with perfect and defective structures*, *Mechanics of Materials* **141** (2020) 103266
- [2] L. Lu, Y. Shen, X. Chen, L. Qian, K. Lu, *Ultrahigh strength and high electrical conductivity in copper*, *Science* **304** (2004) 422–426

Lois d'échelle et complexité des fluctuations de contrainte associées aux modes de déformation monotone et saccadés

M. Lebyodkin^{1*}, J. Brecht², T. Lebedkina¹, K. Wen³, P.K. Liaw⁴, T.D. Shen³

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

² *Buildings and Transportation Science Division, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN 37830, USA*

³ *Clean Nano Energy Center, State Key Laboratory of Metastable Materials Science and Technology, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China*

⁴ *The Department of Materials Science and Engineering, The University of Tennessee, Knoxville, TN 37996, USA*

* mikhail.lebedkin@univ-lorraine.fr

Des observations récentes de déformation non monotone (saccadée) d'alliages à haute entropie (HEA) ont mis en évidence le rôle important joué par l'auto-organisation des ensembles de dislocations dans leur plasticité. Ce travail présente les premiers résultats d'une étude des fluctuations de contrainte lors de la déformation plastique d'un alliage FeCoNiTiAl, sur une large gamme de températures couvrant à la fois la déformation monotone et la déformation saccadée. Ces fluctuations rapides s'écartent du comportement moyen, qui représente l'évolution de la contrainte sur une échelle de temps plus lente, sous l'effet de l'écrouissage. Elles ont été analysées à l'aide d'approches complémentaires incluant l'analyse spectrale de Fourier, le calcul de l'entropie multi-échelle (« refined composite multiscale entropy ») et le formalisme multifractal. Cette analyse composite à différentes échelles montre que même un écoulement plastique macroscopiquement continu et monotone s'accompagne de fluctuations non aléatoires, témoignant d'une dynamique auto-organisée des dislocations. De plus, une variation de la température de l'essai entraîne des changements qualitatifs de dynamique dans le « bruit » à échelle fine. La diversité des comportements observés pourrait contribuer à une meilleure compréhension des relations entre les différentes échelles de plasticité des HEAs et des matériaux cristallins en général.

Impact de l'hydrogène sur les dislocations vis dans le tungstène

Thomas LEVEAU^{1)*}, Lisa VENTELON¹⁾, Mihai-Cosmin MARINICA¹⁾, Emmanuel CLOUET¹⁾

1) Université Paris-Saclay, CEA, Service de recherche en Corrosion et Comportement des Matériaux, SRMP, 91120 Gif sur Yvette, France

*adresse email : thomas.leveau@cea.fr

L'hydrogène est connu pour influencer le comportement mécanique des métaux de transition de structure cubique centrée en conduisant soit à un adoucissement, soit un durcissement selon les conditions de sollicitation. Des observations par microscopie électronique en transmission (MET) de dislocations, réalisées lors d'essais de traction in-situ, ont montré une accélération des dislocations en présence d'hydrogène à température ambiante dans le fer [1,2]. Dans ce contexte, des calculs basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) effectués dans le fer et le tungstène révèlent une ségrégation de l'hydrogène sur les dislocations vis associée à une reconstruction du cœur de dislocation [3]. À partir de ces configurations, nous avons réalisé des calculs DFT de barrières de migration des dislocations décorés en hydrogène, mettant en évidence des barrières d'énergie multiples et significatives, de hauteur comparable. Ces résultats ne permettent toutefois pas de conclure sur l'effet adoucissant ou durcissant de l'hydrogène.

Dans ce travail, nous avons développé un potentiel de Machine Learning (ML) capable de reproduire correctement l'interaction entre les dislocations et l'hydrogène, en nous appuyant sur le potentiel ML pour le tungstène pur développé par Goryaeva et al. [4], pour nous permettre de réaliser des simulations à température finie. À partir de ce potentiel et grâce à des simulations de dynamique moléculaire de ségrégation de l'hydrogène sur les dislocations, nous avons identifié une nouvelle structure de cœur de dislocation ségrégé en hydrogène, différente de celle obtenue précédemment en DFT [3]. Cette structure mise en évidence en ML est également stable en DFT et d'énergie comparable à la configuration précédente [3]. Un modèle d'interactions de paires, paramétré sur les calculs DFT, est ensuite utilisé avec une approximation en champ moyen pour prédire l'énergie libre de cette nouvelle configuration, en prenant en compte l'entropie de configuration et en négligeant les autres sources d'entropie. Le modèle montre que cette nouvelle configuration est la plus stable dans le régime des hautes températures, lorsque la concentration en hydrogène ségrégé autour du cœur de dislocation est la plus faible. Nous avons également effectué des simulations de dynamique moléculaire avec le potentiel ML pour différentes contraintes appliquées, températures et concentrations nominales en hydrogène, correspondant à une forte ségrégation en hydrogène. Nos résultats révèlent un épinglage de la dislocation décorée pour les deux configurations considérées, ce qui conduit à un durcissement sous ces conditions.

- [1] T. Tabata et H.K. Birnbaum, *Scr. Metall.* **17** 947950 (1983)
- [2] L. Huang *et al.*, *Nat. Mater.* **22**, 710 (2023)
- [3] P.P.O. Borges *et al.*, *Acta Mater.* **234**, 118048 (2022)
- [4] A. Goryaeva *et al.*, *Phys. Rev. Mater.* **5**, 103803 (2022)

La dynamique des dislocations dans l'alliage de Cantor étudiée par déformation MET in situ et apprentissage automatique

Chen Zhang¹, Kishan Govind¹, Hengxu Song¹, Binh Duong Nguyen¹, Antonin Dlouhy², Anna Fraczkiewicz³, Stephan Sandfeld¹ & Marc Legros⁴

¹Forschungszentrum Jülich, 52425, Jülich, Germany

²Ecole des Mines de Saint-Etienne, 158 cours Fauriel, 42023 Saint-Etienne, France

³Institute of Physics of Materials, CAS Zizkova 513/2, 2616 00 Brno, Czech Republic

⁴CEMES-CNRS, 29 rue Jeanne Marvig, Toulouse, France

*marc.legros@cemes.fr

Les alliages à haute entropie sont des matériaux potentiellement intéressants du point de vue des propriétés mécaniques par rapport aux alliages « classiques », sans doute à cause des interactions entre les dislocations et le paysage énergétique complexe formé par l'alliage. La microscopie électronique à transmission (TEM) in situ permet à partir de la dynamique des dislocations de rendre visible le paysage énergétique local visible, mais ces observations souvent qualitatives ne permettent pas une analyse fine de la statistique de ces interactions ni leur quantification.

Dans cette étude, nous avons utilisé les dislocations comme des sondes dont les maxima d'énergie locale correspondent aux points d'épingle les plus forts sur le mouvement des dislocations. Pour ce faire, nous avons développé une approche unique d'exploration de données, permettant de calculer la moyenne de nombreux instantanés afin de produire un paysage de ce qu'une dislocation ou un train de dislocations peut voir lorsqu'on cisaille le cristal. Nous étudions l'effet des points d'épingle sur le comportement des dislocations de l'alliage CoCrFeMnNi (Cantor) au cours d'une déformation TEM in situ à basse température et à température ambiante, et nous constatons que la résistance des points d'épingle change au fur et à mesure que les dislocations les traversent. Notre méthode peut également s'appliquer à l'analyse des avalanches de dislocations à l'échelle des dislocations.

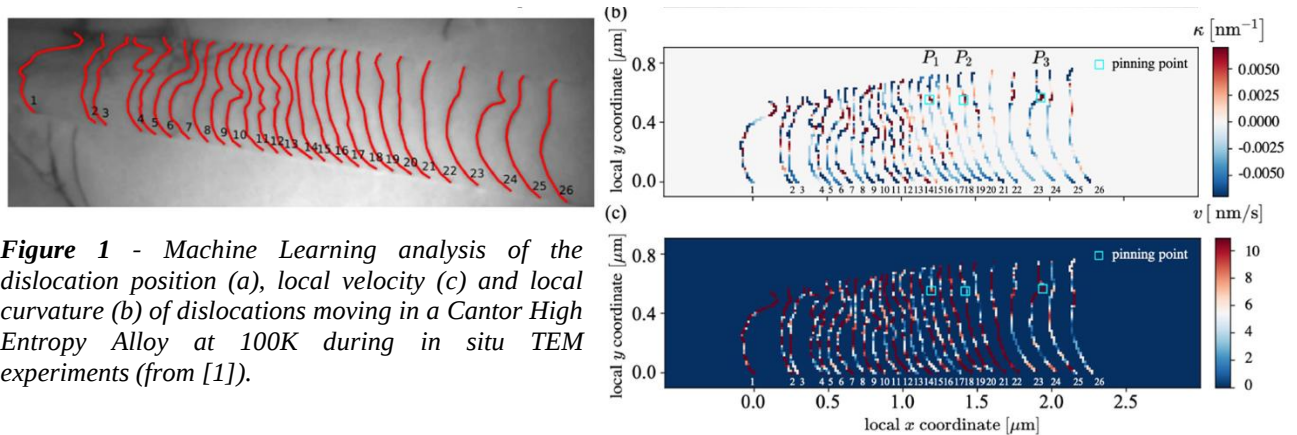


Figure 1 - Machine Learning analysis of the dislocation position (a), local velocity (c) and local curvature (b) of dislocations moving in a Cantor High Entropy Alloy at 100K during in situ TEM experiments (from [1]).

References

- [1] C. Zhang, H. Song, D. Oliveros, et al, *Acta Materialia*, 241 (2022) 118394.
- [2], H. Song, B.D. Nguyen, K. Govind et al, *Acta Materialia*, 282 (2024) 120455.

Effet de la teneur en Pu sur les propriétés à rupture du combustible MOX

Charlélie Chil^{1*}, Adrien Pivano¹, Bruno Michel¹, Emeric Bourasseau¹

¹CEA, DES, IRESNE, DEC, SES, LM2C
charlelie.chil@cea.fr

Afin de parvenir à valoriser le Pu produit dans les centrales nucléaires, le combustible MOX, de composition $(U,Pu)O_2$ utilisé dans les réacteurs à eau pressurisée français, est l'un des combustibles candidats pour les réacteurs des générations futures avec des teneurs en Pu plus élevées. Ce combustible est fabriqué à partir du traitement du combustible usé dont la structure polycristalline est composée d'amas riches en Pu dans une matrice d' UO_2 . En conditions de fonctionnement normal des réacteurs, les joints de grains (JdG) sont fortement sollicités à la fois par la contrainte thermomécanique induite par le gradient thermique subi par le combustible et par l'apparition des gaz de fission qui s'agglomèrent sous forme de bulle dans les JdG. Ces deux phénomènes, exacerbés en situation incidentelle ou accidentelle, provoquent l'apparition de fissures macroscopiques pouvant se propager de façon intra ou intergranulaire. Il est donc crucial pour des enjeux de sûreté de connaître les propriétés à rupture des JdGs dans le MOX (contrainte à rupture et ténacité) notamment pour prédire la quantité de gaz pouvant être libérée par le combustible.

Des simulations à l'échelle atomique ont été réalisées afin d'étudier le comportement à la rupture des JdGs dans des systèmes $(U_{1-x},Pu_x)O_2$, afin de vérifier l'influence de la teneur en Pu sur ces derniers. Les JdGs étudiés sont des joints de flexion et de torsion largement étudiés dans le cas du combustible UO_2 [1, 2]. Les simulations atomistiques permettent d'obtenir les énergies de formation (l'excès d'énergie dû à la présence du JdG par rapport au monocristal) et l'énergie de clivage (l'énergie nécessaire pour séparer le joint en deux) conduisant à une première estimation de la ténacité. Pour approfondir cette étude, des essais de traction uniaxiale perpendiculaire au plan du JdG ont révélé deux types de comportement à la rupture en fonction du type de JdG : une rupture fragile dans le plan du JdG ou une modification de la structure cristalline retardant très largement la rupture. A l'aide de ces essais, il a été montré que la teneur en Pu augmente légèrement la ténacité du système.

[1] Bourasseau, E., Mouret, A., Fantou, P., Iltis, X., & Belin, R. C. (2019). Experimental and simulation study of grain boundaries in UO_2 . *Journal of Nuclear Materials*, 517, 286-295.

[2] Borde, M., Germain, A., & Bourasseau, E. (2021). Molecular dynamics study of UO_2 symmetric tilt grain boundaries around [001] axis. *Journal of the American Ceramic Society*, 104(6), 2879-2893.

Effet du frittage hautes pressions sur la microstructure et les propriétés mécanique et optique d'une spinelle de magnésium (MgAl_2O_4) nanostructurée

Sandrine Cottrino¹, Thomas Gaudisson², Thierry Douillard¹, Nicholas Blanchard², Sylvain Meille¹, Laurent Gremillard¹, Sylvie Le Floch²

1 Univ Lyon, CNRS, INSA Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, MATEIS, UMR5510, 69621 Villeurbanne, France

2 Université Claude Bernard Lyon 1, CNRS, Institut Lumière Matière, UMR5306, F-69100, Villeurbanne, France

**sandrine.cottrino@insa-lyon.fr*

Le spinelle de magnésium polycristallin est une céramique transparente prometteuse pour plusieurs applications, comme par exemple les applications de blindage. Ce spinelle peut être élaboré par des procédés conventionnels en plusieurs étapes tels que par frittage libre suivi d'un pressage isostatique à chaud. Néanmoins, le frittage SPS (Spark Plasma Sintering) en une seule étape est une approche plus rapide d'un point de vue procédé. Il a été démontré que l'application d'une pression simultanément au traitement thermique de frittage permettait de fabriquer des céramiques à grains fins, entièrement denses [1, 2] et optiquement transparentes.

