

## FRANÇAIS

### Introduction au thème « Modélisation des procédés et des microstructures pour des décisions novatrices et sûres »

J.-F. Tiers

Lors des Journées d'Automne 2001 de la SF2M, une journée a été organisée à la mémoire de Jean Morlet, ancien président de la Revue de Métallurgie. Différentes contributions à cette journée, représentatives du type de démarche cher à Jean Morlet, sont regroupées dans ce numéro de Science et Génie des Matériaux.

### Coopération Université – CNRS – Industrie, Jean Morlet, industriel exemplaire

G. Beck

Cet hommage évoque différents niveaux d'intervention de Jean Morlet dans les relations entre recherche de base et recherche industrielle : identification et mobilisation des compétences de base nécessaires au progrès de l'industrie métallurgique, acteur et animateur de la recherche publique, coordinateur d'une recherche interdisciplinaire, membre actif de la communauté scientifique.

### La modélisation comme outil de décision dans l'investissement industriel. L'exemple de Jean Morlet

G. Raissou

La modélisation est un outil puissant pour préparer et mener des développements industriels. Jean Morlet a utilisé largement la modélisation et a contribué à l'épanouissement d'une école française forte. Plusieurs types de développement seront présentés et illustrés à partir de réalisations concrètes effectuées au cours de la carrière de Jean Morlet.

### Applications de la thermodynamique à l'élaboration de l'acier

H. Gaye, M. Faral, J. Lehmann

Le logiciel de calcul CEQCSI (Calcul d'Équilibres Chimiques pour la Sidérurgie) a été développé à l'IRSID sous l'impulsion de Jean Morlet. Cet article situe CEQCSI à l'intérieur du domaine en forte croissance des logiciels de calcul thermodynamique, analyse l'impact de l'expérimentation faite à Imphy sur l'évolution du modèle, présente quelques exemples de son application industrielle en métallurgie secondaire et maîtrise des inclusions et évoque enfin les développements engagés en vue du couplage des codes thermodynamiques avec les calculs d'écoulements (CFD) et les modèles cinétiques.

### Développement de nouveaux alliages de magnésium : modélisation thermodynamique et élaboration par coulée

A. Pisch, C. Anton, C. Tassin-Arques

Les alliages de magnésium connaissent récemment un intérêt accru dans le domaine de l'allègement des structures. Le but de cette contribution est le développement de nouvelles nuances d'alliages en utilisant des calculs d'équilibre thermodynamique pour définir les

compositions les plus prometteuses ainsi que les paramètres de procédé (solidification, traitement thermique) dans le système chimique Mg-Y-Sc-Mn. Des échantillons ont été élaborés par coulée et analysés et les résultats sont en bon accord avec les prévisions.

### Thermodynamique des phénomènes de vaporisation et de condensation dans les fours de coulée de superalliages sous vide

M. Heyman, C. Chatillon, C. Barat, S. Fargeas

La compréhension des phénomènes chimiques se déroulant dans les fours de coulée a été abordée par une analyse thermodynamique. Les moules en céramiques utilisés pour la coulée des superalliages se vaporisent à haute température sous vide et les vapeurs vont ensuite se condenser dans les zones les plus froides du four. De plus, l'influence du matériau graphite du résistor des fours perturbe le régime d'évaporation des moules et donne naissance à d'autres processus d'évaporation et de condensation. Le régime de dépôt d'impuretés conduisant à des inclusions, lors de la coulée du métal, s'en trouve modifié. L'analyse thermodynamique est corroborée par les observations faites sur les fours de coulée des superalliages. Les dépôts observés et caractérisés correspondent à ceux prévus par l'analyse thermodynamique, cependant que les pertes de masse des moules fournissant ces dépôts sont environ 60 fois plus faibles que prévues.

### Influence de l'affinage sur la fissuration à chaud des alliages d'aluminium-cuivre utilisés en fonderie

M. Braccini, M. Suéry, C. Laguerre, M. Stucky

La fissuration à chaud, ou crique à chaud, des alliages aluminium-cuivre est un défaut sérieux rencontré en fonderie. L'affinage de ces alliages permet de diminuer leur sensibilité à la crique. L'objectif de cette étude est de mieux comprendre le mécanisme de la fissuration à chaud ainsi que l'action de l'affinage. Pour ce faire, des essais de criquabilité et de traction à l'état pâteux ont été réalisés. Par ailleurs, un modèle fondé sur la germination-croissance d'une cavité dans un film de liquide et tenant compte de la rhéologie à l'état pâteux a été développé.

### Dimensionnement des aubes de turbines monocristallines

G. Cailletaud, J.-L. Chaboche, S. Forest, L. Rémy

Après un bref historique, on décrit ici les différentes étapes de la prévision de durée de vie des aubes monocristallines, en s'attachant notamment à la bonne prise en compte du comportement du matériau, à la mécanique de l'aube et aux conditions de calcul sous sollicitation réaliste. La chaîne de calcul réalisée autour du code ZéBuLoN permet actuellement de prévoir l'amorçage de fissures en réalisant le post-traitement de calculs élasto-viscoplastiques tridimensionnels.

