

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE DU 20 AOUT 1955- SKIKDA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE

MEMOIRE

PRESENTE POUR OBTENIR LE DIPLOME DE

MAGISTER

SPECIALITE : PHYSIQUE

OPTION : MATIERE CONDENSEE

Etude par simulation de l'influence des paramètres morphologiques et
cristallographiques sur la croissance des grains de Goss dans les tôles
magnétiques Fe-3%Si

PAR

MERAREB Fouzia

Soutenue le : 15/10/2014

Devant le jury :

| | | | |
|--------------------------|----------------------|-----|----------------------|
| <u>Président</u> | A. GOUTAS | MCA | Université de Skikda |
| <u>Rapporteur</u> | N. MAAZI | Pr. | Université de Skikda |
| <u>Examineurs</u> | R. BOULECHFAR | MCA | Université de Skikda |
| | A. BOUMAIZA | MCA | Université de Jijel |

Remerciements

Je souhaite remercier en premier lieu mon directeur de ce mémoire, Mr N. MAAZI. Tout au long de mon travail, il a su orienter mes recherches aux bons moments. Je lui suis également reconnaissante pour le temps conséquent qu'il m'a accordé, ses qualités pédagogiques et scientifiques, sa franchise et sa sympathie. J'ai beaucoup appris à ses côtés et je lui adresse ma gratitude pour tout cela.

Je souhaiterais exprimer ma gratitude à Mr A. GOUTAS pour avoir accepté de présider le jury de ce mémoire.

Mes remerciements vont également à M^{me} R. Boulechfar et à Mr A. BOUMAIZA pour avoir accepté de participer à ce jury.

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

Enfin, Il m'est très agréable de remercier mes sœurs, mes frères et mon mari pour leur confiance, leur aide et soutiens moral.

TABLES DES MATIERES

| | |
|--|-----------|
| Introduction générale | 1 |
| Chapitre I : Evolution Structurale en Recristallisation et Croissance | |
| I.1 Introduction | 3 |
| II.2 Recristallisation et grossissement | 3 |
| I.2.1 La Restauration..... | 3 |
| I.2.2 Recristallisation primaire..... | 4 |
| I.2.3 Croissance normale..... | 4 |
| I.2.4 Croissance anormale ou exagérée..... | 5 |
| I.3 Migration de joints dans les matériaux polycristallins | 6 |
| I.3.1 Introduction..... | 6 |
| I.3.2 Spécialité du joint de grains..... | 7 |
| I.3.3. Energie du joint de grains..... | 7 |
| I.3.4 Mobilité du joint de grains..... | 8 |
| I.4 Forces en recristallisation et croissance de grains | 8 |
| I.4.1 Force motrice..... | 8 |
| I.4.2 Force Freinage..... | 10 |
| I.5 Modélisation de la de croissance de grains | 11 |
| I.5.1 Introduction | 11 |
| I.5.2 Rôle de la topologie | 12 |
| I.5.3 Modèles de Hillert..... | 13 |
| I.5.4 Modèles d'Abbruzzese et Lucke | 14 |
| I.5.5 Modèle de Hundy et Ryum..... | 16 |
| Référence bibliographiques | 18 |