Dans ce travail, des pastilles de MgAl_2O_4 nanostructurées de haute densité ont été fabriquées à partir d'une nanopoudre par une technique de SPS haute pression (HP-SPS), sous des pressions croissantes jusqu'à 5 GPa. Le frittage sous hautes pressions permet d'obtenir des cristaux avec une distribution en taille de pores très fine et une haute compacité permettant d'optimiser le procédé de frittage. Cela peut s'expliquer par une modification importante de l'arrangement granulaire avec d'abord une réorganisation inter-agglomérat, puis un arrangement intra-agglomérat (inter-particules) et enfin une déformation plastique des nanoparticules. Il est montré qu'en appliquant une pression élevée (76 MPa à 5 GPa), la densification commence à une température plus basse et est accélérée. L'application d'une pression de 1,5 GPa réduit les températures de frittage de 500°C, ce qui permet d'obtenir des céramiques denses et transparentes sans grossissement des grains. Des techniques avancées d'analyse microstructurale ont été utilisées pour suivre l'évolution de la microstructure à haute pression et à haute température (défauts, microcontraintes, etc.). Des mesures de transmission en ligne (RIT) et de microdureté ont été effectuées pour évaluer l'effet de la pression sur les propriétés optique et mécanique des différents échantillons. Les céramiques obtenues sous haute pression présentent une dureté accrue en raison de leur nanostructuration, bien que certaines pertes optiques à des longueurs d'ondes plus courtes soient observées en raison de défauts cristallins induits par la contrainte.

Références

- [1] A. Verchère et al. "Effect of High Pressure Spark Plasma Sintering on the Densification of a Nb-Doped TiO_2 Nanopowder" *Ceramics* 2020, 3, 507–520
- [2] S. Cottrino et al. "In situ X-ray diffraction study of a TiO_2 nanopowder spark plasma sintering under very high pressure" *Journal of the European Ceramic Society* 43 (2023) 2783-2793

Extraction des surfaces de contraintes seuil d'écoulement dans les matériaux cristallins par application de chemins de déformation en dynamique moléculaire

Eliott T. Dubois^{1,2*}, Jean-Bernard Maillet^{2,3}, Paul Lafourcade^{2,3}

¹CEA, DES, IRESNE, DEC, SESC, LM2C, Cadarache F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance, France

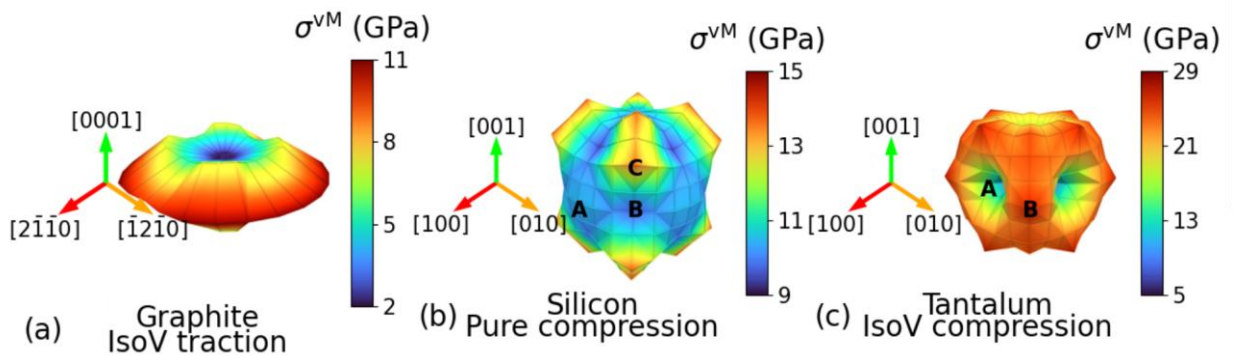
²CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

³Université Paris-Saclay, LMCE, 91680 Bruyères-le-Châtel, France

*eliott.dubois@cea.fr

La simulation à l'échelle atomique des processus de déformation est un outil essentiel pour prédire la réponse mécanique d'un matériau, en particulier pour le calcul de ses contraintes seuil d'écoulement en fonction de la direction de chargement. Ce travail présente une méthode permettant d'appliquer des chemins de déformations arbitraires dans le code de dynamique moléculaire LAMMPS [1], tout en respectant les conventions imposées par ce dernier sur les vecteurs périodiques de la supercellule (**a** coïncide avec l'axe *x* et **b** est dans le plan (*x,y*)). Cette méthode, particulièrement pertinente pour les matériaux qui présentent une faible symétrie cristalline ainsi que pour l'exploration de déformations non-uniaxiale, permet, en outre, de faciliter l'intégration des informations microscopiques vers les modèles continus.

Afin de démontrer la polyvalence de cette méthode, nous l'avons appliqué à divers matériaux (Graphite, Silicium, Tantale) soumis à différents types de déformation (cisaillement, traction, compression isochore) illustrant son efficacité dans des simulations mettant en jeu des déformations complexes et des structures cristallines variées. Finalement, les surfaces de contraintes seuil extraites de ces simulations sont analysées comme la signature des mécanismes de déformation des matériaux et de leurs comportements anisotropes.



[1] A. P. Thompson *et al.* "Lammps - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales", Computer Physics Communications 271, 108171 (2022).

Modélisation du glissement dévié de la dislocation vis dans UO_2

Jules-Elemir Suchorski^{1,2*}, Adrien Pivano¹, Laurent Dupuy³, Jonathan Amodeo²

¹CEA, DES, IRESNE, DEC, Cadarache, F-13108 Saint-Paul-Lez-Durance, France

²Aix-Marseille Université, Université de Toulon, CNRS, IM2NP, F-13397 Marseille, France

³Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherche en Matériaux et Procédés Avancés, Gif-sur-Yvette, France

* jules-elemir.suchorski@cea.fr

La déformation plastique des monocristaux d' UO_2 est caractérisée par des dislocations mobilisées dans les systèmes de glissement $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ et, moins fréquemment observées, dans $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ et $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{111\}$. Bien que la dislocation coin soit le caractère lent qui contrôle la déformation dans les systèmes de glissement primaires, la dislocation vis joue un rôle majeur i) comme caractère lent pour les deux autres modes de glissement, ii) dans le cadre du composite slip et de l'anisotropie plastique [1] et iii) dans le durcissement par irradiation où elle forme des configurations durcissantes en forme de tour d'hélice par interaction avec des boucles prismatiques $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{110\}$ [2].

Récemment, l'étude de la structure de cœur de la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ dans UO_2 a montré une transition de l'étalement du cœur, d'un plan de type $\{001\}$ à basse température vers des plans $\{111\}$ au-dessus d'une température critique de l'ordre de 1700 K, température à partir de laquelle la mobilité de la dislocation dans les plans $\{111\}$ est favorisée [3].

Dans cette présentation nous confirmerons tout d'abord la transition de système de glissement pour différentes conditions de sollicitation et températures via des calculs de dynamique moléculaire. Nous présenterons ensuite un modèle de glissement dévié pour la dislocation vis $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ dans UO_2 . Ce modèle, informé par l'échelle atomique, repose sur l'évolution de la structure de cœur en température et est ajusté à l'aide de simulations de mobilité de la dislocation vis, à différentes températures et contraintes. La validation du modèle et son implémentation dans le code de dynamique des dislocations discrète Numodis seront discutées et le modèle sera finalement confronté à un cas de glissement dévié récemment étudié [2], montrant l'interaction d'une dislocation vis glissile $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ et d'une boucle d'irradiation, via le glissement dévié de la dislocation mobile.

[1] Madec, Portelette, Michel, Amodeo, "Plastic anisotropy and composite slip: Application to uranium dioxide". In: *Acta Materialia* 255, 119016 (2023).

[2] Borde, Dupuy, Pivano, Michel, Rodney, Amodeo, "Interaction between $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ dislocations and $\{110\}$ prismatic loops in uranium dioxide: Implications for strain-hardening under irradiation". In: *International Journal of Plasticity* 168, 103702 (2023).

[3] Suchorski, Pivano, Amodeo, "On the influence of temperature on the $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ screw dislocation core in uranium dioxide". In: *Acta Materialia* 287, 120771 (2025).

Understanding plasticity in Face-Centered Crystals with the Mesoscopic Tensorial Model

Gaël Tejedor^{*}, Umut Salman, Sylvain Queyreau

*LSPM, Université Sorbonne Paris Nord, av. J.P Clement,
Villetaneuse, 93430, France*

**gael.tejedor@lspm.cnrs.fr*

Understanding the origin of crystalline materials' mechanical strength could lead to new industrial and technological breakthroughs, yet it requires a multi-scale fundamental theory of crystal plasticity. Nonetheless, detailed mathematical modeling and simulations of crystal plasticity at the mesoscale still remains a major challenge for materials science.

Certain models such as Discrete Dislocation Dynamics and Phase Field Methods have allowed to explore beyond atomistic methods' usual spatial and time scales while still reproducing features of crystal plasticity. However, due to modeling assumptions, prohibitive computational requirements, or tedious numerical implementations these oftentimes phenomenological methods can overlook many crucial aspects.

The Tensorial Mesoscopic Model (MTM) of crystal plasticity is able to capture the fast topological changes in dislocation configurations such as nucleation, annihilation, interaction with obstacles in a self-consistent manner, only requiring initial assumptions about the crystalline symmetry and inter-atomic potential [2]. The model involves constructing a coarse-grained non-convex energy, which poses $GL(3, \mathbb{Z})$ group symmetry to describe crystal plasticity [1].

In this work, we will show how to construct the full 3D MTM model, as well as how it is able to reproduce many of the fundamental mechanisms of crystal plasticity in Face-Centered Cubic crystals and how it enables a renewed understanding by involving the $GL(3, \mathbb{Z})$ group symmetry and the large deformation formalism.

[1] S. Conti and G. Zanzotto, "A variational model for reconstructive phase transformations in crystals, and their relation to dislocations and plasticity," *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, vol. 173, no. 1, pp. 69–88, 2004. [Online]. Available: <https://doi.org/10.1007/s00205-004-0311-z>

[2] O. U. Salman, R. Baggio, B. Bacroix, G. Zanzotto, N. Gorbushin, and L. Truskinovsky, "Discontinuous yielding of pristine micro-crystals," *Comptes Rendus. Physique*, vol. 22, no. S3, pp. 201–248, 2021.

Mixed Climb in Naturally Deformed Quartz and the Effect of Water: Evidence from Electron Tomography

Timmo Weidner^{1*}, Alexandre Mussi¹, Patrick Cordier^{1,2}, Andreas K Kronenberg³, Richard D Law⁴, Olivier Castelnau⁵

¹*Université de Lille, UMET, Villeneuve d'Ascq, France*

²*Institut Universitaire de France, Paris, France*

³*Texas A&M University, Department of Geology and Geophysics, College Station, United States*

⁴*Virginia Tech, Blacksburg, VA, United States*

⁵*CNRS, ENSAM, CNAM, PIMM, Paris Cedex 16, France*

**timmo.weidner@univ-lille.fr*

This study employs dislocation electron tomography to investigate three-dimensional dislocation microstructures in quartz mylonites from the Main Central Thrust and the Moine Thrust, both of which experienced dislocation creep in the presence of water. Our previous analysis revealed a widespread occurrence of mixed climb, with nearly half of all dislocations exhibiting this atypical deformation mechanism. Mixed climb, which occurs when glide and climb mobilities are comparable, suggests that under natural conditions—high temperature and low strain rate—climb is not merely a recovery process but a significant contributor to strain.

To further explore the role of water in dislocation behavior, we have extended our study to a less wet quartz sample. This ongoing analysis aims to assess whether the prevalence of mixed climb is influenced by the quantity of water and to what extent water may facilitate dislocation mobility, particularly in enabling climb.

These findings have important implications for understanding the influence of water on quartz deformation mechanisms. While laboratory experiments typically emphasize stress-driven glide, our previous results indicate that, at natural strain rates, diffusion-controlled climb has sufficient time to operate. The presence of water may further enhance this process, potentially modifying the balance between glide and climb in naturally deformed quartz.

Relation entre propriétés mécaniques locales et microstructure de conducteurs Cu-Ag nanostructurés obtenus par déformation plastique sévère

Hanane Idrir, Institut Pprime, UPR 3346 CNRS-Université de Poitiers-ENSMA, France

Hanane.idrir@univ-poitiers.fr

Anne Joulain, Institut Pprime, UPR 3346 CNRS-Université de Poitiers-ENSMA, France

Christophe Tromas, Institut Pprime, UPR 3346 CNRS-Université de Poitiers-ENSMA, France

Ludovic Thilly, Institut Pprime, UPR 3346 CNRS-Université de Poitiers-ENSMA, France

Simon Tardieu, Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses-CNRS, Toulouse, France

Florence Lecouturier, Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses-CNRS, Toulouse, France

Fabien Cuvilly, Groupe de Physique des Matériaux, UMR 6634 CNRS-Université de Rouen-INSA, France

Xavier Sauvage, Groupe de Physique des Matériaux, UMR 6634 CNRS-Université de Rouen-INSA, France

Muriel Veron, Science et Ingénierie des Matériaux et des Procédés-CNRS, Grenoble, France

Mots-clés : Fils Cu-Ag, Nanoindentation, Dureté, Microstructure.

