

**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE
FACULTE DES SCIENCES EXACTES
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**

N^o d'ordre:
Série:

MEMOIRE

PRESENTE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE MAGISTER
EN PHYSIQUE

SPECIALITE : SCIENCES DES MATERIAUX

OPTION : METALLURGIE

Thème

**SIMULATION DE LA CROISSANCE NORMALE DANS DES CLUSTERS TEXTURES.
COMPARAISON ENTRE LES METHODES MONTE CARLO ET VERTEX
APPLICATION AUX TOLES Fe3%Si.**

Par M^{elle} : Amel ADJIMI

Soutenue le : / / 2007

Devant le jury :

<u>Président :</u>	O. KHALFALAH	Prof.	Univ. Mentouri Constantine
<u>Rapporteur :</u>	N. ROUAG	Prof.	Univ. Mentouri Constantine
<u>Examineurs :</u>	A. ROUSTILA	M.C.	Univ. Mentouri Constantine
	M. AIDA	Prof.	Univ. Mentouri Constantine
	A. CHARI	Prof.	Univ. Mentouri Constantine

Remerciements

Ce travail a été réalisé au laboratoire Microstructures et Défauts du Département de Physique de l'Université Mentouri – Constantine, sous la direction de Madame N. Rouag, professeur au département de physique. Je veux lui exprimer mes sincères remerciements pour ses orientations, pour ses conseils, pour sa disponibilité, et spécialement pour sa patience et sa grande gentillesse tout au long de la réalisation de cette thèse. Je lui adresse mes sincères respects pour sa compétence scientifique et son esprit critique.

J'adresse mes sincères remerciements à Monsieur O. Khalfallah, professeur à l'Université Mentouri – Constantine, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

Je suis très particulièrement sensible à l'honneur que me fait Madame A. Roustila, maître de conférences à l'Université Mentouri – Constantine, en acceptant de participer au jury et d'examiner ce travail.

Monsieur M S. Aida, professeur à l'Université Mentouri – Constantine, m'a fait l'honneur de s'intéresser à mon travail, qu'il trouve ici l'expression de mes plus vifs remerciements.

Je remercie vivement Monsieur A. Chari, professeur à l'Université Mentouri – Constantine, pour m'avoir fait l'honneur d'accepter de participer à ce jury.

Mes remerciements chaleureux s'adressent à Madame Farida, pour la sympathie qu'elle m'a témoignée et à tous mes collègues du laboratoire Microstructures et Défauts.

Enfin, j'adresse mes remerciements les plus sincères à mes très chers parents qui ont tout sacrifié pour moi.

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE	1
------------------------------------	----------

Chapitre I : RECRISTALLISATION ET CROISSANCE

I.1. HISTORIQUE	3
I.2. ETAT DE DEFORMATION	4
I.3. LES ETAPES DE RECRISTALLISATION	
I.3.1. Restauration	
I.3.2. Recristallisation primaire	
I.3.3. Croissance normale	5
I.3.4. Croissance anormale	6
I.4. LES JOINTS DE GRAINS EN RECRISTALLISATION ET CROISSANCE	
I.4.1. Introduction	
I.4.2. Caractéristiques des joints de grains	
I.4.3. Classification des joints	8
I.4.3.1. Joints à faible angle (L.A.)	
I.4.3.2. Joints à grand angle	9
I.4.4. Migration des joints de grains	10
I.4.4.1. Energie du joint de grains	
I.4.4.2. Mobilité du joint de grains	
I.4.4.3. Effet de la température	
I.4.4.4. Effet d'orientation	
I.4.4.5. Effet des impuretés	11
I.5. FORCES EN RECRISTALLISATION	
I.5.1. Force motrice	
I.5.2. Force de freinage	13

Chapitre II : MODELES DE CROISSANCE

II.1. INTRODUCTION	14
II.2. TOPOLOGIE DE LA CROISSANCE	
II.2.1. Aspect topologique à deux dimensions	15
II.2.2. Aspect topologique à trois dimensions	18
II.3. MODELES DE CROISSANCE	

II.3.1. Les modèles statistiques	19
II.3.1.1. Le modèle de Hillert	
II.3.1.2. L'analyse de Burke et Turnbull	21
II.3.1.3. Modèle de Louat	23
II.3.1.4. Analyse de Rhines et Craig	24
II.3.1.5. Modèle d'Abbruzzesse et Lucke	26
II.3.2. Les modèles déterministes	29

Chapitre III : TECHNIQUES DE SIMULATION ET PROCEDURES DE CALCUL UTILISEES

III.1. INTRODUCTION	31
III.2. METHODES DE SIMULATION	
III.2.1. Automate Cellulaire	32
III.2.2. Dynamique Moléculaire	33
III.2.3. Méthode de Monte Carlo	
III.2.4. Méthode des vertex	
III.3. TECHNIQUE DE SIMULATION MONTE CARLO	34
III.3.1.Principe	
III.3.2. Le temps dans la méthode Monte Carlo	36
III.3.3. Générateur de nombre aléatoire	
III.3.4. Influence du motif sur l'évolution de la croissance	37
III.3.5. Influence du nombre d'orientation	38
III.3.6. Influence de la dimension de la matrice	
III.3.7. Influence de la température	39
III.3.8. Limites de la technique Monte Carlo	
III.4. SIMULATION PAR LA METHODE DES VERTEX	40
III.4.1. Historique	
III.4.2. Les modèles	41
III.4.3. Procédure de calcul utilisée	46
III.4.3.1. Principe	
III.4.3.2. Mouvement des joints de grains	47
III.4.3.3. Mouvement des points triples	
III.4.3.4. Algorithme de croissance	49

Chapitre IV : RESULTATS ET DISCUSSION

IV.1. INTRODUCTION	50
IV.2. CARACTERISATION DE LA MATRICE INITIALE	51
IV.2.1 Caractérisation morphologique	
IV.2.2. Caractérisation cristallographique	52
IV.2.3. Correction de la matrice globale	
IV.2.3.1. Introduction	
IV.2.3.2. Procédure de correction	53
IV.3. CONSTRUCTION DES CLUSTERS.....	56
IV.4. TESTS DE VALIDATION	60
IV.4.1 Introduction	
IV.4.2. Décroissance d'un grain insulaire	
IV.4.3. Rectilignité d'un joint de grains	
IV.4.4. Réajustement à 120° aux points triples	63
IV.4.5. Disparition d'un grain triangulaire	
IV.5. SIMULATION DE LA CROISSANCE PAR LA METHODE MONTE CARLO	64
IV.5.1. Evolution des clusters morphologiques	
IV.5.2. Evolution des clusters cristallographiques	69
IV.6. SIMULATION DE LA CROISSANCE PAR LA METHODE DES VERTEX	74
CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES	79

INTRODUCTION GENERALE

Les matériaux industriels sont généralement polycristallins. Le contrôle et la compréhension de l'évolution de la microstructure restent les objectifs essentiels de la science des matériaux. Cette évolution dépend de la composition du matériau, mais aussi de son histoire thermo-mécanique, c'est-à-dire de toute la gamme de transformations subies au cours des différentes étapes de sa fabrication. Les propriétés mécaniques, magnétiques et électriques des matériaux sont influencées par cette évolution, qui recouvre de nombreux paramètres : la taille et la forme des grains, l'homogénéité de leurs distributions en tailles et orientations et la présence des différentes phases.

La recristallisation est l'un des phénomènes les plus utilisés dans la gamme de fabrication industrielle, il est généralement partagé en divers stades : restauration, recristallisation primaire, croissance normale et/ou croissance anormale. Nous nous intéressons dans ce travail aux processus de croissance des grains, qui restent à ce jour des phénomènes suffisamment complexes, même dans les microstructures les plus simples (homogénéité cristalline en formes, en orientations et en distribution des grains ; absence de particules) pour que de nombreux travaux proposent, encore actuellement, des théories souvent contradictoires. L'introduction de l'outil informatique a permis de mieux contrôler le processus de croissance ; la simulation de l'évolution des microstructures dans les différents stades de ce processus permet d'optimiser les paramètres qui peuvent l'influencer.

L'homogénéité de distribution des différents paramètres structuraux contrôle l'homogénéité de comportement du matériau. Les premières théories classiques de la croissance, établies dans les années 60, ont relié l'aspect morphologique de la croissance au rayon moyen de la matrice. Il est bien établi actuellement que la seule considération de ce rayon moyen peut masquer l'effet de l'hétérogénéité structurale, qui caractérise la plupart des matrices réelles. Pour tenir compte de l'effet de cette hétérogénéité structurale, sur le comportement local des grains en croissance, nous considérons dans cette étude l'évolution en croissance normale de micro-matrices, correspondant à des clusters de populations différentes, coexistant dans la même matrice globale.

Nous nous intéressons à l'influence de l'hétérogénéité structurale sur la croissance anormale des grains de Goss, d'orientation $\{110\}\langle 001\rangle$, dans des tôles magnétiques de Fe3%Si de type HiB. Nous considérons l'évolution par croissance normale de clusters, morphologiques ou cristallographiques, afin de caractériser les matrices potentiellement favorables au déclenchement de la croissance anormale des grains de Goss.

Nous faisons une étude comparative entre deux méthodes de simulation de croissance, la méthode statistique de Monte Carlo et la méthode déterministe des vertex. Nous utilisons comme microstructure initiale une matrice après recristallisation primaire, caractérisée par EBSD (Electron Back Scattering Diffraction).

Ce mémoire comprend quatre chapitres :

- Le premier chapitre est consacré à la description des processus de recristallisation et croissance, avec une caractérisation des paramètres et des forces qui contrôlent les différentes étapes.
- Le deuxième chapitre considère les différents modèles généralement utilisés en croissance, après un rappel sur l'aspect géométrique et topologique de ce processus.
- Le troisième chapitre présente les diverses techniques utilisées pour simuler le processus de croissance, avec un accent particulier sur les deux méthodes utilisées dans cette étude, la technique Monte Carlo et la méthode des vertex. Nous y décrivons également les algorithmes que nous avons utilisés.
- L'approche adoptée dans cette étude et les résultats sont regroupés dans le quatrième chapitre. La première partie est consacrée à la caractérisation de la matrice expérimentale, obtenue par EBSD, et des clusters morphologiques et cristallographiques, choisis à partir de cette matrice. La deuxième partie est consacrée à la simulation de la croissance normale dans les deux types de clusters, dans une étude comparative entre les paramètres structuraux et les méthodes de simulation utilisées.
- Nous terminons cette étude par une conclusion et des perspectives.

Chapitre I

Recristallisation et Croissance

I.1. HISTORIQUE

C'est à la fin du 19^{ème} siècle, que commencent à être établies les premières hypothèses métallurgiques pour expliquer l'évolution des propriétés structurales des métaux et alliages, après des traitements thermo-mécaniques. Sorby fut le premier à analyser, en 1887, les phénomènes qui contrôlent cette évolution structurale et parle de « recristallisation » (Sorby, 1887).

En 1898, Stead (Stead, 1898) a proposé un concept de croissance normale par rotation et coalescence des grains. Ewing et Rosenhain (Ewing & Rosenhain, 1900) ont montré que le phénomène se produit par la migration des joints de grains, ils ont remarqué que la vitesse de migration augmente avec la température de recuit. En 1910, Charpy (Charpy, 1910), a relié le taux d'écrouissage à la taille finale du grain. En 1916, Jeffries (Juffries, 1916) montre que la croissance anormale dans des fils de W est causée par une inhibition de la croissance normale.

Le développement de la théorie élémentaire des dislocations, proposée indépendamment par Orowan, Taylor et Polanyi en 1934, a amélioré considérablement les études expérimentales et théoriques de la recristallisation, de nombreux modèles sont alors proposés pour expliquer les différentes étapes du cycle de recristallisation.

C'est au début des années 80 que la simulation fut introduite dans les études de recristallisation, comme technique d'investigation complémentaire des études expérimentales et théoriques. Les premiers travaux, d'Anderson et ses collaborateurs (Anderson et al., 1984), utilisent la méthode statistique Monte Carlo, qui reste encore actuellement la plus courante. Une description déterministe du processus de croissance fut proposée dans le modèle des vertex de Kawasaki et ses collaborateurs (Kawasaky et al., 1989). Ces deux techniques de simulation que nous utilisons dans notre travail sont décrites dans le chapitre 3, elles sont à la base de nombreux modèles actuels de croissance.

Le contrôle du processus de recristallisation dépend de la maîtrise des paramètres suivants :

- 1- l'état de déformation,
- 2- la texture,
- 3- l'histoire thermo- mécanique du matériau,
- 4- la présence des précipités et des atomes étrangers,
- 5- la température.

I.2. ETAT DE DEFORMATION

L'application d'une contrainte sur un matériau produit en général une déformation. Si après suppression de la sollicitation, le matériau revient à son état initial, la déformation est élastique, elle est plastique s'il ne peut pas revenir à son état initial. Au cours de cette déformation plastique, l'essentiel de l'énergie est dissipée sous forme de chaleur, l'énergie emmagasinée par le matériau ne représente qu'une faible proportion (2-10%) (Benard et al., 1969). Cette énergie est due aux divers défauts créés durant la déformation, ces défauts sont : les dislocations, les lacunes, les défauts d'empilement et les auto-interstitiels.

La participation de chaque population de défauts à la déformation dépend essentiellement de deux facteurs : l'énergie de défaut et la densité de population. Les lacunes et les atomes auto-interstitiels s'annihilent facilement à haute température, l'état de déformation dans les études de recristallisation est caractérisé uniquement par la densité des dislocations (80-90% de l'énergie emmagasinée).

Après déformation, le métal n'est plus en état d'équilibre (état instable), ses propriétés mécaniques et physiques initiales sont modifiées, on obtient un nouvel état d'équilibre ; si la température est suffisante, certains processus thermiques apparaissent pour diminuer son énergie libre, comme la restauration et la recristallisation

I.3. LES ETAPES DE RECRISTALLISATION

I.3.1. La Restauration

La restauration est un processus qui permet la réduction du nombre de défauts et leur réarrangement dans de nouvelles configurations de moindre énergie, sans création de nouveaux grains. Cette étape permet de retrouver la presque totalité des propriétés physiques et mécaniques du métal, c'est donc une restauration de l'état qu'il avait avant déformation.

Dans les ouvrages pédagogiques, la restauration est généralement classée dans les étapes de recristallisation, bien qu'elle n'en fasse pas réellement partie. C'est un phénomène qui peut précéder ou se faire en parallèle avec la recristallisation.

I.3.2. Recristallisation Primaire

La recristallisation primaire est caractérisée par l'apparition de germes, qui se développent aux dépens de la matrice écrouie qui les entoure. Pour qu'un germe puisse croître, il faut qu'il atteigne une taille critique, sinon il disparaît. La croissance de ces nouveaux grains se poursuit

jusqu'à ce qu'ils arrivent au contact les uns des autres. La fin de ce stade correspond à la consommation de toute la matrice écrouie.

Le processus de recristallisation primaire est régi par les lois suivantes :

- L'écrouissage doit être supérieur à un certain taux d'écrouissage minimal, dit écrouissage critique.
- La température de recristallisation T_r est d'autant plus élevée que la déformation est plus faible.
- La taille des grains recristallisés est d'autant plus petite que la déformation est plus importante.
- Les nouvelles cellules peuvent croître à partir des grains déformés, avec des orientations tout à fait différentes de celles de la matrice d'origine
- La température de recristallisation diminue si la pureté du métal s'élève.

I.3.3. Croissance normale

Après recristallisation primaire, la structure obtenue n'est pas stable, les joints de grains continuent leur migration dans la structure recristallisée, en diminuant l'excès d'énergie dû à leur courbure. Au cours de cette étape, la taille moyenne des grains croît d'une façon continue et homogène, on parle de croissance normale ou continue.

Plusieurs facteurs peuvent inhiber la croissance normale :

- Les fines particules de seconde phase épinglent les joints qu'elles bloquent un temps, seuls certains joints spéciaux peuvent échapper à cette inhibition.
- Les impuretés ségrègent sur les joints (ils présentent un excès de volume et une affinité pour occuper les vides qui existent sur les joints), la vitesse de migration des joints diminue.
- En présence d'une texture accusée, la majorité des joints sont à faible angle, donc de faible énergie, leur déplacement est difficile, par rapport aux joints à grand angle qui seront plus mobiles ; les grains minoritaires entourés des joints à grand angle peuvent croître de façon exagérée.-
- L'inhibition de la croissance normale par l'énergie de surface : dans les tôles minces, la croissance est contrôlée par l'énergie superficielle. Pour une atmosphère donnée, les grains qui présentent des plans de plus basses énergies parallèles à la surface de la tôle auront tendance à se développer aux dépens du reste de la matrice.

I.3.4. Croissance anormale

La croissance anormale, exagérée ou discontinue, est une croissance soudaine et rapide d'une minorité de grains, dans certaines régions de la matrice recristallisée ; elle apparaît après inhibition de la croissance normale par un des phénomènes décrits ci-dessus, elle n'exige pas de nouvelle germination, c'est une minorité de grains qui se développent de façon discontinue et spécialement exagérée aux dépens du reste de la matrice.

La croissance anormale se produit dans un grand nombre de métaux de structures diverses : CFC (Cu, Al, Ag, Ni), CC (W, Fe, Zr, Ti), hexagonale (Zn), ou dans certains alliages (Fe-Si, Fe-Ni, Al-Mn, Al-Cu).

I.4. LES JOINTS DE GRAINS EN RECRISTALLISATION ET CROISSANCE

I.4.1. Introduction

Dans le domaine industriel, les matériaux utilisés sont généralement polycristallins, c'est-à-dire constitués de cristaux ou grains. Entre ces cristaux, des régions caractérisées par une structure plus ou moins ordonnée permettent une jonction géométrique et cristallographique. Ces régions sont appelées joints de grains.

La recristallisation en général et la croissance en particulier, sont des phénomènes de migration des joints de grains. La compréhension du comportement des joints de grains est donc essentielle dans toute étude de croissance. En effet, comme la relaxation de l'énergie du matériau est attribuée au mouvement des joints, la compréhension des caractéristiques des joints est essentielle pour étudier leur mobilité.

I.4.2. Caractéristiques des joints de grains

Un joint de grains est la surface qui sépare deux cristaux (ou grains) de même nature, de même structure et d'orientations différentes. Le joint est dit joint de phases si les deux cristaux sont de structure différente. Dans le cas général, on parle d'interfaces.

La description géométrique d'un joint de grains fait intervenir cinq paramètres : trois paramètres pour caractériser la désorientation relative, entre les deux cristaux adjacents, et deux paramètres pour situer le plan du joint.

En recristallisation et croissance, le joint de grains est toujours en mouvement, on ne tient compte généralement que des trois paramètres de désorientation. On peut utiliser une rotation d'angle θ autour d'un axe $R = [uvw]$ (figure I.1) ou les trois angles d'Euler (figure I-2).

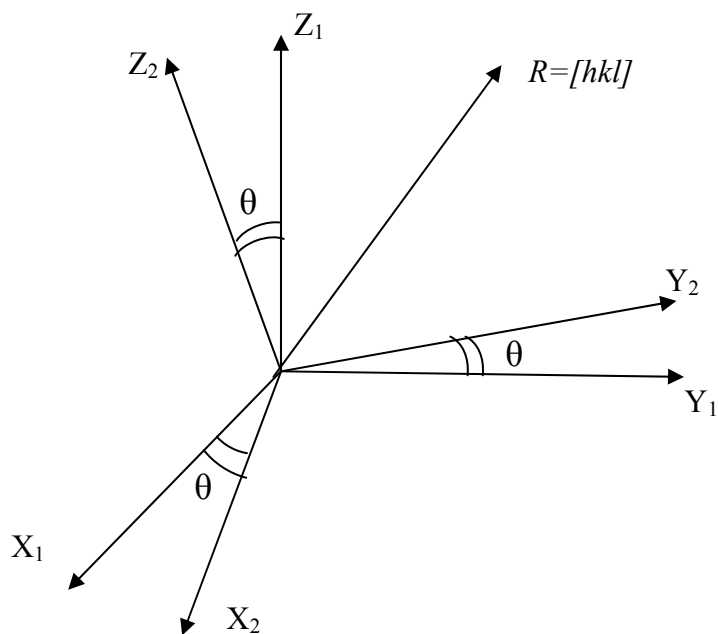


Figure I.1 : Axe et angle (R, θ) de désorientation entre deux grains

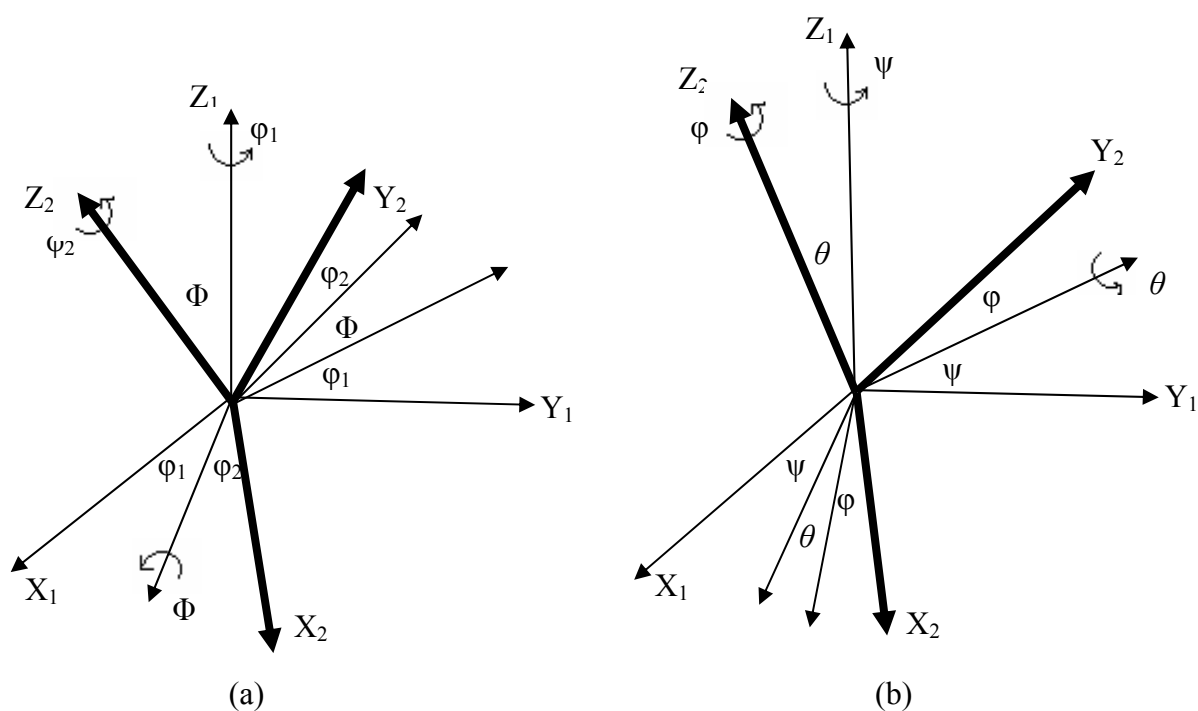


Figure I.2: Désorientation entre deux grains dans l'espace d'Euler

(a) (ϕ_1, ϕ, ϕ_2) dans le formalisme de Bunge , (b) (ψ, θ, ϕ) dans le formalisme de Roe

I.4.3. Classification des joints

Dans un premier partage, les joints de grains sont classés suivant leur désorientation en joints à faible angle et en joints à grand angle, la limite de passage est souvent choisie à $\theta = 15^\circ$ (Read et Shokley, 1950), parfois $\theta = 8^\circ$ (Mykura, 1980). Ce premier partage est utile, en première approximation, pour décrire les caractéristiques globales des joints (Adams et al., 1998). Dans les études de simulation des microstructures, il sert souvent à une première validation de la technique utilisée.

I.4.3.1. Joints à faible angle (LA)

Les joints de grains à faible angle ou sous-joints sont décrits par des réseaux de dislocations. Read et Shokley ont proposé un modèle simple basé sur la théorie élastique des dislocations. La désorientation d'un sous-joint est donnée par la relation (I-1) (Burgers, 1940 ; Read et Shockly, 1950).

$$b/d = \sin(\theta/2) \quad (\text{I-1})$$

Où :

- b est le vecteur de Burgers,
- d est la distance entre deux dislocations.

L'énergie interfaciale du joint LA correspond à l'énergie élastique par unité de longueur d'un ensemble de dislocations coins, elle est donnée par la relation :

$$\gamma = \frac{1}{d} \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \ln(d/r_0) \quad (\text{I-2})$$

Où :

- ν et μ sont respectivement la constante de Poisson et le module de cisaillement,
- d est la distance entre deux dislocations,
- $1/d$ est le nombre de dislocations par unité de longueur.

L'expression de l'énergie n'est valable que si la théorie élastique est applicable, c'est-à-dire avec une distance d supérieure au diamètre du cœur de dislocation ; si ce dernier est pris égale à $4b$ (cœur large) on a : $d/2 > 2b \Rightarrow \sin(\theta/2) < 0.125 \Rightarrow \theta < 15^\circ$ (limite angulaire LA).

La relation (I-1) devient :

$$\theta \approx b/d \quad (\text{I-3})$$

L'énergie s'écrit alors:

$$\gamma = \frac{b}{d} \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)} (\log(b/d) + \log(b/r_0)) \Rightarrow \gamma = \gamma_0 \theta (A_0 - \log(\theta)) \quad \text{(I-4)}$$

Avec : $\gamma_0 = \log(b/r_0)$ et $A_0 = \frac{\mu b}{4\pi(1-\nu)}$

L'énergie γ est généralement normalisée par rapport à l'énergie limite de transition des joints à faible angle vers les joints à grand angle (Read, 1953), cette énergie est donnée par :

$$\frac{\gamma}{\gamma_m} = \frac{\theta}{\theta_m} \left(1 - \ln \left(\frac{\theta}{\theta_m} \right) \right) \quad \text{(I-5)}$$

Où :

- γ_m et θ_m sont respectivement l'énergie et l'angle de désorientation correspondant à la transition faible angle-grand angle.
- γ est l'énergie du joint à faible angle de désorientation θ .

I.4.3.2. Joints à grand angle

En recristallisation, on admet en général que les joints à grand angle sont plus mobiles que les joints à faible angle. Il existe cependant des joints particuliers, correspondant à des désorientations particulières et des minima d'énergie, qui peuvent avoir des mobilités relativement faibles. On distingue :

- Les joints C.S.L (Coincidence Sites Lattice)

Pour certaines désorientations entre les deux grains adjacents, il existe des sites atomiques communs aux deux grains. L'ensemble de ces sites forme le réseau CSL, ces joints sont caractérisés par une périodicité de coïncidence P, définie par le rapport du volume de la maille de coïncidence à celui de la maille élémentaire du réseau du monocristal. L'indice de coïncidence Σ est l'inverse de la périodicité des nœuds communs, on a :

$$\Sigma = \frac{\text{volume de la maille de coïncidence}}{\text{volume de la maille élémentaire}}$$

En recristallisation, on considère généralement qu'un joint est de type CSL jusqu'à $\Sigma = 25$.

- Les joints C.A.D (Coincidence Axis Directions)

Certains joints possédant des axes R[uvw] de faibles indices peuvent également avoir des propriétés de mobilité particulières, quel que soit l'angle de désorientation. On retient généralement, en migration des joints de grains, les axes $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ et $\langle 211 \rangle$.

I.4.4. Migration des joints de grains

I.4.4.1. Energie du joint de grains

L'énergie du joint de grains intervient dans la force de migration et, en présence de précipités, dans la force de freinage. On sait notamment que les joints à faible désorientation et les joints de coïncidence ont une faible énergie, relativement aux joints généraux. L'énergie du joint est donc une propriété qui dépend de sa structure (Goodhew et Balluffi, 1980).

I.4.4.2. Mobilité du joint de grains

La mobilité du joint de grains dépend essentiellement de la structure du joint lui-même, de la température de recuit et souvent de la présence des impuretés.

Dans le cas des joints à grand angle, si la force motrice est considérée comme constante, cette mobilité varie avec la température suivant une loi exponentielle d'activation thermique (loi d'Arrhénius) :

$$M=M_0 \exp (-Q/kT) \quad \text{(I-6)}$$

Q est l'énergie d'activation, M_0 est le coefficient pré-exponentiel.

La vitesse de migration des joints à faible angle est inférieure à celle des joints à grand angle. Plusieurs paramètres peuvent influencer leur mobilité

I.4.4.3. Effet de la température

C'est l'effet le plus important. A température élevée, les joints ordonnés perdent leurs propriétés à cause du changement de leur structure et, par conséquent, du transfert atomique ; l'énergie d'activation croît, ils deviennent plus mobiles. Il faut remarquer que ce paramètre prépondérant est souvent pris égal à 0K en simulation, pour pouvoir suivre l'évolution des paramètres structuraux.