Chapitre II : Structure et Texture Cristallographique

| | |
|---|----|
| II.1 Introduction | 19 |
| II .2 Définition géométrique du joint de grains | 19 |
| II.2.1 Introduction..... | 19 |
| II.2.2 Angle et axe de désorientation..... | 20 |
| II.2.3 Détermination des éléments de la désorientation..... | 20 |
| II.3 Modèles géométrique | 21 |
| II.3.1 Réseau de coïncidence C.S.L. | 22 |
| II.3.2 Critère géométrique de spécialité..... | 22 |
| II.3.3 Réseau « O » et dislocation primaires | 24 |
| II.3.4 Réseau « D.S.C » et dislocations secondaires | 25 |
| II.4 Modèle énergétique | 25 |
| II.5 Principales méthodes de simulation | 26 |
| II .5.1 Introduction..... | 26 |
| II .5.1 Dynamique Moléculaire (DM)..... | 26 |
| II.5.2 Technique des vertex..... | 26 |
| II.5.3 Méthode de Monte Carlo..... | 27 |
| II.6 La texture cristallographique | 28 |
| II.6.1 Introduction | 28 |
| II.6.2 Orientation d'un grain..... | 29 |
| II.6.3 Description d'une orientation par les indices d'Euler | 30 |
| II.6.4 Figures de pôles | 33 |
| II.6.4.1 Figures de pôles directs | 33 |
| II.6.4.2 Figures de pôles inverses | 33 |
| II.6.5 Fonction de Distribution des Orientations Cristallines (FDOC) | 34 |

| | |
|---|-----------|
| II.6.6 Analyse des orientations par diffraction des électrons rétrodiffusés EBSD | |
| (Electron Back –Scattering Diffraction) | 35 |
| Références bibliographiques..... | 38 |
| Chapitre III : Simulation Monte Carlo de la croissance de grains | |
| III.1 Introduction | 39 |
| III.2 Simulation de croissance de grains à partir des cartographies d’orientations | |
| d’un matériau Fe-3%Si..... | 40 |
| III.2.1 Introduction..... | 40 |
| III.2.2 Couplage entre le MEB (EBSD) et la simulation | 42 |
| 1- Acquisition des données expérimentales..... | 42 |
| 2- Entrée des données expérimentales..... | 42 |
| 3- Analyse de fichiers résultats par OIM TM (Orientation Imaging | |
| Microscopy)..... | 42 |
| III.2.3 Matériau utilisé..... | 43 |
| III.2.4 Préparation des échantillons..... | 43 |
| III.2.4.1 Polissage mécanique..... | 43 |
| III.2.4.2 Polissage électrolytique..... | 45 |
| III.2.4.3 Attaque des échantillons..... | 46 |
| III.2.5 Caractérisation par OIMTM des cartographies d’orientations de la tôle | |
| Fe-3%Si..... | 46 |
| III.3 Simulation Monte Carlo de croissance de grains | 50 |
| III.3.1 Tests de validation..... | 50 |

| | |
|---|-----------|
| III.3.2 Influence d'énergie des joints de grains sur la croissance des grains de Goss..... | 54 |
| III.3.2.1 Microstructure théorique..... | 55 |
| III.3.2.2 Microstructure expérimentale..... | 57 |
| Références bibliographiques | 63 |
| Conclusions et Perspectives | 65 |

Introduction Générale

Introduction

La microstructure des matériaux polycristallins évolue au cours du temps, des grains vont grossir alors que d'autres vont disparaître. L'étude de cette évolution est d'une importance capitale pour les sciences des matériaux. En effet, la microstructure conditionne largement les propriétés des matériaux, quelles soient mécaniques, magnétiques, électriques ou autres. Il est donc important de simuler cette évolution pour connaître a priori les futures propriétés. L'évolution de la microstructure est contrôlée par la croissance normale ou anormale des grains. Les forces motrices impliquées dans les processus de recristallisation primaire et de croissance des grains sont de nature différente. Dans le premier cas cette force est due à l'énergie associée à la densité de dislocations, alors dans le second cas elle est contrôlée par l'énergie des joints de grains. La croissance des grains qu'elle soit normale ou anormale dépend de l'orientation cristallographique des grains (texture cristallographique), de leur taille moyenne, de leur distribution en taille et bien entendu de l'énergie du joint qui tend à réduire l'aire totale des joints de grains. En général, on divise les joints de grains en deux grandes classes : les joints spéciaux et les joints généraux selon la propriété qui leur est associée, selon leur structure et les paramètres cristallographiques qui les décrivent.

