

Sujet de thèse

Années universitaires 2023-2026

Microstructure de dislocations 2D vs 3D : approche expérimentale et modélisation

Le doctorant fera partie de l'équipe de recherche du projet MAMIE NOVA (**M**achine le**A**rning for **M**icrom**E**chanics: a **N**OVel Approach), projet financé par l'ANR (Agence Nationale de la Recherche).

Contexte. L'objectif ultime de la science des matériaux est de pouvoir adapter les microstructures pour atteindre des propriétés souhaitées. Cependant, aucun modèle constitutif n'est disponible à ce jour essentiellement en raison de la nécessité de lier statistiquement les échelles microscopique et macroscopique. Dans ce projet, nous proposons une méthodologie originale dans laquelle un code de plasticité cristalline sera couplé à un algorithme d'apprentissage supervisé pour obtenir un système capable de suggérer la distribution des mécanismes opérant dans un polycristal avec ses paramètres microstructuraux afin d'obtenir les propriétés mécaniques macroscopiques souhaitées. Ce nouveau modèle résultant du processus d'apprentissage sera instruit à partir d'un large ensemble de données expérimentales obtenues par microscopie électronique à balayage (SEM) et traduites dans un système d'entrée-sortie. Le projet MAMIE NOVA aura un impact majeur sur les enjeux sociétaux actuels en permettant des économies d'énergie et des coûts limités associés à la mise au point de microstructures ciblant des performances mécaniques spécifiques.

Objectifs. Nous allons nous concentrer, dans cette étude, sur les dislocations. Ces défauts cristallins sont générés par sollicitations mécaniques. La densité de dislocations représente donc un paramètre clef pour l'étude des propriétés mécaniques des matériaux cristallins. La microscopie électronique en transmission (MET) est historiquement l'outil le plus adapté pour caractériser ces défauts linéaires d'épaisseur nanométrique [1] et permet de faire des analyses fines et rigoureuses [2], mais à une échelle très locale (de l'ordre du micromètre). Depuis 1979 [3-4], une nouvelle technique de caractérisation des dislocations au MEB a vu le jour, il s'agit de l'ECCI (imagerie par contraste de canalisation des électrons). Cette technique permet de faire des analyses à grande échelle (sur plusieurs centaines de microns) et donc quantitatives. Néanmoins, les caractérisations MEB sont des analyses de surface. Sont-elles représentatives du volume ? Pour déterminer une densité de dislocations, il faut intégrer l'ensemble des longueurs de lignes de dislocations rapporté au volume de l'objet étudié. Une visualisation 2D va inmanquablement sous-estimer la densité de dislocations par des problèmes de projections et de superpositions. L'idée principale de la thèse va consister à comparer des microstructures de dislocations 2D venant du MEB (micrographies ECCI) à des microstructures de dislocations 3D venant du MET (depuis 2014, le laboratoire UMET développe la caractérisation MET de microstructures 3D de dislocations [5-6]). Des simulations micromécaniques [7-8] seront aussi réalisées de façon complémentaire à cette étude expérimentale. Des simulations de microstructures de dislocations et de leur micrographies ECCI virtuelles seront entreprises au laboratoire LEM3 à partir des microstructures 3D de dislocations obtenues au MET. Les images ECCI obtenues pourront être comparées à celles obtenues expérimentalement. Aux problèmes de projection et de superposition des visualisations 2D, s'ajoute le problème de force image (une dislocation proche d'une surface est attirée par son homologue virtuelle de signe opposé située de l'autre côté de la surface), important pour les analyses MEB (une surface libre) et très important pour les analyses MET (deux surfaces libres). Les méthodes expérimentales et théoriques proposées s'intéresseront donc aussi à la détermination des pourcentages de perte d'information au passage du volume à la 2D, ce qui constitue l'un des objectifs importants de l'ANR MAMIE NOVA. Il s'agit là de l'objectif principal de cette thèse.

[1] = Hirsch, P.B., Horne, R.W., Whelan, M.J. Direct observation of the arrangement and motion of dislocations in Aluminium. *Philos. Mag.* **1956**, 1, 677–684.