I.4.4.4. Effet d'orientation

Dans les métaux CFC les joints de flexion de désorientation 30-40° autour de <100> sont les plus rapides ; c'est pour les joints 25-30° <110> dans les CC et 30° <0001>l'hexagonal qu'on observe ce comportement, les joints de torsion de même désorientation que les précédents sont plus lents.

L'orientation du plan du joint de grains a également une forte influence sur la migration. Ces effets anisotropes de migration s'expriment davantage aux basses températures qu'aux températures élevées, et sont généralement observés pour des joints de grains avec Σ petit.

I.4.4.5. Effet des impuretés

L'effet des impuretés sur la mobilité des joints dépend de leur concentration, de la température et des caractéristiques des joints. La mobilité des joints est faible si la concentration est élevée, elle augmente avec la diminution de cette dernière. A haute température, les joints sont plus mobiles, l'énergie d'activation du mouvement atomique augmentant avec la température. En mobilité, la cristallographie et la spécialité des joints jouent un rôle important sur l'effet des impuretés, les joints spéciaux sont moins freinés par les impuretés que les joints généraux.

I.5. FORCES EN RECRISTALLISATION

On distingue deux forces essentielles en recristallisation, la force motrice et la force de freinage.

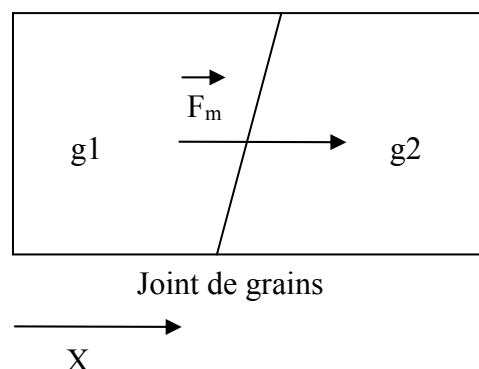
I.5.1. Force motrice

Le processus de recristallisation peut être défini comme une évolution de la microstructure par migration des joints de grains. La minimisation de l'énergie libre globale du système est réalisée essentiellement à partir du mouvement de ces joints. La force motrice dans les différentes étapes de recristallisation correspond en grande partie à la différence d'énergie libre entre l'état initial et le nouvel état d'équilibre. La force motrice F est reliée à la vitesse de migration du joint de grains par la relation suivante :

$$V = M F^n \quad (I-7)$$

M est la mobilité du joint de grains, le coefficient n est compris entre 0.5 et 1. Considérons deux grains g_1 et g_2 séparés par un joint de grains figure (I.5), avec respectivement G_1 et G_2 les énergies libres par unité de volume de chaque grain.

Figure I.3 :
Force motrice appliquée sur le joint de grains



La force motrice est reliée à l'enthalpie du système par la relation suivante:

$$F_m = - dG_{sys}/dx \quad (\text{I-8})$$

Où x est la position du joint de grains.

L'enthalpie du système est donnée par :

$$G_{sys} = V_1(x) G_1 + V_2(x) G_2 + S_{JG} G_{JG}. \quad (\text{I-9})$$

Où :

- S_{JG} , G_{JG} et x sont respectivement l'aire, l'enthalpie et la position du joint,

- G_i , et V_i sont respectivement l'enthalpie et le volume du grain i .

Si la température et la pression sont constantes, et lorsque le joint se déplace de dx , on aura :

$$\frac{dG_{sys}}{dx} = G_1 \frac{dV_1(x)}{dx} + G_2 \frac{dV_2(x)}{dx} + G_{JG} \frac{dS_{JG}(x)}{dx}. \quad (\text{I-10})$$

Sachant que le volume est conservé, on aura :

$$\frac{dV_1(x)}{dx} = - \frac{dV_2(x)}{dx} \quad (\text{I-11})$$

La force motrice devient :

$$F_m = (G_2 - G_1) \frac{dV_1(x)}{dx} - G_{JG} \frac{dS_{JG}(x)}{dx}. \quad (\text{I-12})$$

Cette force est constituée par deux termes :

$$\text{Une force motrice volumique : } F_v = (G_2 - G_1) \frac{dV_1(x)}{dx} \quad (\text{I-13})$$

$$\text{Une force motrice interfaciale : } F_s = - G_{JG} \frac{dS_{JG}(x)}{dx}. \quad (\text{I-14})$$

L'importance d'une force par rapport à l'autre dépend de l'étape considérée dans le processus global de recristallisation :

- **En recristallisation primaire**, la force motrice résulte de la différence en densité de dislocations entre les parties recristallisée et écrouie, seule la force volumique intervient. Si ρ_e et ρ_r sont respectivement les densités de dislocations de l'état écroui et l'état recristallisé, la force motrice agissant sur le joint de grains s'écrit :

$$F_p = E_d (\rho_e - \rho_r) \quad (\text{I-15})$$

Où :

- ρ_e est la densité de dislocation dans le volume écroui ($\sim 10^{12} \text{cm}^{-2}$).
- ρ_r est la densité de dislocation dans le volume recristallisé ($\sim 10^7 \text{cm}^{-2}$).
- E_d est l'énergie emmagasinée par unité de longueur de dislocation.

Pratiquement, $\rho_e \gg \rho_r$, $R \gg R_0$ donc la relation (I-15) devient :

$$F_p = c G b^2 \rho_e \quad (\text{I-17})$$

c est une constante de l'ordre de 0.5, ρ_e est de l'ordre de 10^{12}cm^{-2} , G est le module de cisaillement.

E_d est donc de l'ordre de 10^{-8}N , ce qui implique que $F_p \sim 10^4 \text{N/cm}^{-2}$.

- **En croissance**, la force motrice correspond à l'énergie interfaciale des joints. Une estimation avec un grain cubique d'arête D et entouré de 6 joints, avec une aire des joints par unité de volume égale approximativement à $3/D$ donne :

$$F_n = \gamma_{JG} \left[\frac{3D^2}{D^3} \right] = \frac{3\gamma_{JG}}{D} \quad (\text{I-18})$$

Où γ_{JG} est l'énergie du joint.

I.5.2. Force de freinage

La présence des particules de seconde phase produit un effet d'épinglage au niveau des joints. Zener (Smith, 1948) a estimé que la force de freinage due à une fraction volumique f_v de particules identiques, de forme sphérique et de rayon r , est égale à :

$$P = -2\gamma_{JG} f_v / r \quad (\text{I-19})$$

Chapitre II

Modèles de Croissance

II.1. INTRODUCTION

La recristallisation primaire s'achève quand la matrice écrouie disparaît totalement ; cependant, la configuration obtenue n'est pas encore stable, la taille moyenne des grains continue à augmenter si le matériau est maintenu à T élevée, c'est le processus de croissance.

Pour quantifier ce processus et déterminer les effets des différents paramètres introduits, diverses approches théoriques ont été effectuées, ces approches sont séparées en deux groupes de modèles :

- **Les modèles statistiques** : dans ce type de modèles, les grains sont triés en classes. Les grains de chaque classe ont le même environnement local (le nombre de proches voisins, leurs tailles et leurs formes) que celui de l'ensemble de tous les grains.
- **Les modèles déterministes** : ces modèles décrivent la croissance en tenant compte de l'influence de la position relative des grains (chaque grain est étudié indépendamment), le calcul numérique est important pour suivre l'évolution de chaque grain en respectant l'évolution de son voisinage.

II.2. TOPOLOGIE DE LA CROISSANCE

C.S. Smith (Smith, 1952) fut le premier à discuter les aspects topologiques et géométriques de la croissance, il a décrit le phénomène de croissance par le mouvement des joints, il prend fin quand la stabilisation est atteinte, le processus de croissance permet donc au matériau d'atteindre un état de stabilité. D'après Smith, le grain, ou n'importe quelle structure cellulaire, est caractérisé par des quantités finies : côtés, faces et sommets. En 2D, les grains sont séparés par des arêtes et en 3D ils sont séparés par des faces (figure II.1).

Ces quantités sont reliées par l'équation d'Euler :

$$C - E + V = 1 \quad (\text{en 2D}) \quad (\text{II.1})$$

$$-C + F - E + V = 1 \quad (\text{en 3D}) \quad (\text{II.2})$$

F est le nombre de faces, E est le nombre de cotés (arêtes), V est le nombre de sommets (vertex) C est le nombre de cellules (grains). Le nombre de joints liés au même sommet est appelé le nombre de coordination (z), il est constant dans toutes les microstructures stables : z=3 en 2D, z=4 en 3D.

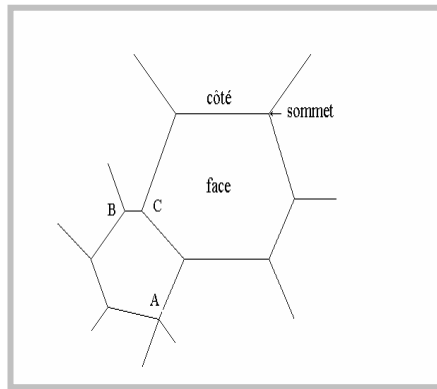


Figure II.1 : Schéma d'une structure de grains en 2D.

II.2.1. Aspect topologique à deux dimensions (critère de stabilité aux nœuds)

En croissance, le mouvement des joints se fait vers leurs centres de courbure pour réduire leurs énergies et donc atteindre un état plus stable. Les tensions appliquées au niveau des sommets de grains, peuvent avoir une résultante non nulle. Pour obtenir un état stationnaire, il est indispensable de réarranger les joints de telle manière que cette résultante s'annule. Si nous considérons le cas d'un sommet à trois côtés (point triple), la configuration la plus stable est obtenue pour une égalité des angles aux points triples, c'est la condition de stabilité aux nœuds proposée par Von Neumann, elle est donnée par la relation suivante (Von. Neumann, 1952):

$$\frac{\gamma_1}{\sin(\theta_{23})} = \frac{\gamma_2}{\sin(\theta_{13})} = \frac{\gamma_3}{\sin(\theta_{12})} \quad (\text{II.3})$$

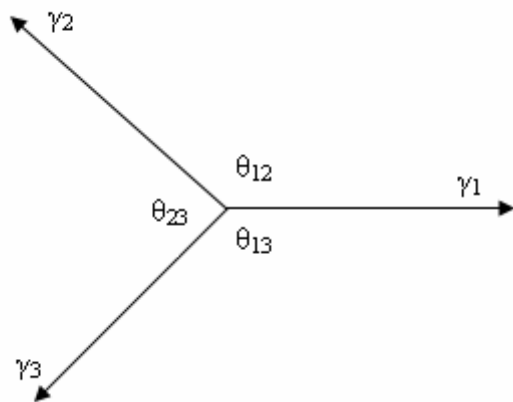


Figure II.3:

Représentation schématique des tensions appliquées à un sommet ou point triple.

Si nous admettons que les tensions sont indépendantes de la désorientation, c'est-à-dire $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma_3$, une structure à motif hexagonal ($z=3$) est imposée, les angles aux points triples sont égaux à 120° . Un grain en équilibre est entouré par 6 joints, le grain qui possède moins de 6 côtés aura tendance à disparaître, tandis que celui possédant plus de 6 côtés aura tendance à croître (figure II-2).

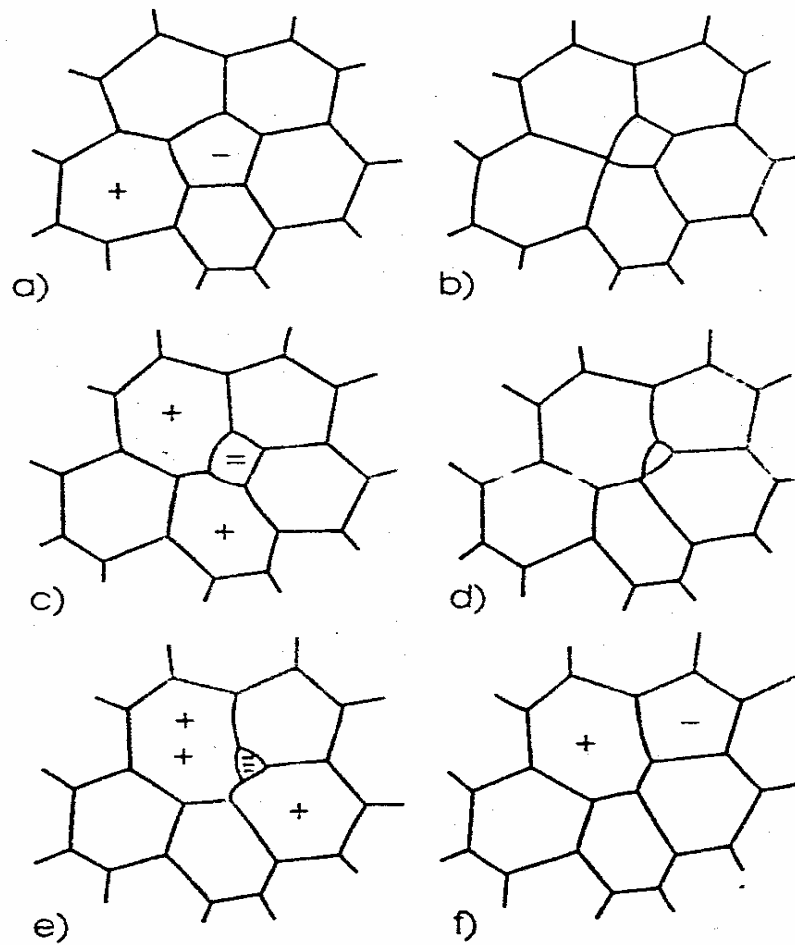


Figure II.2 : Mécanisme de croissance de grains en 2D

Les signes (=) (+) (-) se rapportent respectivement à un grain stable, en croissance ou en décroissance (Humphreys, 1995).

Deux processus topologiques fondamentaux en 2D sont l'échange de voisins et la disparition de grains (figure II-4). L'échange de voisins se produit lorsque deux sommets 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.

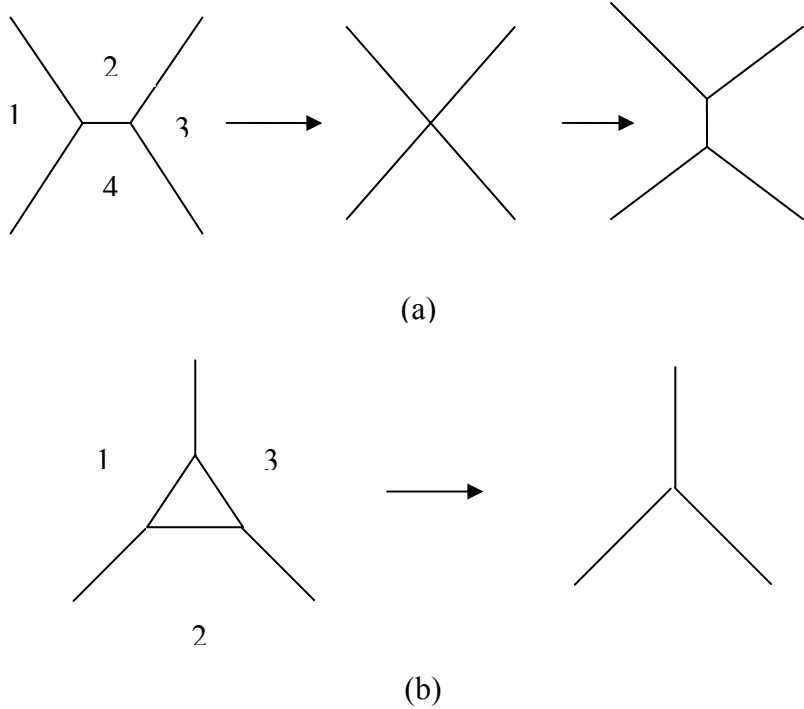


Figure II.4 : Les deux processus topologiques fondamentaux qui se produisent en croissance en 2D. (a) échange de voisin "switching neiboring" et (b) disparition d'un grain triangulaire.

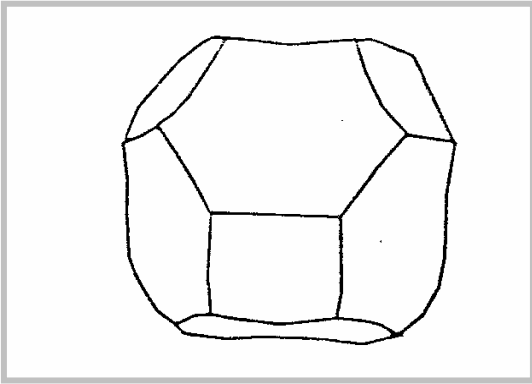


Figure II.5 : Polyèdre de 'Kelvin tetrackaidecahedron (Haessner, 1978)

Von Neumann (Von Neumann, 1952) puis Mullins (Mullins, 1956) ont relié, en 2D, la vitesse de croissance des grains à leurs classes topologiques et ont montré que la vitesse de variation d'aire des grains s'écrit :

$$\frac{dA}{dt} = c(N - 6) \quad (\text{II.4})$$

Où N est le nombre de côtés d'un grain d'aire A

II.2.2. Aspect topologique à trois dimensions

A trois dimensions, il n'existe pas une forme géométrique simple qui puisse satisfaire aux conditions de remplissage de l'espace et à la condition de stabilité aux sommets avec le polyèdre de 'Kelvin tetrackaidecahedron' (figure II-5) qui a des surfaces possédant deux rayons de courbures.

II.3. MODELES DE CROISSANCE

Dans ce paragraphe, nous rappelons les modèles de croissance les plus importants. Les deux points essentiels à considérer en modélisation de croissance sont :

- 1- la détermination des distributions de tailles et des formes de grains.
- 2- la variation de la vitesse de croissance en fonction du temps et de la température.

Les fonctions de distributions les plus connues proposées par les différentes approches pour étudier l'évolution de la croissance des grains sont :

a) la distribution normale :

$$F(\rho) = C \exp(-[\ln(\rho)]^2) \quad (\text{II.5})$$

b) la distribution de Rayleigh-Louat :

$$F(\rho) = A \rho \exp(-1/2 \rho^2) \quad (\text{II.6})$$

c) la distribution de Lifschitz-Splyozov-Hillert :

$$F(\rho) = K \frac{\beta \rho}{(2 - \rho)^{2+\beta}} \exp\left(-\frac{2\beta}{2 - \rho}\right) \quad \beta=1D, 2D \text{ ou } 3D \quad (\text{II.7})$$

d) la distribution de Aboav-Langdon :

$$F(\rho) = c \exp[-b(\rho^{1/2} - \rho_c^{1/2})] \quad (\text{II.8})$$

Où :

- $\rho = l/l_c$ est une variable indépendante du temps.
- l est la taille des grains.
- l_c est une taille critique.
- β est la dimensionnalité de la distribution. $\beta = 1$ (1D), 2 (2D), 3 (3D).

II.3.1. Les modèles statistiques

II.3.1.1. Le modèle de HILLERT

Le modèle de Hillert (Hillert, 1965) est l'un des premiers modèles de croissance proposés. Il a été établi par analogie avec le phénomène de coalescence des précipités « Oswald repinning ». Il introduit l'existence d'une taille critique de croissance, un grain ne peut croître que s'il possède une taille supérieure à cette taille critique.

Dans ce modèle, la courbure des joints introduit un mouvement dû à la pression interne du matériau

Le modèle appliqué à une dimension permet d'écrire la pression ΔP pour un grain (i) :

$$\Delta P = cm\gamma \left(\frac{l}{R_{i+1}} - \frac{l}{R_i} \right) \quad (\text{II.9})$$

Où m est la mobilité du joint, γ son énergie et c une constante.

La vitesse de croissance pour le grain (i) est donnée donc par la relation :

$$V = \frac{dR_i}{dt} = m\gamma c \left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R_i} \right) \quad (\text{II.10})$$

$$\text{- } R_c \text{ est la taille critique donnée par : } R_c = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_{i+1}} - \frac{1}{R_{i-1}} \right) \quad (\text{II.11})$$

On remarque, à partir de l'équation (II.11), que chaque grain possède une taille critique.

La notion de champ moyen introduite par Hillert permet de traiter cette taille critique indépendamment du voisinage, tous les grains possédant la même taille ont donc le même taux de croissance (environnement local homogène). A partir de cette hypothèse, R_c peut s'écrire sous la forme :

$$R_c = \frac{\int_0^{\infty} f(R) dR}{\int_0^{\infty} \frac{1}{R} f(R) dR} \quad (\text{II.12})$$

La distribution des grains obéit à l'équation de continuité, qui s'écrit :

$$\frac{\partial f(R,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial R} \left(f(R,t) \times \frac{\partial R}{\partial t} \right) \quad (\text{II.13})$$

- Où $f(R,t)$ est la fonction de distribution.

Hillert a supposé que la taille critique R_c suit la loi parabolique suivante :

$$R_c \frac{\partial R_c}{\partial t} = k \quad \text{où : } k \text{ est une constante.} \quad (\text{II.14})$$

La fonction de distribution obtenue en résolvant l'équation (II.13) est la suivante :

$$F(\rho) = K \frac{\rho}{(2-\rho)^3} \exp\left(-\frac{2}{(2-\rho)}\right) \quad (\text{II.15})$$

Où :

$$- \rho = \frac{R}{R_c}$$

- $F(\rho)$ est la fonction de distribution indépendante du temps, $F(\rho) = f(R, t) \times R_c^2$

- K est la constante d'intégration

L'expression (II.13) est généralisée sous la forme :

$$F(\rho) = K \frac{\beta \rho}{(2-\rho)^{2+\beta}} \exp\left(-\frac{2\beta}{(2-\rho)}\right) \quad (\text{II.16})$$

β est la dimensionnalité : $\beta=1(1D)$, $\beta=2(2D)$, $\beta=3(3D)$.

Hillert a identifié la taille critique à la taille moyenne du grain qui est égale à $\approx 1.7R_c$, les grains possédant une taille inférieure à cette taille critique vont disparaître, tandis que les autres vont croître.

- **Le modèle de croissance de Hillert en présence de particules**

L'effet des particules d'une seconde phase joue un rôle important dans la croissance des grains, Hillert a traité cet effet par l'introduction de la force de freinage de Zener dans la relation (II.11) qui devient :

$$\frac{dR_i}{dt} = m\gamma c \left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R_i} \pm z \right) \quad (\text{II.17})$$

z est le facteur de Zener, avec : $z = \frac{3f_v}{4r}$ (f est la fraction volumique de particules, r est leur rayon moyen).

Si, dans la distribution initiale, il n'y a pas de grains dont la taille est supérieure à cette limite, le modèle prévoit une croissance normale, sinon ces gros grains vont croître exagérément et envahir toute la matrice par croissance anormale.

Le modèle de Hillert suppose que l'environnement local est homogène, l'aspect topologique n'est pas considéré.

II.3.1.2. L'analyse de BURKE et TURNBULL

Cette analyse, faite par Burke (Burke, 1949) puis Burke et Turnbull (Turnbull, 1951), considère la croissance normale avec une force motrice des joints due à leurs courbures. Pour résoudre ce problème, les hypothèses posées sont :

- 1- les énergies des joints sont similaires (isotropie aux joints).
- 2- la vitesse de croissance est proportionnelle à la vitesse du joint.
- 3- le rayon de courbure moyen est proportionnel à la dimension moyenne des grains.

Soit r_1 et r_2 les rayons de courbure qui décrivent un joint (surface) d'énergie γ , la force motrice s'écrit alors :

$$F = \gamma \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) \quad (\text{II.18})$$

Si le joint est sphérique, de rayon r , on a $r = r_1 = r_2$ et la relation (II.18) devient, en tenant compte de l'hypothèse 3 ($r = \alpha R$) :

$$F = \frac{\alpha\gamma}{R} \quad (\text{II.19})$$

Où α est une constante et R est le rayon du grain.

D'après l'hypothèse 2, la vitesse de migration du joint V est proportionnelle à la force motrice et l'expression de la vitesse V s'écrit :

$$V = m \times \frac{\alpha\gamma}{R} \quad (\text{II.20})$$

Où m est la mobilité du joint.

L'hypothèse 1 peut donner :

$$\frac{dR}{dt} = c \times \frac{\alpha m \gamma}{R} \quad (\text{II.21})$$

En intégrant cette équation, on a :

$$\bar{R}^2 - \bar{R}_0^2 = kt^{1/2} \quad (\text{II.22})$$

Où \bar{R}_0 est la taille initiale à ($t=0$) et k est une constante.

La taille initiale peut être de l'ordre de $1 \mu\text{m}$ et la taille après croissance est de l'ordre de $100 \mu\text{m}$ ce qui donne :

$$\bar{R}^2(t) = kt^{1/2} \quad (\text{II.23})$$

Expérimentalement, la dernière équation n'est pratiquement jamais vérifiée, on a généralement:

$$\bar{R}^2(t) = kt^n \quad (\text{II.24})$$

Où n est l'exposant cinétique, sa valeur est proche de la valeur 0.5, il dépend de T et du matériau.

Ce modèle néglige la spécialité des joints et ne tient pas compte de l'aspect géométrique et topologique de la microstructure.

II.3.1.3. Modèle de LOUAT

La notion de la marche au hasard constitue la base du modèle de Louat (Louat, 1974) ; ce modèle suppose que le mouvement aléatoire des joints est la cause fondamentale de la croissance ou la décroissance des grains, en relation avec la diminution de l'énergie du système.

Dans ce modèle, la croissance des grains se fait par des sauts atomiques aléatoires à travers les sites vides de façon similaire au processus de diffusion, le nombre de grains à un temps donné est connu et la longueur de la chaîne est invariante dans le temps, ce qui implique que le volume du matériau reste inchangé au cours du processus de croissance.

Le volume est constant dans le temps, cela veut dire que la croissance de certains grains se fait par l'alimentation d'autres grains, on peut dire donc qu'une classe de grains est alimentée par une autre classe de taille plus petite. L'évolution du nombre de grains de chaque classe obéit à la deuxième loi de Fick :

$$\frac{\partial f(t,l)}{\partial t} = D \frac{d^2 f(t,l)}{dl^2} \quad (\text{II.25})$$

Où :

- $f(t,l)$ est la fonction de distribution des grains,
- l est la taille moyenne des grains de la classe considérée,
- D est un coefficient donné par : $D = 1/2 (\delta x^2) \Gamma$, (II.26)
- Γ est la fréquence de saut aléatoire,
- δx est la longueur du saut.

La longueur totale de la chaîne atomique est donnée par l'expression suivante :

$$L = \int_0^{\infty} \frac{l}{l_c} f(l,t) \left(\frac{dl}{dt} \right) l_c^2 = \int_0^{\infty} \lambda F(\lambda) d\lambda = c \quad (\text{II.27})$$

- l_c est la taille critique
- $F(\lambda)$ est la nouvelle fonction de distribution des tailles, indépendante du temps.

$$F(\lambda) = f(l, t) \cdot l_c^2 \quad (\text{II.28})$$

En introduisant l'expression (II.28) dans la loi de Fick II, on obtient :

$$\frac{\partial(F(\lambda)/l_c^2)}{\partial t} = D \frac{\partial^2(F(\lambda)/l_c^2)}{\partial \lambda^2} \quad (\text{II.29})$$

Après développement, l'équation (II.29) devient :

$$D \frac{\partial^2 F(\lambda)}{\partial \lambda^2} - \frac{\partial F(\lambda)}{\partial \lambda} + \frac{2}{l_c} F(\lambda) \frac{\partial l_c}{\partial t} = 0 \quad (\text{II.30})$$

Si l_c suit une loi parabolique [$l_c \frac{dl_c}{dt} = k$ et $l_c^2(t) - l_c^2(0) = 2kt$], l'équation (II.30) devient :

$$D \frac{d^2 F}{d\lambda^2} + k\lambda \frac{dF(\lambda)}{d\lambda} - 2kF = 0 \quad (\text{II.31})$$

Le problème est résolu en considérant les deux conditions aux limites :

$$F(0) = 0 \text{ et } F(\infty) = 0$$

La solution de cette équation différentielle est alors :

$$F(\lambda) = KZ \exp\left(-\frac{1}{2} Z^2\right) \quad \text{avec : } Z^2 = \sqrt{\frac{K}{D}} \lambda \quad (\text{II.32})$$

Cette distribution obtenue par Louat correspond à celle de Rayleigh à une dimension, lorsque le mouvement des joints est aléatoire, les fonctions de distribution des modèles statistiques et déterministes sont donc similaires.

Hundri et Ryum (Hundri et Ryum, 1992) ont comparé ce modèle avec leur modèle déterministe à une dimension, ils ont considéré des chaînes d'atomes (les grains), séparées par des vides (les joints de grains) (cf II.3. 2).

II.3.1.4. Analyse de RHINES et CRAIG

Le modèle de Rhines et Craig (Rhines et Craig, 1974) met en évidence l'aspect topologique de la croissance, il insiste sur l'importance des caractéristiques géométriques du voisinage (faces, sommets, arêtes des grains voisins). Les auteurs introduisent deux notions principales :

- La constante de balayage θ , qui définit le nombre de grains disparus quand les joints balayent l'unité de volume.