Dans les tôles magnétiques Fe-3%Si, la texture de Goss $\{110\}\langle 001\rangle$ est définie par :

- Des plans (110) parallèles à la surface de la tôle (plan de laminage) ;
- Des directions cristallographiques $\langle 001\rangle$ (direction de facile aimantation pour le fer) parallèles à la direction de laminage.

Cette texture est obtenue par une croissance soudaine et rapide d'une composante mineure de la matrice primaire, aux dépens des composantes majeures. La théorie classique de Hillert prévoit une croissance anormale des grains dont la taille est deux fois supérieure à la taille moyenne de la matrice primaire. Dans le cas des tôles magnétiques Fe-3%Si, il a été observé que le facteur « taille » n'intervient pas seul dans les premiers stades de la recristallisation secondaire. La croissance anormale des grains de Goss est réalisée par la migration facile des joints qui les entourent. Cette migration est contrôlée par différents facteurs : morphologique, cristallographique et chimique.

Dans notre présent travail, nous nous sommes intéressés à l'influence des paramètres morphologique (la taille de grains) et cristallographique (l'énergie des joints qui entourent le grain de Goss) sur l'évolution des grains de Goss par croissance anormale.

L'exposé de ce travail comprend 3 parties :

- Le premier chapitre est un rappel sur le phénomène de la recristallisation et la croissance de grains. Nous considérons les forces essentielles intervenant en migration des joints de grains ;
- Dans le second chapitre, nous rappelons la théorie géométrique et la modélisation des joints de grains, en plus de la description des orientations cristallographiques ;
- Le dernier chapitre comprend nos résultats et discussion sur la croissance normale et anormale des grains de Goss.

Chapitre I

Evolution Structurale en Recristallisation et Croissance

I.1 Introduction

On dit qu'un métal est écroui, lorsqu'il a subi une déformation plastique à froid; sa microstructure a été modifiée, ses propriétés physiques et mécaniques ont été altérées, une certaine quantité d'énergie a été emmagasinée sous forme d'énergie potentielle. Elle conduit à l'augmentation des défauts structuraux tels que [1] :

- Défauts ponctuels : lacunes et interstitielles ;
- Défauts linéaires : dislocations ;
- Défauts de surface : défauts d'empilement, macles et sous grains.

Les défauts de structure formés lors de la déformation ne se trouvent pas généralement en équilibre thermodynamique [2] ; ceci fait que l'état d'un métal écroui est thermodynamiquement instable. Pour restaurer les propriétés et la structure que le métal possédait avant la déformation, un apport d'énergie est nécessaire, c'est-à-dire il faut le réchauffer, sauf, bien sur si la déformation a été appliquée à température assez élevée.

I.2 Recristallisation et grossissement granulaire

Après déformation plastique, le matériau n'est plus en état d'équilibre. On observe une modification des propriétés physiques et mécaniques de la matrice primaire. Le recuit permet d'obtenir un nouvel état d'équilibre. C'est le processus de recristallisation. L'obtention des tôles à grains orientés est basée sur le contrôle du processus global de recristallisation.

I.2.1 Restauration

La restauration est le stade de recuit qui précède celui de l'apparition de nouveaux grains à faible densité de dislocations ou encore, c'est tout processus thermique qui ne fait pas appel au mouvement des joints (Fig. I.1). Cette étape de restauration permet de récupérer totalement ou partiellement les propriétés mécaniques initiales du métal, elle est discutée essentiellement en termes de changement de structures de dislocations. Elle est mesurable expérimentalement par les changements qu'elle produit sur des paramètres physiques telles que : la limite d'élasticité [3], la résistivité électrique [4] et la conductivité [5]. Actuellement, Elle représente un domaine très riche pour la recherche.

