

***CROISSANCE ET JOINTS DE
GRAINS***

I-1-Introduction :

La plasticité c'est la propriété que possède un matériau de pouvoir être déformé et de conserver la déformation acquise, après la suppression de l'effort qui l'a provoquée : la déformation est dite plastique.

Dans cette étude, on s'intéresse particulièrement aux procédés de mise en forme à froid par la déformation plastique, cette dernière entraîne des changements visibles de formes, des changements en plus de microstructure de propriétés physiques et mécaniques. Le contrôle de l'évolution de la microstructure joue un rôle important dans l'optimisation de ces propriétés pour contrôler la microstructure et restaurer la propriété que le métal possédait avant la déformation.

I-2- L'état de déformation :

A l'état de déformation, l'échantillon étudié subit une déformation plastique par laminage à froid. Dans le processus de mise en forme, l'étape de laminage à froid constitué de deux rouleaux tournant en sens inverse et dont l'écartement permet d'obtenir l'épaisseur de l'échantillon souhaitée. Figure (I-1) ; Le taux de laminage est défini par la relation suivante :

$$\varepsilon = \frac{l_0 - l_f}{l_0} \quad (\text{I.1})$$

Où : l_0 et l_f sont l'épaisseur initiale et finale de la tôle respectivement.

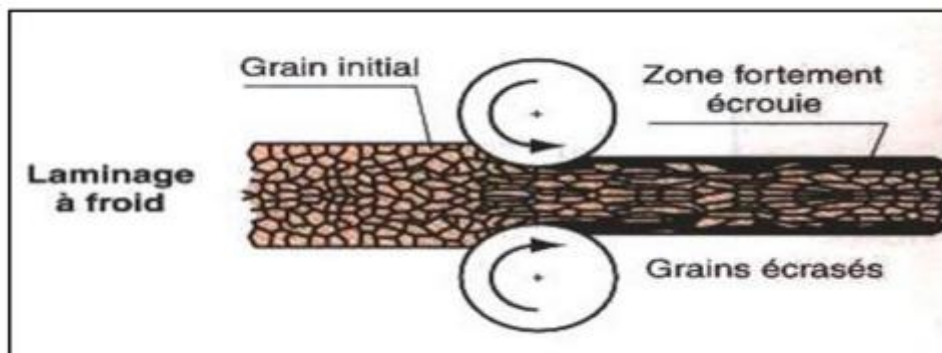


Figure (I-1) : Schéma de principe de laminage à froid [1].

Le laminage provoque des modifications des structures et influe directement sur les propriétés structurales du matériau, comme les changements morphologiques de l'ensemble des grains et les évolutions des orientations cristallographiques Figure (I-2).

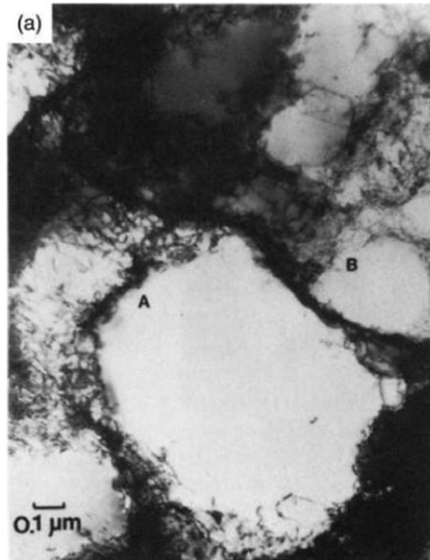


Figure (I-2) : une structure déformée [2].

La déformation plastique du matériau peut se produire grâce aux défauts linéaires et les dislocations, et essentiellement régit par le glissement de dislocations et renouvelée par le mécanisme de multiplication. En effet la déformation à froid entraîne une importante augmentation de la densité de dislocations sous forme d'énergie stockée, cette énergie est donnée par l'équation suivant : citée par [3]

$$E = E_{dis} + E_{sou-joint} \quad (\text{I-2})$$

$$E_{dis} = c\rho b^2 \quad (\text{I-3})$$

$$\text{et } E_{sou-joint} = \frac{\gamma_s \alpha}{R} \quad (\text{I-4})$$

c : une constance sans dimension de l'ordre 0.5

b : le vecteur de burgers ; R : rayon des sous-grains.

ρ : la densité de dislocation ; α : facteur géométrique

γ_s : L'énergie des sous-joints.

La création et la présence des dislocations est importante pour faciliter le mécanisme de déformation plastique donc, moins il ya de dislocations plus il ya de déformation possible.

Au cours de la déformation à froid, les dislocations s'organisent et se réarrangent pour former des configurations plus stables.

Toutes ces évolutions liées au taux de déformation et les conditions de déformation (la température, la vitesse et le mode de déformation) dont résultent la modification et le changement des formes des grains, ainsi qu'une influence sur le déroulement de la recristallisation.

I-3 - Diminution de l'énergie libre (Gibse) et la création des défauts :

Lorsqu' un matériau cristallin est déformé plastiquement, il crée une quantité importante de défauts, qui s'éliminent en grande partie, soit pendant la déformation (restauration) soit lors d'un recuit.

Lorsqu' on augmente la température, l'énergie libre peut baisser par la réduction et la réarrangement des défauts de réseaux et les atomes s'élèvent jusqu'à la barrière qui les sépare de l'état d'équilibre perdu lors de la déformation, toutes ces évolutions se produisent par certains processus qui diminuent l'énergie libre.

Les processus fondamentaux qui peuvent rapprocher le matériau à un état équilibre sont essentiellement les suivants :

- 1) - L'annihilation en particulier les défauts ponctuels.
- 2) - L'annihilation des dislocations de signes opposés et le rétrécissement des boucles des dislocations.
- 3) - le réarrangement des défauts et dislocations pour former des configurations énergétiques plus favorables (stables).
- 4) - L'absorption des défauts et dislocation par les joints des grains migrant à travers le métal.
- 5) - La réduction de la superficie totale de la frontière des grains.

Les processus(1) et (2) sont appelés restauration et le processus (4) et (5) représentent le phénomène de recristallisation (migration des joints à grand angle) alors que le processus (3) constitué le premier stade de recristallisation dit germination, cette dernière qui conduit à la formation des nouveaux joints de grains [4].

I-4-La restauration :

La restauration est un état qui permet de diminuer les défauts qui sont créés lors de la déformation plastique pour former des configurations énergétiques plus stables. Ce phénomène défini comme un processus thermique qui se produit dans le matériau déformé.

Au cours de cette étape, on n'a pas de création de nouveaux grains et sans migration des joints à grande angle .Il est également possible le recouvrement et le rétablissement des propriétés mécaniques ou physiques du matériau déformé (Figure I-3).

Le mécanisme de restauration permet un adoucissement du matériau par le réarrangement et l'annihilation des défauts cristallins et des dislocations.