L'objectif de ce travail est de caractériser les propriétés mécaniques locales de fils nanocomposites Cu-Ag par nanoindentation et d'analyser les relations entre ces propriétés et les caractéristiques microstructurales des fils. Les fils conducteurs Cu-Ag, développés pour des applications dans les aimants à champ intense, ont été fabriqués par métallurgie des poudres suivie d'une déformation plastique sévère. Un mélange de poudre sphérique de cuivre (diamètre : 0,5 à 1 μm) et de nanofils d'argent (diamètre : 200 nm, longueur >30 μm) a été consolidé sous forme cylindrique par frittage flash (SPS), puis étiré à froid afin d'obtenir des fils fins. Des fils présentant différentes teneurs en argent (1 % et 5 %) et différents diamètres (1 mm et 0,5 mm) ont été étudiés selon une approche multi-échelle et multi-modale. La nanoindentation a permis d'évaluer les propriétés mécaniques à plusieurs échelles : à l'échelle mésoscopique, pour caractériser le comportement du composite, et à l'échelle submicrométrique, notamment par cartographie de la dureté, afin d'analyser l'influence des canaux d'argent et des interfaces Cu-Ag. Les propriétés microstructurales, cristallographiques et chimiques ont été étudiées en surface et en volume par microscopie électronique à balayage, microscopie électronique en transmission et diffraction des électrons rétrodiffusés. La complémentarité de ces méthodes permet une caractérisation fine des nanograins de cuivre ainsi que des canaux d'argent. Enfin, la tomographie par sonde atomique a été employée pour analyser l'interdiffusion entre l'argent et le cuivre, tandis que la technique ACOM-ASTAR a été utilisée pour quantifier la taille des grains et clarifier l'influence combinée de l'écrouissage, de la taille des grains et de la diffusion sur les propriétés mécaniques des fils nanocomposites Cu-Ag.

Mécanismes de déformation plastique dans la phase MAX Cr_2AlC monocristalline : étude des macles et des configurations de dislocations par essais micromécaniques

Mohamed Akou^{1)*}, Anne Joulain¹⁾, Edgar Rauch²⁾ Christophe Tromas¹⁾

1) Institut Pprime-DPMM, Université de Poitiers

2) Laboratoire SIMAP, Université de Grenoble Alpes

*adresse email : mohamed.akou@univ-poitiers.fr

Les phases MAX sont des matériaux nano-lamellaires qui combinent les propriétés des métaux et des céramiques, les rendant attractifs pour l'industrie. Leur plasticité est principalement contrôlée par le glissement basal, mais ce mécanisme est insuffisant pour accommoder toute déformation appliquée. Des mécanismes supplémentaires, comme le maclage, ont récemment été identifiés [1, 2], nécessitant une réévaluation des mécanismes de déformation.

Cette étude se concentre sur la phase MAX Cr_2AlC monocristalline, analysée par nanoindentation et compression de micropiliers. Pour cela, diverses techniques de caractérisation ont été employées, notamment la microscopie à force atomique (AFM), la microscopie électronique à balayage (MEB), la microscopie électronique en transmission (MET) et les cartographies d'orientation ASTAR, afin d'examiner les structures de déformation et leurs interactions, en particulier le maclage et le glissement basal.

L'exploitation de ces techniques, associée à de nouvelles configurations d'orientation de lamelle MET, a permis d'observer des structures de déformation originales. Ces observations révèlent clairement les interactions entre macles et kink bands, ainsi que des phénomènes de glissement dévié et de dissociation de dislocations. Elles mettent en évidence la complexité de la réponse plastique de ces matériaux, incitant à une analyse approfondie des défauts et structures de déformation. Cette analyse contribue à mieux comprendre la plasticité des phases MAX et souligne l'importance d'élargir nos connaissances sur leur comportement sous contrainte mécanique.

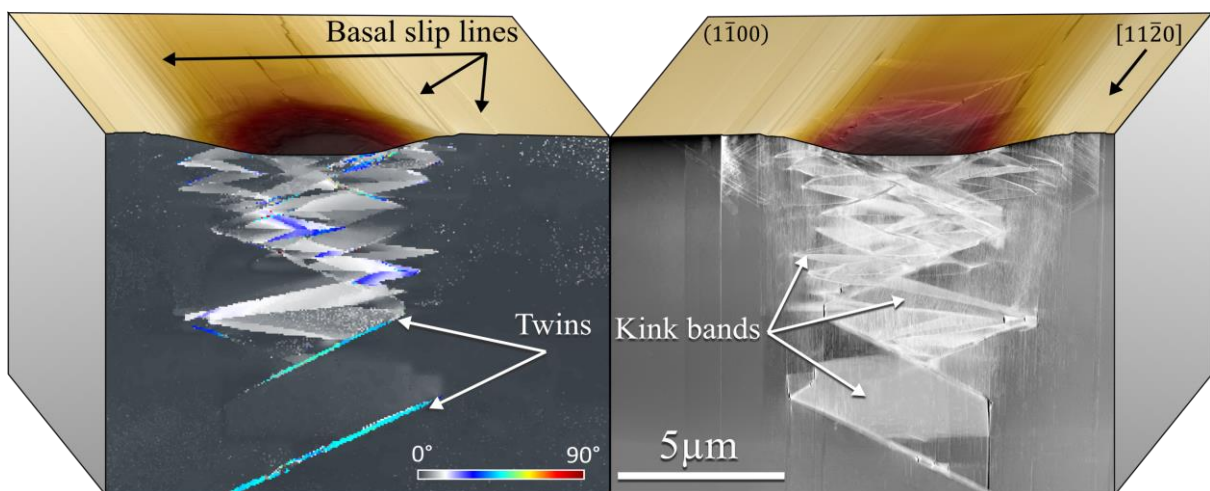


Figure 1: Combinaison d'images AFM, STEM et ASTAR montrant la diversité de la structure de déformation générée par nanoindentation sphérique.

[1] C. Tromas, S. Parent, W. Sylvain, L. Thilly, G. Renou, C. Zehnder, S. Schröders, S. Korte-Kerzel, A. Joulain, Nanoindentation-induced deformation twinning in MAX phase Ti_2AlN , *Acta Materialia* 227 (2022) 117665.

[2] S. Parent, A. Joulain, H. Bahsoun, G. Renou, T. Ouisse, P. Villechaise, C. Tromas, Atomic force microscopy and transmission electron microscopy identification of deformation twinning in the Cr_2AlC MAX phase, *Acta Materialia* 270 (2024).

Un modèle d'élastoplasticité en petites déformations fondé sur l'incompatibilité : théorie macroscopique et interprétation mésoscopique

Thiên-Nga Lê^{*1}, Samuel Amstutz², Nicolas Van Goethem³

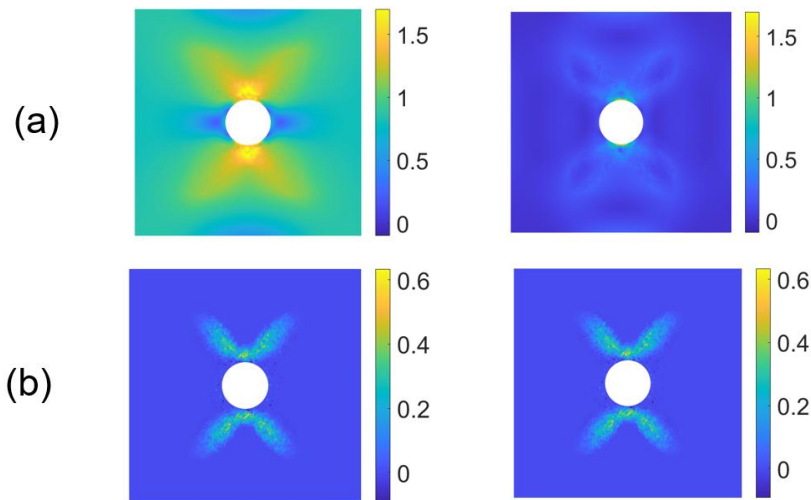
¹Laboratoire de Mécanique des Solides (LMS)

²Laboratoire de Mathématiques d'Avignon

³Departamento de Matemática, CMAFcIO, Lisboa

**thien-nga.le@polytechnique.edu*

Historiquement, la théorie classique de la plasticité a été établie grâce aux efforts « d'ingénieurs-mathématiciens » (Prandtl, von Mises, Reuss, puis Prager, Drucker et Hill). Nous avons élaboré, dans cette tradition de pluridisciplinarité, un nouveau modèle d'élastoplasticité infinitésimale, qui a cependant l'originalité de s'appuyer sur les grandeurs cinématiques E et $\text{inc } E$, où E est un champ de déformation que nous précisons ultérieurement, et où $\text{inc } E$ est l'incompatibilité de ce champ de déformation, soit $\text{curl}(\text{curl}^T E)$. Ce modèle, macroscopique, incrémental et variationnel, peut être établi indépendamment d'une interprétation mésoscopique, permettant le calcul des contraintes et des grandeurs cinématiques telles que le déplacement, E , et $\text{inc } E$. Une implémentation numérique simple donne par exemple le résultat suivant :



Un pas de charge, un pas de décharge : (a) contrainte de Von Mises (b) $\text{inc } E$

Nous montrons l'intérêt de l'usage de l'incompatibilité au niveau mésoscopique, avec des hypothèses simplificatrices. En effet, nous avons pu relier E aux grandeurs classiques : déplacement u , déformations ε^e et ε^p , en décomposant mathématiquement les grandeurs singulières, dans le cas d'un monocristal comportant une dislocation coin. En généralisant les équivalences obtenues dans ce cadre, on voit qu'on doit avoir $\text{inc } E = \text{inc } \varepsilon^p = -\eta$, la mesure d'incompatibilité de Kröner, directement reliée au tenseur de Nye, le tenseur de densité des dislocations. Ce travail est en cours, mais des résultats intéressants sont apparus, lors de calculs à plusieurs incréments de charge avec durcissement, mettant en évidence une séparation des zones négatives et positives de l'incompatibilité, dont le signe est associé au signe du vecteur de Burgers des dislocations.

Simulation multi-échelle de l'interaction entre l'hydrogène et les dislocations vis dans le Fer- α .

Margot Lucas^{1,2*}, Marie Landeiro Dos Reis¹, Sylvain Queyreau², Xavier Feaugas¹

¹*LaSIE UMR - 7356 CNRS - Université de La Rochelle*

²*LSPM UPR - 3407 CNRS - Université Sorbonne Paris Nord*

**margot.lucas74@gmail.com*

La fragilisation des matériaux par l'hydrogène est un mécanisme connu qui altère les propriétés mécaniques des matériaux et dans les cas les plus avancés peut conduire à la propagation de fissures et à la rupture. Dans le fer- α , l'hydrogène a une faible solubilité [1-3], cependant il peut diffuser aisément et se piéger dans les défauts du métal. Ses interactions avec les divers défauts présents dans le matériau ont des conséquences à l'échelle macroscopique (modifications des microstructures et propriétés mécaniques...). Dans ce travail, nous avons concentré nos efforts sur l'interaction entre l'hydrogène et les dislocations vis. Les dislocations vis moins mobiles, contrôlent les mécanismes de plasticité du matériau. Cependant l'effet de l'hydrogène sur la mobilité des dislocations reste mal compris et dépend de nombreux facteurs, tels que la vitesse de déformation, la température, l'état de contrainte ou encore la mobilité du soluté. Ce dernier engendre des effets antagonistes dans le matériau : un durcissement due au piégeage de l'hydrogène dans le cœur qui va ralentir le glissement de la dislocation [4-6], et un adoucissement du fer- α réduisant la densité électronique locale favorisant la nucléation des doubles décrochements en abaissant l'enthalpie de formation associée [7,8].

En utilisant une approche classique de la Dynamique Moléculaire basée sur un potentiel NNIP (en accord avec la DFT) [9], nous avons étudié la ségrégation et diffusion du soluté au voisinage de la dislocation puis la mobilité de la dislocation vis en présence du soluté. Pour cela, nous avons évalué le paysage énergétique de l'interaction entre l'hydrogène et le cœur de la dislocation en fonction de sa concentration, des différents sites accessibles et de la structure de cœur. Le cœur, impacté par la présence du soluté à courte portée, se reconstruit localement en configuration difficile. Cette interaction reste limitée aux premiers voisins et devient négligeable au-delà de 7 vecteurs de Burgers. Afin de caractériser les processus de diffusion au voisinage du cœur, nous avons calculé les barrières de migrations [10] entre les différents sites accessibles. Nous avons, par la suite, examiné la mobilité des dislocations en caractérisant l'impact de l'hydrogène sur le processus de formation de paires de décrochements.