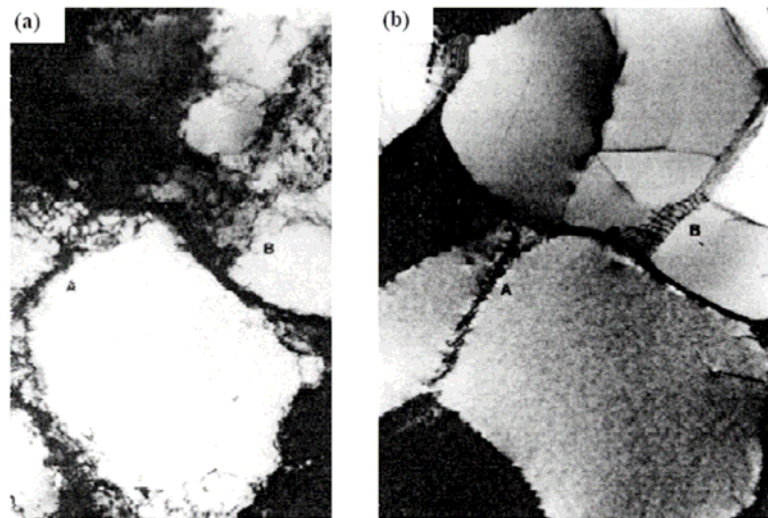


Figure I.1 Micrographies par microscopie électronique en transmission d'un aluminium déformé (10%) et recuit in-situ : (a) structure déformée et (b) la même plage après un recuit de 2 minutes à 250°C [6].

I.2.2 Recristallisation primaire

La recristallisation d'une microstructure suffisamment déformée est appelée recristallisation primaire. La recristallisation d'un métal déformé comprend généralement deux stades, germination et croissance de ces germes au dépend de la matrice déformée. La germination implique la formation de petits volumes relativement parfaits, qui sont partiellement bordés par des joints à grand angle, à l'intérieur de la matrice déformée [6]. Pour que les germes soient viables, ces volumes doivent avoir des tailles suffisantes pour continuer à croître dans la matrice écrouie. Donc, par définition, un germe de recristallisation est une cristallite de faible énergie interne, séparé de la matrice déformée par des joints à grand angle, et capable de croître. La croissance des germes implique la migration des joints à grand angle vers l'intérieur de la matrice déformée.

I.2.3 Croissance normale

La croissance normale a lieu après la recristallisation primaire. En effet, si le matériau est maintenu à haute température, le cycle se poursuit par une croissance homogène des grains (Figure I.2). La taille moyenne des grains croît d'une façon continue. Les premières tentatives

pour décrire la croissance de grains datent d'une soixantaine d'années. Il a été établi que l'énergie de joint constitue la force motrice pour la croissance de grains. Les joints de grains continuent leur migration dans la structure recristallisée, en diminuant l'excès d'énergie dû à leur courbure. Un joint de grains courbe migre généralement vers son centre de courbure.

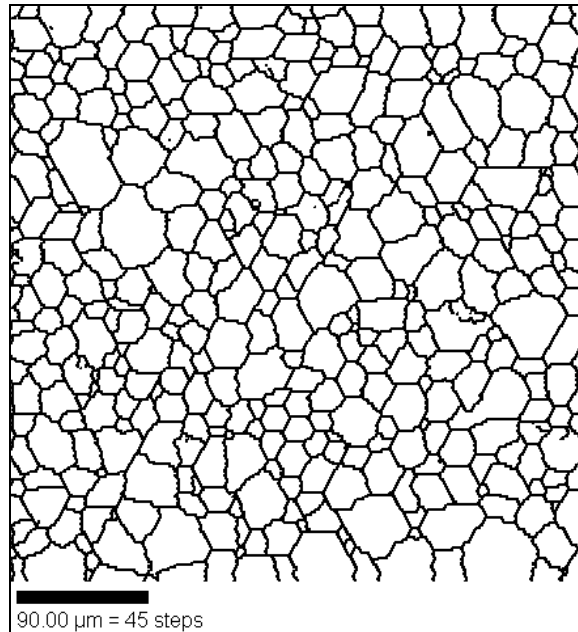


Figure I.2 Croissance normale des grains.