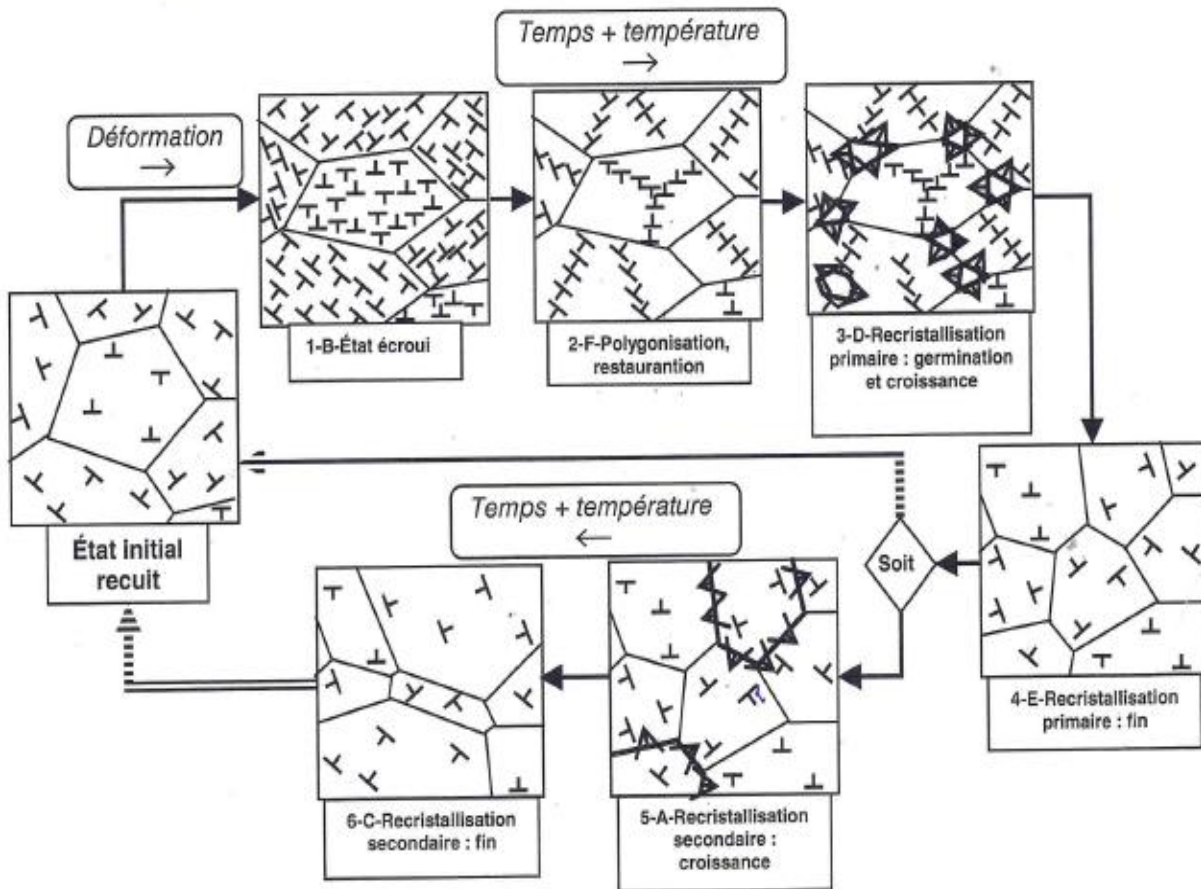


Figure (I-3) : les étapes de variation de la microstructure d'un métal qui subit un cycle d'écroutissage suivant de recuit [5].

La restauration se déroule en plusieurs étapes schématisées sur la figure (I-3). Ces étapes sont les suivantes :

- 1^{ère} étape : les dislocations et les défauts ponctuels sont regroupés et condensés dans des parois pour la diminution de la densité des dislocations (Figure I-4-a).
- 2^{ème} étape : lorsqu'on vous augmente la température (un chauffage), il ya réduction du nombre de dislocations de signes opposés dans les parois par annihilation, cette étape est appelée "polygonisation" (Figure I-4-b). Dans ce cas les dislocations s'arrangent dans une configuration énergétique plus stable formant des sous joints (joints de grains à faible angles (Figure I-4-c) [4].

Toutes ces évolutions de la phase de restauration sont liées et affectées par le taux de déformation, la température et les propriétés ou les caractéristiques des matériaux.

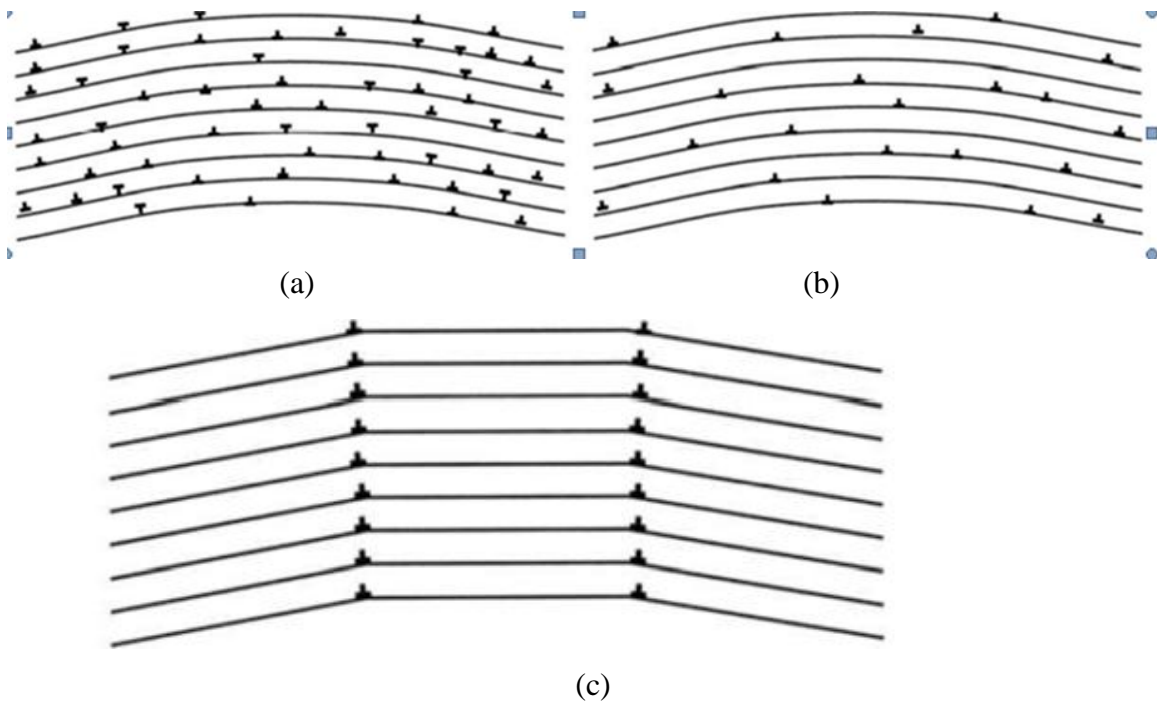


Figure (I-4): Polygonisation d'un cristal contenant des dislocations coin :
(a) Après déformation, (b) après annihilation des dislocations,
(c) formation de joints de flexion [2].

I-5-La recristallisation :

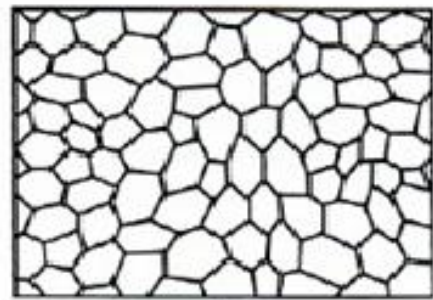
La recristallisation se traduit par la formation de nouveaux grains et migration des joints de grains à fortes désorientations. Ce phénomène nécessite un matériau déformé plastiquement et une énergie suffisante pour produire des germes et également soumis à l'action de l'énergie stockée de déformation qui permet la migration des joints grains figure (I-5). L'énergie emmagasinée joue un rôle très importante dans le mécanisme de recristallisation, elle influe considérablement la mobilité des joints de grains.

La recristallisation d'un matériau déformé est divisée en deux étapes : la germination et la croissance des germes. La germination est la formation de petits volumes ou la composition des cristaux à faible densité de dislocations et une énergie plus stable ; les germes qui sont formés sont abordés par des joints à grand angle à l'intérieur de la matrice déformée [2].

Les germes étant formés lors de la recristallisation se poursuit par une migration des joints de grains à travers de la matrice déformée sous l'action de l'énergie. Cette étape conduit à la croissance des germes



a) état déformé



b) état recristallisé

Figure. I-5 : Représentation schématique de : a) état déformé, b) état recristallisé.

Carpenter et Elem [6] montrent que la croissance se produit par migration de joints et non par la coalescence.

Avec l'hypothèse précédente, Burke et Turnbull [7] montrent que la vitesse de croissance normale suit une loi parabolique. Dans le cas d'un métal pur, la vitesse de migration d'un joint de grains est reliée à la force motrice par :

$$v = F \cdot m \quad (\text{I-5})$$

Où m et F la mobilité du joint de grain et la force par unité d'aire de joint.

Dans le processus de recristallisation, il existe une structure microscopique reconstruite non pas de façon aléatoire, mais dans une direction préférée.

I-6-La croissance normale :

La croissance normale des grains est une croissance uniforme de nouveaux grains recristallisés, elle est classée comme un processus continu de recristallisation primaire. Ce dernier phénomène se termine lorsque le matériau déformé (écroui) est consommé, dans ce cas le matériau devient stable.

Si le matériau est conservé à haute température, la microstructure du matériau se met à une croissance homogène des grains, conduisant à un grossissement uniformément de ces derniers ; La taille moyenne de ces grains croît de façon continue.