- Le gradient structural ξ , qui est le produit de l'aire des joints (S_v) ramenée à l'unité, par la courbure de surface (m_v) ramenée à l'unité:

$$\xi = \frac{mS_v}{N_v}$$

- N_v est le nombre de grains par unité de volume.

$$- m_v = \int_{S_v} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) dS_v \quad (\text{II.33})$$

Où r_1 et r_2 sont les principaux rayons de courbure

Les quantités θ et ξ doivent rester invariantes dans le temps. Doherty (Doherty, 1974) a proposé d'autres paramètres :

θ^* : le nombre de grains disparus lorsque les joints balayent un volume égal au volume moyen des grains.

ξ^* : la courbure moyenne par grain, égale à : m_v/N_v

Suivant l'analyse de Atkinson (Atkinson, 1988), la pression moyenne sur le joint est :

$$p = \frac{\gamma_j m_v}{S_v} \quad (\text{II.34})$$

La vitesse moyenne du joint est donnée par :

$$V = MP = M \frac{\gamma_j m_v}{S_v} \quad (\text{II.35})$$

Lorsque le volume balayé par unité de volume est $V \times S_v$, la vitesse de disparition des grains est :

$$\frac{dN_v}{dt} = \frac{\theta^* V S_v}{\bar{V}} = \theta^* M \gamma_j m_v N_v \quad (\text{II.36})$$

Pour chaque grain disparu par unité de volume, le volume de matière est redistribué sur le nombre de grains restant N_v , le volume moyen augmente donc suivant la relation suivante :

$$\frac{d\bar{V}}{dt} = \frac{dN_v}{dt} \times \frac{\bar{V}}{N_v} = \frac{\theta^* M m_v \gamma_j}{N_v} \quad (\text{II.37})$$

et donc :

$$\bar{V} = \frac{\theta^* M \gamma_f m_v}{N_v} \times t + \bar{V}_0 \quad (\text{II.38})$$

\bar{V}_0 est le volume moyen à $t=0$.

La relation linéaire entre le volume moyen et le temps, trouvée par Rhines et Craig pour l'aluminium 99.99%, donne un exposant de croissance égal à 3 ($D=ct^{1/3}$), différent de la valeur obtenue par application de la loi parabolique de croissance (Hillert, 1965 ; Louat, 1974).

II.3.1.5. Modèle d'ABBRUZZESSE et LÜCKE

Ce modèle est basé sur le modèle statistique de Hillert, il prend en compte l'aspect microstructural et introduit la texture de la matrice, il relie l'orientation des joints à leurs énergies et mobilités (Abbruzzesse et Lucke 1986 ; Abbruzzesse et al., 1986 ; Abbruzzesse et al., 1992). Dans un premier temps ils ont d'abord considéré le modèle sans texture (Abbruzzesse, 1985).

II.3.1.5.1. Modèle sans texture

Dans ce cas, le modèle ne prévoit pas la différence d'orientations entre les grains.

Un grain A de volume V_A peut croître au dépens d'un voisin B avec la vitesse :

$$\frac{dV_A}{dt} / B = MS_{AB} \left(\frac{1}{R_B} - \frac{1}{R_A} \right) \quad (\text{II.39})$$

Où :

- $M=2m\gamma$ est la diffusivité macroscopique,
- S_{AB} est la surface de contact entre les deux grains A et B,
- R_A et R_B sont les rayons des grains A et B respectivement.

Avec l'hypothèse des grains sphériques : $V_A = \frac{4}{3}\pi R_A^3$, la variation de taille du grain A aux dépens

de son voisin B s'écrit :

$$\frac{dR_A}{dt} / B = \frac{M}{4\pi R_A^2} S_{AB} \left(\frac{1}{R_B} - \frac{1}{R_A} \right) \quad (\text{II.40})$$

Si le grain A est entouré de N_A grains, l'expression (II.40) devient :

$$\frac{dR_A}{dt} = \frac{M}{4\pi R_A^2} \sum_{i=1}^{N_A} S_{Ai} \left(\frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_A} \right) \quad (\text{II-41})$$

On obtient un système à N_G équations différentielles si N_G étant le nombre total de grains.

L'hypothèse d'homogénéité de l'environnement (homogénéité dans la répartition des grains du matériau), simplifie considérablement le problème. Dans ce cas, les grains sont séparés en classes, les grains de même rayon auront le même voisinage et la variation de rayon (dR_{ij}/dt) donnée par la relation (II-40) sera valable pour tous les grains appartenant à une classe de grains de rayon R_A , le nombre d'équations N_G se réduit donc à N_S le nombre de classes.

La surface moyenne de contact a_{ij} d'un grain de la classe i (de rayon R_i) avec les grains de la classe j (de rayon R_j), est donnée par le rapport de la surface totale de contact A_{ij} entre les deux classes et le nombre n_i des grains de la classe i , équation (II-41)

$$a_{ij} = \frac{A_{ij}}{n_i} \quad (\text{II-42})$$

Par l'hypothèse du grain sphérique, la surface d'un grain de classe i est égale à :

$$\sum_j a_{ij} = 4\pi R_i^2 \quad (\text{II-43})$$

En remplaçant la surface de contact individuelle S_{AB} par la surface moyenne a_{ij} dans l'équation (II-41), on obtient :

$$\frac{dR_i}{dt} = \frac{M}{4\pi R_i^2} \sum_j a_{ij} \left(\frac{1}{R_j} - \frac{1}{R_i} \right) \quad (\text{II-44})$$

Avec : $i=1,2,\dots,N_S$.

En introduisant l'équation (II-42), on obtient :

$$\frac{dR_i}{dt} = M \left(\frac{1}{R_{c_i}} - \frac{1}{R_i} \right) \quad (\text{II-45})$$

R_{c_i} est le rayon critique de la classe i , donné par :

$$R_{c_i} = \frac{\sum_j a_{ij}}{\sum_j \frac{a_{ij}}{R_j}} \quad (\text{II-46})$$

- $R < R_{c_i}$ les grains de la classe i vont croître
- $R > R_{c_i}$ la décroissance des grains de la classe i.

Avec l'hypothèse de la répartition aléatoire des grains dans le matériau, a_{ij} ne dépend que des nombres n_i et n_j (nombres de grains de la classe i et j respectivement) :

$$a_{ij} = 4\pi R_i^2 \frac{n_j 4\pi R_j^2}{\sum_j n_j 4\pi R_j^2} \quad (\text{II-47})$$

Le rayon R_{c_i} défini dans l'équation (II-46) devient :

$$R_c = R_{c_i} = \frac{\sum_j n_j R_j^2}{\sum_j n_j R_j} \quad (\text{II-48})$$

II.3.1.5.2. Modèle avec texture

La différence d'orientation entre les grains voisins introduit d'autres paramètres dans le calcul précédent. Dans ce modèle, un grain est caractérisé par sa taille i et son orientation H . Dans ce cas, la variation du rayon d'une classe, de taille i et d'orientation H , s'écrit :

$$\frac{dR_i^H}{dt} = \sum_K \eta^K M^{HK} \left(\frac{1}{R_C^K} - \frac{1}{R_i^H} \right) \quad (\text{II-49})$$

$$\eta^K = \varphi^K \frac{\bar{R}^{2K}}{R^2} \quad \text{et} \quad R_C^K = \frac{\bar{R}^{2K}}{R^K} = \bar{R}^K (1 + x^{K^2}) \quad (\text{II-50})$$

Dans ce modèle, le principe de calcul en croissance normale ou anormale est le même. Les hypothèses d'homogénéité et de voisinage du modèle sans texture ne sont plus valables : dans un matériau réel, les grains de même orientation et de même taille n'ont pas nécessairement le même environnement local ; le rayon critique ne dépend plus de la taille des grains mais uniquement de l'orientation.

Dans le modèle de Hillert, le processus de croissance anormale peut démarrer si au moins un grain de la matrice a une taille supérieure à $2\langle R \rangle$, où $\langle R \rangle$ est le rayon moyen de la matrice primaire (Hillert, 1965). Les premières contradictions de ce modèle sont liées à l'observation expérimentale de la croissance anormale des grains de Goss, dans les tôles magnétiques de type

Hi-B, où les grains de Goss font partie des plus petits grains de la matrice (Rouag et al, 1986 ; Harase et al, 1986). Dans une structure hétérogène, la croissance d'un grain n'est donc pas contrôlée par le comportement moyen de la matrice mais par son voisinage immédiat : du point de vue morphologique, où la relation du rayon critique pour une croissance des grains avec leur voisinage le plus proche est pris en considération (Maazi & Rouag, 2001, 2002 ; Maazi et al, 2006) ; du point de vue cristallographique où la croissance des grains de Goss est considérée dans des matrices hypothétiques, reconstruites à partir de composante de texture de la matrice réelle (Afer et al, 2004 a et b, 2005).

Dans notre travail, les clusters sont définis à partir de la matrice réelle, nous avons considéré deux types d'hétérogénéité pouvant influencer le déclenchement de la croissance anormale : des clusters morphologiques et des clusters cristallographiques.

II.3.2. Les modèles déterministes

Hundry et Ryum (Hundry et al, 1976, Hundry et Ryum, 1981, 1982) sont les premiers à proposer un modèle déterministe pour prévoir le comportement des grains en croissance anormale. Dans un premier temps, le modèle a traité la croissance des grains par analogie avec la coalescence des bulles de savon. Les grains sont assimilés à des bulles connectées par des tubes. La pression interne P_i dans une bulle de rayon R_i est égale à :

$$P_i = 2\sigma/R_i \quad (\text{II.51})$$

La différence des pressions internes dans les bulles est due à la différence de tailles entre les bulles voisines, l'évolution du système est exprimée par :

$$dv = m2\sigma \left(\frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_j} \right) dt \quad (\text{II.52})$$

Où m est la viscosité. Le taux de croissance est donc :

$$\frac{dR_i}{dt} = M \left[\frac{1}{R_i^2} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_{i-1}} + \frac{1}{R_{i+1}} \right) \right] \quad (\text{II.53})$$

Où $M = 4m\sigma$.

Pratiquement, il faut résoudre un système de N équations de la forme (II.54), N est le nombre de grains. Les auteurs ont résolu le problème avec (N=3500), ils ont retrouvé les caractéristiques connues de la croissance normale, avec une expression du rayon moyen donnée par :

$$\bar{R}^4(t) - \bar{R}^4(0) = kt \quad (\text{II.54})$$

A partir de ce résultat, on constate que l'exposant cinétique est 1/4, il est très éloigné de la valeur 1/3 trouvée dans la majorité des études réalisées en 3D. Cette différence provient de deux problèmes :

- chaque bulle possède deux voisins, dans les matériaux réels le nombre de voisins dépend de la taille du grain ;
- la surface de contact n'est pas constante entre deux grains.

Pour tenir compte de ces deux points, des modifications ont été introduites dans le modèle (figure II.6), la surface de contact d'un grain i avec ses voisins doit toujours vérifier la relation suivante :

$$A_i = 4\pi R_i^2 = \sum_{j=1}^{j_{\max}} A_{ji} \quad (\text{II.55})$$

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 voisins en contact avec le grain i

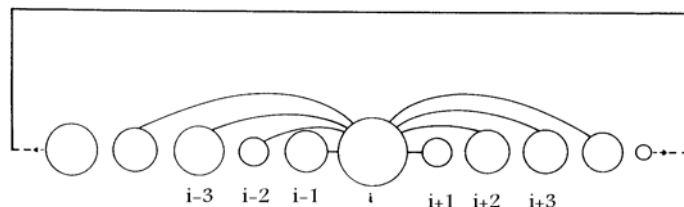


Figure II.6 : Modèle de bulles de savons connectées en considérant les interactions avec le voisinage (Hundri et al, 1979).

Chapitre III

Techniques de Simulation

et

Procédures de Calcul utilisées

III.1. INTRODUCTION

Le phénomène de croissance est parmi les phénomènes les plus importants en métallurgie, plusieurs études ont été faites sur ce processus et son influence sur l'évolution des propriétés mécaniques des matériaux polycristallins.

De nombreux modèles ont été développés ces dernières années, surtout depuis l'utilisation de la simulation numérique comme technique d'analyse prévisionnelle. L'approche numérique permet, d'une part d'orienter le choix des approximations dans les approches analytiques, d'autre part d'obtenir des résultats directement comparables à ceux de l'expérience. Les moyens informatiques actuels ont donné un essor considérable aux méthodes de simulation de l'évolution de la microstructure ; utilisées en premier lieu pour la croissance des grains ou des sous-grains, ces méthodes se sont étendues à tous les stades de recristallisation, y compris l'épinglage par les particules de seconde phase et la formation des textures.

Les techniques de simulation utilisées sont partagées en deux catégories, probabilistes et déterministes. Les approches probabilistes de type Monte Carlo ont proposé les plus importantes théories en modélisation et en simulation de croissance, depuis les premiers travaux de Srolovits et ses collaborateurs (Srolovits et al, 1983 ; Sahni, 1983). Ils ont établi l'existence d'une relation entre ces théories conceptuelles de Monte Carlo et les caractéristiques physiques de croissance. Ces approches statistiques traitent le changement de taille d'un grain donné, noyé dans un milieu qui représente le comportement moyen de l'ensemble de grains d'une façon générale, c'est-à-dire que tout grain 'voit' les caractéristiques moyennes de la population et non son entourage réel. Pour les modèles déterministes, la croissance est décrite 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, donc le comportement à travers le temps sera uniquement une conséquence des règles déjà établies. La simplicité des conditions physiques imposées à l'échelle des grains implique un nombre important de variables, qui doivent être prises en compte simultanément, limitant ainsi ces modèles.

III.2.METHODE DE SIMULATION

La connaissance du rôle des paramètres de croissance permet de mieux contrôler ce phénomène, c'est dans ce cadre que l'outil informatique est introduit pour simuler l'évolution des microstructures dans les divers stades de recristallisation, dans un large champ de variation des différents paramètres, qui peuvent influencer le processus. La comparaison des résultats de

calcul avec les résultats expérimentaux permet de mieux comprendre la relation paramètre-cinétique.

III.2.1. Automate cellulaire

Cette méthode a été appliquée à la recristallisation par Hesselbarth et Gobel (Hesselbarth et Gobel, 1991). Le développement du modèle sur ordinateur a permis de représenter la microstructure initiale par un ensemble de cellules, ensemble caractérisé par la géométrie, le nombre, la taille et l'arrangement des cellules (figure III-1). L'évolution est décrite en respectant les lois topologiques spécifiées à l'avance, comme la relation de stabilité aux nœuds par exemple. Cette méthode permet ainsi de simuler la relaxation de la courbure des joints par mouvement des sommets. En croissance, l'automate cellulaire 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.

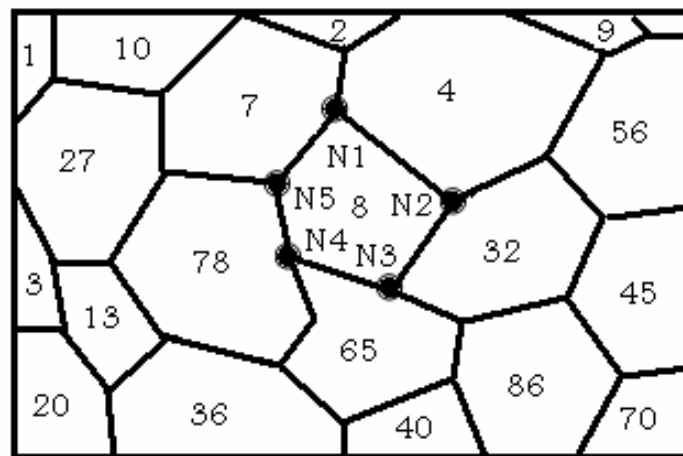


Figure III.1: Représentation d'une microstructure en 2D dans l'automate cellulaire, les numéros correspondent aux grains, un joint est spécifié par deux sommets, ces derniers sont indexés par la lettre N.

III.2.2. Dynamique moléculaire

La dynamique moléculaire est une méthode déterministe, basée sur la simulation des équations de mouvement ; elle est couramment utilisée en simulation atomique. L'objectif principal de la dynamique moléculaire est le calcul des propriétés statistiques ou dynamiques d'un système, en utilisant les équations de mouvement tirées de la mécanique classique newtonienne, avec des solutions obtenues par des méthodes numériques (Novikov, 1978 ; Rollett et al, 1992). 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 par les autres atomes en fonction du temps, les forces sont considérées comme constantes. 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.

III.2.3. La technique Monte Carlo

La technique Monte Carlo est une adaptation d'un modèle classique utilisé en physique statistique, connu sous le nom de modèle de Pott (modèle de spins utilisé en ferromagnétisme). Elle possède un caractère purement statistique : c'est la technique d'échantillonnage. L'évolution du système est basée sur le principe de la minimisation de l'énergie globale, le passage d'une configuration à une autre est lié à des probabilités de transition. Cette méthode a été appliquée dans les simulations de croissance des grains en 2D et 3D, avec introduction de l'épinglage par des particules de seconde phase et de l'anisotropie des joints de grains (Anderson et al., 1988-1989 ; Srolovits et al., 1985 ; Rollett et al., 1989). Une analyse des différents travaux effectués par cette méthode peut être trouvée dans l'ouvrage de Humphreys (Humphreys et Hatherly, 1995) et dans l'article revue (overview) de Rollett (Rollett et al., 1997).

L'évolution du processus de croissance est contrôlée par plusieurs paramètres microstructuraux (composition chimique, présence de particules de seconde phase, texture cristallographique.....). L'introduction de ces paramètres, avec une évolution imposée peut donner à cette méthode un caractère déterministe.

III.2.4. Méthode des vertex

La méthode des vertex est une description déterministe, elle a été appliquée en premier sous cette appellation par Kawasaki et ses collaborateurs (Kawazaki et al, 1989) par considération du mouvement des points triples en 2D, modèle qu'ils développèrent ensuite en 3D, avec également introduction des vertex virtuels (Fuchizaki et al, 1995).

L'évolution de la microstructure est décrite par le mouvement de sommets (points triples en 2D et points quadruples en 3D), en se basant sur des calculs simples pour étudier la migration des joints. Ce modèle permet de considérer les différentes mobilités et énergies des joints de grains en fonction des paramètres introduits pour le contrôle de leur mouvement.

Dans le cadre du présent travail, nous avons utilisé la méthode Monte Carlo et la méthode des vertex pour l'étude de la croissance dans des clusters, caractéristiques d'une structure hétérogène, du point de vue morphologique et cristallographique. Les travaux antérieurs de notre équipe utilisent la méthode Monte Carlo, notre présent travail est une première approche de la croissance cristalline par la méthode des vertex, dans l'axe simulation de notre équipe.

Les programmes que nous avons utilisés pour l'application des deux méthodes ont été élaborés en langage Matlab. La matrice initiale utilisée est une matrice de Fe₃Si de type HiB, après recristallisation primaire, caractérisée par EBSD.

III.3. TECHNIQUE DE SIMULATION MONTE CARLO

III.3.1. Principe

Le matériau est décrit par un ensemble de sites, avec les mêmes propriétés chimiques et physiques. Les sites sont généralement distribués sur un motif hexagonal de réseau triangulaire (figure III-2), à chaque site est affecté un nombre entier variant entre 1 et Q, ce nombre est nommé spin ou orientation. Deux sites adjacents ayant la même orientation sont donc à l'intérieur d'un même grain ; un joint de grains passe entre deux sites adjacents d'orientations différentes

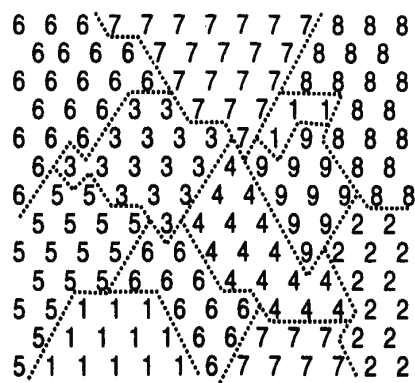


Figure III.2: Représentation d'une microstructure sur un réseau triangulaire ; les nombres entiers représentent les orientations et les traits représentent les joints de grains.

Le principe de la technique Monte Carlo est basé sur la relaxation de l'énergie libre globale du matériau, emmagasinée dans les joints de grains ; elle est proportionnelle au nombre de paires d'orientations différentes entre les premiers proches voisins.

L'énergie des joints est exprimée par la relation suivante :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^z \Delta E(Q_i, Q_j) (1 - \delta_{Q_i, Q_j}) \quad (\text{III-1})$$

Où:

- Q_i et Q_j sont respectivement les orientations des sites voisins i et j ;
- ΔE est la constante d'énergie liée à la désorientation entre les sites i et j ;
- N est le nombre de sites constituant le matériau ;
- z est le nombre de proches voisins, il dépend du motif utilisé ; avec un motif hexagonal, $z=6$.
- δ_{Q_i, Q_j} est le symbole de Kronecker.
- le facteur $1/2$ est introduit pour éviter de comptabiliser la même paire de sites deux fois.

Si on considère une isotropie de migration des joints de grains, la désorientation entre les grains n'est pas considérée, on ne différencie pas les classes des joints et l'énergie devient alors :

$$E = \frac{1}{2} \Delta E \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^z (1 - \delta_{Q_i, Q_j}) \quad (\text{III-2})$$

L'évolution de la microstructure correspond à une réorientation des sites, basée sur la minimisation de l'énergie globale. Le processus de réorientation continue jusqu'à la stabilisation du système global. Chaque site est caractérisé par une énergie donnée par la relation :

$$E = -J \sum_{i=1}^z (\delta_{Q_i, Q_j} - 1) \quad (\text{III-3})$$

J est une constante positive représentant l'énergie.

Après réorientation, la variation d'énergie du site est donnée par :

$$\Delta E_i = E_{i\text{finale}} - E_{i\text{initiale}} \quad (\text{III-4})$$

Si $\Delta E_i \leq 0$ la réorientation est acceptée, sinon elle est acceptée avec la probabilité :

$$P = \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right) \quad (\text{III-5})$$

k est la constante de Boltzmann et T est la température, exprimée en Kelvin.

Les étapes de calcul de la méthode MC sont résumées dans l'algorithme suivant, proposé et appliqué, pour la première fois pour la croissance des grains, par Anderson et ses collaborateurs [Anderson et al, 1984] :

1. Générer une matrice initiale en attribuant à chaque site une orientation Q_i .
2. Choisir aléatoirement un site i d'orientation Q_i .
3. Calculer l'énergie de site i .
4. Choisir un site j au hasard parmi les six premiers voisins de i .
5. Calculer l'énergie de site j .
6. Calculer ΔE et la probabilité correspondante (équation III-5) pour le changement d'orientation de i à j .
7. Répéter la procédure pour un autre site.

Remarques :

- Comme nous utilisons des matrices réelles comme matrices initiales, nous introduisons une étape de calcul de la désorientation entre les deux sites i et j , après l'étape 4 de l'algorithme ci-dessus ; on a $E=0$ si les deux sites appartiennent au même grain, sinon $E=J$ (équation III-3).
- Les sites limites d'une microstructure ne possèdent pas le même nombre de voisins que les sites de l'intérieur ; dans les calculs de simulation de croissance, le choix aléatoire prendra en compte seulement les sites à l'intérieur de la matrice possédant 6 voisins ; les sites limites ne sont pas considérés.

III.3.2. Le temps dans la méthode Monte Carlo

L'unité de temps dans la technique MC est le MCS ou pas Monte Carlo (Monte Carlo Step), il correspond à une procédure complète de réorientation de tous les sites de la matrice, cette procédure est d'autant plus longue que les microstructures sont de haute résolution. Ce temps d'évolution n'est donc pas un temps réel. La conversion du MCS en temps réel introduit un facteur exprimé par l'énergie d'activation $\{\exp(-W/kT)\}$, qui correspond à la fréquence de saut atomique (W , k et T sont respectivement l'énergie d'activation atomique, la constante de Boltzmann et la température) (Srolovits et al, 1984).

III.3.3. Générateur de nombre aléatoire

Le générateur de nombre aléatoire est utilisé dans notre calcul pour:

- tirer un site de la matrice au hasard,

- réorienter le site choisi aléatoirement vers une nouvelle orientation parmi les voisins,
- accepter ou non la probabilité de réorientation,
- réorienter les sites des grains à 1 ou 2 sites de la matrice expérimentale vers les orientations des voisins.

Le tirage aléatoire des nombres peut poser le problème de corrélation entre deux tirages ; pour résoudre ce problème, nous avons utilisé les fonctions propres au logiciel Matlab.

III.3.4. Influence du motif sur l'évolution de la croissance

Plusieurs études ont montré que le motif du réseau utilisé a une influence sur les résultats de simulation de croissance (Rollett, 1997 ; Holm et al, 1996). Dans le matériau réel, l'énergie du joint de grains n'est pas uniforme, cette anisotropie peut être caractérisée en simulation par le motif, le nombre de coordination et la symétrie du réseau ; le tableau III-1 regroupe divers types de réseaux avec leurs caractéristiques et leur incidence sur la cinétique de croissance.

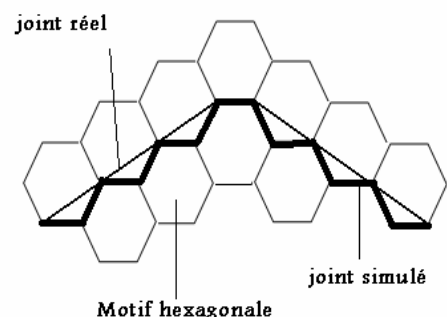
Type de réseau	Motif	Nombre de coordination	Anisotropie	Croissance
Cubique (1)	Cubique	4	1,414	Stagnation
Triangulaire	Hexagonale	6	1,154	Normale
Cubique (1,2)	Octogonale	8	1,116	Normale
Triangulaire	Dodécagonale	18	1,057	Normale

Tableau III-1: Différents réseaux avec leurs motifs en 2D et leur influence sur la croissance, (1,2) sont les premiers et les deuxièmes proches voisins du site (Holm et al, 1996).

Nous avons utilisé dans nos calculs le réseau triangulaire avec un motif hexagonal, généralement utilisé dans les simulations en 2D. Ce motif a l'avantage d'éviter le risque de stagnation rapide ; de plus sa forme géométrique possède la symétrie la plus adéquate pour la représentation des joints de grains la plus proche de celle d'une microstructure réelle (figure III-3).

Figure III-3:

Représentation d'un joint de grains avec un réseau triangulaire de motif hexagonal



III.3.5. Influence du nombre d'orientations

Le nombre d'orientations a une grande influence sur l'évolution des microstructures et la cinétique de croissance. Lorsque ce paramètre est petit, un fusionnement des grains peut être observé, ce qui amène à une augmentation rapide des diamètres de grains, donc à une accélération de la croissance. Il a été établi que la possibilité que deux grains de même orientation deviennent voisins est inversement proportionnelle au nombre d'orientations (Srolovits et al, 1983), la probabilité P pour que ce cas particulier se produise est exprimée par la relation:

$$P = 1 - \left(1 - \frac{1}{Q}\right)^z \quad \text{(III-6)}$$

Où Q et z sont respectivement le nombre d'orientations et le nombre de deuxièmes proches voisins. Si nous considérons un motif hexagonal, avec z=18, nous avons : P=0.631 pour Q=48 et P=0.026 pour Q=640. L'augmentation du nombre d'orientations diminue donc la possibilité d'avoir le fusionnement de grains.

III.3.6. Influence de la dimension de la matrice

La dimension ou le nombre total de sites de la matrice a un effet important sur la simulation de croissance. Pour suivre les paramètres de croissance, il est nécessaire d'avoir une population statistique qui compte un nombre important de grains, la matrice initiale doit avoir suffisamment de temps pour que l'équilibre soit atteint et le suivi des paramètres de croissance devient valable.

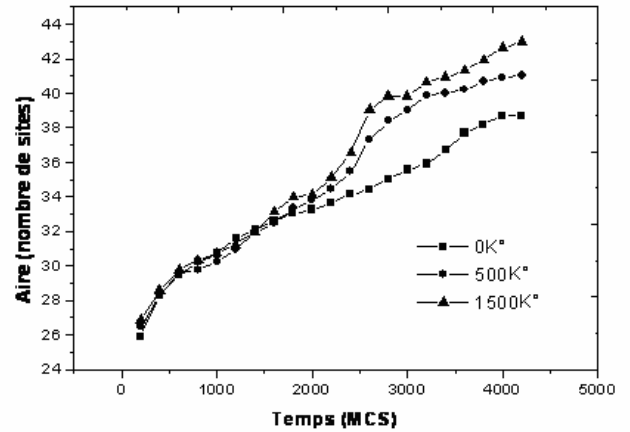
Lorsque le nombre de sites est faible, une élimination rapide des joints est observée, pouvant aller jusqu'à l'obtention d'un monocristal. Une série de calculs, effectuée avec des résolutions différentes (20x20 sites, 50x50 sites, 100x100 sites, 200x200 sites) a montré que la stagnation est atteinte d'autant plus rapidement que les matrices sont de faible résolution (Sekak, 2003).