I.2.4 Croissance anormale ou exagérée

Lorsque la croissance normale est bloquée, il peut se produire une croissance anormale ou exagérée d'un petit nombre de grains au détriment des autres : c'est la croissance anormale ou recristallisation secondaire. La croissance normale peut être retardée, puis arrêtée par quatre facteurs :

- Une forte texture de recristallisation primaire qui rend très difficile le déplacement des joints de très faible désorientation ;
- Le joint peut être fixé par une ségrégation intergranulaire d'impuretés. En se déplaçant le joint attire avec lui ces impuretés ce qu'il diminue sa vitesse de migration ;

- Les particules de seconde phase dispersées dans une microstructure peuvent bloquer la croissance normale et ainsi favoriser la croissance d'une façon exagérée de quelques grains ;
- Pour Les matériaux de faible épaisseur, lors de la croissance, la plupart des grains arrive rapidement à une taille égale à l'épaisseur de la tôle. De ce fait, les joints de grains émergeant à la surface de l'échantillon peuvent se trouver bloquer.

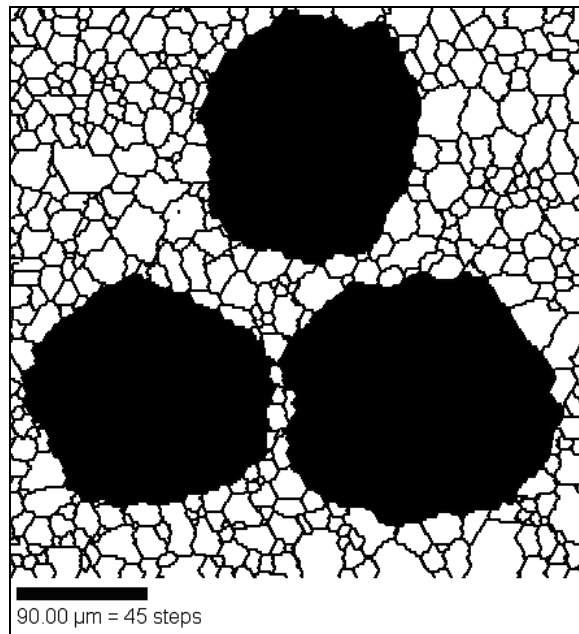


Figure I.3 Croissance anormale de grains.

I.3 Migration de joints dans les matériaux polycristallins

I.3.1 Introduction

On a vu précédemment que le phénomène de la croissance de grains est contrôlé par la migration des joints de grains. Cette migration implique à l'échelle atomique que certains atomes, dont l'arrangement correspond initialement au réseau de l'un des deux cristaux, vont se trouver disposés suivant le réseau de l'autre cristal. Il y a une réorganisation des atomes au niveau du joint. Donc, la migration d'un joint de grains est équivalente au transfert d'atomes d'un grain vers l'autre. Différents paramètres influent sur la migration des joints de grains :

- La spécialité du joint de grains ;
- La présence de précipités ou ségrégation ;
- Les nœuds ou points triples ;
- L'énergie du joint de grain.

I.3.2. Spécialité du joint de grains

Du point de vue énergétique, les joints de grains sont classés généralement en deux groupes :

- Les joints à faible désorientation ($<15^\circ$) et les joints à grand angle, proches d'un état de coïncidence. Ces joints correspondent à des minima d'énergie (Figure I.4) ;
- Les joints généraux, dans lesquels aucune périodicité ne peut être révélée (ce qui n'exclut pas un certain degré d'organisation) ; ces joints possèdent une grande énergie.