Le mécanisme de croissance est contrôlé par la migration des joints de grains et la réduction de l'énergie totale du joint de grain qui représente la force motrice pour provoquer cette migration. Les joints de grains continuent leur migration dans la structure recristallisée,

en diminuant l'excès d'énergie due à leur courbure. Généralement, les joints des grains courbés migrent vers le centre de courbure.

Dans ce cas, la vitesse de la croissance normale est inférieure à celle de la recristallisation primaire et la structure a tendance à être complètement homogène (figure I-6).

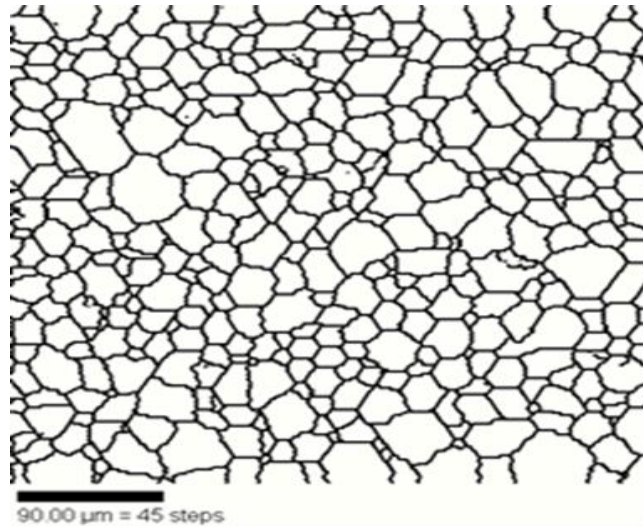


Figure. I-6 : croissance normale des grains.

I-6-La croissance anormale :

Lorsqu'on poursuit à l'augmentation de la température après la recristallisation totale, cette dernière est suivie d'un réarrangement de structure ; au cours duquel, un petit nombre de grains grossissent au dépend d'autres et certains grains de petites tailles disparaissent.

Les grains produits pendant la recristallisation sont caractérisés par une certaine orientation cristallographique, vont commencer par une croissance soudaine ; d'où le nom souvent utilisé la croissance anormale ou exagérée. Dans ce cas, la structure du matériau est constituée de deux familles des grains de grosseurs différentes jusqu'à ce que les nouveaux cristaux occupent et envahissent toute la structure, pour cela la distribution granulométrique est bimodale développée voir figure (I-7).

Lorsque la croissance normale est bloquée, il peut se produire une croissance anormale d'un petit nombre des grains au détriment des autres, alors les joints de grains en croissance migrent dans la direction de leur centre de courbure à l'aide de force motrice de mouvement de joints des grains, ce processus se poursuit jusqu'à la taille moyenne d'équilibre. Voir les figures (I-7) et (I-8).

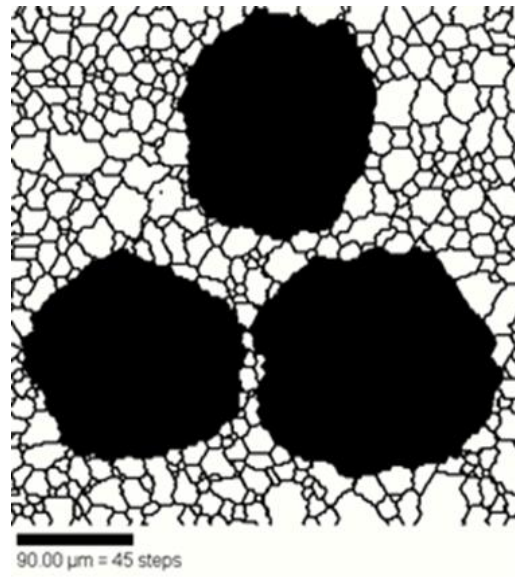


Figure. I-7: Croissance anormale des grains.

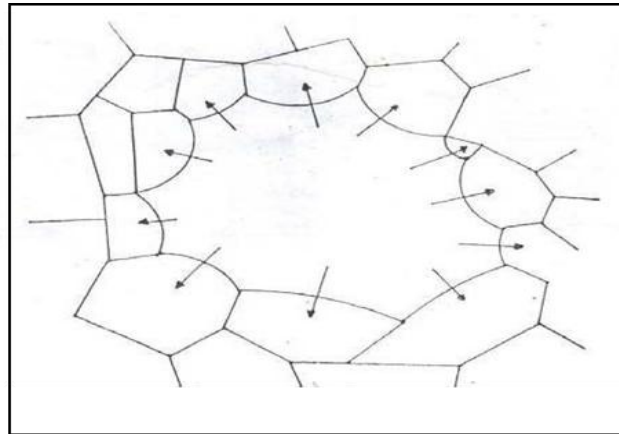


Figure I-8 : Evolution du grain de la croissance anormale [8].

I-7-L'orientation des grains :

Dans le cas d'une croissance, où les deux grains délimitant le joint possèdent une orientation, ce dernier résulte de la cinétique des deux grains qui est plus élevée pour le grain le moins désorienté.

L'orientation d'un grain sera déterminée par la connaissance des angles que font les plans de réseaux associés à une maille cristallographique élémentaire d'un grain du matériau avec des plans ou des directions fixes par rapport à l'échantillon.

Plusieurs notations sont employées pour décrire les orientations cristallines. En général, elles sont décrites par une rotation du repère de laminage (R_L) vers le repère du cristal (R_C) voir figure (I-9).

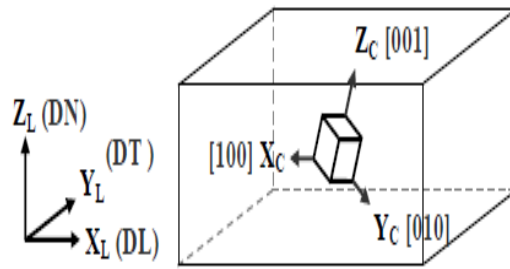


Figure I-9 : Le référentiel échantillon (X_L, Y_L, Z_L) ou (DL, DT, DN) et le référentiel cristal (X_C, Y_C, Z_C).

Les plus couramment utilisées dans la représentation des orientations cristallographiques sont :

➤ Les indices de Miller qui sont décrits par :

-la détermination du plan $\{h k l\}$ parallèle au plan de laminage (DL, DT).

-La donnée de la direction $\langle u v w \rangle$ parallèle à la direction de laminage (DL).

Les orientations sont notées $g = \{h k l\} \langle u v w \rangle$ où $h k l u v w$ sont les indices de Miller.

➤ Comme exemple de représentation d'une orientation d'un grain, on cite la notation de Bunge [9] définie par les trois angles d'Euler $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ avec l'ensemble de trois rotations permettant d'orienter le repère associé à l'échantillon (O, DL, DT, DN) avec celui associé au cristallite (O, X, Y, Z) figure(1-10) ; ces orientations sont :

-la rotation autour de l'axe OZ d'un angle φ_1 .

-la rotation autour de l'axe OX' d'un angle Φ .

- la rotation autour de l'axe OZ' d'un angle φ_2 .

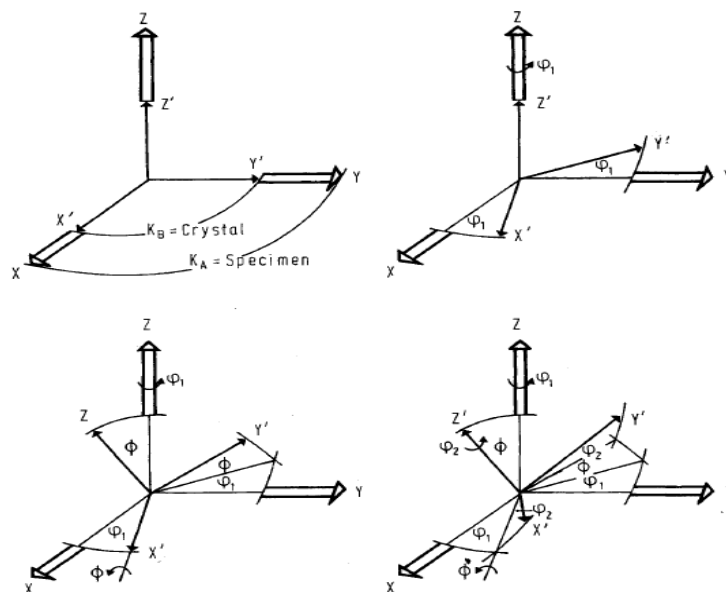


Figure. I-10 : Définition des trois angles d'Euler [9].