L'utilisation de petites matrices (50x50 sites) pour la caractérisation des clusters ne permet pas un suivi rigoureux des paramètres de croissance mais, dans un cadre comparatif, la caractérisation du voisinage (morphologique ou cristallographique) le plus adéquat pour la croissance anormale des grains de Goss peut être envisagée.

III.3.7. Influence de la température

La température est le paramètre le plus important intervenant dans le processus de croissance des matériaux (Humphreys et Hatherly, 1995). En simulation, elle est introduite dans l'expression de la probabilité (équation III-5). Lorsque la température augmente, la cinétique de croissance s'accélère (figure III-4).

Figure III.7 : Influence de la température sur l'évolution de l'aire moyenne, matrice à 120x120 sites (Sekak, 2003).



L'introduction de la température dans la procédure de simulation masque les effets que peuvent avoir les paramètres structuraux sur le mouvement des joints. Pour pouvoir caractériser l'effet des paramètres morphologiques et cristallographiques, nos calculs sont effectués à T=0K, comme cela est en général le cas dans les travaux considérant l'impact des paramètres structuraux sur le processus de croissance. La considération de T permet de valider la procédure initiale, sans considération de paramètres structuraux.

A T=0K, les sites réorientés sont ceux ayant une énergie inférieure à 0, pour les sites avec E>0 aucune configuration n'est acceptée, et donc la probabilité P devient :

$$P = \begin{cases} 1 & \Delta E < 0 \\ 0 & \Delta E > 0 \end{cases} \quad \text{(III-6)}$$

III.3.8. Limites de la technique Monte Carlo

Comme toute méthode de calcul, la technique MC a ses limites et ses défauts, malgré le succès certain et toujours actuel donné par les résultats satisfaisants concernant le comportement global de la croissance. Les limites importantes au cours de l'utilisation de cette technique peuvent être résumées comme suit :

- 1- La nature statistique de la méthode considère les grains en croissance comme une population statistique, où chaque grain voit les caractéristiques moyennes de la population et non son entourage réel. Elle ne peut donc pas décrire le comportement intrinsèque des grains en croissance et leur environnement local. Des modifications de la procédure initiale peuvent être introduites pour pallier cet effet.
- 2- Le temps d'évolution n'est pas un temps réel ; il possède une nature discrète qui ne permet pas de suivre le changement à l'échelle des sites, le mouvement réel des joints de grains ne peut pas être suivi.
- 3- Les sites du matériau réel ne sont pas distribués sur un réseau régulier comme en simulation, il est difficile de prendre en compte l'hétérogénéité de structure.
- 4- La simulation de la croissance en présence de particules peut être étudiée par la MC, mais la nature de l'interaction particule-joint ne peut pas être appréciée par cette méthode, bien que l'épinglage soit prévisible.

III.4. SIMULATION PAR LA METHODE DES VERTEX

Contrairement à la technique Monte Carlo, il n'y a pas encore de modélisation établie, basée sur des simulation de croissance par les vertex.

III.4.1. Historique

Le modèle des vertex a été proposé, pour la première fois sous ce nom, par Kawazaki et ses collaborateurs (Kawazaki et al, 1989). En fait, le mouvement des points triples a été utilisé antérieurement en simulation de croissance dans d'autres travaux, mais sans appellation explicite (Soares et al., 1985 ; Frost et al, 1987 ; Zhang et al., 2003). Une première approche analytique a été proposée par Fullman dès 1952 (Fullman, 1952). Ensuite, c'est à partir de l'évolution observée sur des réseaux cellulaires, que des modèles basés sur le mouvement des points triples (vertex) ont été proposés par plusieurs auteurs, dans des modélisations analytiques ou basées sur des simulations :

- avec une croissance contrôlée uniquement par le mouvement des points triples (Nagai et al, 1988, 1994 ; Weygand et al, 1988 ; Enomoto, 1990 ; Miodownik, 2002) ;
- avec introduction d'une force motrice due à la courbure (curvature-driven grain growth) (Rivier et Lssowski, 1982 ; Weaire et Rivier, 1984 ; Atkinson, 1988) et la considération de « vertex virtuels », permettant de discrétiser le joint (Bronsard et Wetton, 1994 ; Fuchizaki et al, 1995 ; Weygand et al., 1998).

L'effet d'anisotropie a été pris en compte par Humphreys pour l'étude de la nucléation en recristallisation (Humphreys, 1992) ; dans les travaux de Weygand et ses collaborateurs, l'effet d'épinglage des joints par une seconde phase a été considéré (Weygand et al., 1999, 2000). Ils ont également été considérés dans des extensions du modèle des vertex de Kawasaki (Nagai et al., 1994).

III.4.2. Les modèles

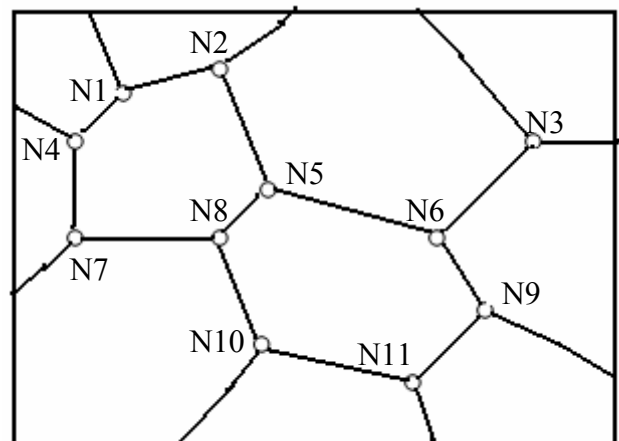
Le modèle des vertex (Kawazaki et al, 1989) a été appliqué en deux dimensions, avec une évolution des grains caractérisée au départ seulement par le mouvement des points triples. Deux types de modèles sont proposés sous la même appellation de modèle des vertex, selon qu'ils considèrent les vitesses de chaque vertex ou une vitesse moyenne de l'ensemble des vertex.

La microstructure considérée est obtenue à partir d'un réseau de Voronoi, elle est définie à partir des points triples (figure 1). L'évolution de la microstructure est définie à partir de l'évolution de cette population :

- en positions, avec $\{r\} = r_1, r_2, \dots$,
- en vitesses $\{v\} = v_1, v_2, \dots$, avec $v_i = dr_i / dt$.

Figure 1 :

Représentation d'une microstructure construite sur un réseau de Voronoi ; $i = N1, N2, \dots$ sont les points triples.



L'évolution de la microstructure est associée à une fonction potentielle $F(\{r\})$, qui décrit l'énergie totale de surface, et une fonction de dissipation de Rayleigh $R(\{r\}, \{v\})$ qui décrit la dissipation due au mouvement des joints de grains à travers le matériau. Ces deux fonctions sont données par :

$$F(\{r\}) = \int_{GB} \sigma(a) da \quad (\text{III-7})$$

$$R(\{r\}, \{v\}) = \frac{\sigma}{2L} \int_{GB} v(a)^2 da \quad (\text{III-8})$$

σ et $v(a)$ sont respectivement l'énergie et la vitesse normale du joint au point a , L est un coefficient cinétique.

Le réseau de Voronoi considère les joints de grains comme des segments droits, un joint ij sépare deux points triples i et j , de position r_i et r_j , et de vitesse v_i et v_j respectivement. Si r_{ij} est le vecteur $(r_j - r_i)$, sa normale n_{ij} est donné par la relation :

$$n_{ij} = \frac{1}{\|r_{ij}\|} \begin{bmatrix} -y_{ij} \\ x_{ij} \end{bmatrix} \quad (\text{III-9})$$

Où $y_{ij} = y_j - y_i$ et $x_{ij} = x_j - x_i$

Les intégrales (III-7) et (III-8) deviennent :

$$F_{ij} = \sigma \|r_j - r_i\| \quad (\text{III-10})$$

$$R_{ij} = \frac{\sigma}{6L} \|r_{ij}\| [(v_i n_{ij})^2 + (v_j n_{ij})^2 + (v_i n_{ij})(v_j n_{ij})] \quad (\text{III-11})$$

La sommation des équations (III-10) et (III-11), sur toutes les paires ij connectés, donne:

$$F = \sigma \sum_{\langle ij \rangle} \|r_{ij}\| \quad (\text{III-12})$$

$$R = \sum_i \frac{\sigma}{6L} \sum_j^{(i)} \|r_{ij}\| (v_i n_{ij})^2 + \sum_{\langle ij \rangle} \frac{\sigma}{6L} \|r_{ij}\| (v_i n_{ij})(v_j n_{ij}) \quad (\text{III-13})$$

$\sum_j^{(i)}$ est la somme sur tous les points triples j qui sont connectés au point triple i ,

A partir de la fonction de Lagrange, donnée par la relation :

$$\frac{\partial R}{\partial v_i} + \frac{\partial F}{\partial r_i} = 0 \quad i=1, N. \quad (\text{III-14})$$

Où N est le nombre total de points triples dans le système.

L'équation de mouvement des vertex s'exprime par la relation suivante :

$$\frac{1}{3L} \sum_j^{(i)} \|r_{ij}\| n_{ij} n_{ij} \cdot (v_i + 1/2 v_j) = - \sum_j^{(i)} \frac{r_{ij}}{\|r_{ij}\|} \quad (\text{III-15})$$

Pour réduire le nombre d'équations à considérer, Kawasaki et ses collaborateurs ont proposé deux approximations, conduisant à deux modèles de comportement. En premier lieu, l'ensemble des directions des vitesses $\{v\}$ est remplacé par leur moyenne, la vitesse de chaque vertex i est alors donnée par la relation :

$$v_i = \frac{6L}{\sum_j^{(i)} \|r_{ij}\|} f_i \quad (\text{III-16})$$

f_i est donnée par la relation

$$f_i = - \frac{\partial F}{\partial r_i} = - \sum_j^{(i)} \sigma_{ij} \frac{r_{ij}}{\|r_{ij}\|}. \quad (\text{III-17})$$

En second lieu, les longueurs $\|r_{ij}\|$ sont remplacées par leur moyenne $r_B(t)$, la vitesse de chaque vertex est alors donnée par :

$$v_i = \frac{2L}{r_B(t)} f_i \quad (\text{III-18})$$

Les deux modèles sont appliqués en simulation, avec des propriétés asymptotiques dans les systèmes larges, pendant un long intervalle de temps. La structure initiale utilisée pour les deux modèles est le réseau de Voronoi, l'aire moyenne de cette structure cellulaire à $t = 0$ est $\bar{R}(0)^2$.

Dans le modèle (I), l'unité de temps est donnée par la relation suivante :

$$\tau = 2 \int_0^t \frac{1}{r_B(s)} ds \quad (\text{III-19})$$

Et l'équation (16) devient :

$$\frac{dr_i}{d\tau} = - \sum_j^{(i)} \frac{r_{ij}}{\|r_{ij}\|} \quad (\text{III-20})$$

Pour le modèle (II), l'équation (18) devient :

$$\frac{dr_i}{dt} = - \frac{6}{\sum_j^{(i)} \|r_{ij}\|} \sum_j^{(i)} \frac{r_{ij}}{\|r_{ij}\|} \quad (\text{III-21})$$

La solution numérique de ces deux équations est faite avec la condition des limites périodiques.

Pour compléter l'équation de mouvement des vertex, deux processus topologiques ont été proposés (cf§II.1.2.1):

- 1- Si la longueur d'un joint entre deux points triples devient inférieure à une distance Δ , ce joint est remplacé par un autre joint qui est perpendiculaire à l'ancien, c'est le processus de recombinaison.
- 2- Un grain à trois côtés de longueur Δ (grain triangulaire) est remplacé par un vertex situé au centre de gravité de ce triangle, c'est le processus d'annihilation des grains triangulaires.

Les résultats obtenus par Kawasaki et ses collaborateurs confirment les lois classiques de la croissance, l'exposant cinétique trouvé est égal à 0.5.

Le modèle de Kawasaki a également été appliqué avec introduction de l'anisotropie. Ils utilisent la même équation de mouvement des vertex ; en ajoutant la constante de tension σ_{ij} et la constante de friction η_{ij} , elle devient :

$$\sum_j^{(i)} D_{ij} (v_i + 1/2v_j) = - \sum_j^{(i)} \frac{r_{ij}}{\|r_{ij}\|} \quad \text{(III-22)}$$

$$\text{Où : } D_{ij} = \frac{1}{3} \eta_{ij} r_{ij} n_{ij} n_{ij} \quad \text{(III-23)}$$

Les joints sont toujours considérés rectilignes comme dans le premier modèle, et les deux constantes σ_{ij} et η_{ij} dépendent de la désorientation entre les deux grains séparés par le joint ij. Si q est l'orientations des grains (q=1, Q ; Q nombre total des orientations) est l'orientation des grains, la tension du joint ij est donnée par :

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij} (|q - q'|)$$

Où q et q' sont les orientations des deux grains séparés par le joint ij

La constante de friction est supposée constante sur tout le système : $\eta_{ij} = \eta$

Pour bien montrer l'effet d'anisotropie, deux cas ont été traités dans ce modèle : le cas simple (deux valeurs d'énergie) et le cas réel (plusieurs valeurs d'énergie). Les résultats obtenus ont montré que l'introduction de l'anisotropie influe sur l'évolution de la microstructure.

Un modèle a été proposé par Humphreys (Humphreys, 1992), où le concept de mouvement des points triples est appliqué aux premiers stades de recristallisation. Il a considéré différentes mobilités et énergies des joints de grains. Les résultats ont montré que l'exposant cinétique de la croissance est inférieur à 0.5 pour les réseaux constitués de joints à faible angle, ce qui a été attribué à la diminution de la désorientation moyenne produite pendant le recuit. La présence

d'un gradient d'orientations dans la matrice initiale mène à la formation de gros grains, conduisant aux premiers stades de germination de la recristallisation

Weygand et Bréchet (1998) ont utilisé les modèles de Kawasaki, avec les mêmes équations de mouvement, pour les deux types de vertex réels et virtuels. Les joints de grains sont discrétisés pour introduire les vertex virtuels, avec une condition d'équilibre à 120° aux points triples par application de la minimisation d'énergie.

Les points triples « vertex réels » dans le modèle de Weygand et ses collaborateurs sont les coins du réseau de Voronoi, le nombre des vertex virtuels entre deux points triples sur un joint de grains est n_{virtuel} . La distance entre un vertex virtuel et un autre vertex qui peut être réel ou virtuel est proportionnelle à la taille moyenne des grains $\langle r \rangle$, elle est donnée par la relation :

$$\Delta = \frac{\alpha}{n_{\text{virtuel}} + 1} \langle r \rangle \quad \text{(III-22)}$$

$$\text{Où : } \langle r \rangle = \sqrt{\frac{2A_{\text{totale}}}{\pi n_{\text{réel}}}} \quad \text{(Humphreys et Hatherly, 1995)} \quad \text{(III-23)}$$

A_{totale} est la taille moyenne des grains du système considéré, $n_{\text{réel}}$ est le nombre de points triples et α est un paramètre de simulation (très faible pour avoir un effet négligeable sur la distribution de tailles des grains). Si la distance entre deux points triples est supérieur à $2.5 n_{\text{virtuel}} \Delta$, on introduit n_{virtuel} vertex virtuels entre eux. Le nombre de ces vertex virtuels a été choisi égal à 3.

L'exposant cinétique obtenu à partir des résultats de simulation est plus élevé (de 40%) que celui trouvé dans l'approche analytique de Hillert (Hillert, 1965).

Une nouvelle implémentation du modèle des vertex a été développée pour la simulation de la croissance en deux dimensions, avec la considération de l'influence d'un champ magnétique externe qui influe directement sur l'énergie totale de chaque grain (Barrales-Mora, 2006). Cette adaptation conserve les paramètres qui peuvent influencer le mouvement des joints et des points triples : orientations des grains et désorientations des joints. L'effet d'un champ magnétique sur les processus de croissance été étudié expérimentalement par Mullins (Mullins, 1956) dans le bismuth.

Les résultats de simulation ont montré un agrément parfait avec toutes les bases théoriques de la croissance en 2D, avec un écart par rapport aux valeurs théoriques inférieur à 1%. Ils montrent que le champ magnétique influe sur l'évolution de la texture de titane durant la croissance.

III.4.3. Procédure de calcul utilisée

III.4.3.1. Principe

Pour mettre au point nos programmes de calcul, nous nous sommes basés sur la procédure de Barrales-Mora (Barrales-Mora, 2006) en éliminant le champ magnétique. La matrice initiale est la même que celle utilisée en Monte Carlo. Il faut noter que la validité des évolutions obtenues par la méthode des vertex n'est pas liée à la dimension de la matrice utilisée, contrairement à la technique statistique MC (cf. § III.2.6) ; en effet, dans la méthode déterministe des vertex le mouvement est réel et la discussion peut se faire sur une évolution locale.

L'évolution de la matrice est attribuée au mouvement des sommets si on utilise uniquement les vertex réels, correspondant aux points triples (cf. figure III.1). Si on utilise également les vertex virtuels, obtenus par discrétisation des joints de grains, le mouvement des deux populations est traité séparément dans la procédure de simulation. L'évolution de la matrice est attribuée aux mouvements interdépendants des deux populations, vertex réels et vertex virtuels, en imposant bien sûr une corrélation entre les deux populations, à chaque étape de l'évolution.

Nous avons besoin de définir les paramètres suivants :

Le nombre N de points triples dans la matrice, le nombre G de joints de grains, le nombre n de vertex virtuels sur chaque joint et la distance d entre deux vertex virtuels (n dépend de la longueur du joint et de d). Chaque point triple N_i ($i=1, N$) est identifié comme vertex réel et possède trois vertex virtuels voisins. Un vertex virtuel n_{i2v} ($i=1, n$) est le vertex qui possède deux voisins ($n_{(i-1)2v}$, $n_{(i+1)2v}$), un vertex limite n_{i1v} est le vertex qui a comme voisins un vertex réel et un vertex virtuel (figure III-5)

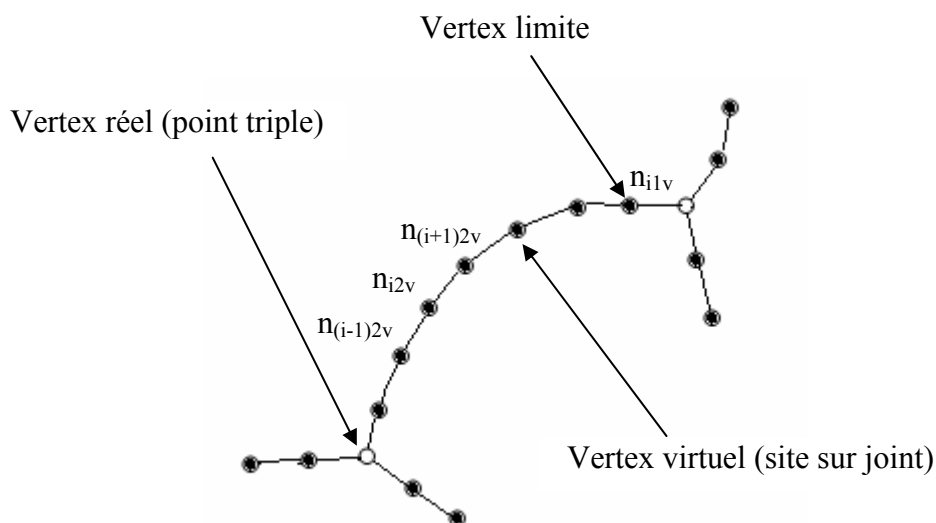


Figure III-5 : Représentation des vertex réels (points triples) et virtuels (sites sur joints).

III.4.3.2. Mouvement des joints de grains

En croissance, un joint de grains se déplace vers son centre de courbure. Dans la procédure de simulation, son mouvement est attribué aux mouvements des deux populations des vertex virtuels, vertex à deux voisins (n_{i2v}) et vertex à un voisin (n_{i1v}). La vitesse de chaque vertex est donnée par la relation :

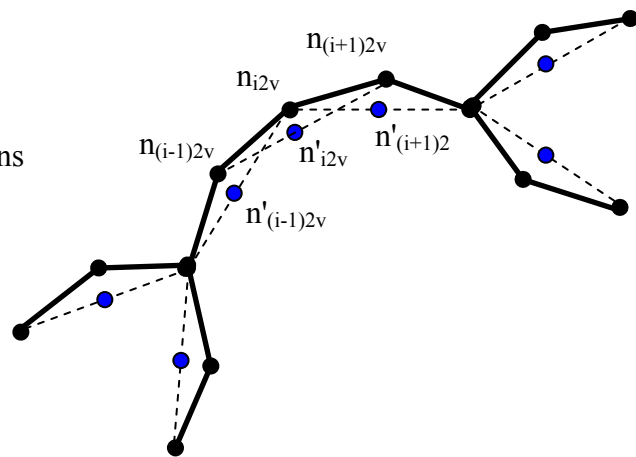
$$v_n = m_{jg} \gamma_{ij} k_{ni} n_{ni} \quad (\text{III.24})$$

Où :

- m_{jg} et γ_{ij} sont respectivement la mobilité et l'énergie du joint.
- k_{ni} et n_{ni} sont respectivement la courbure et la normale du joint au niveau du vertex virtuel n_i

Dans cette équation, le seul paramètre à déterminer à partir de la matrice est la courbure du joint k_{ni} (la mobilité et l'énergie du joint sont considérées comme étant constantes). La figure III-6 montre le calcul du paramètre courbure, au niveau de chaque vertex virtuel n_{i2v} , à partir de ses deux vertex voisins $n_{(i-1)2v}$ et $n_{(i+1)2v}$ (Mohles, 2001). La seule force qui agit sur le mouvement des vertex virtuels est la force due à la courbure ; leur déplacement s'arrête dès que la rectilignité totale du joint est réalisée.

Figure III.6 : Evolution des joints de grains



III.4.3.3. Mouvement des points triples

Chaque point triple de la matrice est défini par ses trois voisins vertex virtuels limites. Son déplacement est effectué vers le centre de gravité du triangle construit sur ces vertex limites. Les coordonnées de ce centre de gravité sont donc les coordonnées du nouveau point triple. Les angles entre ce point triple et ses trois voisins sont réajustés à 120° (condition d'équilibre). Ses coordonnées sont données par les relations suivantes :

$$x'_{N_i} = \frac{\sum_{j=1}^3 x_j}{3} \text{ et } y'_{N_i} = \frac{\sum_{j=1}^3 y_j}{3} \quad (\text{III.25})$$

Où x_j et y_j ($j=1, 3$) sont les coordonnées des trois vertex virtuels limites.

Nous avons considéré deux possibilités de mouvements :

- Dans la première (figure III-7-a), les mouvements des joints et des points triples sont réalisés alternativement, c'est-à-dire qu'après chaque déplacement de tous les vertex virtuels (mouvement des joints), nous déplaçons les vertex réels, de telle sorte à avoir 120° entre ce vertex et ses voisins (vertex virtuels limites).

- Dans la deuxième (figure III-7-b), nous réalisons en premier lieu la rectilignité totale des joints, ensuite nous déplaçons les vertex réels vers le centre de gravité du triangle formé par les trois vertex réels voisins de chaque vertex, toujours avec un réajustement des angles à 120° . Les vertex virtuels ne sont plus considérés.

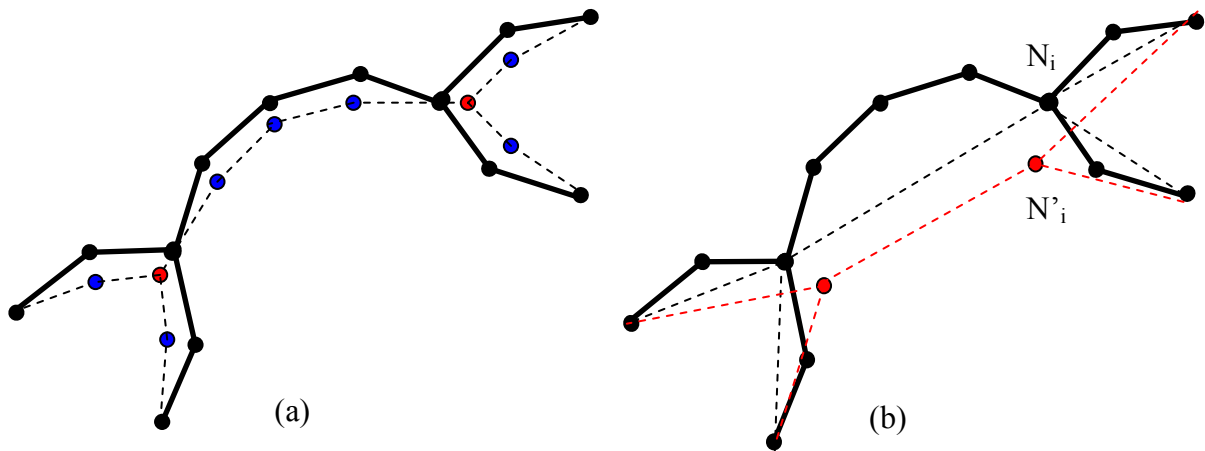


Figure III.7 : mouvement des points triples dans les deux procédures considérées,

(a) le mouvement des vertex virtuels et réels se fait alternativement,

(b) le mouvement des vertex réels se fait après la rectilignité totale des joints.

III.4.3.4. Algorithme de croissance

Nous pouvons résumer les étapes de calcul de notre procédure dans l'algorithme suivant :

- 1- générer une matrice initiale en attribuant à chaque site une orientation Q_i .
- 2- tracer les joints par différence d'orientation (Monte Carlo, cf. chapIII-3-2)
- 3- caractériser et numéroter les sites sur les joints (vertex virtuels), chaque vertex virtuel est défini par un numéro n_{lm} , l'indice l est le numéro du joint où il est situé (l varie de 1 à G , G est le nombre de joints dans la matrice) et m est le numéro qui définit la position (x,y) de ce vertex sur le joint considéré.
- 4- caractériser et numéroter les vertex réels de 1 à N (N le nombre de vertex réels dans la matrice).
- 5- caractériser la longueur minimale d des joints.
- 6- stocker les données sous forme de fichiers contenant les informations suivantes :
 - le numéro et les coordonnées x et y de chaque vertex (réel ou virtuel).
 - le numéro et les coordonnées x et y des deux voisins pour les vertex virtuels et des trois voisins pour les vertex réels (dans notre cas, les voisins de ces derniers sont des vertex virtuels).
- 7- déplacer chaque vertex virtuel à partir de ses deux voisins (figure III-6). Nous avons considéré que la courbure k au niveau de chaque vertex est la distance entre ce vertex et le centre (k_x, k_y) du segment limité par ses deux voisins. Les nouvelles positions sont donc les coordonnées (k_x, k_y) .
- 8- calculer la distance r entre les nouvelles positions (étape n) et les anciennes positions (étape $n-1$).
- 9- Si toutes les distances sont nulles, la rectilignité totale des joints est effectuée, nous déplaçons alors les vertex réels. Sinon, nous recommençons le calcul à l'étape 6 de l'algorithme.

Après chaque déplacement de tous les vertex réels, deux processus topologiques peuvent intervenir :

- Si la longueur des joints d'un grain triangulaire est inférieure à d , ce grain est remplacé par un vertex réel situé au centre de gravité de ce grain
- Si la longueur d'un joint entre deux vertex réels devient inférieure à d , ce joint est remplacé par un nouveau joint qui lui est perpendiculaire.

Chapitre IV

Résultats et Discussion

IV.1. INTRODUCTION

L'homogénéité de distribution des différents paramètres structuraux contrôle l'homogénéité de comportement du matériau. Le terme microstructure recouvre de nombreux paramètres : la taille et la forme des grains, la répartition des différentes phases en présence, les orientations de grains ou texture cristallographique, les caractéristiques et distributions des joints des grains. On utilise généralement des valeurs moyennes, obtenues à partir d'une caractérisation globale de la matrice, pour le suivi des paramètres structuraux et leur utilisation dans l'évolution des propriétés, ce qui n'est en fait valable que pour une structure parfaitement homogène. L'existence d'une hétérogénéité structurale perturbe fortement, voire peut même éliminer, la validité de ces valeurs moyennes. La présence de clusters texturés, morphologiques ou cristallographiques, provoque localement des modifications considérables par rapport aux paramètres structuraux moyens.

Nous nous intéressons dans ce travail à la croissance normale des grains, dans une matrice hétérogène de Fe₃Si de type HiB. Des travaux antérieurs ont montré que le déclenchement de la croissance anormale des grains d'orientation {110} <001> (grains de Goss) est étroitement lié à leur voisinage (Rouag & al., 1990, 1995 ; Maazi et al., 2001, 2002, 2004). Une étude en cours considère leur croissance dans des matrices virtuelles reconstruites à partir des composantes de texture (Afer, 2004 a, b, 2005). Nous considérons dans ce présent travail l'évolution, en croissance normale, de clusters existant dans la matrice primaire, pour la caractérisation de foyers potentiels constituant un environnement adéquat pour le déclenchement de la croissance anormale des grains de Goss.