### Modélisation des transformations de phases dans les aciers à très haute résistance

T. Lung, M. Kandel, D. Quidort, Y. de Lassat

Dans le modèle présenté, les transformations de phases dans les aciers sont décrites à l'aide de lois thermodynamiques et cinétiques appliquées à l'échelle du grain austénitique. Un traitement

géométrique simple donne la fraction transformée finale. L'effet de la composition, du chemin thermique et de la taille de grain austénitique est pris en compte. Les prédictions du modèle sont comparées avec des résultats expérimentaux sur différents aciers. Les résultats obtenus pour la ferrite, la bainite et la taille de grain ferritique sont encourageants.

**Transformations de phase dans les alliages forcés** ..... 183  
**L. Chaffron, Y. Le Bouar, G. Saint-Ayes, G. Martin**

On introduit la notion d'alliage forcé et on donne des exemples d'application. Des expériences systématiques sur échantillons naturels et sur ordinateur montrent que, sous sollicitation (irradiation, broyage, chargement cyclique), l'alliage peut acquérir une configuration stationnaire. Parmi les paramètres dont dépend ce phénomène, l'intensité de la sollicitation joue un grand rôle. Les notions introduites sont appliquées à l'étude de l'usure des roues des trains à grande vitesse (TGV). On trouve que les vitesses d'usure et d'ovalisation des roues sont proportionnelles à l'intensité de la sollicitation.

**Développement de la texture de recristallisation par maclage multiple dans l'INVAR (Fe-36 % Ni)** ..... 193  
**T. Baudin, F. Julliard, R. Penelle**

La distribution des orientations créées par maclage multiple est simulée à partir de la texture d'un échantillon de Fe-36%Ni laminé à froid de 70 %, déterminée par diffraction des neutrons et par EBSD. En accord avec les observations expérimentales, réalisées au cours du recuit de recristallisation, la texture simulée tend à devenir isotrope. De plus, ces deux types d'approches expérimentale et numérique permettent de vérifier le développement d'environ trois générations de macles après complète recristallisation. Finalement, s'il semble évident que les deux mécanismes de germination-croissance possibles de toutes les composantes de la texture et de maclage multiple peuvent contribuer au développement de la partie isotrope de la texture de recristallisation, il semble que le second mécanisme joue un rôle capital.

**Modélisation du fluage anisotherme des alliages à mémoire de forme à base de cuivre** ..... 203  
**C. Niclaeys, T. Ben Zineb, E. Patoor**

Le comportement superélastique des alliages à mémoire de forme est maintenant bien modélisé. Par contre, le fluage anisotherme reste mal décrit, à la fois par les formulations phénoménologiques et par les formulations de type micro-macro. Dans cet article on utilise une nouvelle approche, fondée sur la notion de groupe de variantes et décrivant plus finement la microstructure obtenue en effet mémoire double sens assisté (EMDSA). On propose également un nouveau critère de sélection de variante.

**Mesure de déformation à l'échelle atomique en microscopie électronique à haute résolution** ..... 211  
**M.J. Hÿtch**

On décrit une méthode de mesure quantitative des déplacements et des déformations à l'échelle atomique en microscopie électronique à haute résolution. L'image est décomposée en composantes périodiques caractérisées par analyse de Fourier. On peut déterminer ainsi l'amplitude locale et la phase géométrique des franges correspondant aux différents types de plans atomiques. L'analyse de la phase des franges renseigne sur la configuration locale du réseau. La méthode est illustrée par différents exemples et ses conditions d'application sont discutées.

**Corrosion à long terme du fer dans les sols argileux : étude physico-chimique et électrochimique de vestiges de 1914-1918** ..... 223  
**E. Pons, L. Uran, S. Joiret, A. Hugot-Le Goff, C. Lemaître, D. David**

Des vestiges de la Première Guerre Mondiale ont été étudiés afin de mieux comprendre les mécanismes de corrosion du fer dans les sols argileux. L'identification de leurs deux couches de corrosion par spectroscopie Raman a mis en évidence des oxy-hydroxydes et oxydes de fer. Des expériences électrochimiques ont confirmé la porosité de la couche externe et le rôle protecteur de la couche interne. L'influence du milieu d'enfouissement sur la vitesse de corrosion a aussi été démontrée.

**ENGLISH**

**Introduction to "Process and microstructure modelling in view of innovating and safe decision making"** ..... 111  
**J.-F. Tiers**

At the 2001 Autumn Meeting of SF2M (the French Metallurgy and Materials Society), a symposium has been organized in the memory of Jean Morlet, late President of *Revue de Métallurgie*. Different contributions to this symposium, representative of the type of approach favoured by Jean Morlet, are published in the present issue of *Science et Génie des Matériaux*.