I-7-La désorientation entre deux grains :

La désorientation peut être représentée comme une rotation qui permet de créer une différence de position entre deux grains adjacents g_1 et g_2 , elle est caractérisée par la rotation d'angle θ autour de R (figure I- 11). Les indices de l'axe R sont les mêmes dans les deux cristaux (axe géométrique commun aux deux réseaux).

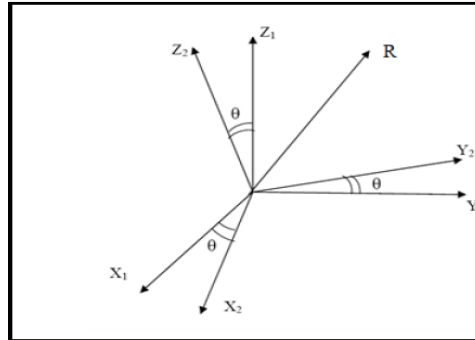


Figure I-11 : Axe et angle (R, θ) de désorientation entre deux grains.

Cette rotation uniquement définie la matrice d'orientation g_1 par rapport à la matrice de désorientation R :

$$R = g_1 \cdot g_2^{-1} \tag{I-6}$$

$$R = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \tag{I-7}$$

L'angle de rotation donné par [2] :

$$2 \cos \theta + 1 = a_{11} + a_{22} + a_{33} \quad \text{et} \tag{I-8}$$

$$\theta = \arccos \left(\frac{(a_{11} + a_{22} + a_{33}) - 1}{2} \right) \tag{I-9}$$

Les indices de l'axe de rotation [u v w] sont définis à partir des éléments R_{ij} de la matrice R par :

$$u = a_{32} - a_{23}$$

$$v = a_{13} - a_{31}$$

$$w = a_{21} - a_{12}$$

L'étude de la désorientation entre deux cristaux dans une microstructure est importante pour évaluer les propriétés des joints de grains.

I-8-Les Joints de grains :

Les joints de grains sont des éléments majeurs constitutifs des matériaux cristallins, ils sont à la fois des sources et des pièges pour les défauts et les dislocations. Le joint de grain

est défini comme étant l'interface entre deux cristaux ou une région qui sépare deux réseaux cristallins de même nature et d'orientation cristallographique différente.

Dans la microstructure d'un matériau, deux grains adjacents ont des orientations différentes, les atomes localisés dans les joints accommodent leurs positions en répulsion avec les atomes appartenant aux grains voir figure (I-12). Ceci est une description générale d'orientation des joints de grains [10].

La géométrie globale des joints de grains est décrite par l'orientation du plan de joint par rapport à l'un des deux cristaux (deux degrés de liberté) et par la petite rotation nécessaire pour les faire coïncider. Donc pour caractériser la désorientation il faut trois degrés de liberté.

En fonction de la position de l'axe de rotation par rapport au plan de l'interface il existe deux catégories de joints :

- L'axe de rotation est perpendiculaire au plan de joint.
- L'axe de rotation est parallèle au plan de joint.

Donc, pour caractériser l'ensemble des joints de grains, nous étudions nécessairement la distribution de désorientation (l'axe et l'angle de rotation).

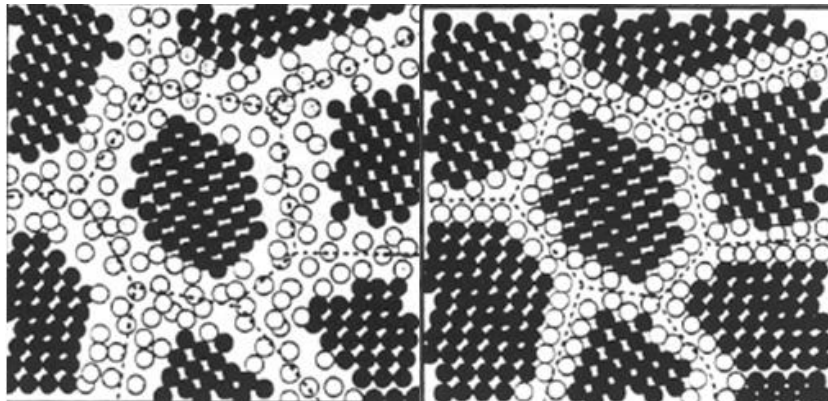


Figure I-12 : types de configurations des atomes dans les joints de grains [10].

I-9-Types des joints de grains :

La caractérisation d'une structure d'un joint de grain est souvent simplifiée en prenant seulement la désorientation qui est constituée d'un angle et l'axe commun de rotation. Suivant la désorientation on classe les joints de grains en quatre types :

- Les joints à faible angle (LA : Low angle)
- Les joints C.S.L (Coincidence Site Lattice)
- Les joints CAD (Coincidence Axis Directions)
- Les joints à grand angle

I-10-Les joints à faible angle (LA : Low angle)

Les joints de grains à faible angle ou sous joint peuvent être représentés par une série de dislocations. Au point de vue énergétique ; l'énergie de joint est une propriété qui dépend de sa structure, donc pour la description des joints à faible angle Read et Shokeley [11] ont proposé un modèle pour évaluer l'énergie des sous joints en fonction de leur structure (décrite en terme de dislocation) et de leur désorientation.

L'énergie de joint à faible angle est donnée ci dessous par Read-Shockley [12]:

$$\gamma = \gamma_0 \theta (A - \ln \theta) \quad (\text{I-10})$$

$$\text{Avec } \gamma_0 = Gb / 4\pi(1 - \nu) \quad (\text{I-11})$$

$$\text{Et } A = 1 + \ln \left(\frac{b}{2\pi r_0} \right) \quad (\text{I-12})$$

Où G : module de cisaillement.

b : vecteur de Burgers.

r_0 : rayon de courbure de dislocation.

ν : le coefficient de poisson

Et θ l'angle de désorientation du joint, donné par $\theta = b/h$

h : la distance séparant deux dislocations (figure I-13).

Dans le cas général, par exemple, à un joint de torsion sont liés deux cristaux par une faible désorientation ; ces derniers peuvent être liés par deux ensemble des dislocations vis de même signe et forment les joints à faible angle [2] (figure I-14).

Ce type de joint à faible angle correspond à des minima de désorientations $\theta < 15^\circ$.

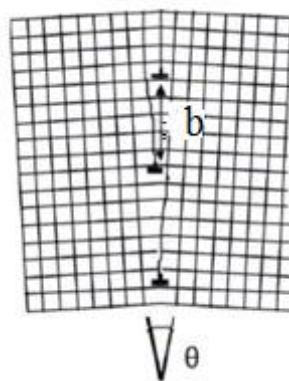


Figure. I-13 : Représentation schématique d'un joint de grain de flexion avec désorientation θ et la distance moyenne entre deux dislocations [12].

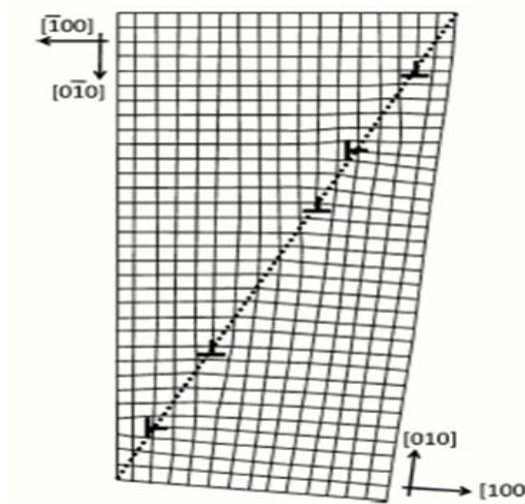


Figure I-14 : un joint à faible angle .

I-11-Les joints CSL (Coïncidence Site Lattice)

Dans les études des types des joints de grains à grand angle, pour certains axes de rotation et angles de désorientation, certaines positions d'atomes du grain I coïncident avec les positions de certains atomes du grain II, donc il est possible d'observer des sites communs aux deux cristaux qui se superposent .Ces joints de grains sont appelés les joints de coïncidence (Coïncidence site Lattice) figure(I-15) .