Nous avons retenu deux formes d'hétérogénéité : des clusters morphologiques et des clusters cristallographiques. Nous comparons deux méthodes de simulation, avec utilisation de clusters identiques comme micro-matrices initiales de simulation:

- la méthode Monte Carlo (cf§III.3.3) qui permet de traiter la population des grains comme une population statistique ; l'ensemble des travaux antérieurs cités ci-dessus utilisent cette méthode, en parallèle avec des caractérisations expérimentales ;
- la méthode des vertex (cf§III.3.4) qui décrit l'évolution d'une microstructure par le mouvement des points triples en 2D ; nous considérons dans cette première approche une évolution de la microstructure contrôlée par les points triples et/ou la courbure des joints de grains.

IV.2. CARACTERISATION DE LA MATRICE INITIALE

IV.2.1 Caractérisation morphologique

La matrice initiale utilisée pour les simulations de croissance est une microstructure primaire de Fe3%Si de type HiB caractérisée par EBSD (Afer, 2004). Elle est décrite par un ensemble de sites, chaque site est caractérisé par une orientation définie par les trois angles d'Euler ($\varphi_1, \varphi, \varphi_2$). La microstructure reportée sur la figure IV-1-a est tracée à partir de ces données. Un ensemble de sites de même orientation forme un grain : si la désorientation entre deux sites voisins est inférieure ou égale à 2° , le même numéro d'orientation est attribué aux sites, sinon les numéros d'orientation sont différents ; chaque grain de la matrice est ainsi indexé. On peut alors déterminer le nombre de grains constituant la matrice et caractériser également les désorientations entre les grains.

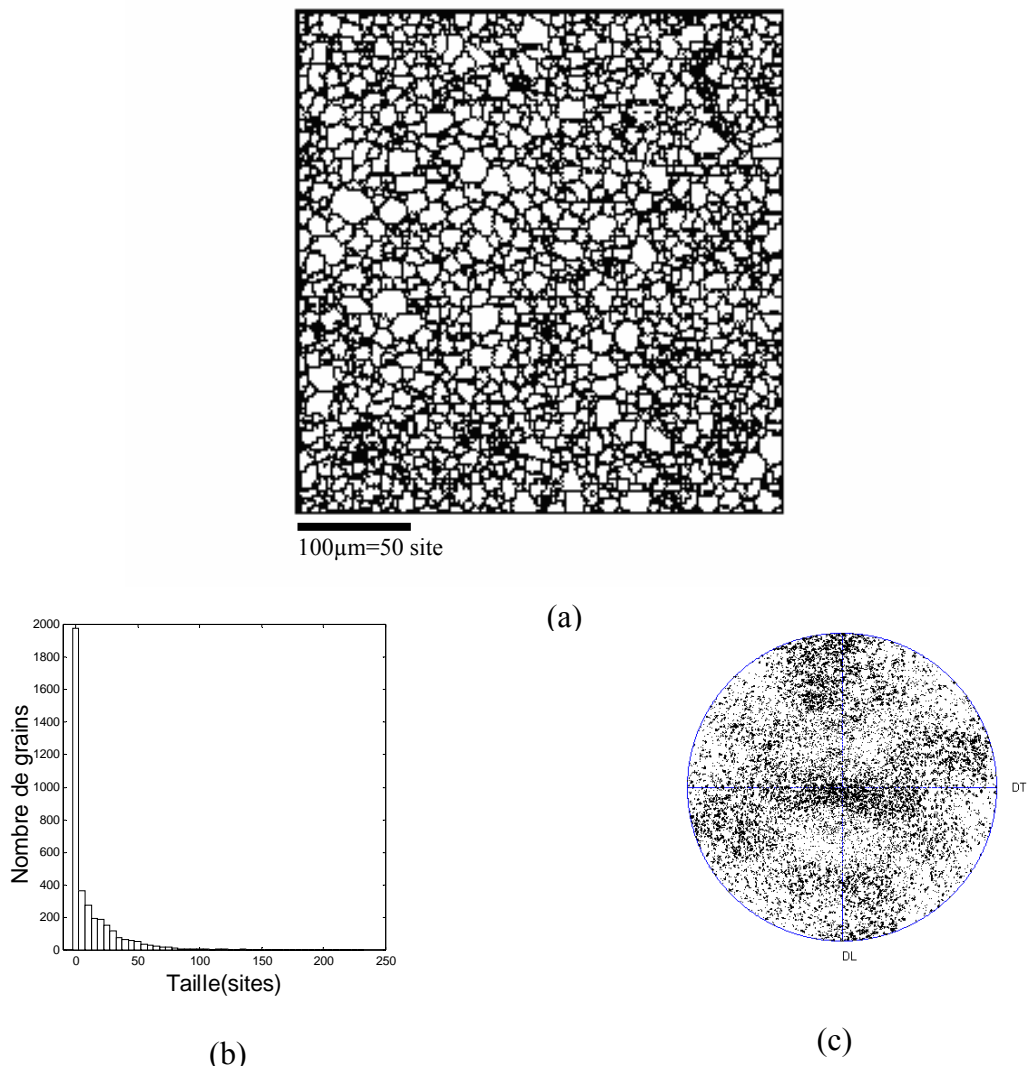


Figure IV.1 :

Microstructure globale (a), distribution des tailles de grains (b) et figure de pôles (c).

IV.2.2. Caractérisation cristallographique

Les orientations des sites dans le référentiel de l'échantillon sont décrites par le triplet $(\varphi_1, \varphi, \varphi_2)$. Le produit des trois matrices de rotation, permet de passer du référentiel-échantillon (DN, DL, DT) au référentiel-cristal. Les coordonnées des directions cristallines [100], [010], [001] dans le référentiel de l'échantillon sont :

$$\begin{aligned}x_{100} &= \cos(\varphi_1)\cos(\varphi_2) - \sin(\varphi_1)\sin(\varphi_2)\cos(\varphi) \\y_{100} &= \sin(\varphi_1)\cos(\varphi_2) + \cos(\varphi_1)\sin(\varphi_2)\cos(\varphi) \\z_{100} &= \sin(\varphi_2)\sin(\varphi) \\x_{010} &= -\cos(\varphi_1)\sin(\varphi_2) - \sin(\varphi_1)\cos(\varphi_2)\cos(\varphi) \\y_{010} &= -\sin(\varphi_1)\sin(\varphi_2) + \cos(\varphi_1)\cos(\varphi_2)\cos(\varphi) \\z_{010} &= \cos(\varphi_2)\cos(\varphi) \\x_{001} &= \sin(\varphi_1)\sin(\varphi) \\y_{001} &= -\cos(\varphi_1)\sin(\varphi) \\z_{001} &= \cos(\varphi)\end{aligned}\tag{IV-1}$$

La texture du matériau utilisé est connue, elle a été déterminée dans des études antérieures par diffraction X et EBSD. Deux composantes majoritaires caractérisent la matrice Fe3%Si de type HiB utilisée, après recristallisation primaire :

- la composante A, d'orientation idéale $\approx \{111\} \langle 112 \rangle$, avec une fraction surfacique de l'ordre de 45-50% ;
- la composante B, d'orientation idéale $\approx \{100\} \langle 012 \rangle$, avec une fraction surfacique de l'ordre de 20-25% ;
- les 35-30% restants sont considérés comme des orientations aléatoires.

La figure IV-1-c montre la figure de pôles $\{100\}$. La fraction volumique des grains de Goss d'orientation $\{110\} \langle 001 \rangle$ est largement inférieure à 1% et n'est donc pas détectable.

IV.2.3. Correction de la matrice globale

IV.2.3.1. Introduction

Les procédures de simulation utilisent généralement des matrices générées, donc parfaites ! Les matrices réelles, caractérisées expérimentalement, contiennent de nombreux défauts (réels, comme les inclusions et les précipités, ou superficiels comme des rayures ou des poussières incrustées) qui peuvent perturber la caractérisation de la microstructure utilisée comme matrice initiale de simulation.

La distribution en tailles de notre matrice initiale montre que la fraction volumique de ‘grains’ ayant moins de 5 sites est très importante (figure IV-1-b). L’échelle de la matrice réelle utilisée comme matrice initiale de simulation est $100\mu\text{m} = 50$ sites, elle nécessite l’élimination des grains à 1 ou 2 sites (0.5 à $1\mu\text{m}$), la présence de ces petits ‘grains’ pouvant être expliquée par l’indexation :

- des sommets de grains pouvant avoir des tailles importantes en volume,
- des défauts de surface ou inclusions MnS.

IV.2.3.2. Procédure de correction

La procédure de correction consiste à réorienter les grains à 1 ou 2 sites en prenant aléatoirement l'orientation d'un site appartenant à un grain voisin de taille supérieure à 2 sites. La figure IV-2 montre la répartition topologique des ‘grains’ à 1 site (a) ou 2 sites (b).

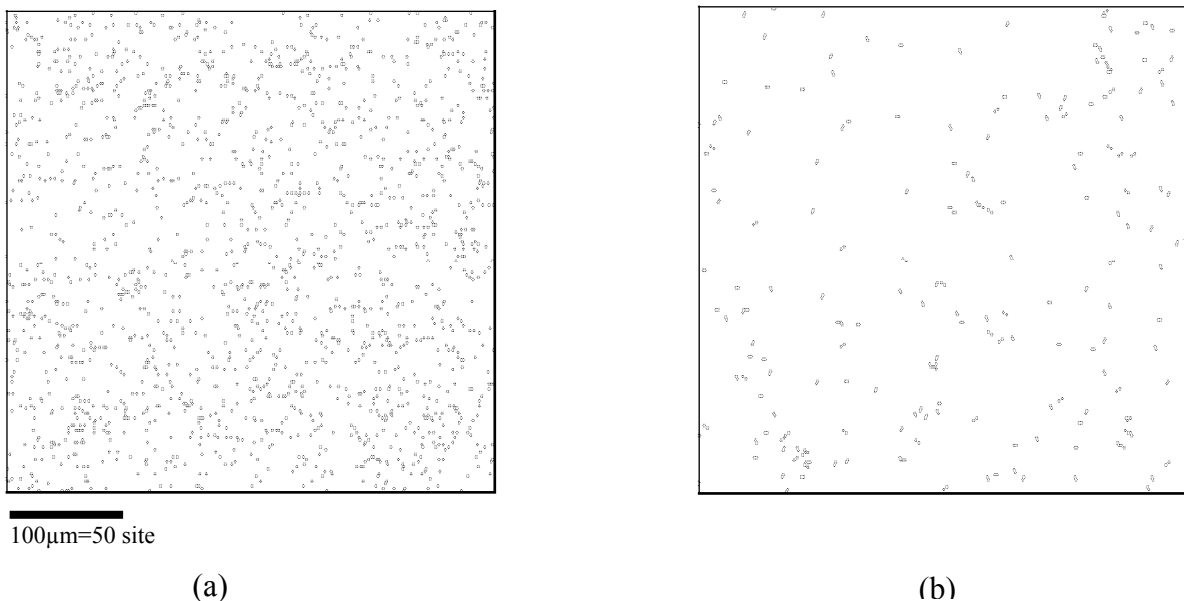


Figure IV.2: Répartition des grains à 1 et 2 sites dans la matrice initiale (a) et (b), respectivement.

La figure IV-3 montre la distribution en tailles de l’ensemble des tailles inférieures à 5 sites dans la matrice globale (figure IV-3-a). On peut remarquer que le taux des grains à 1 site est très important. Les figures IV-3-b et IV-3-d montrent respectivement les nouvelles distributions après réorientation des grains à 1 site et 2 sites. La correction est finalisée par élimination des grains à 1 et 2 sites situés sur les bords de la surface analysée. Après cette étape de correction, les classes de tailles de 5 à 25 sites représentent une fraction volumique de l’ordre de 50% du nombre total de grains.

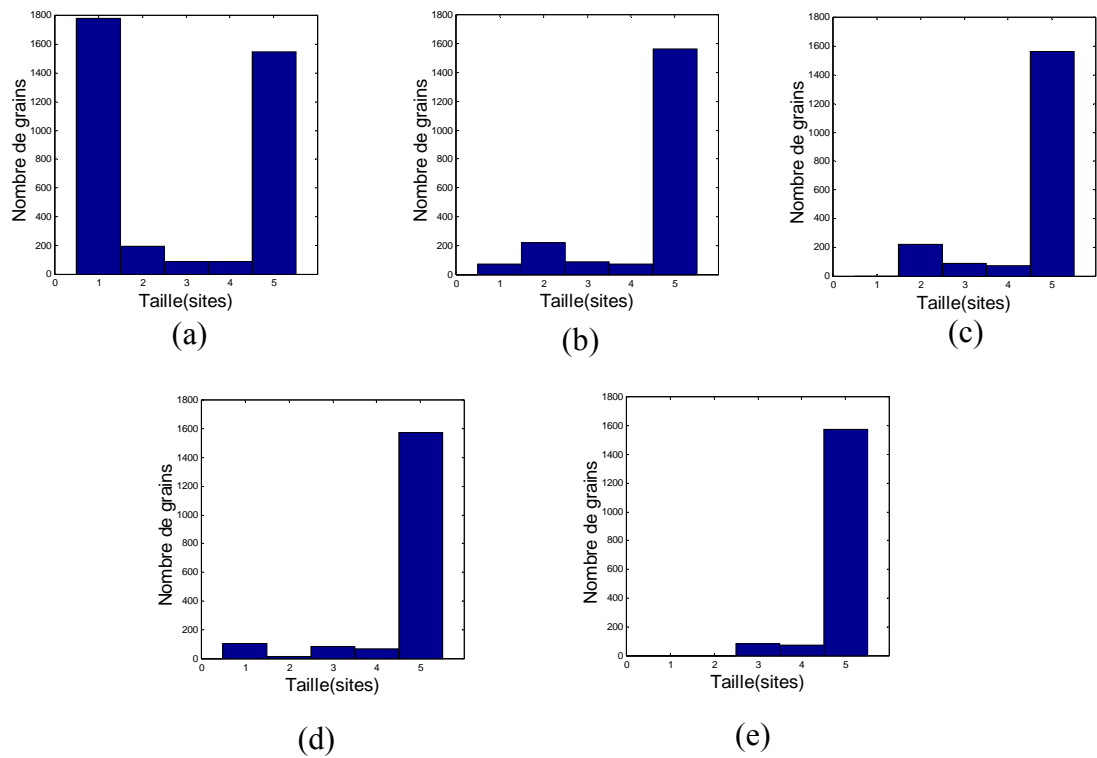


Figure IV-3 : Distributions des grains de taille inférieure à 5 sites.

a- dans la matrice initiale caractérisée par EBSD,

b- après élimination globale des grains à 1 site,

c- après élimination des grains à 1 site des bords,

d- après élimination globale des grains à 2 sites,

e- après élimination des grains à 1 et 2 sites des bords.

La figure IV-4 montre la microstructure après correction (a), avec la distribution en tailles (b) et la figure de pôles $\{100\}$.

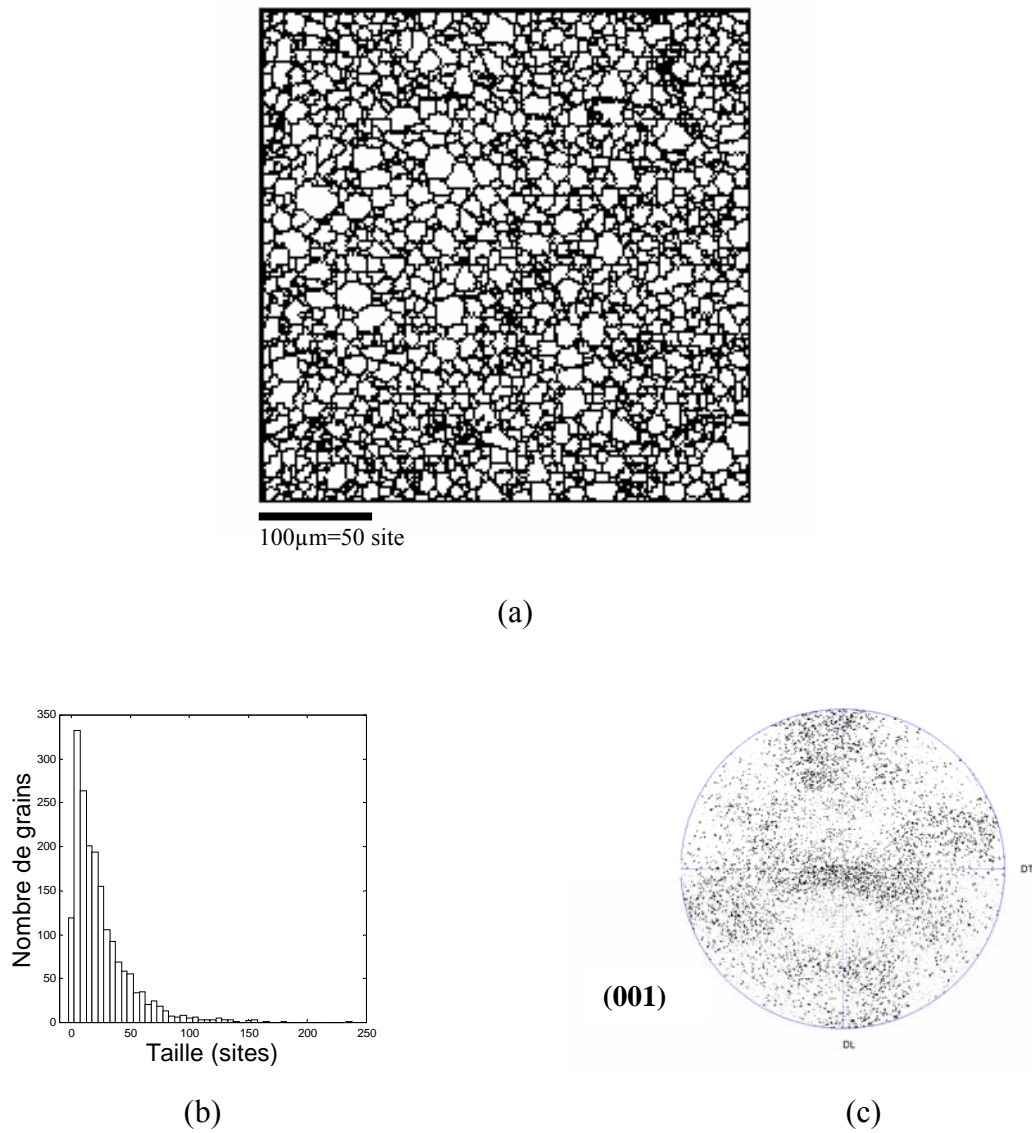


Figure IV.4 : Microstructure (a), distribution de tailles (b) et figure de pôles $\{100\}$ (c), de la matrice globale après correction (élimination des grains à 1et 2 sites).

IV.3. CONSTRUCTION DES CLUSTERS

L'analyse morphologique de la matrice montre des regroupements de petits et gros grains. Pour l'étude de l'influence de la présence des clusters morphologiques, nous avons retenu trois zones de dimensions 50x50 sites, (figure IV-5). La figure IV-6 regroupe, les trois micro-matrices considérées et les histogrammes correspondants :

- dans la première zone, les grains possédant des tailles de 5 à 25 sites sont largement majoritaires, elle constitue donc un cluster à petits grains (figure IV-6-d) ;
- pour la deuxième zone, la distribution des tailles (figure IV-6-e) montre l'existence de nombreux grains voisins possédant des tailles de 50 à 155 sites ; nous la classons comme cluster à gros grains, malgré la présence parmi eux de nombreux petits grains ;
- la distribution des tailles de la dernière zone (figure IV-6-f) regroupe différentes classes et présente une certaine homogénéité morphologique, avec une distribution continue entre petits, moyens et gros grains ; elle est considérée à titre comparatif par rapport aux clusters.

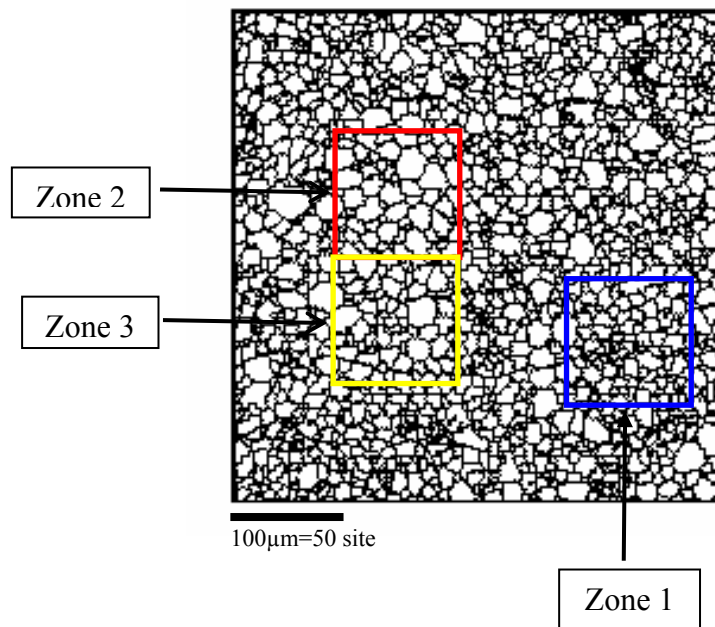


Figure IV.5 : Positionnement des clusters morphologiques sur la matrice globale.

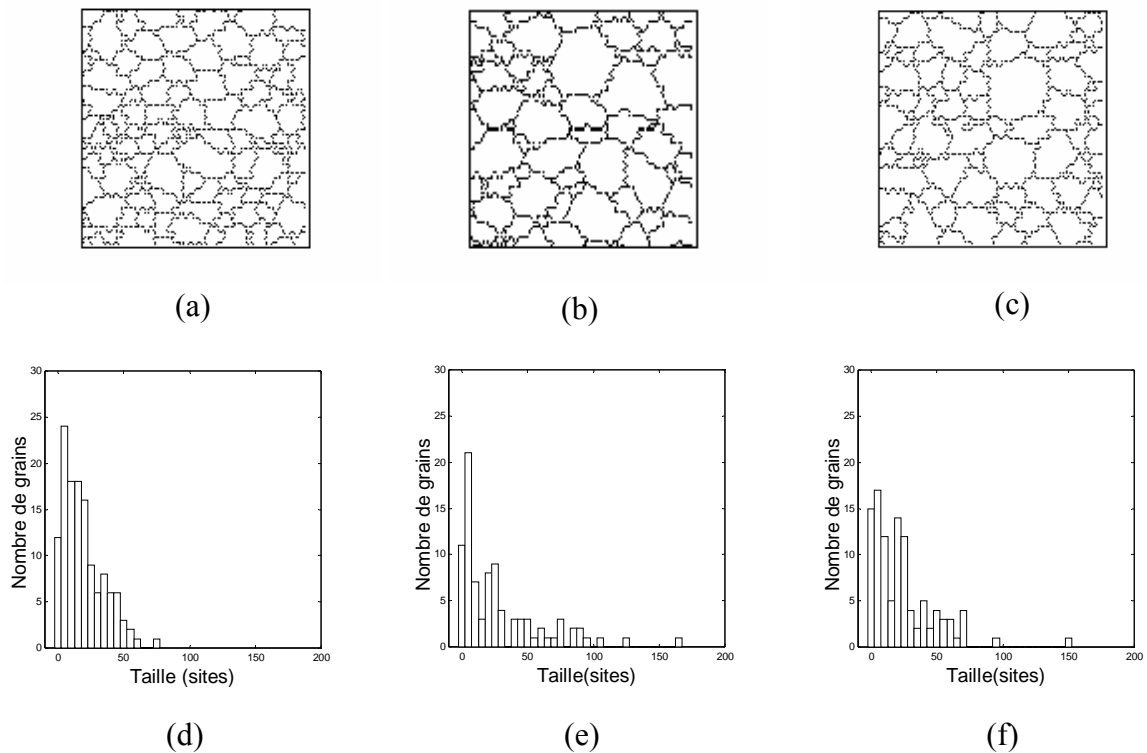


Figure IV.6 : Clusters morphologiques

(a), (b) et (c)- Les microstructures des zones 1, 2 et 3 de la figure IV-5.

(d), (e) et (f)- Les distributions de tailles des zones 1, 2 et 3 respectivement.

La microstructure retracée avec codes couleurs pour la visualisation des composantes de textures A et B (figure IV-9) montre des regroupements de grains appartenant à la composante A (Afer, 2004b). De même que pour le paramètre morphologique, nous avons considéré trois zones de dimensions 50x50 sites pour la considération du paramètre texture cristallographique. Les micro-matrices et les figures de pôles $\{100\}$ correspondantes sont regroupées sur la figure IV-10. Pour bien visualiser la présence (ou l'absence) des composantes de textures, nous avons également reporté les figures de pôles symétrisées. Nous avons :

- une première zone (a) où la composante A est bien marquée,
- une deuxième zone (b), où la composante A est bien visible, mais avec une acuité moins marquée que la celle de la première zone,
- enfin, une troisième zone (c) avec une répartition pratiquement aléatoire des grains, caractérisée à titre comparatif.

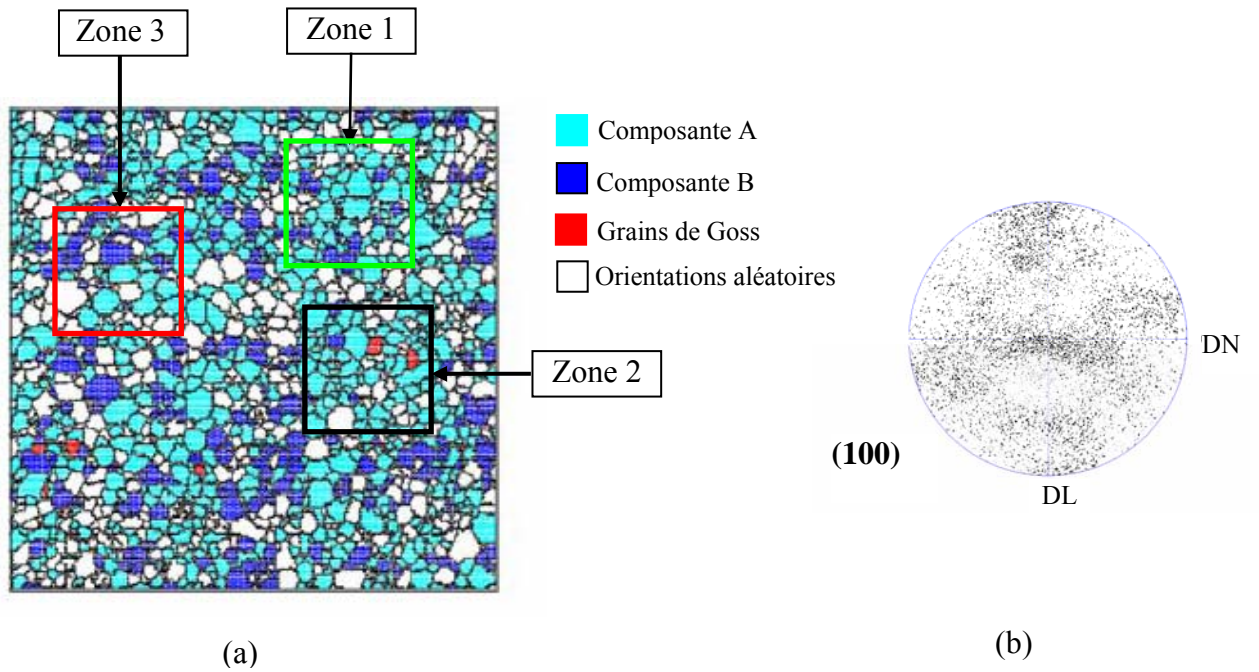


Figure IV-9 : Positionnement des clusters cristallographiques sur la matrice globale (a) et figures de pôles {100} correspondante (b).