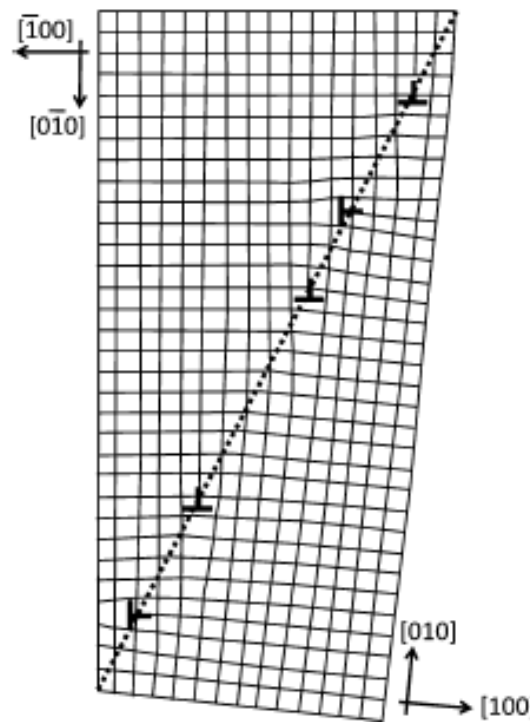


Figure I.4 Un joint à faible désorientation.

I.3.3. Energie du joint de grains

L'énergie du joint est une propriété qui dépend de sa structure [10]. Cette hypothèse a servi de point de départ au modèle proposé des 1950 par Read et Schokley [11] pour évaluer l'énergie des sous-joints en fonction de leur structure (décrite en termes de dislocations) et de leur désorientation. Le modèle a été perfectionné par Brokman et Balluffi [12] pour rendre compte

des minima énergétiques associés aux joints de forte désorientation, proches d'une coïncidence, puis aux joints généraux par Wang et Vitek [13].

Au cours de la croissance de grains, en présence de particules d'une seconde phase, les forces motrice et de freinage dépendent de l'énergie du joint de grains. Il est bien établi que les joints à faible désorientation et les joints de coïncidence ont une faible énergie, relativement aux joints généraux. Par conséquent, les joints spéciaux (à faible angle et de coïncidence) seront moins freinés par les particules que les joints généraux.

I.3.4. Mobilité du joint de grains

La mobilité du joint de grains dépend de sa structure, de sa teneur en impuretés et de la température [9]. Il est difficile d'avoir une relation entre la mobilité du joint et l'angle de désorientation. Cette relation a été discutée par plusieurs auteurs, elle est considérée comme une fonction croissante de l'angle de désorientation du joint de grains.

I.4. Forces en recristallisation et croissance de grains

I.4.1. Force motrice

La vitesse de migration des joints de grains est reliée à la force motrice "F" par :

$$V = MF^n \quad (\text{I-1})$$

où M est la mobilité du joint de grains et le coefficient "n" est compris entre 0.5 et 1.

Considérons deux grains 1 et 2 séparés par un joint de grains "j" (Figure I.5). L'enthalpie libre du système s'écrit:

$$G = g_1 \cdot V_1(x) + g_2 \cdot V_2(x) + g_j \cdot S_j \quad (\text{I-2})$$

où :

- $g_1(g_2)$ est l'enthalpie libre du grain 1(2) par unité de volume $V_1(V_2)$;

- g_j est l'enthalpie libre par unité d'aire du joint.

- S_j est l'aire du joint;

Si le joint se déplace de 'dx', on aura :

$$\frac{dG}{dx} = g_1 \cdot \frac{dV_1}{dx} + g_2 \cdot \frac{dV_2}{dx} + g_j \cdot \frac{ds_j}{dx} \quad (I-3)$$

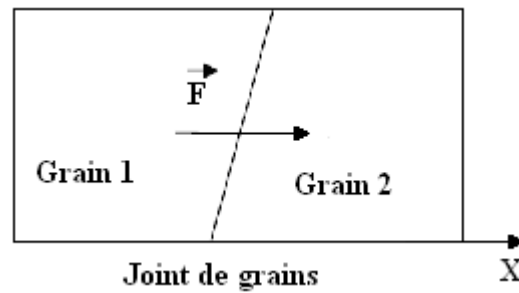


Figure I.5 Force motrice appliquée sur le joint de grains.