[1] P. Ferrin, et al. 606.7-8(2012) : 679-689. [2] D. E. Jiang, et al. 70.6 (2004) : 064102. [3] K. Kiuchi et al. 1986.29-52. [4] V. Gaspard, Thèse de Doctorat 2014. [5] X. Feaugas, et al. 2019. 199-222. [6] D. N. Blaschke, et al. 144(2021) : 103030., [7] M. Itakura, et al. 61.18 (2013) : 6857-6867. [8] M. Wen, et al. 51.6(2003): 1767-1773. [9] Meng, Fan-Shun, et al. 5.11(2021): 113606. [10] G. Henkelman, et al. 113(22):9901–9904, 2000.

Interaction clivage plasticité en fond de fissure : Etude expérimentale des cas de fragilisation du Ti-6Al-4V et Titane Grade 2 par le lithium liquide

Itza Camila Hittner,^{1,*} Thierry Auger,¹ Bassem Barkia,¹ Maxime Vallet,² Louis Cornet,² Nelly Cavalière,³ Jules Phocas³ and Jean-Louis Courouau³, Julie bourgon⁴

¹ PIMM/Arts et Métiers Institute, CNRS (UMR 8006), CNAM 151 bd de l'hôpital, 75013 Paris, France

² LMPS/Ecole CentraleSupélec, Université Paris-Saclay, France,

³ Service de Recherche en Corrosion et Comportement des Matériaux, Université Paris-Saclay, CEA, Gif-sur-Yvette 91191, France

⁴ ICMPE, UMR7182 CNRS/UPEC, Thiais, France

**E-mail: itza-camila.hittner@ensam.eu*

La fragilisation par métal liquide (FML) est un phénomène qui se caractérise par la réduction des propriétés mécaniques d'un métal solide induite par l'adsorption d'un métal liquide à sa surface. Nous présentons un nouveau cas de fragilisation de deux alliages de titane par le lithium liquide. Les résultats des essais de traction en lithium à 300°C montrent une forte fragilisation par lithium liquide pour l'alliage de titane de type α - β (Ti-6Al-4V) et dans certaines conditions également pour le titane α de pureté commerciale (Grade 2). Le mode de rupture majoritaire observé pour les deux matériaux ici est le clivage, ce qui distingue ce système de la plupart des autres cas en FML pour lesquels la fissuration intergranulaire est le mode de rupture observé usuellement.

Des caractérisations à petites échelles du chemin de fissuration par microscopie électronique en transmission révèlent que cette rupture fragile s'effectue pour le Ti-6Al-4V sur des plans cristallographiques de type (10-13) de la phase α . Cette rupture par clivage s'accompagne également de phénomènes de micro-plasticité locale induite par le fond de fissure (émission de dislocation, micro-zone écrouie) permettant d'interpréter les structures sur la surface de rupture (rivières de clivage, structures de fluting). Ce système apparaît comme un système modèle pour l'étude de l'interaction du processus de clivage avec la plasticité dans les hexagonaux compacts.

Deformation Mechanisms of Talc: Insights from Nanomechanical Testing

Patrick Cordier^{1,2,*}, Ihtasham Ul Haq³, Dominique Schryvers³, Nicolas Gauquelin³, Arno Annys³, Johan Verbeeck³, Giuliana Materzanini⁴, Gian-Marco Rignanesi⁴, Hosni Idrissi⁴

¹ Univ. Lille, F-59000 Lille, France

² Institut Universitaire de France, France

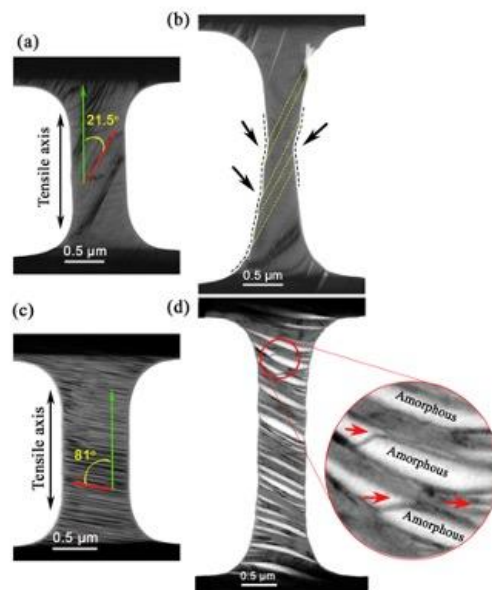
³ University of Antwerp, Antwerp, Belgium

⁴ Université Catholique de Louvain, Louvain-la-Neuve, Belgium

*patrick.cordier@univ-lille.fr

Talc is a hydrous magnesium silicate found in mafic or ultramafic rocks, where it is formed by hydration and/or silica metasomatism. Talc has attracted attention for its exceptional mechanical properties, which could explain the weakness of certain faults such as the San Andreas fault. Talc is weaker than antigorite by a factor of $\sim 3\text{--}4$ and weaker than chlorite by a factor of ~ 2 . It has a coefficient of sliding friction (μ) of 0.36–0.24 under dry conditions, and as low as 0.2 under wet conditions. This very low coefficient of friction has been attributed to weak bonding along basal (001) planes. But beyond this simple consideration generally applicable to layered silicates, the mechanical properties and especially the deformation mechanisms of talc have been relatively little studied and are fairly poorly understood.

Here we propose to use nanomechanical testing to investigate plastic deformation mechanisms in talc single crystals deformed in tension. We use the PI-95 TEM Pico-indenter holder and the Push-to-Pull (PTP) device (Bruker, Inc) to perform quantitative tensile tests at room temperature., in situ in a Transmission Electron Microscope. We investigate the mechanical response of several single crystal specimens with various orientation of the basal (001) planes with respect to the tensile axis. We observe that despite the presence of damage (nanovoids, nanocracks), talc does not exhibit brittle behavior. Even when the orientation of the base planes induces very low resolved shear stress, the activation of dislocations is easy and leads to highly ductile behavior. When the base plane is perpendicular to the tensile axis, talc deforms by amorphization. We propose a model to account for this amorphization.



Dislocations dans les perovskites : similitudes et différences

Pierre Hirel^{1*}, Philippe Carrez¹

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

* pierre.hirel@univ-lille.fr

Depuis la découverte de la ductilité du titanate de strontium SrTiO_3 en 2001 [1], il a été établi qu'elle est principalement associée à l'activité des dislocations dans les systèmes de glissement $\langle 110 \rangle \{110\}$ [2,3]. Cependant, de nombreuses questions demeurent sur la structure de cœur de ces dislocations à l'échelle atomique, sur leur charge électrique [4,5], et sur leur lien avec la transition ductile-fragile [5]. Les différences de comportement mécanique posent aussi la question des conditions qui permettent ou empêchent la ductilité à température ambiante.

Dans cette présentation nous comparerons les propriétés des dislocations dans différentes perovskites modélisées à l'échelle atomique. Les systèmes de glissement $\langle 110 \rangle \{110\}$ semblent être les plus favorables à température ambiante quelle que soit la composition, mais ne s'activent pas dans certaines perovskites. En comparant avec SrTiO_3 , nous tenterons d'expliquer les différences de comportement plastique.

[1] D. Brunner et al., *J. Am. Ceram. Soc.* **84** (2001) 1161-1163.

[2] P. Hirel et al., *Acta Mater.* **58** (2010) 6072-6079.

[3] P. Hirel et al., *Acta Mater.* **60** (2012) 329-338.

[4] A.J. Klomp et al., *Acta Mater.* **242** (2023) 118404.

[5] P. Hirel et al., *Acta Mater.* **285** (2025) 120636.

[6] P. Hirel et al., *Phys. Rev. Mater.* (submitted).

Stress-induced amorphization is a transformation induced plasticity

Jean Furstoss^{1*}, Daniel Pino-Muñoz², Philippe Carrez³, Pierre Hirel³, Valentin Delbecq³, Patrick Cordier³

¹*Institut PPRIME*

²*CEMEF*

³*UMET*

**jean.furstoss@univ-poitiers.fr*

Stress-induced amorphization has been recognized to be an efficient strain accommodating mechanism in several materials where usual plasticity mechanisms are inhibited, such as high lattice friction materials. Stress-induced amorphization is now apprehended as a deformation mechanism in its own right. The classical view of this process is the prior formation of the amorphous phase which then participate to the plastic deformation by flowing. In this presentation we will show that an important part of the plastic deformation related to this mechanism is, in fact, linked to the crystal to amorph phase transformation itself through the transformation induced plasticity (TRIP) mechanism. This finding is firstly supported by a series of molecular dynamics simulations of intragranular amorphous layer shearing highlighting the plastic anisotropy of this mechanism in forsterite, which is an orthorhombic ceramic with high lattice friction. In a second time, by combining molecular dynamics and finite elements simulations, we show that the strain produced by the phase transformation (amorphization) itself as to be taken into account for a first order description of the mechanical behavior of the whole process. Finally, we present a large-scale molecular dynamics simulation of forsterite polycrystal deformation in which grain boundary amorphization plays an important role on the plasticity of the system. The fine analysis of this simulation supports the findings that stress-induced amorphization should be considered as a phase transformation that produces plastic deformation.

Recueil des résumés : Posters

Unravelling the effects of hydrogen on slip localization, dislocation organizations and internal stresses in FCC alloys

A. Radi¹, A. Oudriss¹, X. Feaugas^{1*}

¹La Rochelle Université, LaSIE CNRS UMR 7356, Avenue Michel Crépeau, 17000 La Rochelle

*xfeaugas@univ-lr.fr

Keywords: Dislocations Organizations; length scales; shear bands; persistent slip bands, deformation bands.

Abstract: Even though this remains an established issue, the slip localization induced during plastic deformation remains a complex subject, linked to numerous elementary plasticity processes, the nature and distribution of dislocations, and the state of internal stresses (fig. 1). It is now well-understood that this deformation localization plays a key role in the initiation of surface damage, which is directly related to the environment impact. In this context, hydrogen can be considered as a potential determining factor in the processes leading to such damage. Whether intrinsic and/or extrinsic, hydrogen interacts with elasticity and plasticity properties, contributing to significant changes in the processes of nucleation and multiplication of defects (vacancies, dislocations...). The distribution of these defects (dislocation structure, slip localization, vacancies clusters) and the associated internal stresses, are directly impacted. The purpose of this work is to conduct a review of the state of knowledge on nickel base alloys and austenitic stainless steels in order to identify new issues and challenges that will need to be addressed in future studies. We revisit the implications of elementary plasticity, dislocation structures, and associated internal stresses after remembering the bases of shielding, defactant and hydrogen enhances vacancies clusters concepts. Finally, we examine the influence of hydrogen in the slip localization process to understand the initiation of intra-granular damage.

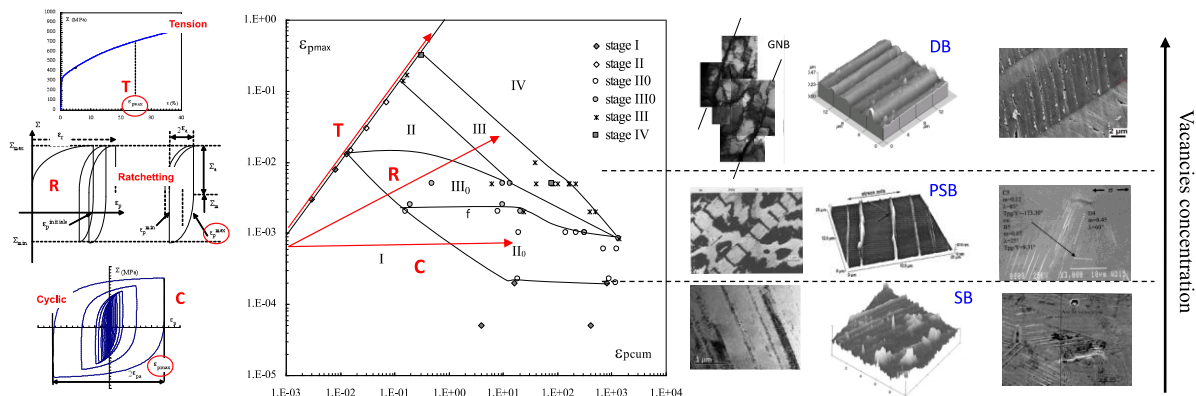


FIGURE 1. A unified view of the impact of the mechanical loading path on the dislocation distribution leading to slip localization and various intragranular damage initiation processes.

Reconstruction 3D de dislocations via tomographie MET : vers une méthode précise et accessible

Romain Gautier^{1*}, Timmo Weidner¹, Alexandre Mussi¹

¹UMET – Université de Lille

^{*}romain.gautier@univ-lille.fr

La caractérisation des défauts cristallins, et plus particulièrement des dislocations, permet d'identifier les mécanismes fondamentaux de déformation plastique. Les études de dislocation sont majoritairement faites en utilisant la microscopie électronique en transmission (MET). Bien qu'extrêmement puissante, la MET fournit uniquement des images projetées. Ceci est amplement suffisant pour des microstructures de dislocations simples (déformation produite uniquement par glissement avec peu de systèmes de glissement), mais cela se complexifie lorsque plusieurs mécanismes de déformation plastique interviennent (glissement, glissement dévié et montée). Une solution pour ces cas plus complexes consiste à reconstruire en 3 dimensions les dislocations en utilisant la tomographie électronique en transmission.