[2] = Ray, I.L.F & Cockayne, D.J.H. The dissociation of dislocations in silicon. *Proc. R. Soc. Lond.* **1971**, A325, 543–554.

[3] = Morin, P., Pitaval, M., Vicario, E., Fontaine, G. Scanning electron microscope observation of single defects in solid crystalline materials. *Scanning* **1979**, 2, 217-224.

- [4] = Morin, P., Pitaval, M., Besnard, D., Fontaine, G. Electron-channelling imaging in scanning electron microscopy. *Philos. Mag. A* **1979**, 40, 511-524.
- [5] = Barnard, J.S., Sharp, J., Tong, J.R., Midgley, P.A. High-resolution three-dimensional imaging of dislocations. *Science*. **2006**, 313, 319.
- [6] = Mussi, A., Cordier, P., Demouchy, S., Vanmansart, C. Characterization of the glide planes of the [001] screw dislocations in olivine using electron tomography, *Phys. Chem. Miner.* **2014**, 41, 537-545.
- [7] = Kohnert, A.A., Tummala, H., Lebensohn, R.A., Tomé, C.N., Capolungo, L. On the use of transmission electron microscopy to quantify dislocation densities in bulk metals. *Scr. Mater.* **2020**, 1780, 161-165.
- [8] = Djaka, K.S., Villani, A., Taupin, V., Capolungo, L., Berbenni, S. Field Dislocation Mechanics for heterogeneous elastic materials: A numerical spectral approach. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **2017**, 315, 921-942.

En tant que doctorant, vous serez inscrit à l'Université de Lille et ferez partie de l'école doctorale SMRE (Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement). Vous aurez l'opportunité de bénéficier d'une grande gamme de programme de formation au cours de votre thèse. Le doctorant sera hébergé au laboratoire UMET de Lille et travaillera en étroite collaboration avec le laboratoire LEM3 de Metz (des déplacements entre Lille et Metz seront à prévoir).

Contacts

Alexandre MUSSI (alexandre.mussi@univ-lille.fr) = directeur de thèse à l'Université de Lille

Vincent TAUPIN (vincent.taupin@cnrs.fr) = directeur de thèse à l'Université de Lorraine

Vos compétences

Requis : Excellentes connaissances en science des matériaux et en mécanique, y compris la plasticité cristalline. Expérience en caractérisation de microstructures par microscopie électronique à balayage.

Bénéfices : Expérience en caractérisation de microstructures par microscopie électronique en transmission et microscopie électronique à balayage. Expérience en simulations micromécaniques et en simulations de microstructures de dislocations.

Nous offrons

Contrat à temps plein de 36 mois (à partir du 01/09/2023) incluant accès aux droits de sécurité sociale, congés payés. Environnement international dynamique. Supervision étroite par des scientifiques expérimentés. Possibilité de développer des

compétences expérimentales et numériques (caractérisations de microstructures, simulations dynamiques de dislocations) pour favoriser une carrière dans le milieu universitaire ou industriel.

Candidature

Si vous êtes intéressé, envoyez un CV détaillé, une lettre de motivation, ainsi que votre relevé de notes de Licence et de Master, aux deux contacts. Les lettres de recommandations ne sont pas obligatoires, mais pensez à bien préciser les coordonnées de vos référents.

Les candidatures envoyées sans les fichiers attachés recommandés ne seront pas prises en compte.

L'équipe de MAMIE NOVA est composée de chercheurs de 3 laboratoires français : LEM3, UMET et LORIA

Dr Antoine GUITTON (PI), maître de conférences HDR, expert en microscopie et plasticité des matériaux. [www.antoine-guitton.fr]

Dr Vincent TAUPIN, chercheur CNRS HDR, expert en modélisation continue de la mécanique des matériaux.

Dr. Benoît BEAUSIR, maître de conférences, expert en caractérisation des microstructures [www.atex-software.eu].

Dr Alexandre MUSSI, maître de conférences HDR, expert en tomographie par microscopie électronique à transmission.

Dr. Lydia BOUDJELOUD-ASSALA, maître de conférences HDR, expert en fouille de données et réseaux de neurones.