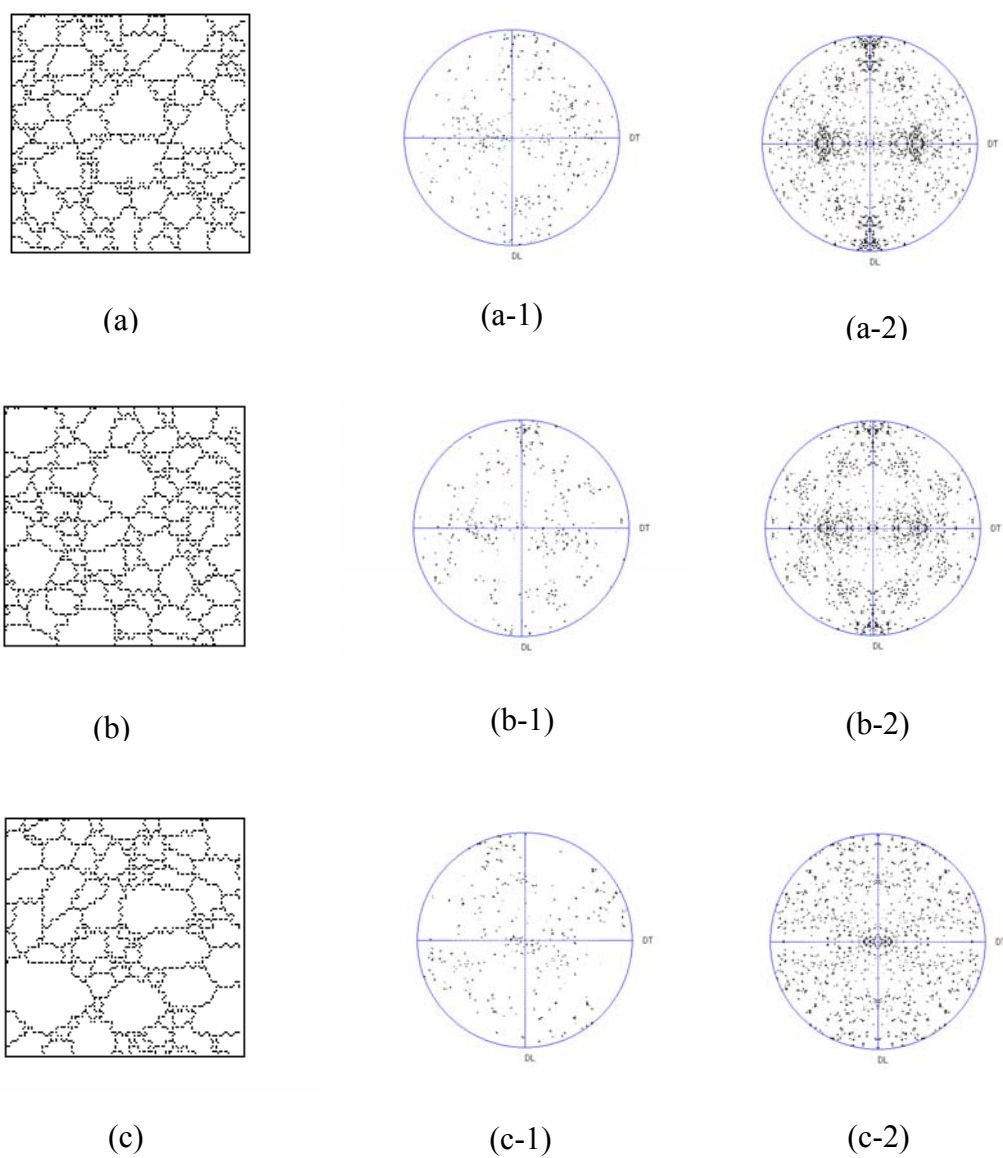


Figure IV.10 : Clusters cristallographiques

Caractérisation des zones 1, 2 et 3 de la figure IV.9, on a respectivement :

- les microstructures, (a), (b) et (c),
- les figures de pôles $\{100\}$ (a-1), (b-1) et (c-1)
- les figures de pôles $\{100\}$ symétrisées (a-2), (b-2) et (c-2)

IV.4. TESTS DE VALIDATION

IV.4.1 Introduction

Tout modèle de calcul doit vérifier les constantes et les hypothèses du problème. Le risque d'avoir des résultats erronés en simulation étant élevé, il faut toujours procéder à des tests de validation pour vérifier la procédure de simulation. Ces tests doivent permettre de retrouver des résultats connus. Parmi les tests de validation des deux procédures de simulation utilisées dans notre étude, nous avons retenu les tests habituellement utilisés dans les simulations de croissance:

- 1- La disparition d'un grain insulaire dans une matrice infinie.
- 2- Le test de rectilignité pour l'évolution d'un joint de grains dans un bicristal,
- 3- La stabilité des nœuds à 120°.

Nous avons rajouté le test de la disparition d'un grain triangulaire pour la méthode des vertex. Pour l'ensemble des tests de validation, nous avons utilisé des matrices 15x15 sites.

IV.4.2. Décroissance d'un grain insulaire

Un des tests les plus connus et le plus utilisé pour valider un modèle de croissance est celui de la disparition d'un grain insulaire dans une matrice infinie. Dans notre test, nous avons considéré l'évolution d'un grain hexagonal (figure IV-11).

La figure IV-11-a montre la décroissance du grain insulaire en simulation MC. Nous remarquons que le grain perd sa forme hexagonale, l'aire diminue d'une façon non uniforme. Par la méthode des vertex, la décroissance est également observée (figure IV-11-b), avec une évolution homogène jusqu'à la disparition totale du grain.

La comparaison entre les deux évolutions permet de noter les côtés statistique (présentant des fluctuations) et déterministe (homogénéité de comportement), respectivement pour les deux méthodes MC et vertex.

IV.4.3. Rectilignité d'un joint de grains

Le test de validation considère l'évolution d'un joint de grains dans un bicristal jusqu'à ce qu'il devienne totalement rectiligne. La figure IV-12 montre l'évolution de ce joint par la méthode Monte Carlo (a) et la méthode des vertex (b). Nous pouvons vérifier dans les deux évolutions que le joint se déplace vers son centre de courbure. L'homogénéité de comportement dans la méthode des vertex ainsi que les fluctuations dans la méthode MC sont toujours présentes.

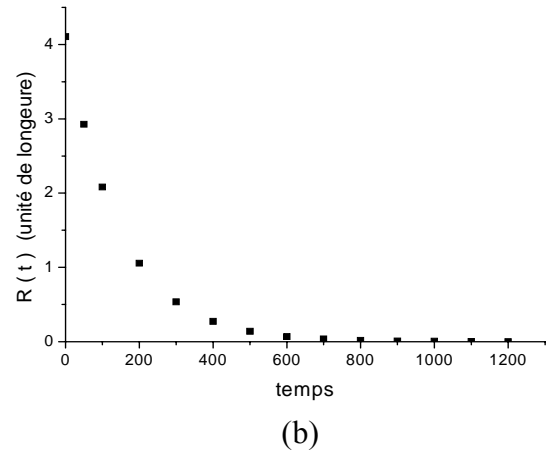
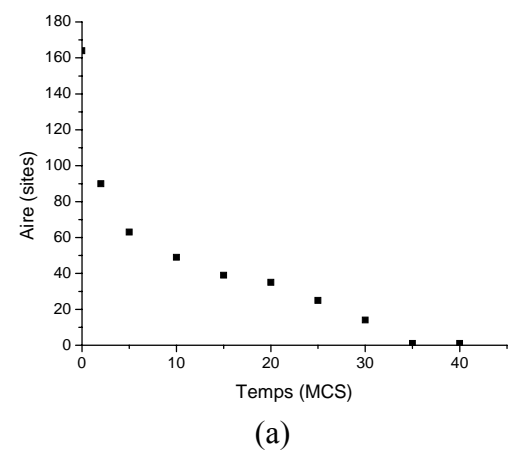
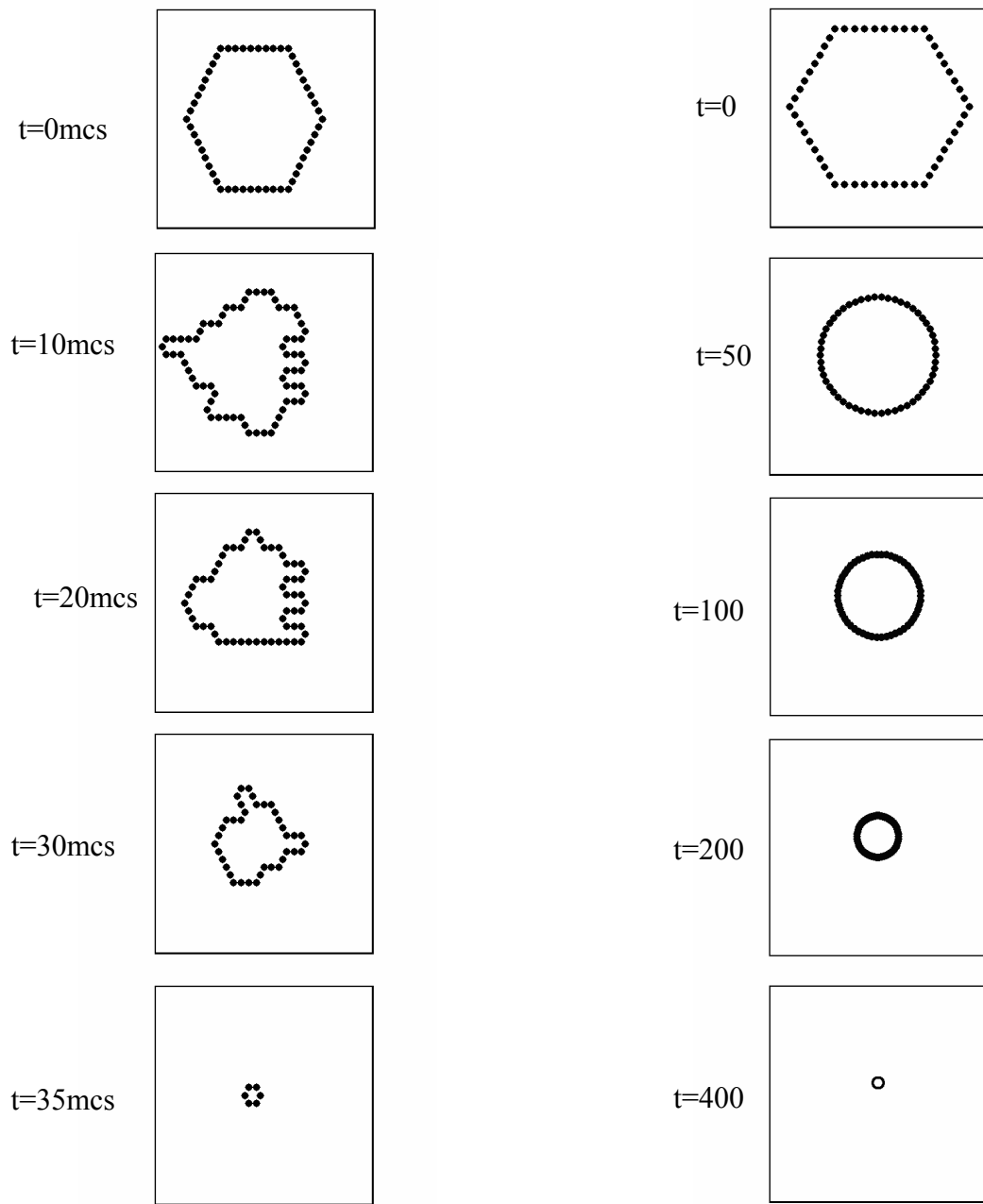


Figure IV.11 : Evolution d'un grain insulaire, méthode MC (a) et méthode des vertex (b).

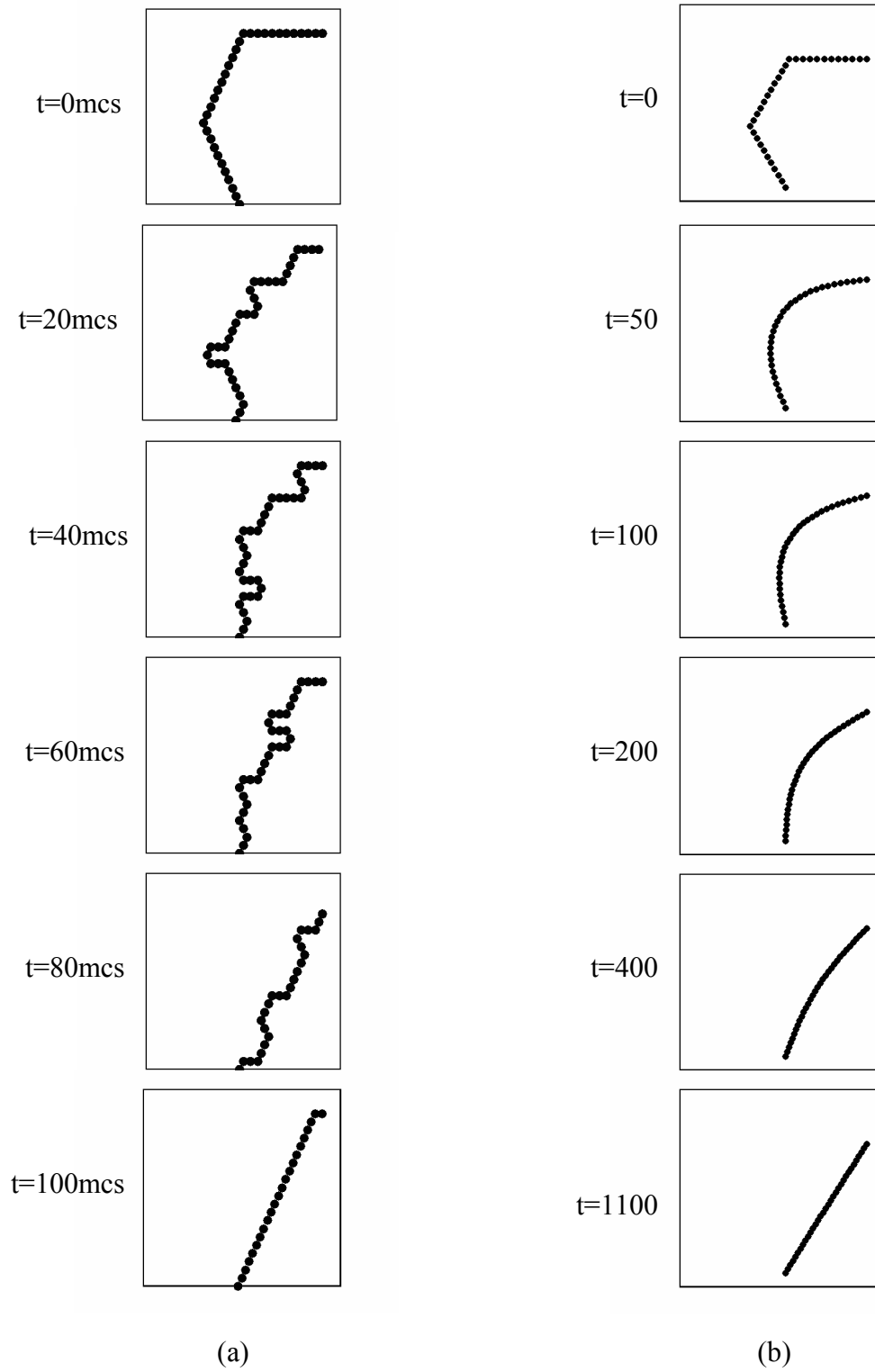


Figure IV.12: Evolution d'un joint de grain dans un bicristal, méthode MC (a) et méthode des vertex (b)

IV.4.4. Réajustement à 120° aux points triples

Ce test et le suivant ont été utilisés uniquement pour la méthode des vertex. La configuration utilisée est constituée d'un point triple O reliant trois joints OA, OB et OC, séparés par des angles au sommet θ_1 , θ_2 et θ_3 (figure IV-13). Le test consiste à réajuster ces angles à 120° ; pour ce, le point triple doit se déplacer vers le centre de gravité du triangle ABC.

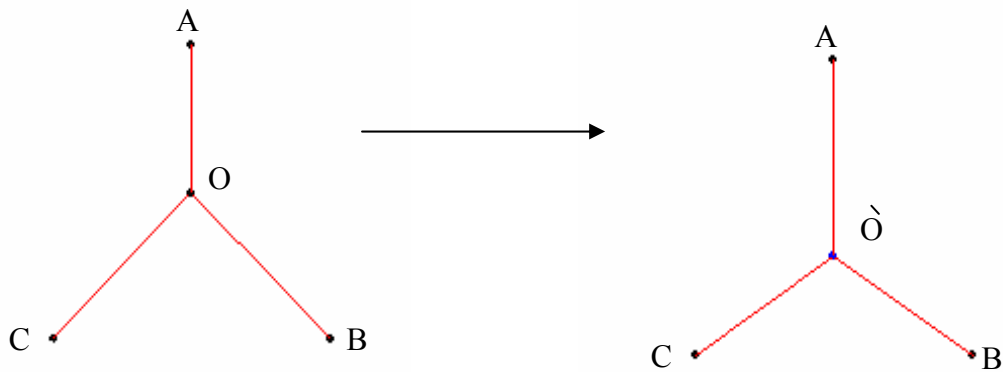


Figure IV.13 : Le réajustement à 120° au point triple.

IV.4.5. Disparition d'un grain triangulaire

Dans un processus de croissance, les grains triangulaires sont considérés comme des grains instables, avec une décroissance obligatoire (Von Neumann, 1952 ; Mullins, 1956 ; cf.§II-2-1). Du point de vue procédure de simulation, le test considère la disparition d'un grain entouré de trois joints, ne comprenant aucun vertex virtuel entre les vertex réels ou points triples (figure IV-14). Si les longueurs des trois joints sont inférieures à une distance fixée d , ce grain triangulaire est remplacé par un point triple correspondant à son centre de gravité. Nous avons retenu comme distance d , la longueur de joint minimale de la microstructure initiale.

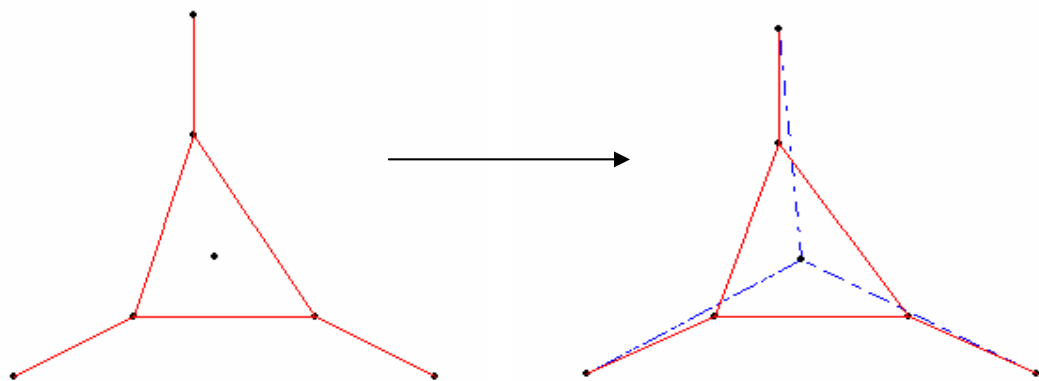


Figure IV.14 : Disparition d'un grain triangulaire

IV.5. SIMULATION DE LA CROISSANCE PAR LA METHODE MONTE CARLO

IV.5.1. Evolution des clusters morphologiques

Nous nous intéressons dans cette partie à la caractérisation du début de la stagnation, c'est-à-dire à la stabilité de la matrice par croissance normale. Nous admettons que des micro-matrices de dimension (50x50 sites), correspondant aux clusters retenus dans une matrice globale 230x200 sites, peuvent être considérés pour étudier le comportement au voisinage immédiat, intervenant en début de croissance. L'évolution microstructurale dans les clusters morphologiques est schématisée dans la figure IV-15.

Nous pouvons distinguer deux stades :

- un premier stade, jusqu'à 250mcs, où les processus de croissance semblent similaires dans les zones a et b ; la zone c se comporte différemment.
- à partir de 300mcs jusqu'à 1100mcs, le comportement devient similaire dans les trois zones.

Dans la zone 1, cluster à petits grains, la taille moyenne est de l'ordre de 28 sites. La distribution initiale en tailles de grains (figure IV-6-d) montre que les classes des petits grains sont majoritaires, un petit grain de Goss (5-10 μm \equiv 3-5 sites) peut avoir un voisinage de petits grains, avec une taille moyenne inférieure à la sienne. Sa croissance anormale pourra donc être possible, même s'il fait partie des plus petits grains de la matrice, car il pourra acquérir l'avantage taille au cours de la croissance normale.

Dans la zone 2, cluster à gros grains, la taille moyenne initiale est de l'ordre de 40 sites, la distribution en tailles (figure IV-6-e) montre que les petits grains (5-25 sites) sont répartis de façon aléatoire dans ce cluster. L'évolution montre que ces grains disparaissent, ce qui peut être expliqué par l'existence d'un voisinage immédiat constitué de gros grains (croissance des gros grains au détriment des petits). Certains grains dans ce cluster ont une taille supérieure deux fois plus de la taille moyenne des grains (152 sites) ; selon la théorie de Hillert (Hillert, 1965) ce sont ces grains qui peuvent croître de façon anormale.

Dans la zone 3, un regroupement des différentes classes de grains (petits, moyens et gros) est bien marqué, la distribution en tailles montre qu'il y a des grains de taille importante au début, leur croissance anormale est possible.

A partir de ces différentes évolutions, c'est le type de cluster 1 qui constitue un voisinage morphologique adéquat pour la croissance de petits grains de Goss, comme c'est le cas des grains de Goss qui existent dans les tôles HiB.

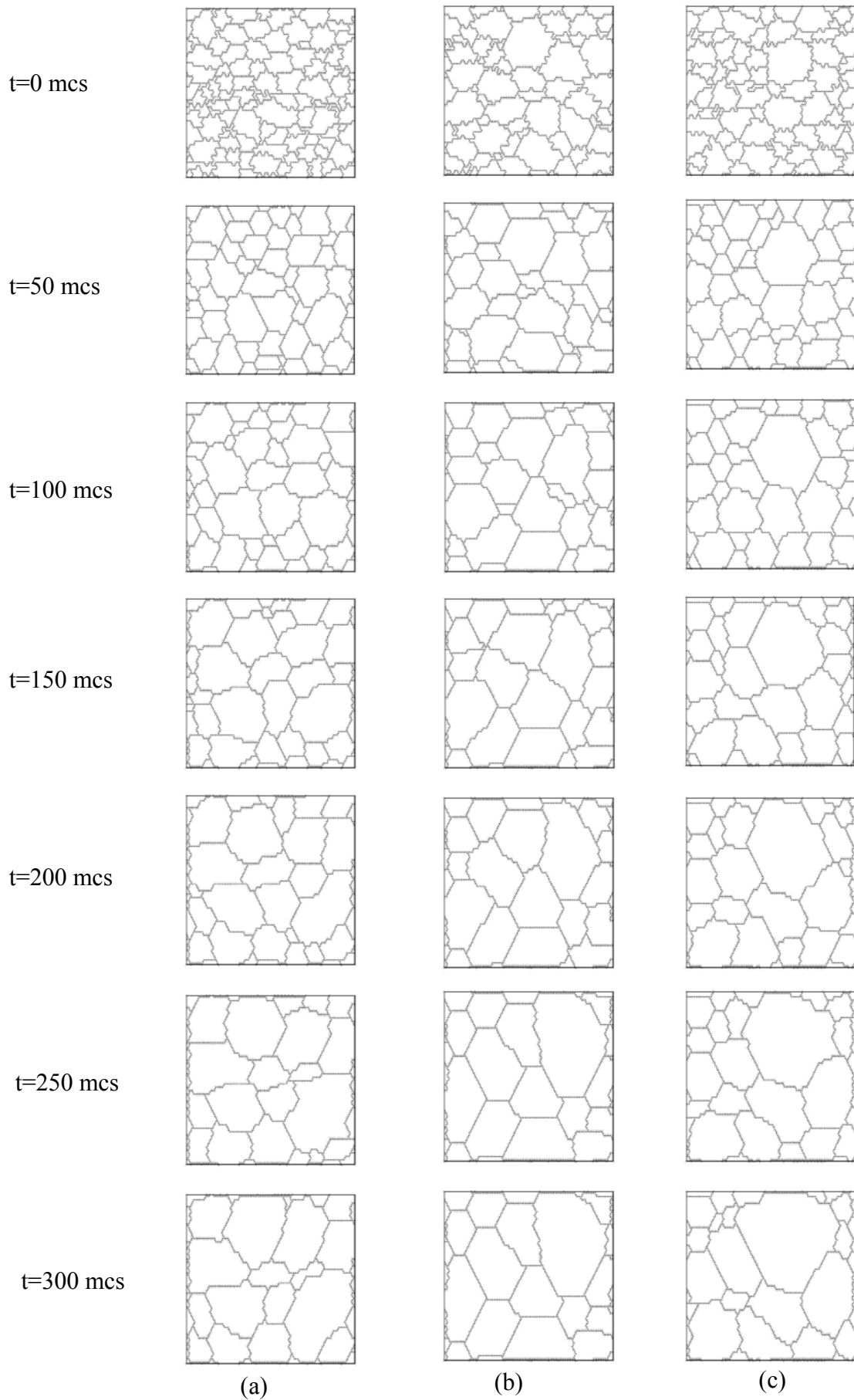


Figure IV.15 : Evolution de la microstructure en croissance normale a, b et c des 3 zones morphologiques

Nous avons suivi l'évolution d'un petit grain dans la zone 1 (taille initiale 38 sites) et un autre dans la zone 2 (taille initiale 43 sites). Ces évolutions sont reportées sur la figure IV-16. A partir de la microstructure de la zone 1, nous remarquons que le grain considéré est entouré par des grains de tailles proches de sa taille, le suivi de son évolution montre que sa croissance est réalisée ; il croit au détriment de ses voisins, grâce à un « voisinage immédiat favorable ».

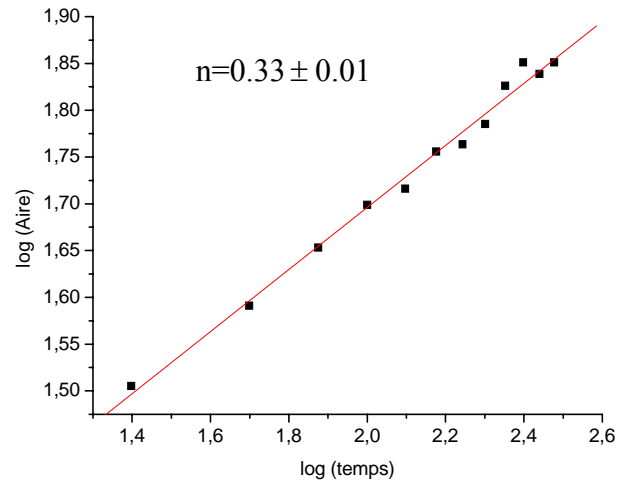
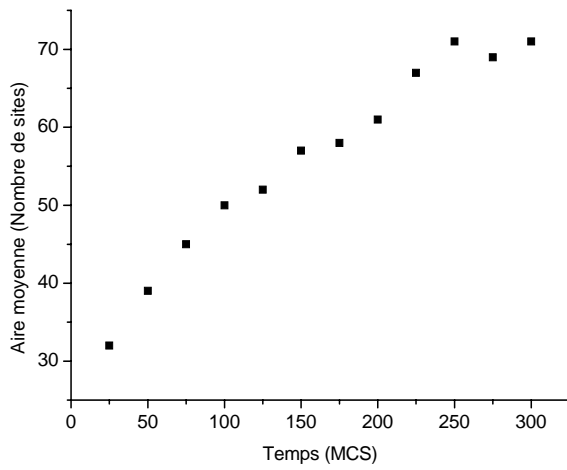
Le suivi de l'évolution de la deuxième zone montre une décroissance du deuxième grain avec le temps. La microstructure initiale de cette zone montre que le voisinage de ce grain est constitué de gros grains, ce qui implique que ces gros voisins ne vont pas permettre la croissance de ce grain, qui a donc un « voisinage non favorable ».

Du point de vue comportement global, les cinétiques de croissance de ces trois zones sont reportées sur la figure IV-17, elles obéissent à la loi générale de croissance. L'exposant cinétique de la zone 1 est égal à 0.33 ; pour la zone 2 et la zone 3, il est de l'ordre de 0.27 et 0.25 respectivement. Les trois cinétiques sont différentes de la cinétique théorique avec 0.5, celui de la zone 1 est le plus proche de cette valeur théorique. Si nous continuons la cinétique jusqu'à 1200 MCS pour chaque cluster, nous remarquons que l'exposant se rapproche de la valeur théorique, surtout pour les clusters 1 et 3.