La tomographie électronique en transmission des dislocations consiste à acquérir une microstructure sous différents angles de projection tout en conservant le contraste des dislocations. Les images ainsi obtenues sont ensuite rétroprojetées selon diverses méthodes (SIRT, WBP, FBP...) basées sur une transformation de Radon. Un problème intrinsèque à la MET est que les angles de vue sont limités à $\pm 30^\circ$ pour les porte-objets conventionnels à $\pm 80^\circ$ pour les porte-objets dédiés à la tomographie (les angles de vue manquant sont appelés 'missingwedge'). Lors de la retroprojection, ce 'missing-wedge' crée des artefacts dans la reconstruction 3D. Il est cependant possible d'extraire les dislocations du volume reconstruit en utilisant des traitements de données appropriés.

L'objectif de notre étude est double ; automatiser une grande partie du processus pour diminuer considérablement le temps de traitement et apporter une plus grande précision dans l'extraction des dislocations des volumes reconstruits. Tout cela visant à rendre l'étude de dislocation par tomographie électronique en transmission des dislocations plus accessible, plus précise et plus rapide.

Méthode de caractérisation des lamelles de perlite d'un fil d'acier au cours du tréfilage

Enzo Ceron Arana^{1,2}, Véronique Aubin¹, Aurélie Jamoneau², Charlotte Mayer², Denis Solas³, Gabriella Tarantino¹

¹Université Paris-Saclay, CentraleSupélec, ENS Paris-Saclay, CNRS, LMPS – Laboratoire Mécanique de Paris-Saclay, 91190, Gif-sur-Yvette, France

²Michelin, Centre de Technologies, 63000 Clermont-Ferrand, France

³Université Paris-Saclay, CNRS, Institut de Chimie Moléculaire et des Matériaux d'Orsay, 91405, France

enzo.ceron-arana@centralesupelec.fr

Dans le cadre de la transition écologique, les entreprises doivent revoir leurs modes de production et/ou adapter leurs procédés de fabrication. Michelin s'engage ainsi à remplacer ses matières premières par des matériaux renouvelables ou recyclés, notamment l'acier recyclé pour les renforts métalliques des pneumatiques (câbles composés de fils tréfilés assurant la tenue mécanique).

Cependant, le recyclage dans les fours à arc électrique entraîne une absorption d'azote, altérant les propriétés et la microstructure de l'acier. Des analyses préliminaires révèlent une perte de ductilité, des écarts en torsion et une sensibilité accrue au vieillissement, rendant l'acier recyclé inadapté au procédé actuel. L'objectif est donc de caractériser son comportement mécanique et sa microstructure au cours du tréfilage afin d'évaluer précisément l'impact de l'azote.

Dans le cadre de la caractérisation microstructurale de l'acier, il est nécessaire de mesurer les caractéristiques clés telles que la distance interlamellaire et l'orientation des lamelles. Durant le procédé, les lamelles de perlite vont notamment se réorienter dans la direction du tréfilage (figure 1) et se tasser progressivement, réduisant ainsi la distance interlamellaire. L'objectif est donc de mettre en évidence l'influence de l'azote sur ce processus. L'utilisation de la méthode des intercepts est limitée, car une étude statistique est nécessaire pour obtenir une sensibilité suffisante sur les mesures.

Pour répondre à ce besoin, une méthode de mesure basée sur la transformée de Fourier a été développée. Appliquée à une image, cette transformée permet notamment d'identifier la présence d'un motif et d'analyser sa périodicité. Dans le spectre de Fourier, il est ainsi possible de déterminer l'orientation des lamelles de perlite ainsi que leur périodicité fréquentielle, qui peut ensuite être convertie en une périodicité spatiale correspondant à la distance interlamellaire. L'avantage de cette méthode est qu'elle permet de traiter des images de lamelles dont les orientations ne sont pas bien définies. Cela est particulièrement intéressant pour l'analyse de fils en coupe transverse avec des lamelles en « Ciel de Van Gogh » (figure 2). Ce poster a pour but de présenter la méthode et certains résultats obtenus avec celle-ci.

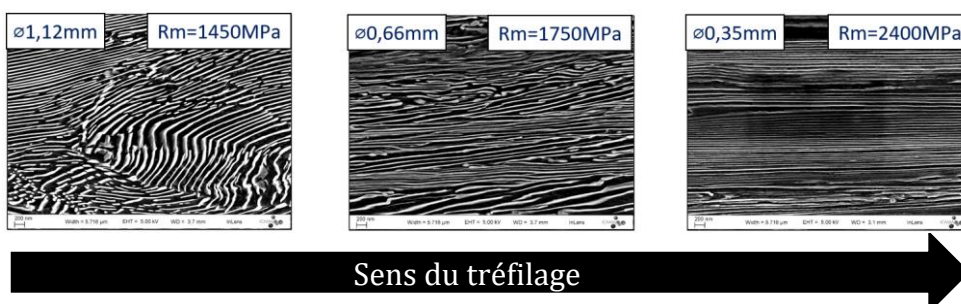


Figure 1 : Evolution de la microstructure au cours du tréfilage

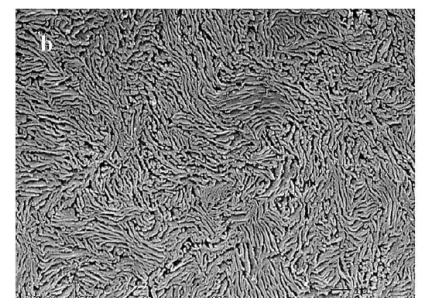


Figure 2 : Coupe transverse d'un fil tréfilé [1]

Optimisation de l'alliage Ti-6Al-4V obtenu par fabrication additive par dépôt direct de fil pour des applications aéronautiques critiques

Elise Labruyere^{1,2*}, Florence Pettinari-Sturmel¹, Joël Douin¹, Claude Archambeau², Philippe Emile²

¹*CEMES-CNRS, Université de Toulouse, Toulouse, France*

²*Airbus Operation S.A.S, Toulouse, France*

**elise.labruyere@cemes.fr*

La fabrication additive, en particulier les techniques de dépôt de fil, offre une alternative prometteuse pour la production de composants en alliage de titane dans l'industrie aéronautique. Toutefois, ce processus présente certaines limites et les microstructures qui en résultent doivent être étudiées de manière plus approfondie. Ce travail vise à optimiser les paramètres de traitement thermique pour améliorer la tolérance aux dommages des pièces en Ti-6Al-4V fabriquées par dépôt de fil, dans le but d'atteindre des performances mécaniques comparables aux pièces produites par procédés traditionnels et traitées thermiquement par recuit β .

Une caractérisation multi-échelle sera effectuée, en utilisant la microscopie optique (MO), la microscopie électronique à balayage (MEB) et la spectrométrie X à dispersion d'énergie (EDS), pour analyser l'évolution de la microstructure après le traitement thermique. Des essais mécaniques, notamment de traction, de fatigue et de propagation de fissures, seront ensuite réalisés pour déterminer l'adéquation du traitement thermique mis au point en ce qui concerne les propriétés mécaniques.

Mots-clés : Alliages de titane, Ti64, fabrication additive, microstructure, traitement thermique, propriétés mécaniques.

Microstructure et mécanismes de déformation de l'acier 316L élaboré par fabrication additive

Bassem Barkia^{1*}, Maxime Vallet², Alexandre Tanguy³, Eva Héripré¹, Thierry Auger¹

¹ *Arts et Métiers ParisTech, PIMM, UMR CNRS 8006, 75013 Paris, France.*

² *Université Paris-Saclay, CentraleSupélec, ENS Paris-Saclay, CNRS, LMPS, Laboratoire de Mécanique Paris-Saclay, 91190 Gif-sur-Yvette, France.*

³ *LMS, CNRS, Ecole Polytechnique, Institut Polytechnique de Paris, Palaiseau, France.*

**bassem.barkia@ensam.eu*

Nous menons une étude multi-échelle afin d'identifier les phénomènes physiques de plasticité aux échelles macro, méso et microscopique de l'acier inoxydable 316L élaboré par fabrication additive, en lien avec la microstructure intragranulaire unique induite par ce procédé. Cette investigation repose sur des techniques expérimentales avancées, notamment des essais mécaniques in-situ en MEB et des observations fines en MET, permettant d'identifier les mécanismes de déformation plastique et d'évaluer l'importance relative des différentes caractéristiques microstructurales (cellules, précipités, joints de grains, etc.). Elle vise également à analyser leur rôle dans les phénomènes de localisation plastique intra- et intergranulaire ainsi que dans les propriétés mécaniques du matériau. L'étude apporte des éléments de compréhension quant à l'origine des caractéristiques mécaniques spécifiques du 316L élaboré par fabrication additive. Les résultats obtenus contribueront à l'identification de modèles de plasticité capables de décrire et de prédire quantitativement le comportement mécanique de ces matériaux.

Rôle de la transformation martensitique sous contrainte dans le maclage des alliages de titane β -métastable

Nicolas Jobit^{1,2)*}, Philippe Castany¹⁾, Fan Sun²⁾, Frédéric Prima²⁾, Thierry Gloriant¹⁾

1) Univ Rennes, INSA Rennes, CNRS, ISCR UMR 6226, 35000 Rennes, France

2) PSL Research University, Chimie ParisTech-CNRS, Institut de Recherche de Chimie Paris, 75005 Paris, France

*nicolas.jobit@insa-rennes.fr

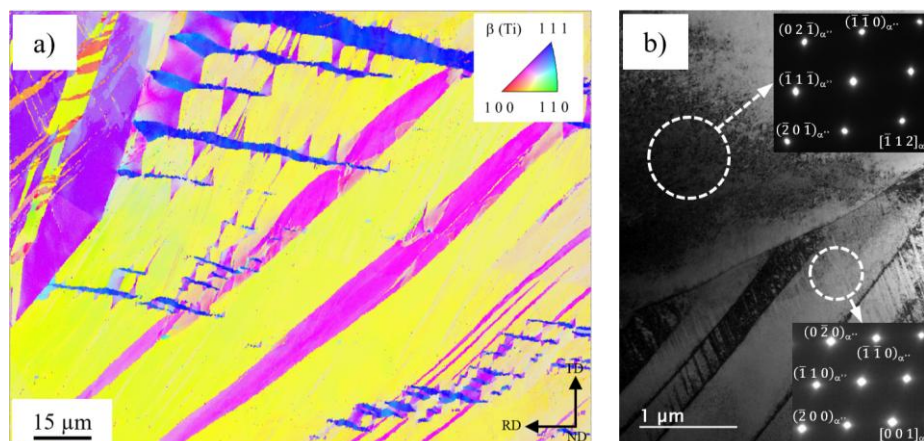
Les matériaux métalliques sont très répandus dans le domaine biomédical et y trouvent de nombreuses applications sous la forme d'implants ou de dispositifs plus complexes comme les stents. Cependant, de nombreux matériaux utilisés actuellement, comme l'acier 316L ou l'alliage Nickel-Titane, contiennent des éléments délétères et qui nécessite de trouver des alternatives.

Parmi les candidats proposés, les alliages de titane β -métastable semblent les plus adaptés. En effet, leurs propriétés mécaniques sont très proches de celles de l'os et les éléments utilisés sont majoritairement biocompatibles. Cependant, les mécanismes qui interviennent dans la plasticité de ces matériaux doivent être mieux compris afin de les utiliser de manière optimales.

Ces alliages ont la particularité de se déformer à l'aide de trois mécanismes: une transformation martensitique induite sous contrainte, qui peut générer un effet TRIP (TRansformation Induced Plasticity), le maclage qui génère un effet TWIP (TWinning Induced Plasticity) et enfin le glissement de dislocations. Le déclenchement et l'interaction de ces mécanismes sont complexes et dépendent fortement de la composition de l'alliage.

Dans cette étude, un alliage binaire Ti-27Nb (at %) a été élaboré. Il présente l'ensemble des mécanismes de déformation cités ci-dessus et une composition simple. Des essais mécaniques à température ambiante ont été effectués et ont été complétés par des analyses EBSD et en microscopie électronique en transmission à différents taux de déformation afin de mieux comprendre le processus de déformation. Ces caractérisations ont été complétées par des essais de traction *in situ* sous rayonnement synchrotron afin d'étudier la répartition des phases au cours de l'essai et ainsi établir le lien entre tous les mécanismes.

L'étude s'est également intéressée à l'effet de la température de sollicitation sur la séquence de déformation et les mécanismes activés.



a) Cartographie EBSD selon ND d'un échantillon déformé à rupture montrant des macles et b) champ clair d'un échantillon similaire montrant la formation de martensite sous contrainte.

Rôle de l'annihilation colinéaire et du glissement dévié

sur la restauration dynamique

Ronan Madec^{1,2*}, Benoit Devincré³

¹*CEA, DAM, DIF 91297, Arpajon*

²*Université Paris-Saclay, CEA, LMCE, 91680 Bruyères-le-Châtel*

³*Université Paris-Saclay, ONERA, CNRS, Laboratoire d'étude des microstructures, 92322 Châtillon*

*ronan.madec@cea.fr

La restauration dynamique au cours du stade III de la déformation des monocristaux est généralement attribuée au glissement dévié des dislocations vis ou, du moins, à une activité très forte de ce mécanisme. Toutefois, la séquence précise des événements menant, après le fort durcissement du stade II, à un retour à une faible valeur de durcissement similaire à celle du stade I demeure le sujet de nombreuses discussions.