**Cooperation University – CNRS – Industry, Jean Morlet, an example to be followed** ..... 113  
**G. Beck**

This tribute presents different ways in which Jean Morlet stimulated the cooperation between basic and industrial research : identification and optimum use of the fundamental competences able to contribute to the enhancement of the industrial skills, actor and coordinator in the area of public research, supporter of an interdisciplinary approach, active member of the scientific community.

**Modelling as a tool for decision in industrial development : Jean Morlet's example** ..... 119  
**G. Raisson**

Modelling is a powerful tool for preparing and carrying industrial developments through. Jean Morlet used modelling widely and contributed to the opening out of a strong French school. Several types of development will be presented and illustrated with concrete achievements carried out during the course of Jean Morlet's career.

**Computational thermodynamics applied to steel elaboration** ..... 125  
**H. Gaye, M. Faral, J. Lehmann**

The CEQCSI software (Chemical Equilibrium Calculation for the Steel Industry) was developed at IRSID under the guidance of Jean Morlet. This paper discusses the place of CEQCSI in the fast expanding field of Computational Thermodynamics packages, analyzes the major impact experimentation at Imphy had on its evolution, presents a few examples of industrial applications in ladle metallurgy and inclusions control, and finally evokes trends in the association of thermodynamic codes with CFD (computational fluid dynamics) codes and kinetic models.

**Development of novel magnesium alloys : thermodynamic modelling and elaboration from the melt ..... 135**  
A. Pisch, C. Antion, C. Tassin-Arques

A growing interest for magnesium alloys has been observed recently in the field of weight reduction for structural applications. The purpose of this study is the development of novel alloys by using thermodynamic equilibrium calculations in order to determine the most promising compositions and their process parameters (solidification, heat treatments) within the Mg-Y-Sc-Mn system. Samples have been prepared and analyzed and the results agree well with the predictions.

**Thermodynamics of vaporization and condensation phenomena in vacuum furnaces used for casting superalloys ..... 141**  
M. Heyrman, C. Chatillon, C. Barat, S. Fargeas

A thermodynamic approach has been used to progress in the understanding of the chemical processes taking place in the casting furnaces. The ceramic mould materials used for the casting of superalloys vaporize at high temperature under vacuum and the vapors condense then in the colder zones of the furnace. In addition, the graphite of the furnace resistor perturbs the vaporization regime of the moulds and is at the origin of other vaporization and condensation processes. The deposition regime of impurities leading to inclusions formation during the casting of the metal is modified. The thermodynamic analysis is confirmed by observations made on the superalloy casting furnaces. The deposits observed and characterized correspond to those predicted by the thermodynamic analysis, but the mass losses of the moulds producing these deposits are 60 times smaller than predicted.

**Influence of grain refinement on hot tearing in aluminium-copper alloys used in foundry industries ..... 157**  
M. Braccini, M. Suéry, C. Laguerre, M. Stucky

The hot tearing of aluminium-copper alloys is a serious defect for the foundrymen. The grain refinement of these alloys allows to decrease their hot tearing susceptibility. The aim of this work is to better understand the hot tearing mechanism and the grain refinement action. So, hot tearing tests and tensile tests in the mushy state have been performed. Moreover, a hot tearing model, based on the nucleation and growth of a cavity in a liquid film and taking into account the mushy zone rheology, has been developed.

**On the design of single crystal turbine blades ..... 165**  
G. Cailletaud, J.-L. Chaboche, S. Forest, L. Rémy

After a short historical review, this paper recalls the successive steps of the life prediction of single crystal turbine blades, paying attention to a proper modelling of the material, to the mechanical aspects in the blades, and to the boundary conditions. The code built around the FE solver ZéBuLoN is now able to predict crack initiation by post-processing of the 3D elasto-viscoplastic computations.

**Physical modelling of phase transformations in high strength steels ..... 173**  
T. Lung, M. Kandel, D. Quidort, Y. de Lassat

In the model presented, phase transformations in steels are described using thermodynamic and kinetic laws at the scale of an austenite grain. A single geometric treatment leads to the final transformed fraction. The effect of composition, temperature path and austenite grain size is taken into account. The predictions of the model are compared with experimental results concerning different steel grades. The results obtained for ferrite, bainite and final ferrite grain size are encouraging.

**Phase transformations in forced alloys ..... 183**  
L. Chaffron, Y. Le Bouar, G. Saint-Ayes, G. Martin

The concept of forced alloys is explained and application examples are described. Systematic experiments with natural test pieces and by computer simulations show that, under the working conditions studied (irradiation, crushing, cyclic loading), the alloy may reach a stationary configuration. Among the parameters controlling this process, the working intensity is of particular importance. The introduced concepts are applied to the study of the wear behaviour of fast train wheels (TGV). Wear rates and out-of-roundness are found to be proportional to this intensity.