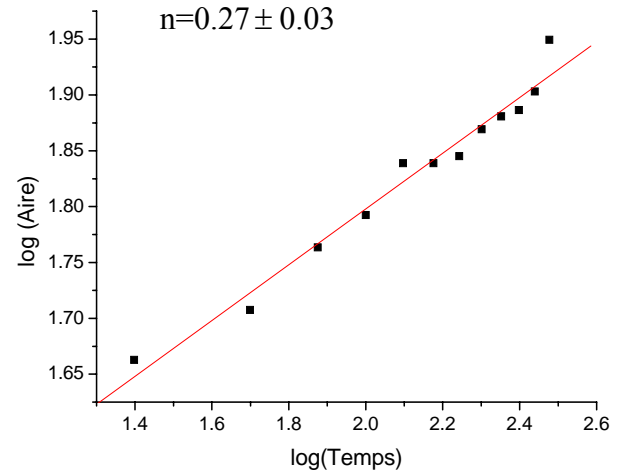
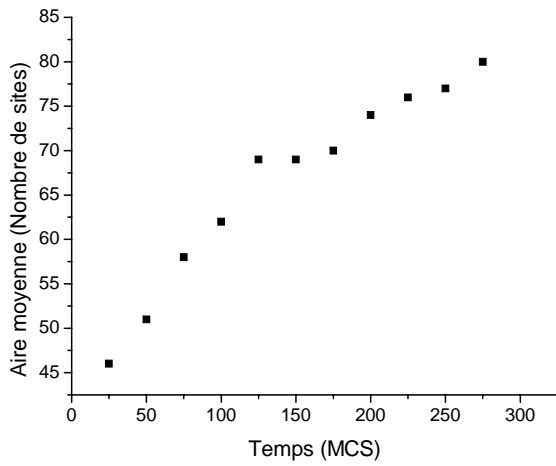
Dans les modèles classiques (Hillert, 1965), l'aspect morphologique de la croissance des grains est lié au rayon moyen de la matrice. Ce sont les plus gros grains de la matrice primaire qui croissent d'une façon anormale (§chap II.3.1.1). Dans le cas des grains de Goss, cela n'est pas vérifié, ces grains ne possèdent pas une taille supérieure à la taille moyenne. La considération du rayon moyen peut masquer l'effet d'hétérogénéité. A partir des évolutions observées par les trois zones, nous pouvons dire que le grain en croissance réagit directement avec ces plus proches voisins et non pas avec la totalité de la matrice. Le cluster à petits grains donne le voisinage le plus favorable aux grains de Goss pour croître anormalement.



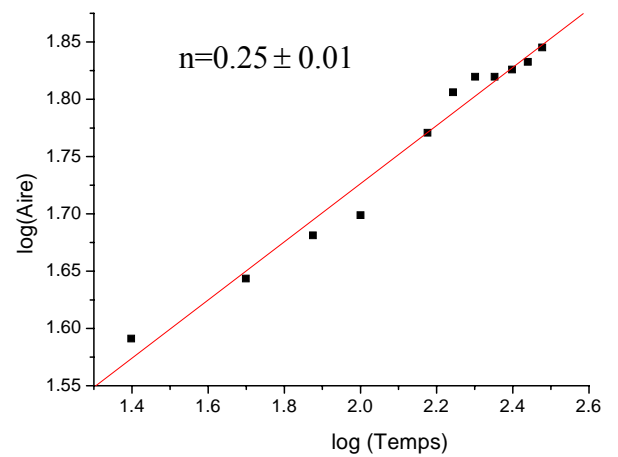
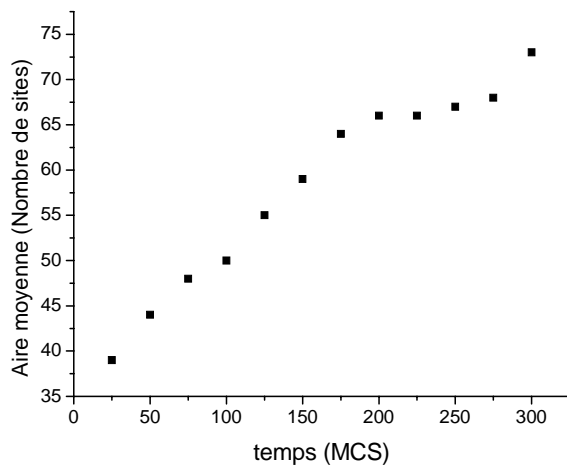
Figure IV.16 : La croissance d'un grain de la zone 1 (a) et la décroissance d'un autre grain de la zone 2 (b) jusqu'à sa disparition. Le grain en croissance dans la zone 1 **ne** bénéficie **pas** au départ d'une taille plus importante que celui de la zone 2.



(a)



(b)



(c)

Figure IV.17 : Cinétique de croissance a, b et c des trois zones morphologiques 1, 2 et 3 de la figure IV.15.1 respectivement.

IV.5.2. Evolution des clusters cristallographiques

Le paragraphe précédent montre des différences de comportement, qui peuvent être expliquées par le facteur taille, mais également des similitudes. En effet, la croissance n'est pas contrôlée uniquement par le facteur taille ; d'autres paramètres interviennent, comme les orientations des grains en croissance et les caractéristiques des joints qui les entourent, mais également celles de leurs proches voisinages. Nous avons considéré dans cette partie l'influence de ce voisinage du point de vue cristallographique. Pour ce, nous avons suivi l'évolution microstructurale de micro-matrices caractérisées par la composante $\{111\}\langle 112\rangle$, d'acuité différente, et d'une micro-matrice aléatoire (Figure IV-10).

Dans une première approche de l'effet d'anisotropie, nous avons retenu le modèle de Read et Shokley qui relie la mobilité des joints à l'angle de désorientation (cf. chap. I.4.3.1). Nous avons suivi l'évolution de la zone 1, correspondant à la texture la plus marquée, avec isotropie de comportement et anisotropie. Dans ce dernier cas, deux populations de joints sont considérées, les joints à faible angle et les joints à grand angle. La limite séparant ces deux populations correspond en général à une désorientation inférieure à 15° . Nous avons également considéré un angle critique de 30° , pour accentuer l'influence de la désorientation sur la mobilité ; d'autre part, deux grains appartenant au tube A peuvent avoir des angles de désorientation supérieurs à 15° . Dans la procédure de simulation, les constantes J (eq. III-1) attribuées aux différentes désorientations seront différentes, nous avons retenu 1 et 1.5 dans cette première approche.

Dans le cas isotrope, la figure IV-18-a montre que l'évolution est similaire à celle observée dans les zones morphologiques, c'est-à-dire que c'est l'effet taille qui contrôle le processus. Les évolutions de ce cluster avec introduction des angles critiques 15° et 30° (respectivement, figures IV-18-b et IV-18-c) semblent différentes de celle du cas isotrope.

Les cinétiques de croissance correspondant aux différentes évolutions de la figure 1 sont reportées sur la figure IV-20. On peut voir que l'augmentation de l'angle critique atténue l'évolution de la microstructure. En d'autres termes, la diminution de la population des joints à grand angle mène à une progression plus faible de la taille moyenne des grains. En effet, les joints à grand angle sont les plus mobiles, la diminution de leur population implique une évolution moins rapide. La stagnation est donc atteinte plus rapidement en introduisant l'anisotropie.

La figure IV-19 regroupe les évolutions des trois zones cristallographiques, pour un angle critique 30° . Nous pouvons remarquer que c'est dans la zone la plus texturée (zone 1) que l'évolution est la plus faible, la stabilisation de la croissance normale est donc plus rapide. Dans

une structure hétérogène comme celle de Fe₃Si, c'est l'existence de ces micro-matrices texturées qui peut être à l'origine du déclenchement de la croissance anormale des grains de Goss, puisque elles fournissent à ces grains le voisinage adéquat pour leur croissance.

Il faut souligner que la séparation des joints de grains en populations à faible angle et à grand angle est insuffisante pour la considération de l'anisotropie, c'est une première approche qui ne permet pas, évidemment, d'introduire l'anisotropie de comportement des joints dans le processus de croissance.

Dans une étude plus approfondie :

- Il faut tenir compte des types de joints (CSL, LA, CAD ou général) et/ou de la mobilité des joints séparant les grains appartenant aux différentes orientations A, B, Goss ou l'aléatoire R (A/A, A/B, A/G, A/R, B/B, B/R) (Abbruzzesse et al., 1986).
- La texture du matériau est connue, les différentes composantes sont sous forme de tubes (texture en fibres) ; la séparation des grains doit se faire par un calcul de désorientations, par rapport au squelette de la texture, coupe par coupe dans l'espace d'Euler. Une zone est en effet considérée comme un cluster cristallographique, si les grains qui la constituent appartiennent en majorité à un tube donné (A ou B dans notre cas).

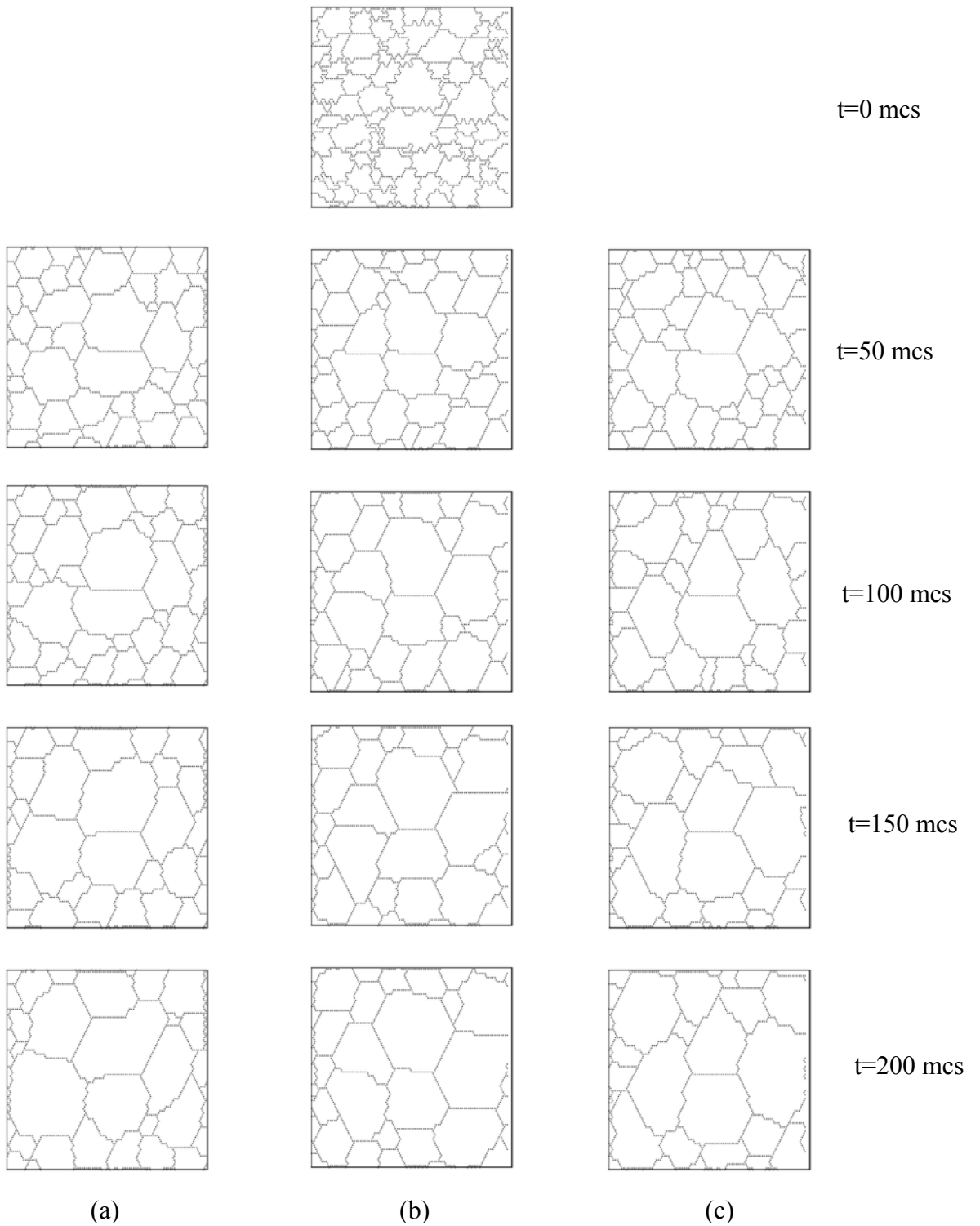


Figure IV.18 : Evolution de la microstructure de la zone 1

- (a) avec isotropie des joints,
- (b) avec une désorientation de 15° ,
- (c) avec une désorientation de 30° .

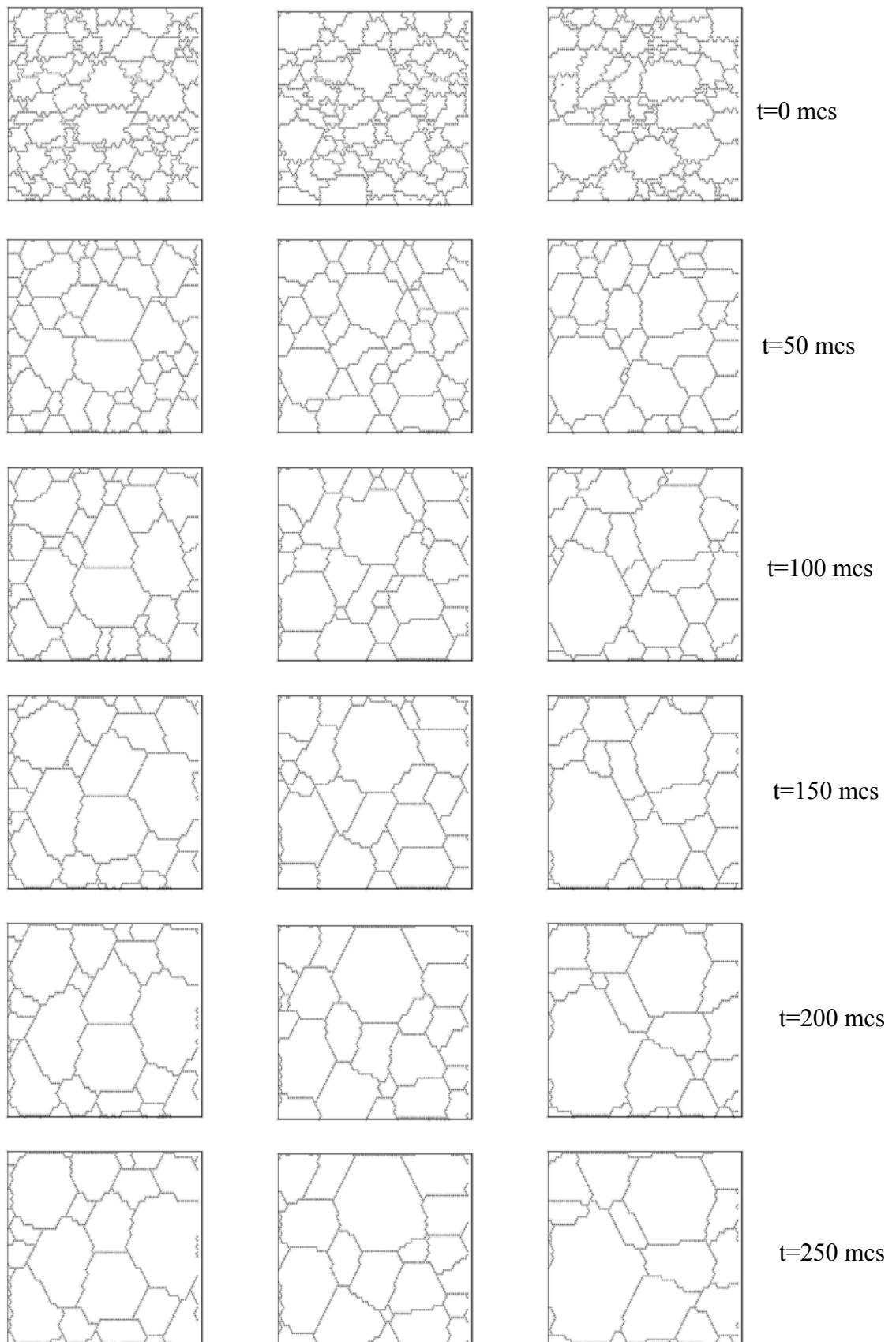
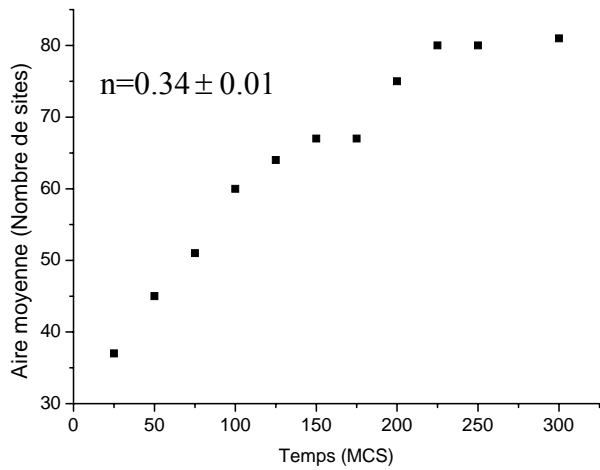
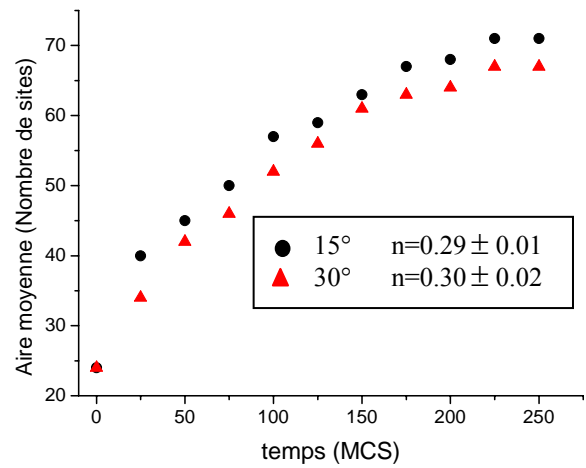


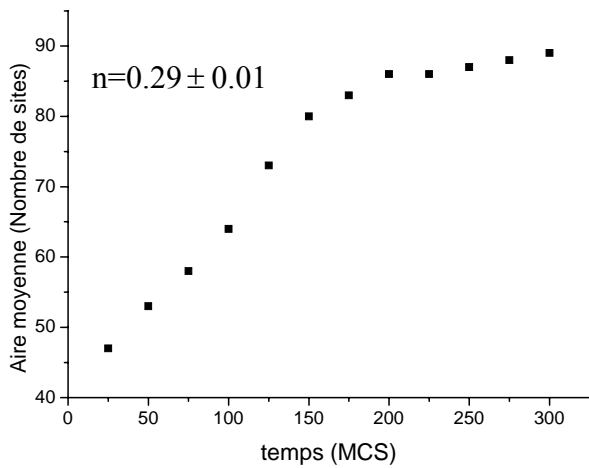
Figure IV.19 : Evolution des zones cristallographiques, avec l'angle de désorientation égale à 30°



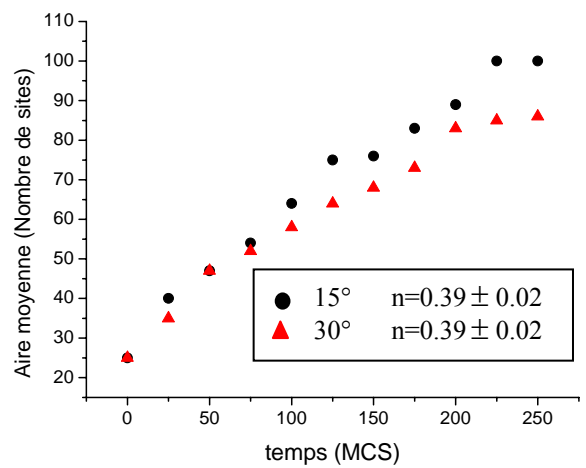
(a1)



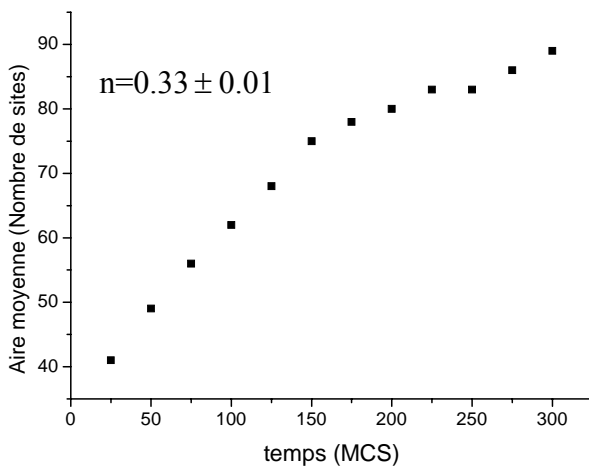
(a2)



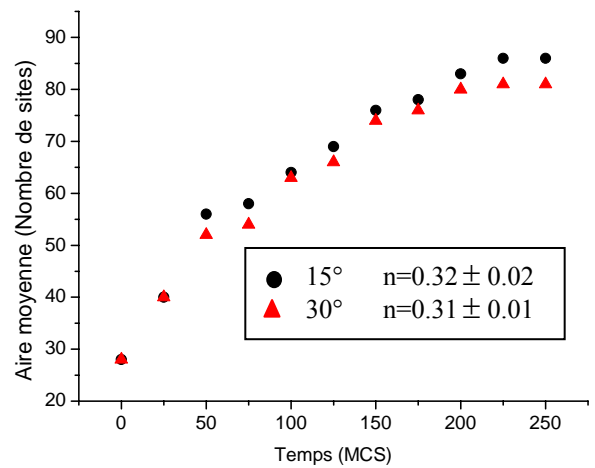
(b1)



(b2)



(c1)



(c2)

Figure IV-20: Cinétique de croissance des zones cristallographique 1, 2 et 3

a1, b1 et c1 dans le cas d'isotropie.

a2, b2 et c2 dans le cas d'anisotropie (15° et 30°).

IV.6. SIMULATION DE LA CROISSANCE PAR LA METHODE DES VERTEX

Pour la mise au point de notre simulation de croissance avec une méthode de type vertex, nous avons retenu comme matrice initiale la microstructure du cluster morphologique à gros grains (zone 2 de la figure IV-5). C'est la matrice notée b dans l'évolution de croissance par la technique Monte Carlo. La procédure de calcul utilisée est décrite dans le paragraphe III-4-1 du chapitre précédent.

Dans une méthode de type vertex avec mouvement des points triples uniquement, l'évolution de croissance est basée essentiellement sur les mécanismes suivants: l'ajustement à 120° aux points triples, la disparition des grains triangulaires et le changement de voisinage (Kawasaki et al., 1989 ; Soares et al., 1985 ; Telly, 1989 ; Fradkov et al., 1993 ; Weygand et al., 1998). Dans les modèles qui utilisent les vertex virtuels sur les joints, il faut rajouter en plus le mouvement de ces derniers vers leurs centres de courbure (Mullins, 1956 ; Frost et al., 1988 ; Bronsard, 1994). La procédure que nous avons mise au point fait partie de deuxième groupe. Nous avons considéré le mouvement des joints de grains par les vertex virtuels (cf.§ III.4.3.2) et le mouvement des points triples (cf.§ III.4.3.3). Dans cette première approche, nous n'avons pas introduit le changement de voisinage.

La disparition des grains triangulaires (cf. § IV.4.5) est appliquée en testant les joints entourant ces grains. Pour retenir le test le plus adéquat à introduire dans la procédure de simulation de croissance, nous avons considéré différents tests préliminaires (figure IV-21):

- 1- Dans le premier cas, les grains triangulaires sont éliminés systématiquement sans aucun test sur les joints (figure IV-21-a). Cette procédure introduit dans l'évolution de croissance des discontinuités notables, qui se répercutent sur l'aspect de la microstructure obtenue par simulation.
- 2- Dans le deuxième cas, la procédure introduit un test sur l'existence d'un joint possédant une longueur critique, correspondant à une longueur minimale donnée. L'évolution de croissance semble plus lente, donc plus homogène, du celle du premier cas (figure IV-21-b).
- 3- Dans le dernier cas, le test de longueur minimale est effectué sur les trois joints de chaque grain triangulaire (figure IV-21-c). L'évolution obtenue est similaire à celle du test sur un seul joint. Nous avons donc retenu le test 2.

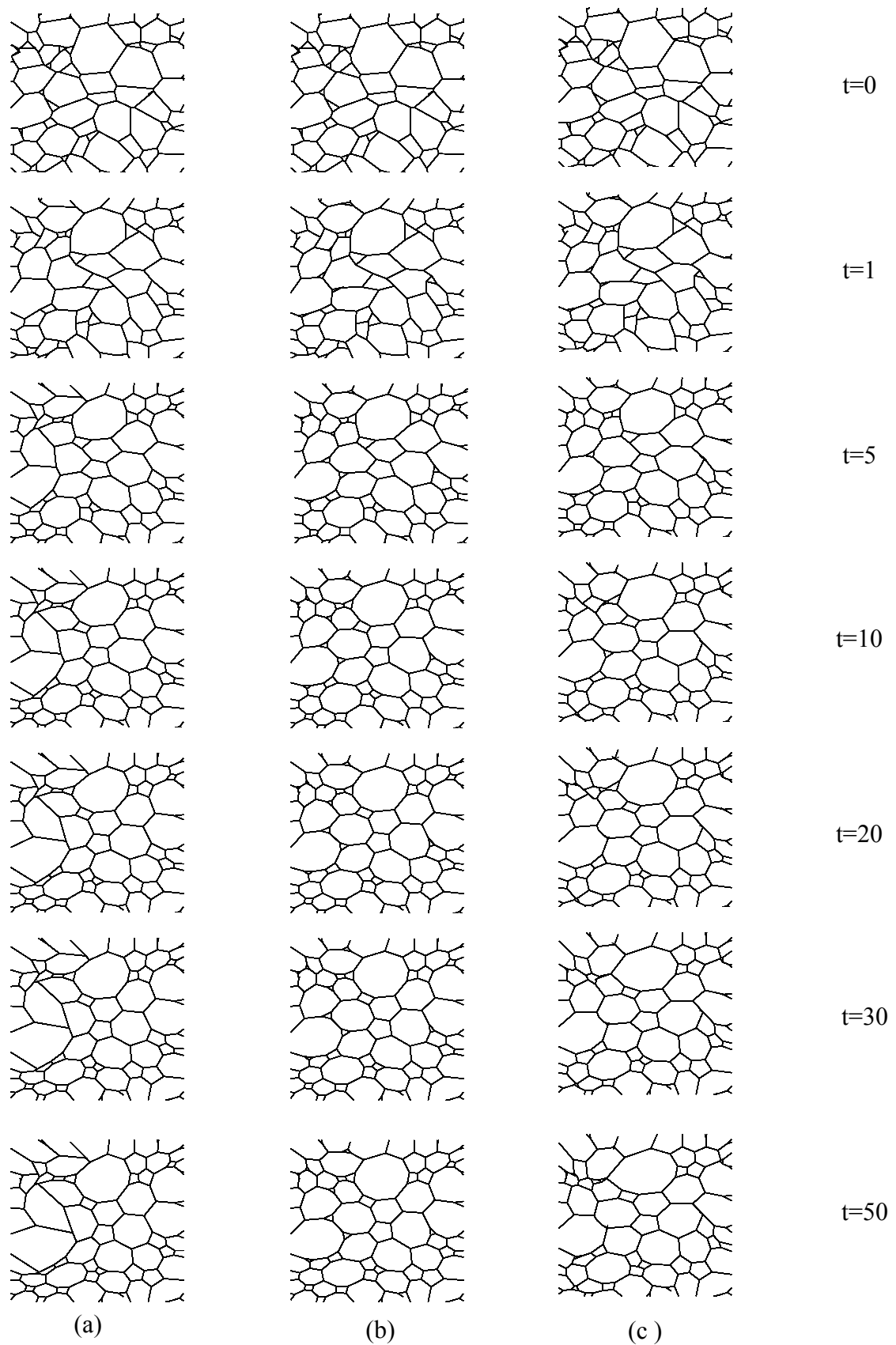


Figure IV.21: Evolutions de croissance par la méthode des vertex du cluster à gros grains
 (a) disparition systématique des grains triples, (b) disparition avec test de longueur minimale sur un seul joint et (c) disparition après test de longueur minimale sur les trois joints.

Pour le choix de la longueur minimale d , nous avons considéré deux possibilités (figure IV-22) :

1- La distance d représente la longueur de joint minimale qui existe dans la microstructure initiale, elle est constante dans la procédure de calcul (figure IV-22-a).

2- La distance d varie au cours du calcul, c'est la longueur de joint minimale après chaque étape de calcul (figure IV-22-b).