Alors que le mécanisme d'écrouissage a été largement étudié ces deux dernières décennies à l'aide des simulations de dynamique des dislocations (DD) [1-6], la restauration dynamique reste peu explorée. En effet, son étude nécessite d'atteindre des déformations suffisamment importantes pour entrer dans le stade III ce qui est difficile à obtenir dans un volume suffisamment grand pour être statistiquement représentatif, en particulier dans le cadre d'un chargement quasi-statique.

Néanmoins, des simulations de DD avec de grandes densités de dislocations permettent d'approcher des conditions proches du stade III et d'examiner plus précisément les mécanismes pouvant induire de la restauration. Dans cette étude, nous avons exploré différentes densités de dislocations et testé séparément certains mécanismes élémentaires afin d'identifier leurs influences. Bien que ces travaux demandent encore des investigations supplémentaires, les premiers résultats obtenus apportent un éclairage nouveau sur l'origine de la restauration [7].

Nous montrons d'abord qu'un mécanisme athermique souvent négligé joue un rôle clé dans la restauration, étant le seul mécanisme de la forêt à ne pas induire de stockage lors de la déformation. Ensuite, nous mettons en évidence l'impact d'instabilités plastiques qui favorisent la réduction du nombre de systèmes de glissement actifs, un phénomène particulièrement efficace pour réduire le stockage. Enfin, nous démontrons que le glissement dévié peut, sous certaines conditions spécifiques, réduire la densité de dislocations, suggérant ainsi un scénario mettant en jeu plusieurs mécanismes devant être conjointement impliqués pour reproduire les conditions de stade III.

- [1] R. Madec, B. Devincré, L.P. Kubin Physical review letters 89, 255508, 2002
- [2] R. Madec, B. Devincré, L. Kubin, T. Hoc, D. Rodney, Science 301, 1879-1882, 2003
- [3] B. Devincré, L. Kubin, T. Hoc, Scripta Materialia 57, 905-908, 2007
- [4] B. Devincré, T. Hoc, L. Kubin, Science 320, 1745-1748, 2008
- [5] L. Kubin, B. Devincré, T. Hoc, Acta materialia 56, 6040-6049, 2008
- [6] R. Madec, L.P. Kubin, Acta Materialia 126, 166-173, 2017
- [7] R. Madec, B. Devincré, L. Kubin, MSMSE 33, 015010, 2025

Approche variationnelle non linéaire des fissures et des dislocations

Antoine Ruffini^{1*}, Godefroy Engrand¹, Yann Le Bouar¹, Alphonse Finel¹

¹Université Paris-Saclay, ONERA, CNRS, Laboratoire d'Etude des Microstructures, 92320 Châtillon, France.

*antoine.ruffini@onera.fr

Décrire numériquement la fracturation ductile ou l'endommagement de matériaux cristallins issu de sollicitations en fatigue nécessite de disposer d'approches qui décrivent à la fois le mouvement d'un très grand nombre de dislocations et l'évolution de fissures courtes. A l'échelle mésoscopique, il existe des outils très performants pour décrire la dynamique de l'un ou l'autre de ces objets (Dynamique des Dislocations Discrètes, Champs de phase...). Leur couplage reste cependant délicat car il faut alors décider de règles d'interaction *ad hoc* qui ne sont pas forcément contraintes par la cohérence physique d'un formalisme variationnel.

Pour y remédier, nous proposons de revenir à une description variationnelle du comportement d'un cristal qui ne repose que sur une variable de champ, i.e. le champ de déplacement, qui apparaît être une observable suffisante pour décrire l'ensemble des transformations displacives d'un réseau cristallin intégrant en outre fissures et dislocations. Pour cela, nous devons identifier l'expression formelle de l'énergie libre du cristal, fonction du champ de déplacement, qui doit être invariante par rapport au groupe ponctuel du réseau de Bravais étudié, mais aussi par rapport à toutes les transformations qui laissent le réseau invariant.

Dans ce travail, nous montrerons comment établir l'expression minimale d'une telle énergie dont les propriétés remarquables seront d'être infiniment dégénérée et de saturer pour des allongements du réseau dépassant un certain seuil. Nous présenterons l'implémentation numérique de ce modèle et des résultats de simulations 2D qui reproduisent la nucléation et la propagation de dislocations dans un système cristallin fissuré.

Study of the interface influence on mechanical properties of core-shell nanoparticles by atomistic simulations

Jules Romuald Mvondo Edou^{*}, Julien Godet, Julien Durinck

Institut Pprime

Dept Physique et Mécanique des Matériaux, UPR 3346 CNRS -Université de Poitiers Bld M. et P. Curie, H1, TSA 41123 86073 Poitiers cedex 9, FRANCE

*[*jules.mvondo.edou@univ-poitiers.fr](mailto:jules.mvondo.edou@univ-poitiers.fr)*

Nanoparticles (NPs) are small fragments of matter with dimensions on the nanometric scale. Due to their reduced size and high surface-to-volume ratio, NPs often exhibit mechanical properties superior to those of bulk materials. These characteristics make NP-based systems excellent candidates for numerous applications, particularly as structural reinforcement components in various materials. Our study focuses on core-shell NPs, consisting of a crystalline silicon core surrounded by an amorphous SiO₂ shell an architecture commonly used in various experiments and applications. What interests us is understanding how the amorphous shell coating influences the mechanical properties of the system. This core-shell structure introduces a crucial additional factor: the interface between the core and the shell. Previous studies [1] have highlighted diverse behaviors, revealing a competition between the NP surface and the interface. Taking these aspects into account, we will examine the influence of the Si/SiO₂ interface structure, as well as the NP size and the core-to-shell thickness ratio, for spherical shapes. We pursue several objectives. First, for a thin SiO₂ shell, we aim to better understand how the native oxide coating modifies the mechanical properties. Then, for comparable core-shell proportions, we will conduct an in-depth study of the different plasticity regimes.

In this context, we propose to study, through atomistic simulations, the effect of the Si/SiO₂ interface structure on the mechanical properties of NPs. To achieve this, we have conducted preliminary studies. In the first, we performed a comparative study of different interatomic potentials (both classical and machine-learning-based) applied to bulk silicon, focusing on the elasticity tensor and thermal expansion coefficient. It appears that the accuracy of interatomic potentials depends on the properties being studied. However, the Stillinger–Weber and Tersoff 3 potentials generally provide a good representation of atomic interactions in silicon. Machine-learning-based potentials, such as the Moment Tensor Potential (MTP), remain a very promising alternative. Currently, we are working on constructing our SiO₂ shell. The properties of interest include the spatial distribution of atoms in the amorphous phase, elastic constants, and thermal expansion coefficient. Our goal is to obtain a SiO₂ configuration with optimal properties. Ongoing calculations and observations are being carried out to refine the design of our SiO₂ shell.

[1] D. Kilymis and al. Ductile deformation of core-shell si-sic nanoparticles controlled by shell thickness. *Acta Materialia*, 164 :560–567, 2018.

Interfaces en tant que champs de densité de dislocations pour relier les échelles de longueur en nanomécanique

Julien Guénolé^{1*}, Houssam Kharouji¹, Yen Fred Woguem¹, Vincent Taupin¹

¹Université de Lorraine, CNRS, Arts et Métiers, LEM3, 57070 Metz, France

*julien.guenole@cnrs.fr

La plasticité des matériaux cristallins est gouvernée par divers processus se produisant sur une large gamme d'échelles de longueur et de temps. Alors que les simulations de mécanique des milieux continus offrent un cadre adapté à la modélisation des propriétés mécaniques des microstructures, elles restent limitées dans leur capacité à capturer les détails de la structure des défauts cristallins et des mécanismes élémentaires de déformation. À l'inverse, ces mécanismes peuvent être directement étudiés grâce aux simulations atomistiques discrètes, mais ces approches sont généralement restreintes à de petites échelles de longueur et de temps. Plus que jamais, alors que l'explosion des moyens et méthodes de simulations se conjugue avec l'essor de l'apprentissage automatique, un transfert précis d'informations entre les échelles est nécessaire pour une modélisation efficace et fiable de la plasticité basée sur la physique.

Le travail que nous présentons ici explore un nouveau schéma de transition de l'échelle atomistique à l'échelle continue, basé sur les champs de densité de dislocations [1,2]. Plus précisément, des tenseurs de transformation élastique sont calculés à partir des configurations atomistiques à l'aide de la méthode de Hartley et Mishin, puis utilisés comme données d'entrée dans un modèle micromécanique de mécanique des dislocations de champ (FDM) de type gradient de déformation, en s'appuyant sur transformée de Fourier rapide résolue sur une grille régulière. Cette approche polyvalente permet de capturer efficacement une grande diversité de défauts, notamment les dislocations et les joints de grains à grand angle, ainsi que leurs interactions (Fig. 1). Une évaluation de cette approche est également présentée pour les matériaux cubiques (Cu, Al) et hexagonaux (Mg, Ti). En outre, la prédiction des caractéristiques des interfaces, représentées sous forme de champs de densité de dislocations, est explorée à l'aide d'approches d'apprentissage automatique.

À la lumière de nos résultats, nous discutons des implications de cette transition du discret au continu pour le passage d'échelles en nanomécanique.

[1] Kharouji *et al.*, International Journal of Plasticity 177 (2024), 103990.

[2] Kharouji *et al.*, Acta Materialia 284 (2025), 120555.

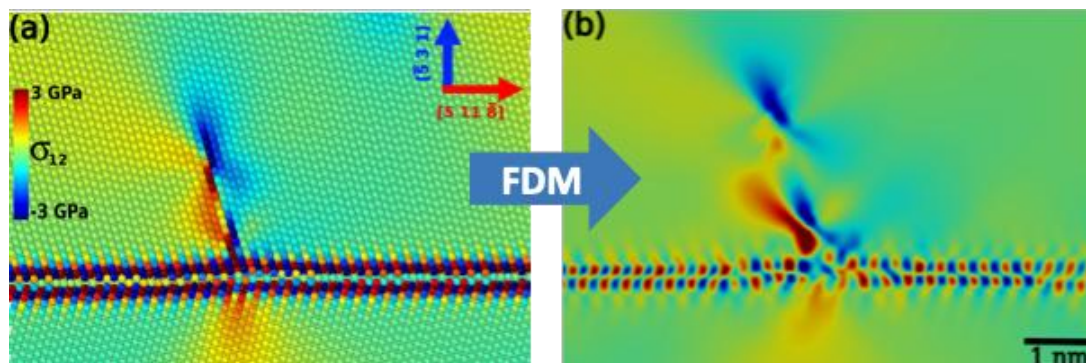


Figure 1: Interaction entre une dislocation coin extrinsèque et un joint de grain de flexion de grand angle $\Sigma 35(5\ 3\ 1)[1\ 1\ 2]_{34,05^\circ}$ dans le cuivre. (a) Contrainte virale par atome σ_{12} . (b) Champ de contrainte élastique continu σ_{12} obtenu en utilisant la méthode G.

***Pyrough* : a tool to build 3D samples with rough surfaces for atomistic and finite-element simulations**

Hugo Iteney¹, Thomas W. Cornelius¹, Olivier Thomas¹, Jonathan Amodeo^{1*}

¹*Aix Marseille Univ, Univ Toulon, CNRS, IM2NP UMR 7334, Marseille, France*

**jonathan.amodeo@cnrs.fr*

Surface roughness has a fundamental impact on the mechanical properties of materials as it plays a key role in several fields of applications including friction, lubrication, machining, and polishing. In this study, we introduce *Pyrough*¹⁻³, an open-source tool recently developed to design virtual samples with rough surfaces for atomistic simulations and finite-element modeling. Based on user requirements for sample design (shape, dimensions, crystal structure, *etc.*) and roughness parameters, *Pyrough* generates a 3D mesh using the classical roughness theory. The sample mesh is exported using the format chosen by the user, such as the *.stl* format, compatible with most of finite-element programs. *Pyrough* being fully coupled with various atomistic libraries, it allows to generate an equivalent atomic description of the rough sample for atomistic simulations. Several 3D shapes are currently available in *Pyrough*, including classical particle shapes (cubes, spheres, Wulff-shapes), cylindrical or faceted wires, plates, thin films but also bicrystals with wavy grain boundaries or the capability to analyze the surface roughness of experimental images to generate digital twin.

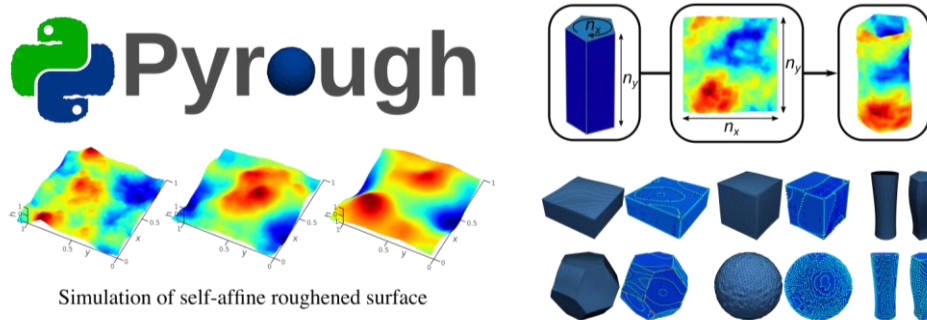


Fig. 1 Pyrough: a tool to build 3D samples with rough surfaces for atomistic and finite-element simulations

[1] H. Iteney, J.A.Gonzalez-Joa, C.L. Bourlot, T.W. Cornelius, O. Thomas, J. Amodeo, Pyrough: A tool to build 3D samples with rough surfaces for atomistic and finite-element simulations, *Comput. Phys. Commun.* 295 (2024) 108958. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2023.108958>.