**Recrystallization texture development by multiple twinning in the Invar (Fe-36 %Ni) alloy ..... 193**  
T. Baudin, F. Julliard, R. Penelle

The orientation distribution of high order twins is computed from the texture determined from neutron and EBSD measurements on a 70 % cold rolled Fe-36%Ni sample. As experimentally observed, during annealing, the simulated twinned texture tends to become isotropic. Moreover, as experimentally observed and numerically verified, it appears that three twin generations develop after the complete recrystallization. Finally, if it is obvious that both the nucleation (and growth) of all possible orientations of the cold rolling texture and the multiple twinning can contribute to explain the isotropic part formation of the recrystallization texture, and it seems that this second mechanism plays an important role.

**New anisothermal creep modelling for Cu-based shape memory alloys ..... 203**  
C. Niclaeys, T. Ben Zineb, E. Patoor

The superelastic behaviour of shape memory alloys is now successfully modelled. On the other hand, the anisothermal creep is badly described, both by phenomenological models and by micro-macro formulations. In this paper we introduce a new approach, based on the concept of group of variants to more precisely describe the microstructure obtained during stress assisted two way memory. A new variants selection criterion is proposed.

**Measurement of deformation at the atomic scale by high-resolution electron microscopy ..... 211**  
M.J. Hÿtch

A quantitative method is described for the measurement of displacements and strains by high-resolution electron microscopy. The image is considered to be composed of periodic sets characterized by Fourier analysis. The local amplitude and geometric phase of lattice fringes can be determined in this way. The analysis of the phase distribution leads to the determination of the local lattice configuration. The method is illustrated by different examples and its application conditions are discussed.

**Long-term behaviour of iron in clay soils : a study of World War I remains by physico-chemical and electrochemical characterization ..... 223**  
E. Pons, L. Uran, S. Joiret, A. Hugot-Le Goff, C. Lemaître, D. David

Artefacts of World War I were studied to better understand iron corrosion phenomena in clay soils. The identification of their two corrosion layers by Raman spectroscopy highlighted iron oxides and oxy-hydroxides. Electrochemical experiments confirmed the porosity of the external layer, and the protective role of the internal products. The influence of the burial environment on the corrosion rate was also proved.

**Introducción al tema « Modelización de los procedimientos y de las microestructuras para decisiones novadoras y seguras »** ..... 111

J.-F. Tiers

Durante los Días de Otoño 2001 de la SF2M (Sociedad Francesa de Metalurgia y Materiales), se ha organizado un coloquio en memoria de Jean Morlet, ex-presidente de La Revue de Métallurgie. Diferentes exposiciones, en este coloquio, representativas del tipo de busca tan querida por Jean Morlet, son reagrupadas en este ejemplar de Science et Génie des Matériaux.

**Cooperación Universidad - CSIC (Consejo Superior de Investigaciones Científicas) - Industria, Jean Morlet, industrial ejemplar** ..... 113

G. Beck

Este obsequio evoca distintos niveles de intervención de Jean Morlet en las relaciones entre investigación básica y industrial : identificación y movilización de las competencias fundamentales imprescindibles para el progreso de la industria metalúrgica, actor y animador de la investigación pública, coordinador de una investigación interdisciplinaria, miembro eficiente de la comunidad científica.

**La modelización como útil de decisión en la inversión industrial. El ejemplo de Jean Morlet** ..... 119

G. Raisson

La modelización es un útil potente para preparar y conducir los desarrollos industriales. Jean Morlet ha utilizado ampliamente la modelización y ha contribuido a la expansión de una escuela francesa. Se presentan varios tipos de desarrollo ilustrados a partir de realizaciones concretas efectuadas durante la carrera de Jean Morlet.

**Aplicaciones de la termodinámica a la elaboración del acero** ..... 125

H. Gaye, M. Faral, J. Lehmann

El logicial de cálculo CEQCSI (Cálculo de equilibrios químicos para la siderurgia) ha sido desarrollado en el IRSID bajo el impulso de Jean Morlet. Este artículo situado en el CEQCSI dentro del campo en fuerte crecimiento de los progicial de cálculo termodinámico, analiza el impacto de la experimentación hecho sobre la evolución del modelo, presenta algunos ejemplos de su aplicación industrial en metalurgia secundaria y control de las inclusiones y evoca finalmente los desarrollos empleados con vistas al acoplamiento de los códigos termodinámicos con los cálculos de colada (CFC) y los modelos cinéticos.

**Desarrollo de nuevas aleaciones de magnesio : modelización termodinámica y elaboración por colada** ..... 135

A. Pisch, C. Antion, C. Tassin-Arques

Las aleaciones de magnesio conocen recientemente un interés elevado en el campo del aligeramiento de estructuras. En el fln de esta contribución está el desarrollo de nuevos tipos de aleaciones utilizando los cálculos de equilibrio termodinámico para definir las composiciones más prometedoras así como los parámetros de procedimiento (solidificación, tratamiento térmico) en el sistema químico Mg-Y-Se-Mn. Las probetas han sido elaboradas por colada y análisis y los resultados están en buen acuerdo con las previsiones.