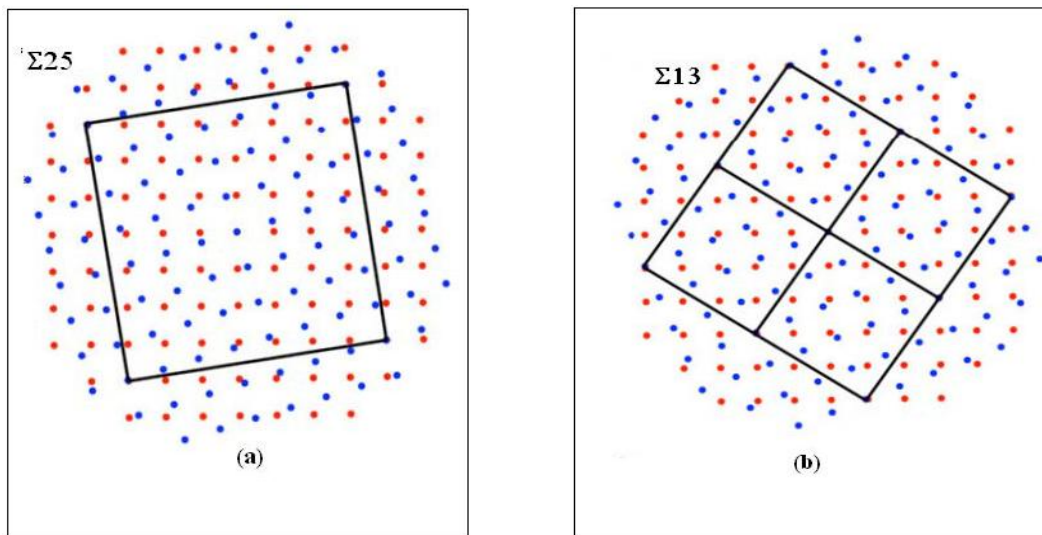


Figure I-15 : Réseau de coïncidence C.S.L (a) $\Sigma 25$, (b) $\Sigma 13$.

Le degré de coïncidence Σ est défini par la densité des sites de coïncidence par rapport au site de cristal. Ou bien par le rapport du volume de la maille de réseaux de coïncidence à celui de la maille de base [13], on a donc :

$$\Sigma = \frac{\text{volume de la maille coïncidence}}{\text{volume de la maille primitive de cristal (ou II)}} \quad (\text{I-13})$$

Et pour un joint de type C.S.L $\Sigma < 25$ [14].

I-12-Les joints CAD (Coïncidence Axis Lattice) :

Dans la classe de joints de grains à faible angle, il y a des joints qui ne peuvent pas être classés de type CSL, ces joints de grains possèdent un axe de désorientation à faibles indices et un angle de désorientation spéciaux. Ces joints de grains sont appelés les joints de coïncidence (Coïncidence Axis Lattice).

I-13-Les joints de grains à grand angle

En raison de la structure de joints de grains à grand angle, on estime que son énergie serait la plus grande et indépendante de la désorientation [15].

Quand la distance entre les dislocations s'approche de la distance interatomique la structure de joints de grains devient très désordonnée, il n'y a presque plus de cohérence entre les deux grains adjacents. A partir de là, on parle de joints de grains à grand angle.

CHAPITRE II
MODELES DE SIMULATION ET
MODELISATION DE LA
CROISSANCE CRISTALLINE

II -1-Introduction :

Ce chapitre sera essentiellement consacré à la modalisation et à la simulation de la croissance des grains. Les moyens informatiques actuels ont donné un essor considérable aux méthodes de simulations de l'évolution de la microstructure.

Donc, nous présentons les différentes théories de croissance (modèle statistique et déterministe) et un rappel des techniques utilisées pour la simulation de la croissance des grains telles que : le modèle de vertex, l'automate cellulaire, méthode Monté Carlo. Ces techniques commencent à prendre une part de plus en plus importante en recherche.

II- 2- Modélisation et croissance des grains :

Le problème de la migration des joints de grains est compliqué. L'objectif de toute théorie de croissance des grains étant de prédire au premier ordre l'évolution de la microstructure granulaire, la modélisation doit être cohérente avec l'observation expérimentale. Dans les années 1950, les premières tentatives de la théorisation ont été de suivre la croissance des grains, ainsi Smith [16] établit que la force motrice pour la migration des joints de grains au cours de la croissance est l'énergie de joint.

En 1952, Burke et Turnbull[Burke et Turnbull, 1952] [7] montrèrent que la vitesse de croissance normale suit la loi parabolique. En supposant par hypothèse que le joint de grain migre vers son centre de courbure pour réduire son énergie [17].

La vitesse de migration est définie par la relation suivante :

$$V = MP \tag{II-1}$$

où : V est la vitesse du joint de grain, M est la mobilité du joint de grain et P est la pression motrice.

La pression P est proportionnelle à la courbure du joint :

$$P = \gamma \left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} \right) \tag{II-2}$$

Où γ est l'énergie du joint. r_1 et r_2 sont les rayons de courbure principaux de surface du joint.

Si le joint est assimilé à une sphère $r_1=r_2$ Burk et Turnbule supposèrent en outre que :

- l'énergie du joint γ est la même pour tous les joints et qu'elle est indépendante de la taille de grains et du temps.

Le rayon de courbure du joint, r est proportionnel au rayon moyen des grains R.

$-\frac{dR}{dt}$ est proportionnel à V. En conséquence :

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\alpha\gamma}{R} \quad (\text{II-3})$$

En supposant que α est une constante géométrique, on obtient après intégration :

$$R^2(t) - R^2(t=0) = \alpha\gamma t \quad (\text{II-4})$$

où $R(t=0)$ est le rayon moyen des grains au temps $t=0$.

Si $R^2(t=0)$ est négligeable par rapport à $R^2(t)$, alors : $R^2(t) = kt$ ou $R(t) = kt^{1/2}$

De façon générale

$$R(t) = k t^n \quad (\text{II-5})$$

n est l'exposant cinétique, il est proche de 0.5.

k est un constant.

Expérimentalement l'exposant n de cette loi de croissance diffère de 0.5. Dans le cas de métaux de haute pureté (Al, Fe, Pb, Sn) les valeurs sont comprises entre 0.25 et 0.43, cet écart à la valeur 0.5 pourrait être dû à des variations de la mobilité des joints de grains liés au freinage par les impuretés, à la présence d'une texture ou l'anisotropie d'énergie des joints [4].

Plusieurs modèles ont été proposés à la description de Burk et Turnbull. Ces derniers sont divisés en deux catégories : les modèles statistiques et les modèles déterministes.

II-3-Modèles statistiques :

Le processus de base lors de la croissance des grains qui est entraînée par les forces capillaires est l'élimination des joints de grains. Dans un système à volume constant, ceci est obtenu cinétiquement par le rétrécissement des petits grains et la croissance des gros grains. Les théories de la croissance normale des grains traitent ce processus comme un processus continu [18].

L'approche statique du champ moyen traite le changement de taille d'un grain donné, noyé dans un milieu qui représente le comportement moyen de l'ensemble des grains. Comme au cours de la croissance normale, il y a augmentation de la taille moyenne des grains et diminution du nombre de grains, ces théories considèrent l'évolution temporelle de la fonction de distribution de taille $F(R, t)$. Donc la croissance est décrite par des paramètres mesurés statiquement qui s'inspirent directement des caractéristiques de l'évolution des grains.

II-3-1 Modèle de Hillert:

Ce modèle est similaire à celui proposé par Lifshitz et Slyzov [19]. La théorie de Hillert [20] lie les conditions d'apparition d'une croissance anormale à la répartition des tailles de grains dans l'échantillon et la présence d'impuretés. Il a montré la possibilité de croissance anormale pour des grains faisant partie initialement des plus petits grains de la matrice. Cela a été réalisé après les observations expérimentales sur les tôles magnétiques Fe 3%- HiB.

Le modèle de Hillert suppose que la vitesse de croissance d'un grain dépend de sa taille R par rapport à la valeur critique R_C . Ainsi, la vitesse de croissance à un instant donné s'écrit :

$$\frac{dR}{dt} = \alpha m \gamma \left(\frac{1}{R_C} + \frac{1}{R} \right) \quad (\text{II-6})$$

Où α est un facteur géométrique. m et γ sont respectivement la mobilité et l'énergie des joints de grains.

Hillert introduit sa loi de croissance dans l'équation de continuité qui s'écrit :

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial R} \left[F(R, t) + \left(\frac{dR}{dt} \right) \right] = 0 \quad (\text{II-7})$$

et résout cette équation en 2 et 3 dimensions.