[2] H. Iteney, T.W. Cornelius, O. Thomas, J. Amodeo, Influence of surface roughness on the deformation of gold nanoparticles under compression, *Acta Mater.* 281 (2024) 120317. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2024.120317>.

[3] Pyrough GitHub repository : <https://github.com/jamodeo12/Pyrough>

Effect of Fe on ultimate mechanical properties of (Mg,Fe)₂SiO₄ olivine

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

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

*karine.gouriet@univ-lille.fr

It is well-known that amorphization of crystalline materials can occur under extreme conditions, at high pressure but also in material deformed at high stresses or high strain rates typical of shock experiments. In olivine, a common silicate of composition (Mg,Fe)₂SiO₄, such amorphization process is now well-documented [1,2,3]. Here, pressure induced amorphization is often described as a kinetically preferred transformation resulting from frustration from reaching the high-pressure equilibrium crystalline state. However, deviatoric stresses seems also to play a role in addition to pressure [3,4]. This transformation questions therefore the mechanical stability of olivine under mechanical loading.

To assess the influence of the nature of cations (Mg or Fe) on the mechanical stability of olivine, we consider in this work two end-members of olivine: Mg₂SiO₄ forsterite and Fe₂SiO₄ fayalite. For both end-members, we study their mechanical stability by computing their ultimate mechanical properties. Calculations, based on the DFT with the generalized gradient approximation, are performed to investigate the mechanical instability resulting from either a maximal stress rendering the system elastically unstable or from a cleavage of the system. Indeed, brittle failure is potentially another mechanical response under high stress loading. In practice, ideal tensile strengths (ITS) and ideal shear strengths (ISS) are computed by applying homogeneous strain increments along high-symmetry directions in low index crystallographic plane of the olivine orthorhombic lattice. The cleavage energies, and the corresponding fracture strength, are calculated for the same orientation. We show that, unlike Mg₂SiO₄, Fe₂SiO₄ is less prone to mechanical destabilization, and therefore less likely to amorphize. Under high stress, Fe₂SiO₄ would therefore be more likely to undergo brittle failure than amorphization.

[1] Finkelstein et al. (2014)

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

[3] Kranjc et al. (2020)

[4] Samae et al. (2021)

Segmentation des dislocations par apprentissage profond en MET

Assya Boughrara¹, Daphné Da Fonseca³, Christine Viala¹, Fabien Onimus², T. Jourdan³, Laurent Dupuy², Frédéric Mompiau^{1*}

¹*CEMES-CNRS Université de Toulouse, 29 rue Marvig, 31055 Toulouse, France*

²*Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherche en Matériaux et procédés Avancés, F-91191 Gif-sur-Yvette, France*

³*Université Paris-Saclay, CEA, Service de recherche en Corrosion et Comportement des Matériaux, SRMP, F-91191 Gif-sur-Yvette, France*

*mompiau@cemes.fr

La compréhension de la dynamique des dislocations est d'un intérêt fondamental pour prédire la résistance des matériaux. Nous observons leur mouvement directement, *in situ*, en MET, lors d'expériences de déformation, parfois en température et sous irradiation. Jusqu'à présent, l'analyse de la dynamique est effectuée manuellement, ce qui limite les traitements statistiques, bien qu'une grande base de données d'observations soit disponible. En outre, cette approche passe à côté d'une grande quantité d'informations en échantillonnant les observations et en calculant la moyenne des quantités. Ici, nous ambitionnons de tirer partie de méthodes d'apprentissage profond et de vision par ordinateur pour exploiter nos bases de données afin de construire des jumeaux numériques d'observations *in-situ* et récupérer des informations quantitatives qui pourraient être mises en œuvre dans des simulations à méso-échelle.

Nous présentons ici, les méthodes d'apprentissage profond basées sur des réseaux de neurones convolutifs entraînés de façon supervisée ou semi-supervisée sur des images de dislocations curvilignes ou sous forme de boucles d'irradiation, obtenues par imagerie en champ clair/champ sombre. Nous montrons que les modèles proposés sont capables de performer à un niveau similaire d'un expert dans le domaine. En guise d'application nous démontrons la possibilité d'analyser statistiquement des séquences dynamique de croissance de boucles d'irradiation formées sous irradiation électronique dans l'aluminium.

Impact des régions microtexturées sur la déformation et l'endommagement d'un alliage de titane en fluage à froid

Anaïs HUET^{1*}, Patrick VILLECHAISE¹, Samuel HEMERY¹

¹INSTITUT P', Physique et Mécanique des Matériaux, équipe ENDOmmagement et Durabilité, ISAE-ENSMA

*anaïs.huet@ensma.fr

Le phénomène de «cold dwell-fatigue » est un effet bien connu des alliages de titane. Il se manifeste par une réduction de la durée de vie pouvant atteindre un ordre de grandeur lorsqu'un temps de maintien à charge maximale est introduit pendant une sollicitation mécanique cyclique. Il est aujourd'hui responsable de certaines ruptures prématurées en service, notamment dans l'industrie aéronautique.

Ces travaux visent à mieux comprendre les mécanismes de déformation et d'endommagement opérant lors du fluage de l'alliage Ti-6Al-4V à température ambiante. Ce mode de chargement est en effet représentatif des maintiens prolongés subis lors de la fatigue- « dwell », c'est pourquoi son étude reste cruciale pour en améliorer la prédiction. En particulier, le rôle des régions microtexturées, aussi appelées macrozones, dans ces mécanismes reste à être précisé dans ce contexte.

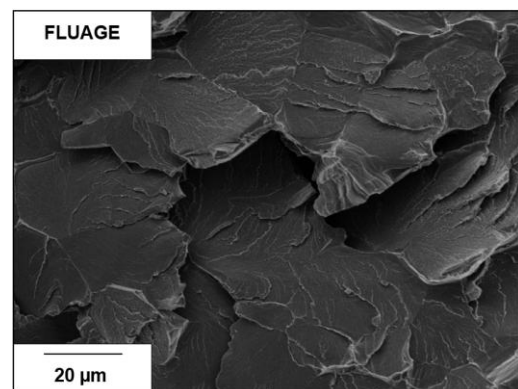


Figure 1 - Facettes de quasi-clivage, caractéristiques de l'endommagement en fluage

Pour répondre à cette problématique, des essais de fluage ont été réalisés à différents niveaux de chargement sur du Ti-6Al-4V nodulaire. Le comportement du matériau étudié a ainsi pu être caractérisé, et les arrangements microstructuraux critiques pour la rupture ont été identifiés. Par ailleurs, des essais de fluage ont été interrompus afin d'étudier le développement de la plasticité en fonction du chargement par l'analyse des lignes de glissement. Ensuite, l'étude de la distribution de fissures internes à différents stades de la durée de vie a permis de clarifier les cinétiques d'endommagement en lien avec la déformation et les caractéristiques microstructurales du matériau.

Enfin, cette étude a été étendue à plusieurs lots de matière avec différentes histoires thermomécaniques afin de préciser le rôle des macrozones dans la variabilité des comportements observés. Des essais complémentaires de traction *in-situ* ont notamment été réalisés pour caractériser l'hétérogénéité de la déformation en lien avec la microstructure par corrélation d'images numériques. Les conséquences des macrozones et de leurs caractéristiques sur les mécanismes de déformation et d'endommagement ont ainsi été clarifiées.

Approche multiéchelle pour la construction d'une loi de comportement du HMX : de l'échelle atomique à l'échelle continue

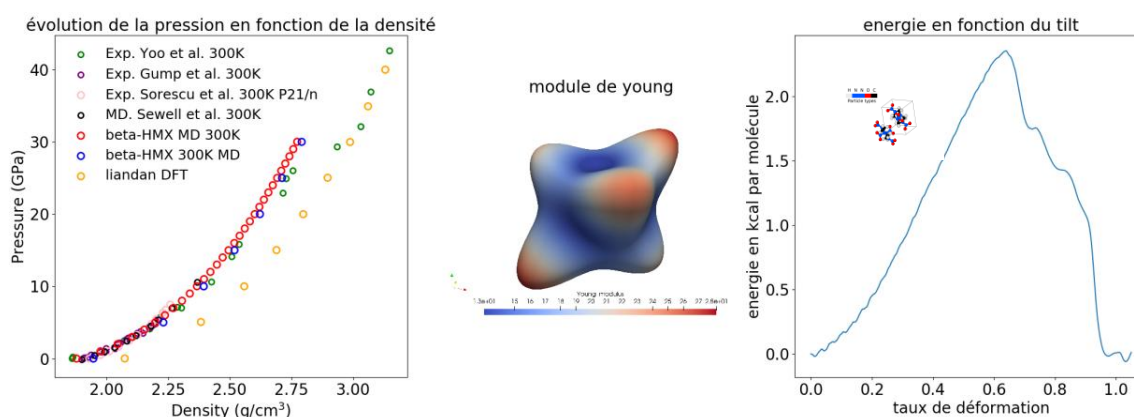
Théo Pargana^{1,2}, Jean-Bernard Mailliet^{1,2}, Paul Lafourcade^{1,2}

¹CEA DAM DIF, Bruyères-le-Châtel, F-91297 Arpajon CEDEX, France

²Université Paris-Saclay, CEA, LMCE, F-91680 Bruyères-le-Châtel, France

theo.pargana-maffre@cea.fr

Le β -1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazoctane plus connu sous le nom de β -HMX est un cristal moléculaire énergétique monoclinique appartenant au groupe P21/n (ou P21/c) principalement utilisé dans les propergols solides et les compositions explosives [1]. Afin de pouvoir modéliser avec précision sa réponse mécanique dans des conditions extrêmes, la construction d'une loi de comportement fiable est alors nécessaire. Cette dernière peut en général se trouver sous la forme d'une décomposition multiplicative de la déformation totale en une contribution élastique (élasticité + équation d'état), une contribution plastique et une contribution supplémentaire faisant intervenir le maillage ou la transformation de phase. En s'appuyant sur la démarche adoptée pour un autre explosif, le TATB [2], nous avons entamé la mise en place d'une chaîne de calcul multi-échelle afin d'alimenter un modèle continu à partir de simulations atomistiques.



L'équation d'état du HMX, ses constantes élastiques en pression ainsi que le chemin d'énergie de maillage [3] ont été calculés en dynamique moléculaire afin de nourrir le modèle hyper-élastique non linéaire et le formalisme de champ de phase par chemins de réaction. Les résultats sont comparés à ceux issus de la littérature [3,4] et serviront de briques de base pour le modèle continu. Nous discutons également le modèle de plasticité existant et les perspectives associées à cette composante de la déformation [5].

[1] Gibbs, T. R., & Popolato, A. (Eds.). LASL explosive property data, 4 Univ of California Press. (2023)

[2] Lafourcade, P., Denoual, C., Mailliet, J.-B. Mesoscopic constitutive law with nonlinear elasticity and phase transformation for the twinning-buckling of TATB under dynamic loading. Phys. Rev. Materials, 3. (2019)

[3] Pereverzev, A. Molecular dynamics study of diffusionless phase transformations in HMX: β -HMX twinning and β - ϵ phase transition. Journal of Applied Physics, 134. (2023)

[4] Yoo, C. S., & Cynn, H. Equation of state, phase transition, decomposition of β -HMX at high pressures. The Journal of Chemical Physics, 111. (1999)

[5] Zecevic, M. Cawkwell, M., Ramos, K., Luscher, D.J. Crystal plasticity including a phase-field deformation twinning model for the high-rate deformation of HMX. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 163, (2022)

Influence de la contrainte et de la température sur la nucléation et la croissance des boucles de dislocations sous irradiation dans l'aluminium

Solenn Fabre^{*123}, Fabien Onimus¹, Thomas Jourdan², Frédéric Mompiau³

¹*Université Paris-Saclay, CEA, Service de Recherche en Matériaux et procédés Avancés, F-91191 Gif-sur-Yvette, France*

²*Université Paris-Saclay, CEA, Service de recherche en Corrosion et Comportement des Matériaux, SRMP, F-91191 Gif-sur-Yvette, France*

³*CEMES-CNRS, and University of Toulouse, 29 rue Jeanne Marvig - 31055 Toulouse Cedex 4, France*

**solenn.fabre@cea.fr*

Dans les réacteurs à eau pressurisée, les aciers austénitiques des internes de cuve, de structure cubique à faces centrées, sont soumis à des sollicitations mécaniques, donnant lieu à un phénomène appelé fluage d'irradiation. Une première étude a été récemment effectuée *[1,2] pour identifier les mécanismes de fluage d'irradiation dans l'aluminium, utilisé comme matériau modèle. Un mécanisme de germination préférentielle des boucles, en fonction de l'orientation de la contrainte par rapport à leur plan d'habitat, a été mis en évidence expérimentalement. Des simulations ont montré que l'anisotropie de la microstructure peut s'expliquer par la transformation de petits amas interstitiels de structure A15 en boucles, la barrière d'énergie pour la transformation étant abaissée pour les amas bien orientés par rapport à la contrainte appliquée [3].