**Termodinámica de los fenómenos de vaporización y de condensación en los hornos de colada de superaleaciones bajo vacío** ..... 141

M. Heyrman, C. Chatillon, C. Barat, S. Fargeas

La comprensión de los fenómenos químicos que se desarrollan en los hornos de colada ha sido abordada por un análisis termodinámico. Los moldes cerámicos utilizados para la colada de las superaleaciones se vaporizan a elevada temperatura bajo vacío y los vapores van seguidamente a condensarse en las zonas más frías del horno. Además, la influencia del material grafitado del resistor de los hornos perturba el régimen de evaporación de los moldes y da lugar a otros procesos de evaporación y de condensación. El régimen de depósitos de impurezas que conducen a las inclusiones, a partir de la colada del metal, se encuentra modificada. El análisis termodinámico está corroborado por las observaciones hechas en los hornos de colada de superaleaciones. Los depósitos observados y caracterizados corresponden a los previstos por el análisis termodinámico, mientras que las pérdidas de masa de los moldes que facilitan estos depósitos son aproximadamente 60 veces más pequeñas que las previstas.

**Influencia del afinado sobre la fisuración en caliente de las aleaciones aluminio-cobre utilizadas en fundición** ..... 157

M. Braccini, M. Suéry, C. Laguerre, M. Stucky

La fisuración en caliente, o agrietado en caliente, de las aleaciones aluminio-cobre es un defecto serio encontrado en fundición. El afino de estas aleaciones permite disminuir su sensibilidad al agrietado. El objetivo de este estudio es el de comprender mejor el mecanismo de la fisuración en caliente así como la acción del afino. Han sido realizados para hacer los ensayos de agrietabilidad y de tracción en estado pastoso. Además, se ha desarrollado un modelo basado en la germinación-crecimiento de una cavidad en una película líquida y teniendo en cuenta la reología en estado pastoso.

**Dimensionamiento de los álabes de las turbinas monocristalinas** ..... 165

G. Cailletaud, J.-L. Chaboche, S. Forest, L. Rémy

Después de una historia breve, se describe aquí las diferentes etapas de la previsión de vida de los álabes monocristalinos, sujetándose especialmente a lo tenido en cuenta sobre el comportamiento del material, a la mecánica del álabe y a las condiciones de cálculo bajo sollicitación realista. La cadena de cálculo realizada alrededor del código ZéBuLoN permite actualmente prever el cebado de fisuras realizando el post-tratamiento de cálculos elasto-viscoplásticos tridimensionales.

**Modelización de las transformaciones de fase en los aceros de muy alta resistencia** ..... 173

T. lung, M. Kandel, D. Quidort, Y. de Lassat

En el modelo presentado, las transformaciones de fase en los aceros se describen con la ayuda de las leyes termodinámicas y cinéticas aplicadas a la escala del grano austenítico. Un tratamiento geométrico simple de la fracción transformada final. Se toma en cuenta el efecto de la composición, del camino térmico y del tamaño del grano austenítico. Las predicciones del modelo se comparan con los resultados experimentales sobre diferentes aceros. Los resultados obtenidos para la ferrita, la bainita y el tamaño de grano ferrítico son esperanzadores.

**Transformaciones de fase en las aleaciones forzadas** ..... 183

L. Chaffron, Y. Le Bouar, G. Saint-Ayes, G. Martin

Se introduce la noción de aleación forzada y se dan ejemplos de aplicación. Las experiencias sistemáticas sobre probetas naturales y sobre ordenador muestran que, bajo sollicitación (irradiación, trituración, carga cíclica), la aleación puede adquirir una configuración

ración estacionaria. Entre los parámetros de los que depende este fenómeno, la intensidad de la sollicitación juega un gran papel. Las nociones introducidas son aplicadas al estudio del desgaste de las ruedas de los trenes de alta velocidad (TGV). Se encuentra que las velocidades de desgaste y de ovalización de las ruedas son proporcionales a la intensidad de la sollicitación.

**Desarrollo de la textura de recristalización por el maclado múltiple en el INVAR (Fe-36%Ni) ..... 193**  
T. Baudin, F. Julliard, R. Penelle

La distribución de las orientaciones creadas por maclado múltiple, está simulada a partir de textura de una probeta de Fe-36%Ni laminada en frío de 70 %, determinada por difracción de neutrones y por EBSD. De acuerdo con las observaciones experimentales, realizadas durante el recocido de recristalización, la textura simulada tiende a hacerse isotrópica. Además, dos tipos de aproximación experimental y numérica permiten verificar el desarrollo de aproximadamente tres generaciones de maclas después de completada la recristalización. Finalmente, parece evidente que los dos mecanismos de germinación-crecimiento posibles de todos los componentes de la textura y del maclado múltiple pueden contribuir al desarrollo de la parte isotrópica de la textura de recristalización, parece que el segundo mecanismo juega un papel capital.