Dr Frédéric PENNERATH, professeur associé, expert en modélisation statistique, réseaux de neurones et apprentissage bayésien.

Dr Briec CONAN-GUEZ, maître de conférences, expert en fouille de données et réseaux de neurones.

Dr. Amedeo NAPOLI, chercheur émérite CNRS, expert en fouille de données et réseaux de neurones.

2 doctorants et 1 post-doctorant.

Le salaire moyenne du 01/09/2023 au 31/08/2026 est de 2170€ brut par mois (source : <https://www.legifrance.gouv.fr/jorf/id/JORFTEXT000046820745>).

PhD thesis

2023-2026

2D vs 3D dislocation microstructures: experimental and modeling approaches

The doctoral researcher will be part of the team of MAMIE NOVA (**M**achine **l**e**A**rning for **M**icrom**E**chanics: a **N**OVel **A**pproach), a project granted by the ANR (**A**gence **N**ationale de la **R**echerche: National Agency for Research).

Context. The ultimate objective of materials science is to be able to adapt microstructures to reach desired properties. However, no consistent constitutive models were made to date essentially because of the need to statistically link the microscopic and macroscopic scales. In this project, we propose an original methodology whereby a crystalline plasticity code will be coupled to a supervised learning algorithm to obtain a system capable of suggesting the distribution of operating mechanisms in a polycrystal with its microstructural parameters in order to obtain desired macroscopic mechanical properties. This new model resulting from the learning process will be instructed from a large set of experimental data obtained by scanning electron microscopy (SEM) and translated into an input-output system. MAMIE NOVA project will have a major impact in current societal issues by enabling energy savings and limited costs associated with the tuning of microstructures targeting specific mechanical performances.

Objectives. We will focus on dislocations in this study. These crystallographic defects are generated by mechanical solicitations. Dislocation density is a key

parameter to study the mechanical properties of crystalline materials. TEM (Transmission Electron microscopy) is historically the most adapted tool to characterize these linear defects with nanometric thickness [1] and makes it possible to perform accurate and rigorous analyses [2], but with a very local scale (in the order of one micrometer). Since 1979 [3-4], ECCI (Electron Channeling Contrast Imaging), a new dislocation characterization technique, has been developed in the SEM. This technique allows to perform large scale dislocation analyses (over several hundreds of micrometers) and so to be quantitative. Nevertheless, SEM characterizations are surface analyses. Are they representative of the volume? In order to obtain dislocation densities, the total length of the dislocation lines has to be summed and divided by the volume of the considered specimen. A 2D visualization will inevitably underestimate the measurement of dislocation densities due to projection and superimposition problems. The PhD principal idea will consist in comparing 2D dislocation microstructures from SEM characterizations (ECCI micrographs) to 3D dislocation microstructures from TEM characterizations (since 2014, the UMET laboratory develops TEM analyses of 3D dislocation microstructures [5-6]). Micromechanics modeling [7-8] will also be realized in addition to these experimental studies. Simulations of dislocation microstructures and simulations of their virtual ECCI micrographs will be performed at the LEM3 laboratory from 3D dislocation microstructures obtained with TEM analyses. The resulting ECCI micrographs will be compared with the experimental ones. The image force problem is in addition to the projection and superimposition problems. A dislocation located near a surface is attracted by its virtual counterpart, with an opposite sign, located on the other side of the surface. This attraction force is called image force. This force is important for SEM analyses (one free surface) and very important for TEM analyses (two free surfaces). Consequently, experimental and theoretical proposed approaches will also be interested by the percentage of data loss switching from volume to 2D, what constitutes one of the main goals of the MAMIE NOVA ANR project. This is the key objective of this PhD.

The candidate will be registered

[1] = Hirsch, P.B., Horne, R.W., Whelan, M.J. Direct observation of the arrangement and motion of dislocations in Aluminium. *Philos. Mag.* **1956**, 1, 677–684.

[2] = Ray, I.L.F & Cockayne, D.J.H. The dissociation of dislocations in silicon. *Proc. R. Soc. Lond.* **1971**, A325, 543–554.