Dans ce travail, nous étudions plus en profondeur les mécanismes de déformation en fluage d'irradiation dans l'aluminium par un couplage entre expériences et simulations. Nous avons effectué des simulations Monte Carlo cinétique sur objets (OKMC) de la transformation des amas A15 sous contrainte et sous irradiation, pour différentes températures. A température ambiante, les amas A15 se transforment en boucles de Frank, sans transformation inverse. Le rapport des densités de boucles d'orientations différentes est simplement donné par le rapport des fréquences de transformation des amas A15 vers les différentes orientations de boucles. A mesure que la température augmente, les boucles peuvent aussi se transformer de nouveau en amas A15 et les proportions sont alors liées à l'énergie d'interaction des boucles avec la contrainte appliquée. Des expériences menées à différentes températures et sous contrainte devraient permettre de vérifier ces prédictions.

[1] D. Da Fonseca *et al.*, *Evidence of dislocation loop preferential nucleation in irradiated aluminum under stress*, Scripta Mater. **233** (2023) 115510

[2] D. Da Fonseca, *Simulation et observation de l'influence d'une contrainte sur l'évolution des défauts cristallins à l'échelle nanométrique et en temps réel*, Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier-Toulouse III (2023).

[3] T. Jourdan, A. M. Goryaeva, et M.-C. Marinica, *Preferential nucleation of dislocation loops under stress explained by A15 Frank-Kasper nanophases in aluminum*, Phys. Rev. Lett. **132** (2024) 226101

Caractérisation des réseaux de dislocations

par Dynamique des Dislocations

B. Quessart^{1*}, A. Dubois^{1,2}, Y.-P. Pellegrini^{1,2}, R. Madec^{1,2}

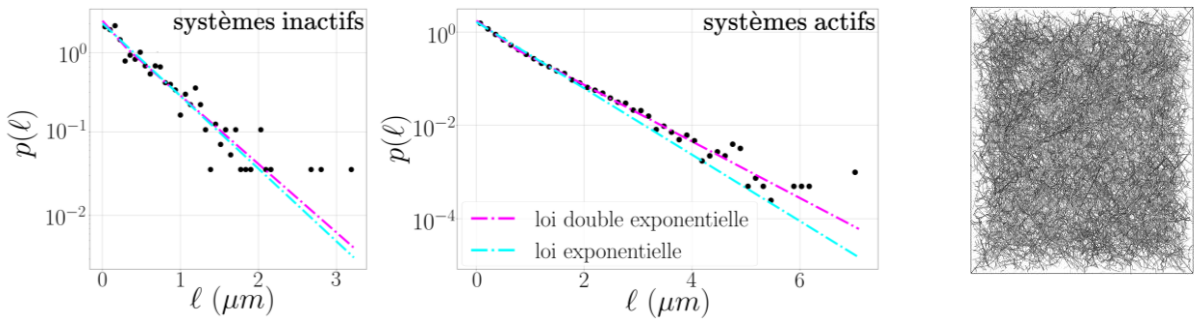
¹CEA, DAM, DIF, F-91297 Arpajon, France

²Université Paris-Saclay, CEA, Laboratoire Matière en Conditions Extrêmes, 91680 Bruyères-le-Châtel, France

*bastien.quessart@cea.fr

La déformation plastique dans les métaux se traduit par une évolution et une structuration de leur réseau de dislocations. Les lois de comportement fondées sur une approche microscopique utilisent a minima la densité totale de dislocations. Des modèles plus précis séparent cette dernière en densités mobile et immobile. C’est notamment le cas pour modéliser les déformations rapides [1]. Une méthode pour obtenir la densité de dislocations mobiles est d’utiliser la distribution de longueurs de lignes de dislocations obtenues par Dynamique des Dislocations [2] en s’appuyant sur un critère de stabilité de ligne [3].

Nous avons étudié la forme des distributions de longueurs des lignes de dislocations obtenues par simulations de Dynamique des Dislocations. Cette forme est exponentielle pour les systèmes inactifs, et exponentielle double pour les systèmes actifs, en accord avec des travaux précédents [3,4]. Nous avons aussi étudié de façon systématique l’influence de la microstructure initiale et de la densité initiale de dislocations sur les paramètres de ces distributions en cours de déformation, ainsi que l’effet de la vitesse de déformation imposée.



- [1] C. Denoual, Y.-P. Pellegrini, P. Lafourcade, R. Madec. “Dislocation storage-release-recovery model for metals under strain rates from 10^3 to 10^7 s⁻¹, and application to tantalum”. J. App. Phy. (2024).
- [2] R. Sills, N. Bertin, A. Aghaei, W. Cai. “Dislocation Networks and the Microstructural Origin of Strain Hardening”. PRL (2017).
- [3] C. Ye, G. Liu, K. Chen, J. Liu, J. Hu, Y. Yu, Y. Mao, Y. Shen. “Strain-rate dependant crystal plasticity model and aluminum softening/hardening transition”. Comput. Mater. Sci. (2023).
- [4] S. Akhondzadeh. “Statistical Analysis and Constitutive Modeling of Crystal Plasticity Using Dislocation Dynamics Simulation Database”. PhD Thesis, Stanford University (2021).

Localisation du glissement et nucléation de cavités :

MEB in situ & simulations.

Antoine Ollivier, Antonio Pereira, Nicholas Blanchard, Loïc Vanel et Dôme Tanguy¹

¹*Institut Lumière-Matière, Université Lyon 1-CNRS, Villeurbanne*

**dome.tanguy@univ-lyon1.fr*

Ce poster présentera d'une part des résultats expérimentaux concernant la localisation du glissement et l'apparition de fissures obtenus par des essais de traction dans un microscope électronique à balayage. Le mécanisme observé est la classique rupture d'interfaces inclusion-matrice, mais vue à une résolution spatiale allant de 50 nm à quelques nm et avec une caractérisation fine du glissement plastique porté par les bandes à l'origine de la rupture. D'autre part, l'agrégation de lacunes constitue un mécanisme de formation de cavités alternatif à la rupture d'inclusions, là aussi classique, mais toujours débattu. En particulier, la taille critique et les contraintes locales, n'ont pas été évaluées avec tous les détails atomistiques. Le poster montrera des résultats de simulations Monte Carlo, à l'échelle atomique, de la nucléation de cavités au niveau d'un joint de grains. La méthode et de premiers résultats sur de petits clusters de lacunes ont été publiés récemment ("Sampling vacancy configurations with large relaxations using Smart Darting" D. Tanguy, Phys. Rev. Materials **8** 033604 (2024)). Pour étudier la formation de cavités, un biais a été introduit dans les simulations, dans l'esprit de la méthode « Umbrella Sampling ». Il a permis de forcer le système à franchir la barrière d'énergie vers la cavité, tout en échantillonnant la structure et l'énergie des clusters de lacunes les plus importants (au sens statistique) le long de la coordonnée de réaction. Les forces motrices et le niveau de déformation nécessaire sont discutées.

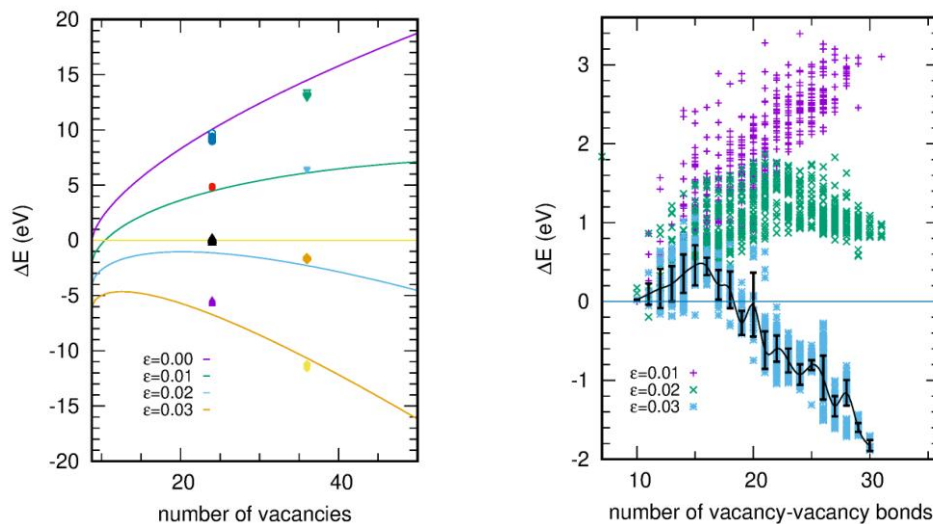


Figure : (a) stabilité des cavités/ligne de lacunes dans le joint (atomistique / modèle continu), (b) barrière d'énergie pour former les cavités (composées de 12 lacunes) à partir d'une ligne de lacunes dans le joint. Joint de flexion $\Sigma 33$, potentiel EAM pour Al.

On the influence of temperature on the $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ screw dislocation core in uranium dioxide

Jules-Elémir Suchorski^{1,2}, Adrien Pivano^{*1} and Jonathan Amodeo²

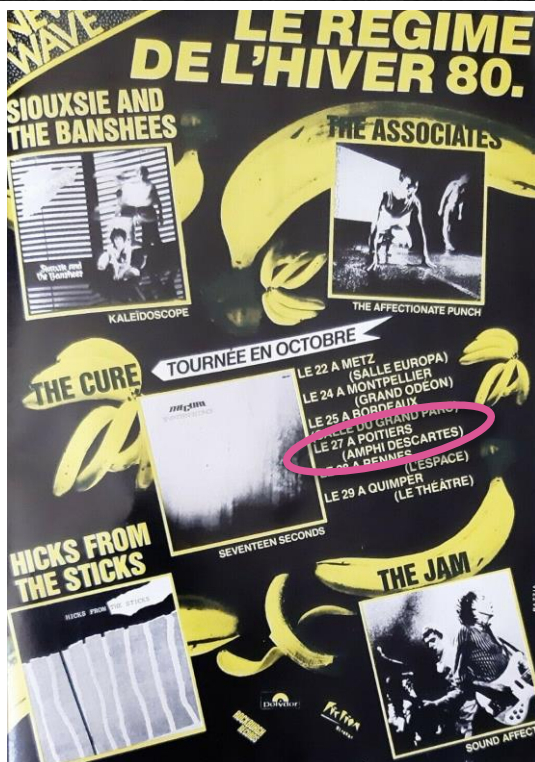
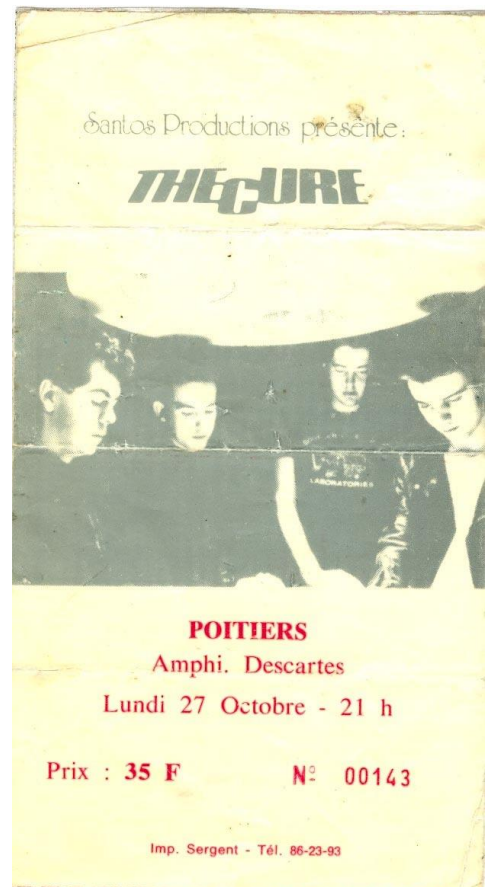
¹CEA, DES, IRESNE, DEC, Cadarache, 13108 Saint-Paul-lez-Durance, France

²Université Aix Marseille, Université de Toulon, IM2NP, CNRS, 13397 Marseille, France

^{*}adrien.pivano@cea.fr

Understanding the fundamental processes of plastic deformation in uranium dioxide (main nuclear fuel) is critical to predict the structural integrity of nuclear reactors under off-normal operating conditions. While the $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle \{001\}$ edge dislocation has been extensively studied in recent years due to its role as rate-limiting character for plastic deformation in the primary slip systems, much less is known about the screw dislocation, despite its recently shown involvement in the composite slip process at high temperature. Here, molecular simulations are employed to investigate the evolution of the $\frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ screw dislocation core structure in UO_2 with temperature. First, a comparison of the various interatomic models tested at 0 K addresses the stability of a *zig-zag* core structure predominantly spread in $\{001\}$. Then, molecular dynamics simulations confirm the stability of the screw dislocation core spread in $\{001\}$ up to 1600 K, after which a transition towards more complex core structures involving the $\{110\}$ and $\{111\}$ planes is characterized, with direct implications on the shear-ability of the various crystallographic planes of the fluorite structure. Further analysis reveal that the transition of the screw dislocation core, that favors thermal fluctuation of the dislocation core in $\{111\}$ slip planes at high temperature, is driven by the local disordering of the anionic sublattice within the dislocation core, preceding the well-known Bredig transition in UO_2 . This transition of the screw dislocation core is at the roots of the composite slip process, which was recently proposed to explain the Schmid law breakdown observed in UO_2 single crystal.

Après avoir accueilli...



l'amphi Descartes est prêt pour...