**Modelización de la fluencia anisotérmica de las aleaciones con memoria de forma a base de cobre ..... 203**  
C. Niclaeys, T. Ben Zineb, E. Patoor

El comportamiento superelástico de las aleaciones con memoria de forma está ahora bien modelizado. Por el contrario, la fluencia anisotérmica permanece mal descrita, a la vez por las formulaciones fenomenológicas y por las formulaciones de tipo micro-macro. En este artículo se utiliza una nueva aproximación, fundada sobre la noción de grupo de variantes y describiendo más finamente la microestructura obtenida en efecto memoria doble lado asistido (EMDSA). Se propone igualmente un nuevo criterio de selección de variante.

**Medida de deformación a la escala atómica en microscopio electrónico de alta resolución ..... 211**  
M.J. Hytch

Se describe un método de medida cuantitativa de los desplazamientos y de las deformaciones a la escala atómica en microscopio electrónico de alta resolución. La imagen está descompuesta en componentes periódicos caracterizados por análisis de Fourier. Se puede determinar así la amplitud local y la fase geométrica de las franjas correspondientes a los diferentes tipos de planos atómicos. El análisis de la fase de las franjas informa sobre la configuración local de la red. El método está ilustrado por diferentes ejemplos y sus condiciones de aplicación son discutidas.

**Corrosión de larga duración del hierro en los suelos arcillosos : estudio físico-químico y electroquímico de vestigios de la Primera Guerra Mundial ..... 223**  
E. Pons, L. Uran, S. Joiret, A. Hogot-Le Goff, C. Lemâtre, D. David

Los vestigios de la Primera Guerra Mundial han sido estudiados con el fin de comprender mejor los mecanismos de corrosión del hierro en los suelos arcillosos. La identificación de las dos capas de corrosión por espectroscopía Raman ha puesto en evidencia los óxido-hidróxidos y óxidos de hierro. Las experiencias electroquímicas han confirmado la porosidad de la capa externa y el papel protector de la capa interna. La influencia del medio de enterramiento sobre la velocidad de corrosión ha sido también demostrado.

## DEUTSCH

**Einführung zum Thema « Modellierung von Verfahren und Mikrogefüge Entwicklung als Vorbereitung von innovatorischen und zuverlässigen Entscheidungen » ..... 111**  
J.-F. Tiers

Während der Herbst Tagung der SF2M in 2001, fand eine Veranstaltung zum Gedenken von Jean Morlet, ehemaliger Präsident der Revue de Métallurgie, statt. Verschiedene Beiträge zu dieser Veranstaltung, die die Näherungsweise von Jean Morlet illustrieren, sind in dieser Ausgabe von Science et Génie des Matériaux zusammengestellt.

**Zusammenarbeit zwischen Universität – CNRS und Industrie, Jean Morlet, ein nachzuziehendes Vorbild ..... 113**  
G. Beck

Als Beitrag zur Gedächtnisveranstaltung für Jean Morlet, sind hier verschiedene seiner Anregungen zu einer fruchtbaren Zusammenarbeit zwischen Grundforschung und Industrie erwähnt: Erkennung und Auswertung der Grundkompetenzen die für den Fortschritt in der metallurgischen Industrie notwendig sind, Teilhaber und Förderer der öffentlichen Forschung, Anregung zu interdisziplinären Näherungen, aktives Mitglied der wissenschaftlichen Gemeinschaft.

**Die Modellierung als Werkzeug bei der Entscheidung einer industriellen Investition. Das Vorbild Jean Morlet ..... 119**  
G. Raison

Die Modellierung ist ein wirkungsvolles Instrument um industrielle Entwicklungen vorzubereiten und durchzuführen. Jean Morlet wendete die Modellierung weitgehend an und trug zur Entwicklung einer starken französischen Schule bei. Verschiedene Entwicklungsformen, die während der Laufbahn von Jean Morlet angewendet wurden, werden ausgehend von konkreten Verwirklichungen dargestellt und illustriert.

**Anwendungen der Thermodynamik bei der Herstellung von Stahl ..... 125**  
H. Gaye, M. Faral, J. Lehmann

Die Berechnungssoftware CEQCSI (Berechnung chemischer Gleichgewichte für das Eisenhüttenwesen) wurde von der IRSID auf Anregung von Jean Morlet entwickelt. Dieser Bericht siedelt CEQCSI auf dem Gebiet thermodynamischer Rechenprogramme mit starkem Wachstum an, analysiert die Auswirkung der bei Imphy gemachten Versuche auf die Modellentwicklung, legt einige Beispiele für seine industrielle Anwendung in der Sekundärmetallurgie und Beherrschung der Einschlüsse dar und erinnert schlussendlich an die eingeleiteten Entwicklungen in Bezug auf die Zusammenführung der thermodynamischen Kode mit den Berechnungen der Fließvorgänge (CFD) und den kinetischen Modellen.