[3] = Morin, P., Pitaval, M., Vicario, E., Fontaine, G. Scanning electron microscope observation of single defects in solid crystalline materials. *Scanning* **1979**, 2, 217-224.

[4] = Morin, P., Pitaval, M., Besnard, D., Fontaine, G. Electron-channelling imaging in scanning electron microscopy. *Philos. Mag. A* **1979**, 40, 511-524.

- [5] = Barnard, J.S., Sharp, J., Tong, J.R., Midgley, P.A. High-resolution three-dimensional imaging of dislocations. *Science*. **2006**, 313, 319.
- [6] = Mussi, A., Cordier, P., Demouchy, S., Vanmansart, C. Characterization of the glide planes of the [001] screw dislocations in olivine using electron tomography, *Phys. Chem. Miner.* **2014**, 41, 537-545.
- [7] = Kohnert, A.A., Tummala, H., Lebensohn, R.A., Tomé, C.N., Capolungo, L. On the use of transmission electron microscopy to quantify dislocation densities in bulk metals. *Scr. Mater.* **2020**, 1780, 161-165.
- [8] = Djaka, K.S., Villani, A., Taupin, V., Capolungo, L., Berbenni, S. Field Dislocation Mechanics for heterogeneous elastic materials: A numerical spectral approach. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **2017**, 315, 921-942.

As PhD student, you will be registered at the Université de Lille and will be part of the SMRE (Sciences de la Matière, du Rayonnement et de l'Environnement: Material Science, Radiation and Environment) doctoral school. You will have the opportunity to benefit from a wide range of training programs during your PhD. The PhD student will be hosted at UMET laboratory at Lille and will have close collaboration with the LEM3 laboratory at Metz (travels are expected between Lille and Metz).

Contacts

Alexandre MUSSI (alexandre.mussi@univ-lille.fr) = PhD supervisor at Lille University.

Vincent TAUPIN (vincent.taupin@cnrs.fr) = PhD supervisor at Lorraine University.

Your skills

Required: Excellent knowledge in materials science and mechanics, including plasticity. Experience in characterization of microstructures by scanning electron microscopy.

Beneficial: Experience in characterization of microstructures by transmission electron microscopy and scanning electron microscopy. Experience in micromechanics modeling and in simulations of dislocation microstructures.

We offer

36 months full-time contract (starting from 01/09/2023) including health care, paid holidays. Dynamic international environment. Close supervision by senior scientists. Opportunity to develop experimental and numerical skills (microstructures characterizations, dislocation dynamic simulations) to foster a career in academia or industry.

Application

Please send a detailed CV, a cover letter, and transcripts of your Bachelor and master's degree to the email addresses provided in the header. Recommendation letters are not required, but please include the contact information of your references.

Applications without the requested attachments may not be considered.

The team of MAMIE NOVA is composed by researchers from 3 French labs: LEM3, UMET and LORIA

Dr. Antoine GUITTON (PI), associate professor HDR, expert in microscopy and materials plasticity. [www.antoine-guitton.fr]

Dr. Vincent TAUPIN, CNRS research scientist HDR, expert in continuum modeling of materials mechanics.

Dr. Benoît BEAUSIR, associate professor, expert in microstructure characterization [www.atex-software.eu].

Dr. Alexandre MUSSI, associate professor HDR, expert in tomography by transmission electron microscopy.

Dr. Lydia BOUDJELOUD-ASSALA, associate professor HDR, expert in machine learning and data mining.

Dr. Frédéric PENNERATH, associate professor, expert in statistical modeling, neural networks, and Bayesian deep learning.

Dr. Briec CONAN-GUEZ, associate professor, expert in data mining and neural networks.

Dr. Amedeo NAPOLI, emeritus CNRS research scientist, expert in data mining and machine learning.

2 doctoral researchers and 1 postdoctoral researcher.

The mean salary in France from 01/09/2023 to 31/08/2026 is 2170 €/month without taxes (source: <https://www.legifrance.gouv.fr/jorf/id/JORFTEXT000046820745>).