Dans son modèle, Hillert prévoit une croissance normale pour une taille de grains suffisamment faible. C'est à dire pour une taille moyenne des grains inférieure à une taille critique R_{C1} . Pour une taille moyenne assez grande, supérieure à une valeur critique R_{C2} , la matrice devient stable en présence des particules de la seconde phase. Il existe donc deux rayons critiques. Les grains entre les deux tailles critiques $R_{C1} = 1/3Z$ et $R_{C2} = 1/2Z$ vont croître exagérément, où Z est le terme de Zener avec $Z = \frac{3f}{r}$, f la fraction volumique des particules de taille R . et r le rayon de courbure de la surface du joint de grain.

Hillert montre que son modèle permet le déclenchement de la croissance anormale des grains si trois conditions sont remplies simultanément :

- 1)- la croissance normale inhibée par des particules de la seconde phase.
- 2)- la taille des grains moyenne a une valeur inférieure à $1/2Z$.
- 3)- il y a au moins un grain plus grand que la moyenne.

Hillert traite aussi l'effet des particules d'une seconde phase qui jouent un rôle déterminant dans le cas d'une croissance anormale des grains. Il introduit la force de freinage de Zener

dans l'équation (II-6) qui s'écrit alors :

$$\frac{dR}{dt} = \alpha m\gamma \left(\frac{1}{R_c} + \frac{1}{R} \right) \pm \frac{Z}{\alpha} \quad (\text{II-8})$$

le signe doit être choisi de telle sorte que la contrainte de répulsion agit contre le mouvement du joint, le signe négatif implique $\frac{1}{R} < \frac{1}{R_c} - \frac{Z}{\alpha}$ et le signe positif $\frac{1}{R} < \frac{1}{R_c} + \frac{Z}{\alpha}$.

II-4-Modèles déterministes :

Ces modèles décrivent la croissance, en tenant compte de l'influence des positions relatives des grains. Ces positions s'obtiennent à l'aide des équations de mouvement dans l'espace réel, le comportement à travers le temps sera uniquement une conséquence des règles déjà établies. L'avantage de ces modèles est la multiplicité des conditions physiques imposées à l'échelle des grains. Ces modèles sont en général limités, à cause du nombre important de variables qui doivent être prises en compte même à l'échelle des grains.

II-4-1Modèle de Hunderi et Ryum :

Hunderi et Ryum [21] [22] développèrent un modèle qui prend en compte l'influence des positions relatives des grains. Ce modèle permet d'élaborer un modèle déterministe, ce dernier peut facilement être utilisé pour prédire la croissance anormale à une chaîne linéaire de bulles, une bulle i est connectée avec un nombre de bulles $(i-n)$ à $(i+n)$ bulles voir Figure (II-1). Dans une bulle de rayon R_i , la pression interne P_i est égale à :

$$P_i = \frac{2\alpha}{R_i} \quad (\text{II-9})$$

Si les bulles ne sont pas toutes de tailles égales, des différences de pression existent entre les bulles, cela conduit un transfert de la matière entre les bulles [23]. Plus le grain est petit plus il est apte à disparaître, puisque la pression est grande.

Un grain i est connecté uniquement à deux voisins, la différence de pression nette dans le grain s'exprime donc :

$$\Delta P_{int} = 2\alpha \left(\frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_{i-1}} \right) + 2\alpha \left(\frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_{i+1}} \right) \quad (\text{II-10})$$

où R_{i+1} , R_{i-1} sont les rayons des grains voisins .

Chapitre II : modèle de simulation et modélisation de la croissance cristalline

Si nous admettons que la variation de volume du grain i est proportionnelle au transfert de matière, nous avons :

$$\frac{dV}{dt} = m\Delta P_{int} \quad (\text{II-11})$$

Où m est une constante de proportionnalité.

Donc, le taux de croissance d'un grain i est :

$$\frac{dR}{dt} = 4m\alpha \frac{1}{R_i^2} \left[\frac{1}{R_i} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_{i-1}} + \frac{1}{R_{i+1}} \right) \right] \quad (\text{II-12})$$

Pour une chaîne de N bulles, il faut résoudre le système de N équations de type (II-1). L'ensemble des équations couplées N a maintenant été résolu sur un ordinateur pour donner la taille de chaque grain ainsi que la distribution de la taille des grains en fonction du temps. Cela a été fait pour une boucle de 3500 grains.

Les auteurs ont introduit des modifications sur le modèle, en tenant compte des deux points Précédents (figure II-2). La surface de contact d'un grain i avec ses voisins doit toujours Suivre la relation :

$$A_i = \sum_{j=1}^{j_{\max}} A_{ij} = 4\pi R_i^2 \quad (\text{II-13})$$

Où A_i : est l'aire du grain i .

A_{ij} : est l'aire de contact du grain i avec le grain j .

R_i : est le rayon du grain i .

j_{\max} : est le nombre maximal de voisin que peut avoir le grain i .

En conclusion, les approches adoptées pour résoudre le problème de recristallisation et de croissance mènent à des résultats différents, parfois contradictoires, le plus souvent complémentaires.

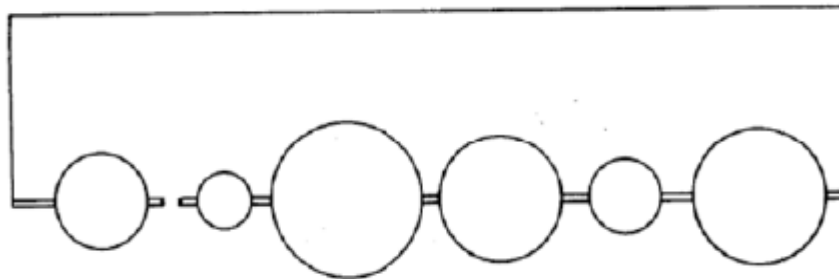


Figure II-1 : Modèle de bulles connectées proposé par Hunderi et al [23].

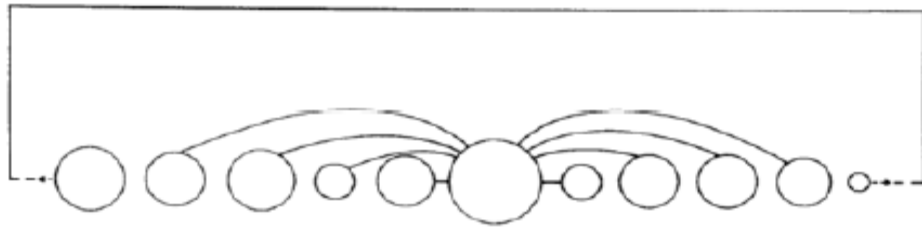


Figure II-2 : Modèle des bulles connectées : le grain i est connecté à nombre donné de proches voisins [21].

II-5 -Rôle de la topologie :

Dans toutes les théories qui traitent l'évolution de la distribution en taille et de la taille moyenne des grains, C. S. Smith [16] fut le premier à souligner l'importance du rôle joué par la topologie pour la croissance des grains et à définir des conditions topologiques. Ainsi en 2D, Smith établit une relation entre le nombre de polygones P , le nombre des cotés E et le nombre des sommets C d'un grain tel que :

$$P-E+C = 1$$

De plus, en moyenne un grain est entouré par 6 joints à 120° . Un grain possédant 6 côtés aura tendance à disparaître et s'il en possède plus de 6 il aura tendance à grossir (Figure II-3).

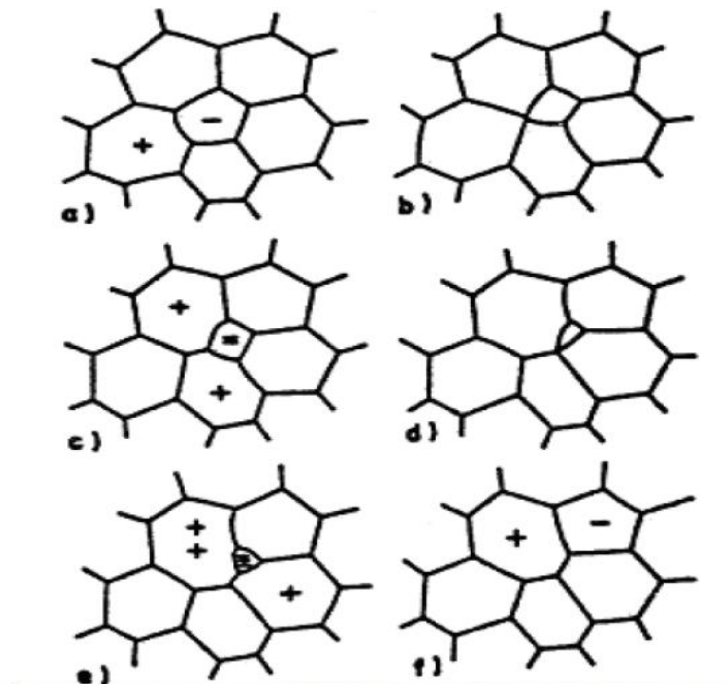


Figure II-3 : Disparition des grains ayant moins de 6 côtés [4].