**Entwicklung neuer Magnesium-Legierungen : thermodynamische Modellierung und Herstellung durch Giessen 135**  
A. Pisch, C. Antion, C. Tassin-Arques

Die Magnesium-Legierungen erfahren neuerdings zunehmendes Interesse auf dem Gebiet der Gewichtsverringerung von Strukturen. Ziel dieses Beitrags ist die Entwicklung neuer Sorten von Legierungen durch Anwendung thermodynamischer Gleichgewichtsberechnungen, um die vielversprechendsten Zusammensetzungen sowie Prozessparameter (Erstarrung, Wärmebehandlungen) im chemischen System Mg-Y-Sc-Mn zu definieren. Dazu wurden Proben durch Giessen hergestellt und analysiert, und die Ergebnisse sind in guter Übereinstimmung mit den Vorhersagen.

**Thermodynamik der Erscheinungen der Verdampfung und Kondensation in Vakuumgiessöfen für Superlegierungen** . 141  
M. Heyrman, C. Chatillon, C. Barat, S. Fargeas

Das Verstehen der chemischen Erscheinungen, die in den Giessöfen ablaufen, wurde mittels einer thermodynamischen Analyse angegangen. Die für das Giessen von Superlegierungen verwendeten keramischen Formen verdampfen bei hoher Temperatur unter Vakuum und die Dämpfe kondensieren danach in den kälteren Zonen des Ofens. Zusätzlich stört der Einfluss des Graphitmaterials des Ofenwiderstandes den Ablauf der Verdampfung der Formen und lässt andere Prozesse von Verdampfung und Kondensation entstehen. Der Ablagerungsverlauf, der zu Verunreinigungen während des Giessens des Metalls führt, wird verändert. Die thermodynamische Analyse wird durch Beobachtungen unterstützt, die an Giessöfen für Superlegierungen gemacht wurden. Die beobachteten und beschriebenen Ablagerungen entsprechen denen, die von der thermodynamischen Analyse vorhergesagt wurden, wogegen die Massenverluste der Formen, die diese Ablagerungen hervorrufen, ungefähr sechszigmal kleiner sind als vorhergesehen.

**Einfluss der Kornverfeinerung auf die Warmrissbildung von Aluminium-Kupfer-Legierungen für die Giesserei** ..... 157  
M. Braccini, M. Suéry, C. Laguerre, M. Stucki

Die Warmrissbildung oder der Warmriss bei Aluminium-Kupfer-Legierungen ist ein in der Giesserei vorkommender schwerer Fehler. Das Gefügefeinern dieser Legierungen ermöglicht ihre Rissempfindlichkeit zu verringern. Ziel dieser Untersuchung ist, die Mechanismen der Warmrissbildung und die Wirkung des Gefügesfeinens besser zu verstehen. Dazu wurden Versuche über die Rissanfälligkeit sowie Zugversuche im teigigen Zustand durchgeführt. Ausserdem wurde ein Modell entwickelt, dem die Keimbildung und das Wachstum eines Hohlraums in einem Flüssigkeitsfilm zu Grunde liegt, und das die Rheologie im teigigen Zustand berücksichtigt.

**Die Dimensionierung monokristalliner Turbinenschaufeln** 165  
G. Cailletaud, J.-L. Chaboche, S. Forest, L. Rémi

Nach einer kurzen historischen Beschreibung werden die verschiedenen Etappen der Lebensdauer vorhersage von monokristallinen Schaufeln beschrieben, wobei besonders auf die Berücksichtigung des Werkstoffverhaltens, die Mechanik der Schaufel und auf die Bedingungen der Berechnung unter realistischer Beanspruchung, zurückgegriffen wird. Die Verkettung der Berechnungen, durchgeführt mit dem ZéBuLoN Lösungskode, erlaubt zur Zeit die Risseinleitung, durch Nachbehandlung der dreidimensionalen elastisch-viskoplastischen Rechnungen, vorherzusagen.

**Modellierung der Phasenumwandlungen in hochfesten Stählen** ..... 173  
T. Lung, M. Kandel, D. Quidort, V. de Lassat

Im vorliegenden Modell werden die Phasenumwandlungen in Stählen mit Hilfe von thermodynamischen und kinetischen Gesetzen beschrieben und auf der Stufe des Austenitkorns angewendet. Eine einfache geometrische Behandlung liefert die umgewandelte Endfraktion. Die Wirkung der Zusammensetzung, des thermischen Ablaufs und der Austenitkorngrösse wird berücksichtigt. Die Vorhersagen des Modells werden mit den Versuchsergebnissen von verschiedenen Stählen verglichen. Die für Ferrit. Zwischenstufengefüge und die Korngrösse erhaltenen Ergebnisse sind ermutigend.