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

$$F = -\frac{dG}{dx} \quad (I-4)$$

Sachant que le volume est conservé :

$$\frac{dV_2}{dx} = -\frac{dV_1}{dx} \quad (I-5)$$

On aura :

$$F = (g_2 - g_1) \frac{dV_1}{dx} - g_j \cdot \frac{dS_j}{dx} \quad (I-6)$$

La force "F" est constituée de deux termes :

* Une force motrice volumique :

$$F_v = (g_2 - g_1) \frac{dV_1}{dx} \quad (I-7)$$

* Une force motrice interfaciale :

$$F_s = -g_j \cdot \frac{dS_j}{dx} \quad (I-8)$$

A la fin de la recristallisation primaire, la force motrice volumique devient nulle, c'est la force interfaciale qui, à ce stade de la croissance, va devenir prépondérante. Un joint de grains se déplace vers son centre de courbure pour diminuer son aire totale. Cette force est donnée par la relation :

$$F = 2 \frac{\gamma}{R} \quad (\text{I-9})$$

où γ est l'énergie du joint de grains et R son rayon de courbure.

En considérant un grain cubique de côté D , entouré de 6 autres grains identiques ; la force motrice sera donnée par :

$$F = \gamma \cdot \frac{V}{S} \quad (\text{I-10})$$

$$F = 3 \cdot \frac{\gamma}{D}$$

En général :

$$F = k \cdot \frac{\gamma}{R} \quad (\text{I-11})$$

où k est une constante.

Gladmann a proposé une approximation par l'introduction d'un facteur de correction, quand la distribution des tailles de grains est hétérogène. La force motrice est donnée par la relation [15] :

$$F_G = 2 \left(\frac{3}{2} - \frac{2}{p} \right) \frac{\gamma}{R} \quad (\text{I-12})$$

où p est un facteur de correction égal au rapport des tailles du grain en croissance et ses voisins.

I.4.2. Force de freinage

Les forces de freinage sont dues essentiellement aux impuretés en solution et aux précipités de seconde phase. Les particules exercent une force de freinage du fait de l'interaction joint-particule. La force de freinage par particule est donnée par :

$$F_e = \pi \cdot r \cdot \gamma \cdot \sin 2\theta \quad (\text{I-13})$$

où r est le rayon de la particule supposée sphérique.

La valeur de la force est maximale pour $\theta = 45^\circ$:

$$F_{em} = \pi \cdot r \cdot \gamma \quad (\text{I-14})$$

S'il y a N particules coupant une surface unitaire de joint :

$$N = \frac{3f}{2\pi r^2} \quad (\text{I-15})$$

où f est la fraction volumique de particules.

La force de freinage par unité d'aire :

$$F_f = N \cdot F_{em}$$

$$F_f = \frac{3}{2} \gamma \frac{f}{r} \quad (\text{I-16})$$

Généralement, la force de freinage est donnée par :

$$F_f = B \gamma \frac{f}{r} \quad (\text{I-17})$$

où B est un constant.

Au cours de la recristallisation primaire, cette force de freinage est négligeable devant la force motrice volumique ($F_v \cong 10^7 \text{ N/m}^2$). Par contre, comme la force motrice interfaciale est faible en croissance ($F_s = 10^4 \text{ N/m}^2$), la force de freinage devient importante à ce stade de la recristallisation.

I.5. Modélisation de la croissance de grains

I.5.1 Introduction

Le problème de la migration des joints dans un matériau polycristallin est compliqué. Pour un recuit isotherme, on exprime l'influence du temps sur le rayon moyen \bar{R} des grains à l'aide de la relation phénoménologique suivante :

$$\bar{R}^2 - \bar{R}_0^2 = kt \quad (\text{I-18})$$

où \bar{R}_0 est le rayon moyen des grains au temps $t = 0$ et k une constante.