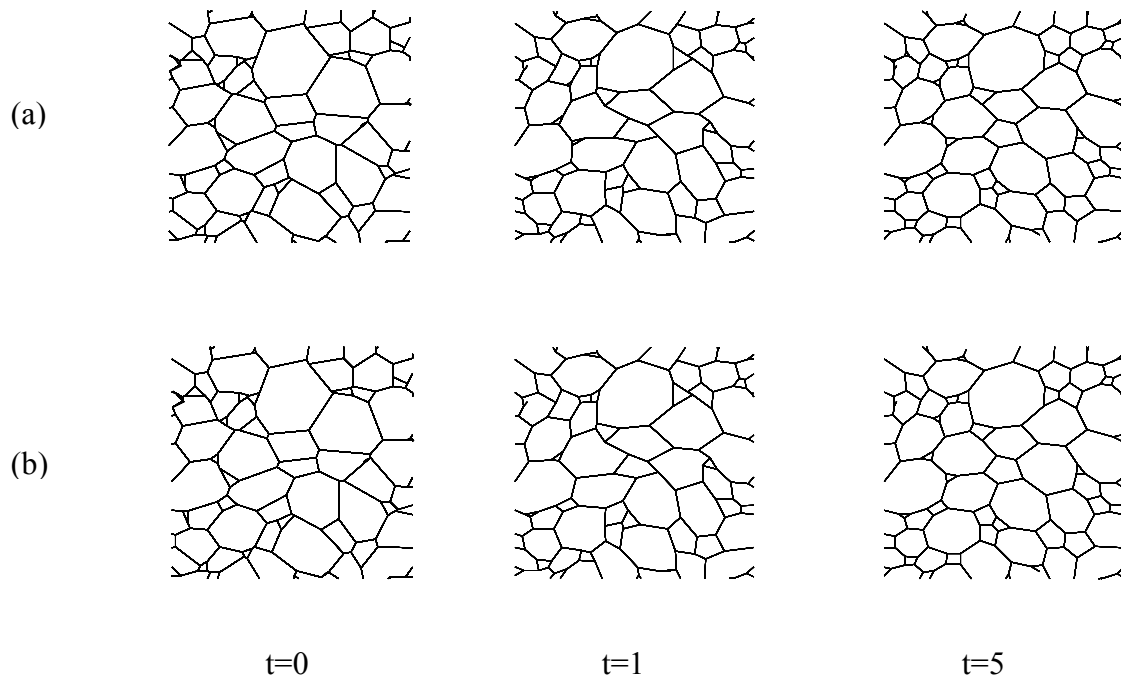


Figure IV.22 : Evolution du cluster à gros grains

(a) disparition des grains triangulaires avec d minimale constante ;

(b) disparition des grains triangulaires avec d minimale variable.

La deuxième procédure nécessite un temps de calcul plus important : par exemple, pour une étape de croissance de 0 à 5, il faut 15 minutes de calcul au lieu de 5 secondes dans la première procédure (le temps de calcul est réalisé sur un Pentium IV de caractéristiques : vitesse de 2.28 GHz, 256 de RAM). Comme les évolutions semblent relativement similaires.

Dans notre procédure de simulation, l'évolution est partagée en deux parties :

- dans un premier temps, l'évolution du cluster s'effectue uniquement par mouvement des joints (vertex virtuels), la seule force agissante est la force due à la courbure des joints. La microstructure se stabilise dès que les joints deviennent totalement rectilignes, la figure IV-23 montre cette évolution.

- Après obtention de la rectilignité totale des joints, l'évolution de la microstructure continue seulement par mouvement des points triples.

Remarque:

De façon plus rigoureuse, les mouvements des joints et des points triples peuvent être réalisés alternativement, c'est-à-dire que après chaque déplacement de tous les vertex virtuels (mouvement des joints), il y a déplacement des vertex réels, avec donc un ajustement à 120° à chaque étape entre le point triple et ses voisins (vertex virtuels limites). Cette procédure est plus astreignante, nous lui avons préférée la première dans cette première approche.

Nous pouvons remarquer que le mouvement des joints (par vertex virtuels) vers leur centre de courbure dans la méthode des vertex apparaît plus lent que dans la Monte Carlo. De même, la population des petits grains qui existent dans ce cluster évolue différemment dans les deux méthodes :

- pour la technique de MC, ils disparaissent dès les premier temps ; la stagnation de la microstructure est rapidement atteinte.

- pour la méthode des vertex, la population de ces petits grains n'a pas disparu et la stagnation est plus lente.

Par ailleurs, l'aspect topologique et le rôle des points triples sont introduits dans la méthode des vertex, avec une stabilisation de la microstructure à 120° aux points triples ; ce dernier aspect n'est pas pris en compte dans la méthode Monte Carlo.

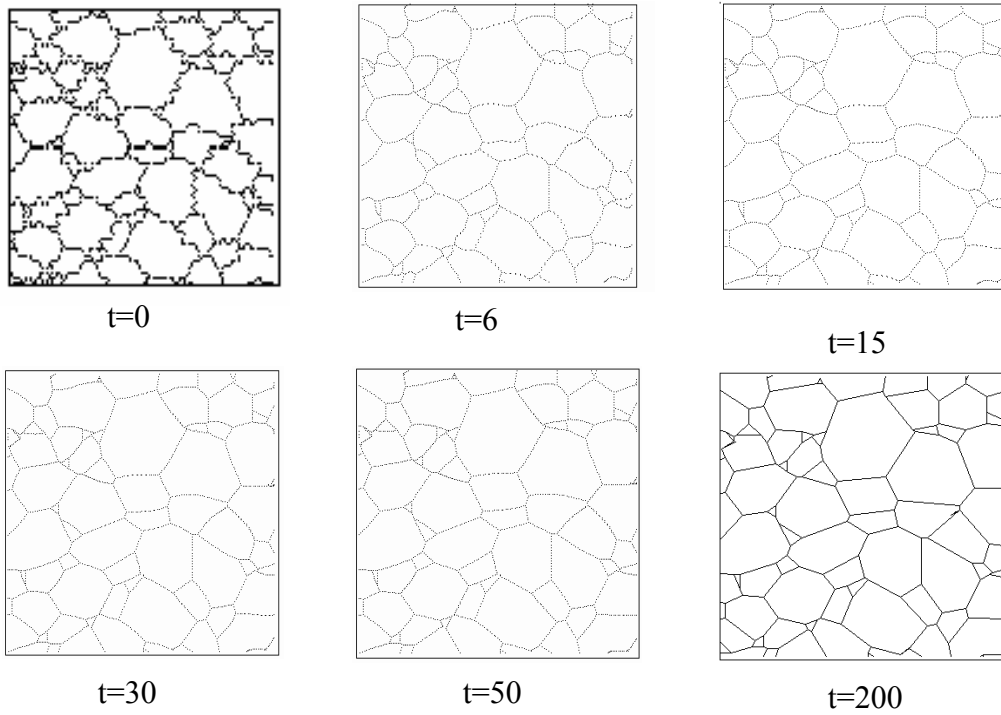


Figure IV.23 : Evolution de la microstructure jusqu'à la rectilignité totale des joints.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

Le phénomène de croissance est contrôlé par plusieurs paramètres microstructuraux, l'hétérogénéité de leurs distributions influe sur l'évolution du matériau. L'utilisation des paramètres structuraux moyens de la matrice peut masquer une évolution locale pouvant être très différente du comportement global de la microstructure.

Dans ce travail nous nous sommes intéressés à l'influence de l'hétérogénéité structurale sur l'obtention de voisinages potentiellement favorables à la croissance anormale des grains de Goss, dans des tôles magnétique Fe3%Si, de type HiB. L'aptitude à croître de ces grains d'orientation {110}<001> est étroitement liée à l'existence d'un voisinage adéquat. Nous avons considéré l'évolution par croissance normale de clusters morphologiques et cristallographiques, afin de caractériser les matrices les plus favorables au déclenchement de la croissance anormale des grains de Goss.

Du point de vue structural, nous avons considéré deux types d'hétérogénéité structurale :

- morphologique, avec des évolutions de micro-matrices correspondant à des clusters à gros grains et à petits grains ; nous avons considéré à titre comparatif une micro-matrice sans caractère morphologique, représentative d'une matrice homogène ;
- cristallographique, avec des évolutions de micro-matrices correspondant aux composantes de texture du matériau, ainsi qu'une micro-matrice isotrope.

Du point de vue techniques de simulation, nous avons utilisé deux méthodes : la technique statistique Monte Carlo et la méthode déterministe des vertex. Les travaux de simulation antérieurs de notre équipe sont tous basés sur la technique Monte Carlo. Dans cette première approche sur l'utilisation de la méthode des vertex, nous avons comparé les deux méthodes pour l'évolution des clusters morphologiques, avec la condition d'isotropie des joints de grains et sans considération de la température, comme c'est généralement le cas dans les études de simulation sur l'influence des paramètres structuraux sur la croissance normale.

En premier lieu, nous avons caractérisé notre matrice initiale, à partir d'une microstructure obtenue par EBSD. Avant le choix des clusters, nous avons procédé à une étape de correction, nécessaire quand les matrices initiales de simulation sont des matrices réelles.

La deuxième étape de l'étude a été consacrée au suivi du comportement en croissance normale dans les clusters. Nous avons commencé notre étude, pour les deux méthodes, par les tests de validation, habituellement utilisés dans les simulations de croissance, permettant de vérifier les procédures de simulation.

Nous avons suivi l'évolution des microstructures pour les deux types de clusters, en utilisant la technique Monte Carlo. Pour les clusters morphologiques, les résultats montrent que le voisinage joue un rôle important sur la croissance ou la décroissance des grains. L'évolution de la micro-matrice correspondant au cluster à gros grains est différente de celle du cluster à petits grains. Les cinétiques de croissance obtenues respectent la loi exponentielle de croissance, avec un exposant cinétique égal à 0.33, 0.27 et 0.25, pour les trois clusters respectivement ; ce sont des valeurs plus faibles que la valeur théorique 0.5, mais très proches des valeurs trouvées par d'autres auteurs utilisant la méthode Monte Carlo, sans introduction de la température. Dans le cluster à petits grains, nous avons remarqué la croissance d'un grain, entouré de petits grains, par contre dans le cluster à gros grains, un grain appartenant à la même classe disparaît. Le voisinage formé de petits grains est donc le plus adéquat pour la croissance anormale des grains de Goss

Dans une première approche de l'effet d'anisotropie, nous retenons le modèle de Read et Shokley qui relie la mobilité des joints à l'angle de désorientation. Nous avons considéré deux cas, la limite de désorientation 15° , généralement admise pour les faibles angles, et un angle critique de 30° , pour accentuer l'influence de la désorientation sur la mobilité. Les cinétiques de croissance montrent que l'augmentation de l'angle critique, correspondant à une diminution de la population des joints à grand angle, atténue l'évolution de la microstructure ; les joints à grands angles sont en effet considérés comme étant plus mobiles dans le modèle de Read et Shokley que les joints à faibles angles. C'est dans la zone la plus texturée que le processus de croissance est le plus faible, la stabilisation de la croissance normale est plus rapide. La stagnation est donc atteinte d'autant plus rapide que l'anisotropie est plus marquée.

Nous avons appliqué la procédure de calcul de la méthode des vertex, mise en point au cours de cette étude, pour suivre l'évolution de la croissance dans le cluster à gros grains. Le mouvement des joints s'effectue globalement vers leurs centres de courbure, la seule force agissante sur les joints est la force motrice due à leur courbure. Ce mouvement s'effectue par déplacement des vertex virtuels, avec une stabilisation de la matrice dès que les joints deviennent totalement rectilignes ; l'évolution de la microstructure continue seulement par mouvement des vertex réels.

Une étude comparative entre les deux méthodes de simulation a été faite pour le cluster à gros grains, afin de caractériser la technique de simulation la plus adéquate, c'est-à-dire la plus proche du comportement expérimental. Le mouvement des joints en Monte Carlo et leur rapide disparition provoque une stagnation rapide de ce cluster ; le mouvement des joints semble plus

lent, une stagnation donc plus lente, avec la méthode des vertex. Par ailleurs l'aspect topologique et le rôle des points triples sont considérés dans la méthode des vertex, avec stabilisation de la microstructure à 120° , ce dernier aspect n'est pas pris en compte dans la méthode Monte Carlo.

De nombreuses perspectives peuvent être envisagées :

- La considération de l'hétérogénéité chimique doit être prise en compte, avec comparaison des deux méthodes pour l'effet d'épinglage des joints de grains, pour différentes distributions de précipités.
- Le problème de croissance en simulation devrait pouvoir être envisagé sans introduire des approximations sur les paramètres expérimentaux, approximations qui empêchent la reproduction complète du comportement expérimental.
- Dans l'étude de l'anisotropie, il faut tenir compte des types de joints séparant les grains appartenant aux différentes orientations et de leurs mobilités.
- Le tri des orientations, pour la caractérisation des clusters cristallographiques, doit se faire par un calcul de désorientations, par rapport au squelette de la texture, coupe par coupe dans l'espace d'Euler.
- A propos des vertex, la procédure la plus adéquate est celle où les joints et les points triples se déplacent alternativement. La simulation de croissance doit introduire l'anisotropie de mouvement sur les joints de grains, avec les mobilités et les énergies de joints, ainsi que sur les points triples pour corriger l'ajustement à 120° , valable uniquement pour une structure isotrope.
- Pour la description des clusters, le choix d'une matrice de calcul avec une haute résolution (plus de 1000×1000 sites) est nécessaire pour caractériser l'effet de chaque paramètre indépendamment.

REFERENCES

- [1] Abbruzzesse G. & Lucke K., *Acta Metal.* 34, 905 (1986).
- [2] Abbruzzesse G., *Acta Metall.*, 33, 1329 (1985).
- [3] Abbruzzesse G., Lucke K. & Eichlkraut H., *Proceeding of 7th Riso International Symposium on Metallurgy and Materials Science*, 303 (1986).
- [4] Abbruzzesse G., Lucke K. & Heckelmann I. *Matr. Sci. For.* 94, 3 (1992).
- [5] Admas B. L., Kinderlehrer D., Mullins W.W. & Rollett A. D., *Scripta Metall.* 38, 531 (1998).
- [6] Afer H., *Thèse de Magister, Université Mentouri Constatine* (2003).
- [7] Afer H., Rouag N. & Penelle R., *Journal of Crystal Growth*, 268, July Issue 2, 320 (a) (2004).
- [8] Afer H., Rouag N. & Penelle R., *Materials Science Forum*, *Trans. Tech. Publications*, 467, 923, (b) (2004).
- [9] Afer H., Rouag N. & Penelle R., *Materials Science Forum*, *Trans. Tech. Publications vols* 495, 523 (2005).
- [10] Anderson M. P., Srolovits D. J. & Grest G. S., *Phil. Mag. B*, 59, 293 (1989).
- [11] Anderson M. P., Srolovits D. J., Grest G. S. & Sahani P. S., *Acta Metall.* 32, 783 (1984).
- [12] Atkinson H. V., *Acta Metall.* 36, 469 (1988).
- [13] Barrales-Mora L. A., Mohles V., Konijnenberg P. J. & Molodov D. A., *Computational Materials Science* (2006).
- [14] Benard J., Michel A. & Phibert J., "*Métallurgie générale*", *Masson et C^{ie}*, éditeurs (1969).
- [15] Bronsard L., Wetton B. T. R., (1994).
- [16] Burgers J. M., *Proc. Phys. Soc. (London)*, 52, 23, (1940).
- [17] Burke J. E., *Trans. Metall. Soc. A.I.M.E.* 180, 73 (1949).
- [18] Charpy G., *Rev. Met*, 71, 655 (1910).
- [19] Doherty R. D., *Metall. Trans*, 6A, 588 (1974).
- [20] Enomoto Y. & Kato R., *Acta Metall. Mater.*, 38, No 5, 765 (1990).
- [21] Ewing J. A. & Rosenhain W., *Phil. Trans. Royal Soc*, 193A, 353 (1900).
- [22] Fradkov V. E., Glicksman M. E., Palmer M., Nordberg J. & Rajan K., *Physica*, 66, 50

(1993).

- [23] Frost H. J., Thompson C. V. & Whang J., *Scripta Metallurgica*, 22, 65 (1988).
- [24] Fuchizaki K., Kusaba T. & Kawazaki K., *Phil. Mag. B*, 71, 333 (1995).
- [25] Fullman R. L., *Metal Interfaces* (Cleveland, Ohio: American Society for Metals), 170, (1952).
- [26] Goodhew P. J., "Grain boundary structure and kinetics", Ed. Balluffi R. W., *Metals Park, Ohio A.S.M.* 155 (1980).
- [27] Haessner F., "Recrystallisation of metallic materials", Dr. Riedere Verlag Gmbh, Stuttgart (1978).
- [28] Harase J., Shimizu, R. & Watanabe, T. *Proc 7th Riso Int. Symp. On Metall. Mater. Sci.*, 343 (1986).
- [29] Hesselbarth H. W. & Gobel I. R., *Acta Metall.* 39, 2135 (1991).
- [30] Hillert M., *Acta metal.* 13. 227 (1965).
- [31] Hillert M., *Acta metal.* 36. 3177 (1988).
- [32] Holm E. A., Rollett A. D. & Srolovits D. J., *Comp. Sim. Mat. Sci.* 373 (1996).
- [33] Humphreys F. J. & Hatherly M., "Recrystallisation and related annealing phenomena" Pergamon (1995).
- [34] Humphreys F. J., *Scripta Metallurgica et Materialia*, 27, 1557 (1992).
- [35] Hundry O. & Ryum N., *Mat. Sci. For Trans.* Vol 94, 89 (1992).
- [36] Hundry O. & Ryum N., *Acta Metall.* 29, 1737 (1981).
- [37] Hundry O. & Ryum N., *Acta Metall.* 30, 739 (1982).
- [38] Hundry O., Ryum N. & Westengen H., *Acta Metall.* 27, 161 (1976).
- [39] Hundry O., Ryum N. & Westengen H., *Acta, Metall.* 27, 161 (1979).
- [40] Juffries Z., *Trans Metall. Soc. A.I.M.E*, 135, 416 (1916).
- [41] Kawasaky K., Nagai T. & Nakashima K., *Phi. Mag.* B60 n°3, 399 (1989).
- [42] Louat N. P., *Acta Metal.* 22, 721 (1974).
- [43] Maazi N. & Rouag N., *Modellig and Simulation in materials Science and Engineering* 9,

423 (2001).

- [44] Maazi N., Rouag N. & Penelle R., *Science & Technologie, UMC*, 17, 39 (2002).
- [45] Maazi N. & Rouag N., *Journal of Crystal Growth*, 243, 361, Issue 2 (2002).
- [46] Maazi N., Rouag N. & Penelle R., *Materials Sciences Forum*, Vols 408-412, 961(2002).
- [47] Maazi N., Rouag N., Etter A.L., Penelle R. & Baudin T., *Scripta Mater.* 641, 55 (7) (2006).
- [48] Martin G., Levy J., Oudar J., Saada G. & Saintfort G., "Interfaces et surfaces en métallurgie", *Trans. Tech Publications* (1973).
- [49] Miodownik M. A., *Journal of Light Metals*, 2, 125 (2002).
- [50] Mohles V., *Phil. Mag. A*. 81, 971 (2001).
- [51] Mulins W. W., *J. App. Phys*, 27, 908 (1956).
- [52] Mykura H., "Grain boundary structure and kinetics", Ed. Balluffi R. W., *Metals Park Ohio A.S.M.* 445 (1980).
- [53] Nagai T., Kawasaki K. & Nakamura K., *Journal of the Society of Japan*, 57, No. 7, 2221 (1988).
- [54] Novikov V., *YU. Acta Metall.* 26, 1739 (1978).
- [55] Orowan E., *Z., Phys.* 89, 634 (1934)
- [56] Polanyi M., *Z. phys.* 89, 660 (1934).
- [57] Read W. T. & Shokley W., *Phy. Rev.* 78, 275 (1950).
- [58] Read W. T., "Dislocations in Crystals". *Mc Graw Hill* (1953).
- [59] Rhines F. N. & Craig. K. R., *Met. Trans.* 5, 413 (1974).
- [60] Rivier N. & Lissowski A. J., *Phys. A*, 15, 143 (1982).
- [61] Rollett A. D., *Mat. Sci.* 42,79 (1997)
- [62] Rollett A. D., Lutton M. J. & Srolovits D. J., *Acta Metall. Mater.*40 (1992).
- [63] Rollett A. D., Srolovits D. J. & Anderson M. P., *Acta Metall.* 37, 1227 (1989).
- [64] Rouag N., Vigna G. & Penelle R., 7th *Riso Int. Symp. On Metall. Maters. Sci.*, 521 (1986).

- [65] Rouag N., Vigna G. & Penelle R., *Acta Metallurgica et Materialia*, 38, 1101, Issue 6 (1990)
- [66] Sekkak C., thèse de magister, Université de Mentouri Constantine (2003)
- [67] Smith C. S., *Metal Interfaces* (Materials Park, OH: ASM), 65 (1952)
- [68] Smith C. S., *Trans. Metall. Soc. A.I.M.E.* 175, 15 (1948).
- [69] Sahni G. S., Grest G. S., Anderson M. P. & Srolovitz D. J., *Physical Review Letters*, 50, No 4 (1983).
- [70] Soares A., Ferro A. C. & Fortes M. A., *Scripta Metallurgica*, 19, 1491, (1985).
- [71] Sorby H. C., *J. Iron and steel Inst*, 31, 1, 253 (1887)
- [72] Srolovits D. J., Anderson M. P., Sahani P. S. & Grest G. S., *Scripta Metal.* 17, 241 (1983)
- [73] Srolovits D. J., Anderson M. P., Sahani P. S. & Grest G. S., *Acta. Metall.* 33, 509 (1985).
- [74] Srolovits D. J., Anderson M. P., Sahani P. S. & Grest G. S., *Acta. Metall.* 32, 793 (1984).
- [75] Stead J. E., *J. Iron and steel Inst.*, 53, 1, 145 (1898).
- [76] Taylor G. I., *Proc. R. Soc. London*, 145 A, 362 (1934).
- [77] Telley H., thèse de doctorat, Ecole polytechnique Fédérale de Lausanne (1989).
- [78] Turnbull D., *Trans Am. Soc. Inst. Min. Engrs* 191, 661 (1951).
- [79] Von. Neumann J., "Metal interfaces", *Am. Soc. Metals*, Cleveland, Ohio (1952).
- [80] Weaire D. & Rivier N., *Contemp. Phys.* 25, 59 (1984).
- [81] Weygand D., Bréchet Y. & Lépinoux J., *Phil. Mag. B*, 78, No 4, 329 (1998).
- [82] Weygand D., Bréchet Y. & Lépinoux J., *Acta Mater.*, 47, No 3, 961 (1999).
- [83] Weygand D., Bréchet Y. & Lépinoux J., *Materials Science and Engineering*, 292, 34 (2000).
- [84] Zhang J., Xu K. & Ji V., *Applied Surface Science*, 218, 267 (2003)

محاكاة النمو العادي في التجمعات النسيجية. المقارنة بين تقنية Monte Carlo و طريقة Vertex تطبيق على الصفائح المغناطيسية Fe₃%Si

يتحكم العديد من العوامل الميكروبنوية في ظاهرة النمو، حيث يؤثر عدم التجانس البنيوي على تطور هذه العوامل، و بالتالي على مختلف مراحل النمو. يعطي وجود تجمعات نسيجية، مرفولوجية أو بلورية، تغيرات محلية معتبرة بالنسبة للعوامل البنيوية (هذه العوامل بالنسبة للشبكة). تأخذ هذه الدراسة بعين الاعتبار تأثير عدم التجانس البنيوي، عن طريق النمو العادي، على الشبكات المجهرية، بحيث تكون هذه الشبكات المجهرية مناسبة للنمو غير العادي لحبيبات Goss، في الصفائح المغناطيسية Fe₃%Si من النوع HiB. أن قابلية نمو هذه الحبيبات ذات التوجيه $\{110\}<001>$ ترتبط بشدة بوجود جوار مناسب. تركز اهتمامنا على تطور النمو العادي في هذه التجمعات المرفولوجية و البلورية. بالاعتماد على التقنية الإحصائية Monte Carlo، قمنا بتتبع مختلف البنى المجهرية لنوعين من التجمعات. بيّنت النتائج، بالنسبة للتجمعات المرفولوجية، أن الجوار يلعب دورا أساسيا في نمو أو عدم نمو الحبيبات.

يعتبر الجوار المكون من الحبيبات الصغيرة الحجم مفضلا عن غيره للنمو العادي لحبيبات Goss. باستعمال نموذج Read و Shokley لإدخال اللاتجانس في الشبكات المجهرية البلورية يؤدي إلى الاستقرار السريع بحيث يكون واضحا في النسيج الأكبر. إنه التجمع أين يكون النسيج كبيرا هو لملائم للنمو الغير العادي لحبيبات Goss. بموازاة ذلك تتبعنا طريقة حسابية من نوع Vertex. بيّنت مقارنة هذه الأخيرة بطريقة Monte Carlo أن حركة حدود الحبيبات، عند استعمال MC، كانت سريعة و كذلك انكماشها (لدرجة اختفائها). يؤدي إلى التوقف السريع للشبكة (الاستقرار). بيد أن عند استعمال طريقة Vertex، يحدث تطور بطيء للبنية المجهرية مما يؤدي إلى الاستقرار البطيء. لقد تمّ إدخال، في طريقة Vertex، المظهر الطوبولوجي و دور النقاط الثلاثية. تجدر الوشاء إلى أن هذا الأخير لم يؤخذ بعين الاعتبار في تقنية Monte Carlo.

الكلمات المفتاحية: حبيبات Goss - تقنية Monte Carlo - طريقة Vertex - حدود الحبيبات تجمعات نسيجية.

Abstract:

The phenomenon of growth is controlled by several interdependent microstructural parameters; the presence of a structural heterogeneity influences the evolution of these parameters and thus the various stages of the growth process. The presence of clusters textured morphological or crystallographic, locally induces considerable modifications compared to the average structural parameters of the total matrix. The present work consider the influence of structural heterogeneity in using, by normal growth, micro-matrices potentially favourable to the abnormal growth of the grains of Goss, in the magnetic sheets Fe3%Si, of HiB Type. The aptitude of growth of these grains with orientation $\{110\}\langle 001\rangle$ is closely related to the existence of an adequate neighbourhood. The evolution by normal growth of morphological and crystallographic clusters is considered. First time followed the evolution of the various microstructures, of these two types of clusters, using the statistical technique Monte Carlo, is followed. For the morphological clusters, the results show that the neighbourhood plays an important role on either the grain growth or shrinking. The neighbourhood formed of small grains is most adequate for the abnormal Goss grain growth of. In parallel, a procedure calculation is developed of the vertex method type in order to make a comparative study between the evolutions obtained by the two methods of simulation, statistics and determinist. The results show that the movement of the grain boundaries in Monte Carlo and their rapid disappearance causes a fast stagnation of the matrix. However, using vertex method of the, the microstructure evolves more slowly and the stagnation is slower. In addition, the topological aspect and the role of the triple points are introduced within vertex method, with a stabilization of the microstructure at 120° at the triple points. This last aspect is not taken into account in the Monte Carlo method.

Key word: Grain growth – Monte Carlo – vertex - Goss grains – Grain boundaries – clusters.

Résumé

Le phénomène de croissance est contrôlé par plusieurs paramètres microstructuraux interdépendants ; la présence d'une hétérogénéité structurale influe sur l'évolution de ces paramètres et donc sur les différentes étapes du processus de croissance. La présence de clusters texturés, morphologiques ou cristallographiques, provoque localement des modifications considérables par rapport aux paramètres structuraux moyens de la matrice globale. Ce travail considère l'influence de l'hétérogénéité structurale sur l'obtention, par croissance normale, de micro-matrices potentiellement favorables à la croissance anormale des grains de Goss, dans les tôles magnétique Fe3%Si, de type HiB. L'aptitude à croître de ces grains d'orientation $\{110\}\langle 001\rangle$ est étroitement liée à l'existence d'un voisinage adéquat.

Nous avons considéré l'évolution par croissance normale de clusters morphologiques et cristallographiques. Nous avons dans un premier temps suivi l'évolution des différentes microstructures, pour les deux types de clusters, en utilisant la technique statistique Monte Carlo. Pour les clusters morphologiques, les résultats montrent que le voisinage joue un rôle important sur la croissance ou la décroissance des grains. Le voisinage formé de petits grains est le plus adéquat pour la croissance anormale des grains de Goss. Avec l'introduction de l'anisotropie, pour les clusters cristallographiques, la stabilisation est atteinte d'autant plus rapidement que la texture est plus marquée. C'est le cluster le plus texturé qui fournit le voisinage le plus adéquat pour la croissance anormale des grains de Goss. En parallèle, nous avons mis au point une procédure de calcul de type méthode des vertex pour faire une étude comparative entre les évolutions obtenues par les deux méthodes de simulation, statistique et déterministe. Les résultats montrent que le mouvement des joints de grains en Monte Carlo et leur rapide disparition provoque une stagnation rapide de la matrice ; avec la méthode des vertex, la microstructure évolue plus lentement, la stagnation est plus lente. Par ailleurs, l'aspect topologique et le rôle des points triples sont introduits dans la méthode des vertex, avec une stabilisation de la microstructure à 120° aux points triples ; ce dernier aspect n'est pas pris en compte dans la méthode Monte Carlo.

Mots clés : Croissance des grains – Grains de Goss – Monte Carlo – Vertex – Joint de grains – cluster.