**Phasenumwandlungen in « erzwungenen » Legierungen** .. 183  
L. Chaffron, Y. Le Bouar, G. Saint-Ayes, G. Martin

Es wird der Begriff « erzwungene » Legierung eingeführt und dafür Anwendungsbeispiele angegeben. Systematische Versuche mit natürlichen Proben und auf dem Rechner zeigen, dass eine

Legierung unter Beanspruchung (Bestrahlung, Zerkleinerung, zyklischer Belastung) eine stationäre Konfiguration erreichen kann. Unter den Parametern, von denen diese Erscheinung abhängt, spielt die Intensität der Beanspruchung eine grosse Rolle. Die eingeführten Begriffe werden bei der Untersuchung des Verschleisses der Räder von Hochgeschwindigkeitszügen (TGV) angewendet. Dabei stellt man fest, dass die Verschleissgeschwindigkeit und die Ovalisierung der Räder proportional der Beanspruchung ist.

**Entwicklung der Rekristallisationstextur durch Mehrfachzwillingsbildung in INVAR (Fe-36 % Ni)** ..... 193  
T. Baudin, F. Julliard, R. Penelle

Die Verteilung der durch Mehrfachzwillingsbildung entstandenen Orientierungen wurde ausgehend von der Textur einer 70 % Prozent kaltgewalzten Probe aus Fe-36 % Ni simuliert und mittels Neutronenbeugung und EBSD bestimmt. In Übereinstimmung mit den Versuchsbeobachtungen, die im Verlauf des Rekristallisationsglühens vorgenommen wurden, neigt die simulierte Textur dazu isotrop zu werden. Darüber hinaus erlauben ebenso Experiment und Simulation, die Entwicklung von ungefähr drei Generationen von Zwillingen nach vollständiger Rekristallisation zu verifizieren. Schliesslich scheint offensichtlich zu sein, dass die zwei möglichen Varianten des Keimbildung – Wachstum Mechanismus für alle Bestandteile der Textur und die Mehrfachzwillingsbildung zur Entwicklung des isotropen Teils der Rekristallisationstextur beitragen können, wobei der zweite Mechanismus eine Hauptrolle zu spielen scheint.

**Modellierung des anisothermen Kriechens von Gedächtnislegierungen auf Kupferbasis** ..... 203  
C. Niclaeys, T. Ben Zineb, E. Patour

Das superelastische Verhalten von Gedächtnislegierungen ist jetzt gut modelliert. Im Gegensatz dazu bleibt das anisotherme Kriechen ungenügend beschrieben, weder durch die phänomenologischen Modelle, noch durch die Formeln vom Typ mikro-makro. In diesem Bericht wird eine neue Näherung angewendet, die auf dem Begriff der Varianten-Gruppe aufbaut und die beim doppelrichtungsaktivierten Gedächtniseffekt (EMDSA) erhaltene Mikrostruktur genauer beschreibt. Ebenso wird ein neues Auswahlkriterium für die Variante vorgeschlagen.

**Messung der Verformung im atomaren Maßstab mit dem Elektronenmikroskop hoher Auflösung** ..... 211  
M.J. Hytch

Es wird eine Methode für die quantitative Messung der Verschiebungen und Verformungen im atomaren Maßstab mittels der Elektronenmikroskopie hoher Auflösung beschrieben. Das Bild wird in periodische Elementarbestandteile zerlegt, die durch die Fourier-Analyse beschrieben werden. Ebenso lässt sich auch die lokale Amplitude und die geometrische Phase der Streifen bestimmen, die den verschiedenen Typen von Atomebenen entsprechen. Die Analyse der Phase der Streifen gibt Auskunft über die lokale Konfiguration des Gitters. Das Verfahren wird an verschiedenen Beispielen erläutert und seine Anwendungsbedingungen erörtert.

**Langzeitkorrosion von Eisen in Lehm Böden : Physikalisch-chemische und elektrochemische Untersuchung von Überresten aus dem Ersten Weltkrieg** ..... 223  
E. Pons, L. Uran, S. Joiret, A. Hugot-Le Goff, C. Lemaître, D. David

Überreste aus dem Ersten Weltkrieg wurden mit dem Ziel untersucht, die Mechanismen der Korrosion von Eisen in lehmhaltigen Böden besser zu verstehen. Die Identifizierung ihrer zwei Korrosionsschichten mittels der Raman-Spektroskopie führte zum Nachweis von Oxi-Hydroxiden und Oxiden des Eisens. Elektrochemische Versuche bestätigten die Porosität der äusseren Schicht und die schützende Rolle der inneren Schicht. Der Einfluss der Erdumgebung auf die Korrosionsgeschwindigkeit wurde ebenfalls nachgewiesen.