Les deux processus topologiques fondamentaux qui se produisent en 2D sont l'échange de voisins et la disparition de grains (figure II- 3a) se produit lorsque deux sommets (deux points triples) se rencontrent le long d'un côté (joint) puis se séparent dans une direction perpendiculaire. La disparition d'un grain se produit lorsque trois sommets voisins entre eux se rencontrent pour former un seul sommet voir figure II-4.

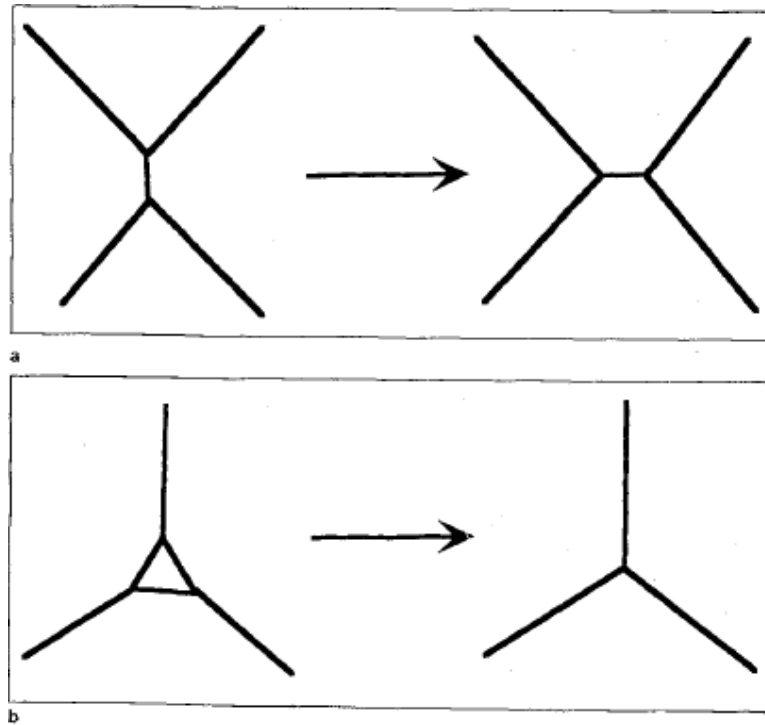


Figure II-4 : les changements topologiques en croissance des grains (2D) [24].

II-6 Techniques de simulation :

Les techniques de simulation numérique reposent sur la mise en œuvre de modèle théorique utilisant souvent la technique des éléments finis. Cette technique est amenée à prendre une part de plus en plus importante en recherche. Pour mieux suivre l'évolution de la microstructure d'un matériau au cours du temps. Il est donc important de simuler cette évolution pour connaître à priori les futures propriétés.

Il existe plusieurs méthodes de simulation dont leur utilisation dépend de l'échelle sur laquelle on travaille comme le montre la figure (II-5), Nous citons les plus utilisées.

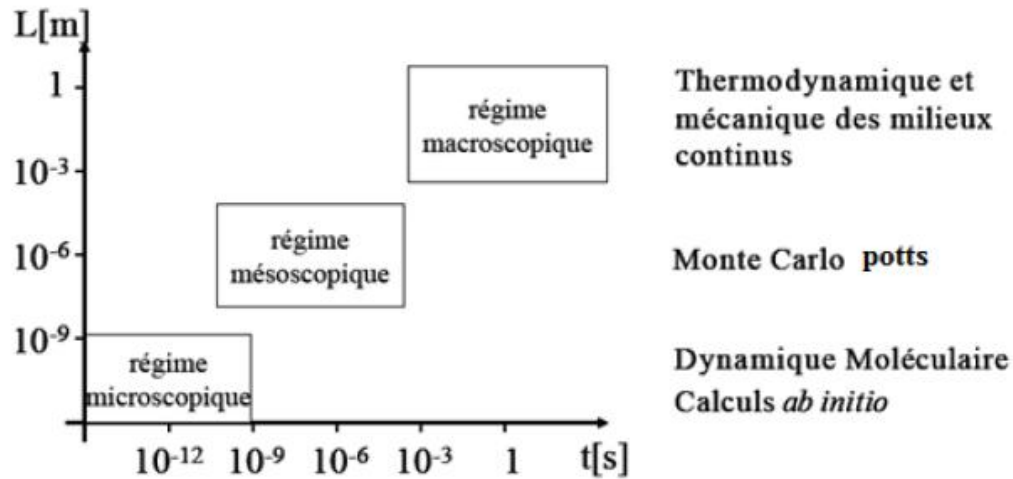


Figure II-5 : principales techniques utilisées en simulation.

Les propriétés d'un ensemble d'atomes ou de particules sont déterminées en étudiant la trajectoire de chaque particule $L(m)$ au cours du temps $t(s)$.

II-6-1-La dynamique moléculaire :

C'est une méthode de simulation ou modélisation physique d'un système à l'échelle atomique via la description de mouvements des atomes ou molécules qui le composent.

Le point de départ de la dynamique moléculaire est une description microscopique fine d'un système physique. Dans cette technique de simulation, chaque atome de la molécule est considéré comme une masse ponctuelle dont le mouvement est déterminé par l'ensemble des forces exercées sur lui par les autres atomes en fonction du temps. Elle consiste à calculer l'évolution temporelle des positions « r_i » et des vitesses « v_i » d'un système composé de N atomes en interaction [25], L'objectif principal de la DM consiste à calculer les propriétés statiques ou dynamiques d'un système, en utilisant les équations de mouvement et leurs solutions obtenues par des méthodes numériques.

En croissance, il s'agit de déterminer le transfert d'atomes à travers les joints, en spécifiant les lois d'interaction qui poussent les atomes à rejoindre les états énergétiques les plus stables.

Elle est aussi couramment utilisée dans les processus dynamiques, telles que les collisions et elle est efficace aussi pour traiter les défauts, les surfaces et les interfaces entre autres.

II-6-2 modèle de vertex :

Kawazaki et ses collègues [26] ont développé plusieurs modèles différents pour la croissance des grains. Parmi ces modèles ils ont appliqué le modèle de vertex en 2 D puis en 3D. Cette technique est basée à décrire l'évolution d'une microstructure par le mouvement de sommets (point triple 2D et point quadruple 3D), avec une variété d'hypothèses sur les comportements des forces sur chaque sommet.

Pour s'approcher de la réalité des joints de grains, des vertex virtuels ont été ajoutés entre les sommets.

Humphreys [27] a étendu le mouvement des sommets pour construire un premier stade de la recristallisation, c'est à dire la génération de nouveaux grains. Ce modèle permet de considérer différentes mobilités et énergies aux frontières. Les résultats du modèle ont montré que l'exposant cinétique de la croissance est considérablement plus faible que 0.5, en utilisant des joints à faible angle, ce qui a été attribué à la diminution de la mauvaise orientation moyenne qui s'est produite pendant le recuit.

Chaque sommet est caractérisé par sa position et sa vitesse, l'évolution de la microstructure est due au mouvement des sommets (figure II-6) Les sommets se déplacent en raison des forces agissant sur chacun d'eux, ces forces résultent de l'énergie totale de surface des joints de grains et de la dissipation de l'énergie due aux forces de freinage qui s'opposent au mouvement des joints de grains (l'effet d'épinglage par des particules de second phase).

