

# THÈSE

présentée et soutenue publiquement le **28 Février 2020**  
pour l'obtention du grade de

**Docteur de l'Université de Lorraine**

(Spécialité : Science des matériaux)

par

**Komlavi Sényo ELOH**

---

## FFT-based modelling of X-Ray Diffraction peaks : application to dislocation loops

---

### Composition du jury

Olivier THOMAS	Professeur, Université Aix-Marseille	Rapporteur
Djimédo KONDO	Professeur, Université Pierre et Marie Curie	Rapporteur
Istvàn GROMA	Professeur, Eötvös Loránd University, Budapest, Hongrie	Examineur
Lionel GELEBART	Ingénieur de recherche HDR, CEA Saclay	Examineur
Marie-Ingrid RICHARD	Ingénieur de recherche HDR, CEA et ERSF	Examineur
Alain JACQUES	Directeur de Recherche CNRS, Université de Lorraine	Directeur
Stéphane BERBENNI	Directeur de Recherche CNRS, Université de Lorraine	Co-directeur
Laurent CAPOLUNGO	Directeur de Recherche, Los Alamos National Laboratory, USA	Invité

---

Labex-DAMAS, Institut Jean Lamour — UMR CNRS 7198, LEM 3- UMR CNRS 7239  
Pôle M4 : Matière, Matériaux, Métallurgie, Mécanique

## Abstract

In this work, we propose and test an original numerical method of simulation of X-ray diffraction peaks by single crystals. This method is based on the use of Fast Fourier Transform (FFT) algorithms for the calculation of mechanical fields resulting from external loading and / or linear defects such as dislocation loops. These defects are modeled by stress-free strain fields (eigenstrains) in a periodic microstructure subjected to thermomechanical loadings.

In the first part, we present an improved approach by FFT-type algorithms which allows to accurately obtain the local mechanical fields without numerical oscillation at material's discontinuities. This improvement is due to the use of a discrete and periodic Green operator. This is obtained by solving the Lippmann-Schwinger equation in the Fourier space and using an appropriate spatial discretization. The fourth order modified Green operator allows to calculate the values of the strain and stress fields at all voxels. We also propose a third order periodic green operator to compute the displacement field. The computed displacement field is then corrected by a sub-voxelization method which removes the artifacts appearing in the case of dislocation loops inclined with respect to the reference grid. Numerical examples on reference cases show the effect of the Green operators for the calculation of local mechanical fields without oscillation and the efficiency of the sub-voxelization method. The final displacement field obtained is the input data of the simulation of X-ray diffraction patterns.

The method of simulation of X-ray diffraction peaks of FCC (Face-Centered Cubic) single crystals is then presented. The diffracting material is modelled by a representative volume containing dislocation loops in (111) slip planes. We calculate the amplitude then the intensity of the diffracted beam near a node of the reciprocal lattice. This 3D distribution of the diffracted intensity is processed to obtain 1D diagrams that will be analyzed.

The simulations demonstrate foremost the elimination of the artifacts on the diffraction diagrams which are due to the oscillations of the uncorrected mechanical fields. The diffraction peaks are analyzed by different statistical methods (Fourier transform of intensity, method of moments, etc.) which allow to evaluate the distribution parameters of dislocations (density, polarization factor, etc.) and to compare them with their theoretical values.

## Resumé

Dans ce travail, nous proposons et testons une méthode numérique originale de simulation de diagrammes de diffraction des Rayons X par des monocristaux. Cette méthode repose sur l'utilisation d'algorithmes numériques de type Transformée de Fourier rapide (Fast Fourier transform (FFT) en anglais) pour le calcul des champs mécaniques provenant de chargement extérieurs et/ou des défauts linéaires comme des boucles de dislocations. Ces défauts sont modélisés par des champs de déformation libres de contraintes (eigenstrains) dans une microstructure périodique soumise à des chargements thermomécaniques.

Dans la première partie, nous présentons une approche améliorée du calcul des champs mécaniques par les algorithmes de types FFT qui permet d'obtenir les champs mécaniques locaux de manière précise et sans oscillation numérique aux discontinuités. Cette amélioration est due à l'utilisation d'un opérateur de Green discret et périodique. Celui-ci est obtenu en résolvant l'équation de Lippmann-Schwinger dans l'espace de Fourier et en faisant une discrétisation spatiale appropriée. L'opérateur de Green modifié de degré quatre permet de calculer pour tous les voxels les valeurs du champ de déformations et de contraintes. Nous proposons aussi un opérateur de Green périodique d'ordre trois qui permet de calculer le champ de déplacement. Le champ de déplacement calculé est ensuite corrigé par une méthode de sous voxélisation qui supprime les artefacts apparaissant dans le cas des boucles de dislocations inclinées vis-à-vis de la grille de référence. Des exemples numériques sur des cas de références montrent l'effet des opérateurs de Green pour le calcul des champs mécaniques locaux sans oscillation et l'efficacité de la méthode de sous voxélisation. Le champ de déplacements final obtenu est la donnée d'entrée de la simulation de diagrammes de diffraction des rayons X.

La méthode de simulation des diagrammes de diffraction des Rayons X de monocristaux CFC est ensuite présentée. Le matériau diffractant est modélisé par un volume représentatif contenant des boucles de dislocations qui glissent dans des plans de types (111). Nous calculons l'amplitude puis l'intensité du faisceau diffracté au voisinage d'un nœud du réseau réciproque. La distribution 3D de l'intensité diffractée est ensuite traitée pour obtenir des diagrammes 2D et 1D qui seront analysés.

Les premières simulations démontrent tout d'abord la suppression des artefacts sur les diagrammes de diffraction qui sont dûs aux oscillations des champs mécaniques non corrigés. Les pics de diffraction sont analysés par différentes méthodes statistiques (transformée de Fourier de l'intensité, méthode des moments statistiques d'ordres supérieurs) qui permettent d'évaluer les paramètres de la distribution des dislocations (densité, facteur de polarisation, etc.) et de les comparer avec les valeurs théoriques.