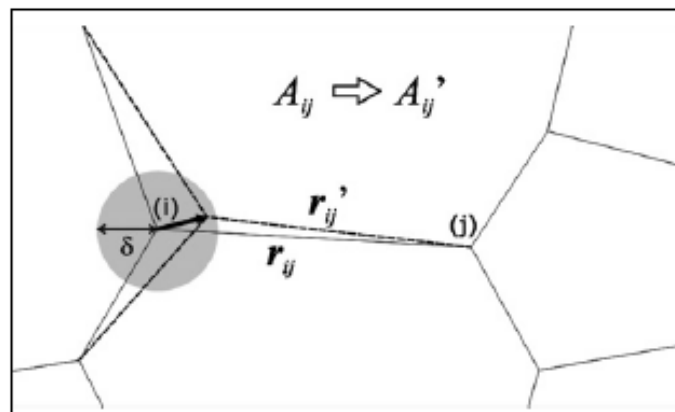


Figure II-6 : changement aléatoire des positions des sommets [28].

II-6-3 L'automate cellulaire :

Les automates cellulaires (AC) ont été utilisés pour la première fois dans le domaine des matériaux par Hesselbarth et Gobel en 1991[29] pour modéliser la cinétique de germination

et de croissance des grains lors de la recristallisation. La microstructure initiale représentée par un ensemble de cellules est caractérisée par la géométrie, le nombre, la taille, et l'arrangement des cellules.

Dans ce type de modèle, le matériau réel est constitué d'un mélange de deux phases α et β représenté par un réseau de cellules adjacentes, toutes identiques. Chaque cellule est mise en correspondance bijective avec un domaine homogène de l'agrégat dont elle définit la nature et la relation de voisinage. Pour un modèle à deux dimensions, on choisit généralement un réseau de cellules hexagonales et chacune a six voisins. La figure II-7 montre une représentation bidimensionnelle d'un agrégat biphasé et son équivalent d'automate cellulaire.

En croissance, l'AC doit introduire les variables de calcul au niveau de chaque cellule, comme des équations paramétriques en dépendance permanente du voisinage immédiat, ce qui donne aux résultats obtenus un caractère approximatif, dans la mesure de la validité des équations formulées.

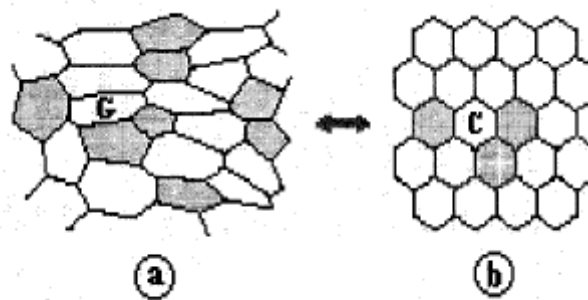


Figure II-7 : Représentation schématique du modèle automate cellulaire : chaque grain G du matériau (a) est mis en correspondance bijective avec une cellule C de l'automate (b) [30].

II-6-3 Méthode MONTE CARLO (Modèle de potts) :

Ce modèle permet de représenter des domaines de manière discrète par des régions d'orientations identiques, ces régions de nombre orientations de tels types peuvent être interprétés comme des grains cristallins.

A chaque site du réseau se voit alors attribuer un certain contenu énergétique, reflétant par exemple l'énergie stockée résultant de la déformation plastique. Elle permet aussi l'identification des interfaces et la quantification des énergies interfaciales pour chaque

segment frontière, cette propriété du modèle de Potts le rend très polyvalent pour décrire des phénomènes grossiers Figure (II-8).

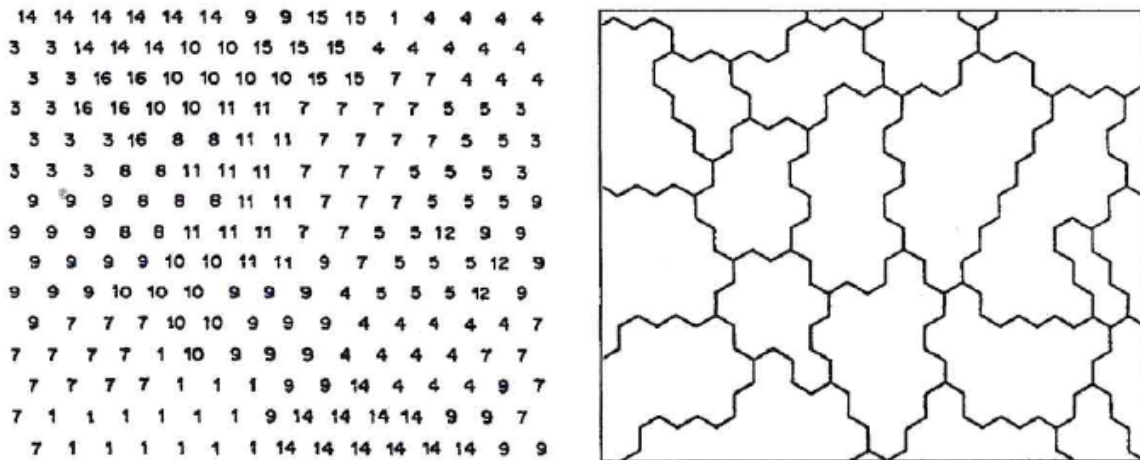


Figure II-8 : Cartographie des nombres généralisée aux sites dans un modèle de Potts [31].

Dans notre domaine, la MC prend une vue métallurgique mésoscopique ou quasi-microscopique de la croissance des grains, où l'intérieur du cristal est composé de sites de réseau avec des énergies identiques ; c'est-à-dire de même orientation. Ces sites sont distribués sur un réseau triangulaire figure (II-9). Les joints de grains sont des interfaces entre différents types d'orientation. Comme le cas de la croissance réelle, la courbure de l'interface entraîne une augmentation de l'énergie de la paroi du côté convexe, ce qui induit à une migration des parois [31] figure (II-10).

Les simulations de Potts comprennent également une mesure à variable de l'état de l'énergie stocké en fonction de l'orientation, la fluctuation à l'intérieur des grains peut être interprétée comme des événements de nucléation de recristallisation primaire. Les événements de commutation qui sont pertinents pour réduire l'énergie ne peuvent avoir lieu que par des changements d'orientation des sites proches des interfaces. Cela signifie que, si la nouvelle énergie de configuration totale après la commutation de deux domaines d'interface (A) et (B) est plus petite que la précédente ; le mouvement conduit le système à un état d'énergie interfaciale totale minimale [31]. Par conséquent, le mouvement est accepté et les domaines commutés restent dans leurs nouvelles positions respectives. Sinon le déplacement est rejeté figure (II-10).

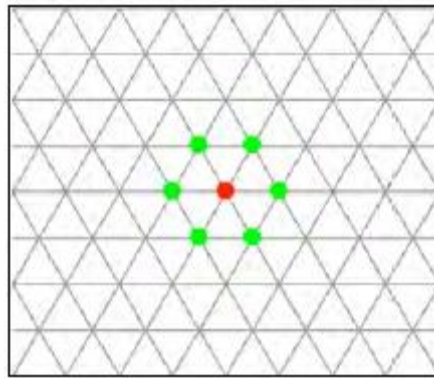


Figure II-9 : Maille triangulaire utilisée pour la discrétisation de la microstructure.

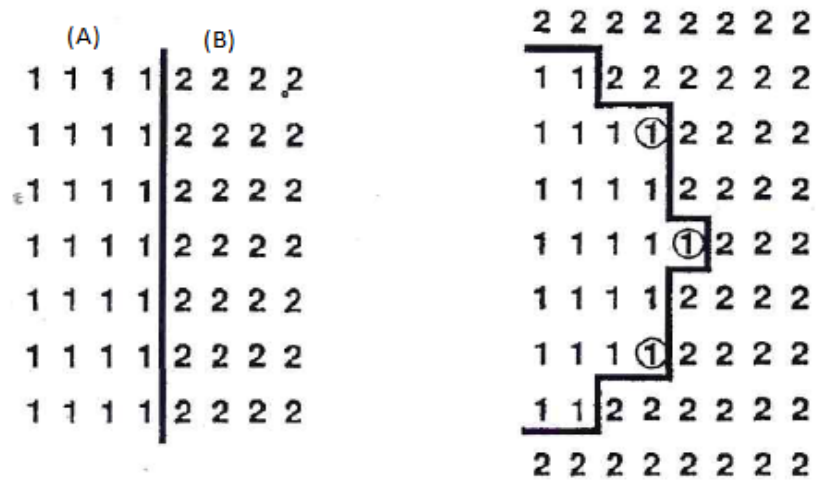


Figure II-10 : caractérisation d'un joint de grain dans un modèle de réseau potts [31].