L'objectif de toute théorie de croissance de grains étant de prédire au premier ordre l'évolution de la microstructure granulaire, la modélisation doit être cohérente avec les observations expérimentales. Les analyses relatives à la croissance de grains s'expriment soit par la dynamique topologique soit par les cinétiques de taille de grains de la microstructure.

I.5.2 Rôle de la topologie

En 2D, la relation entre le nombre de polygones P , le nombre de cotés E et le nombre de sommets C est donnée par :

$$P - E + C = 1 \quad (\text{I-19})$$

De plus, en moyenne un grain est entouré par 6 joints à 120° . Un grain possédant moins de 6 cotés aura tendance à disparaître et s'il en possède plus de 6 il aura tendance à croître (Figure I.6).

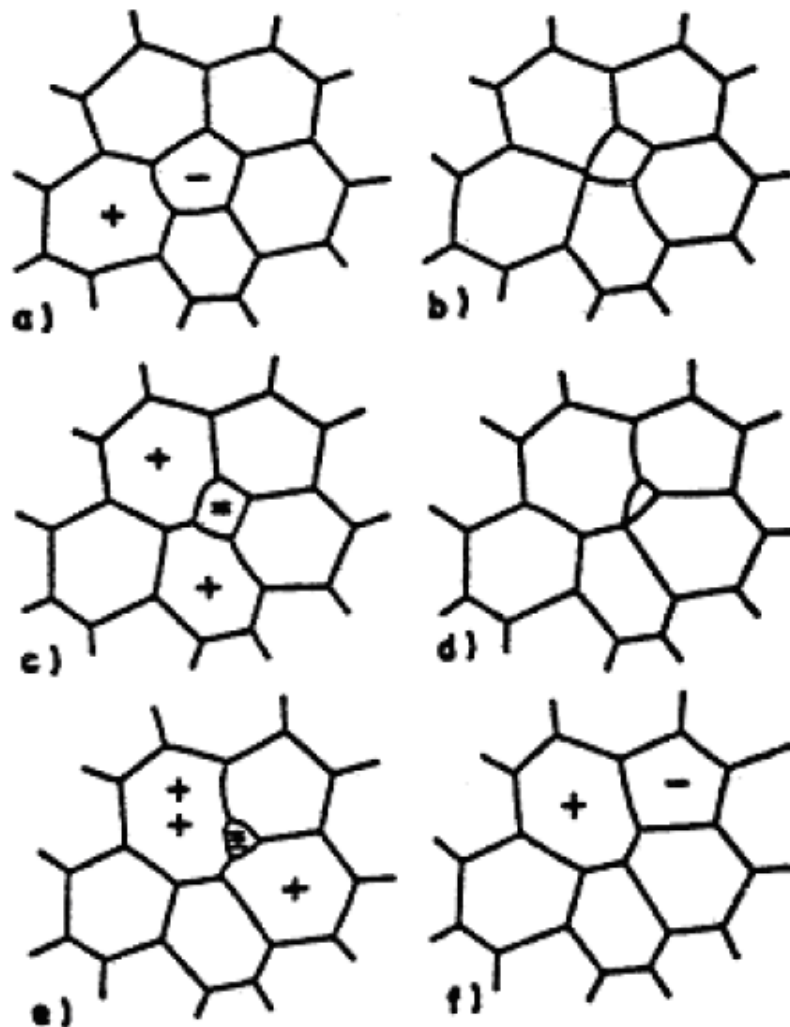


Figure I.6 Disparition des grains ayant moins de 6 cotés (2D).

Les deux processus topologiques fondamentaux qui se produisent en 2D sont l'échange de voisins et la disparition de grains (figure I-7). 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.

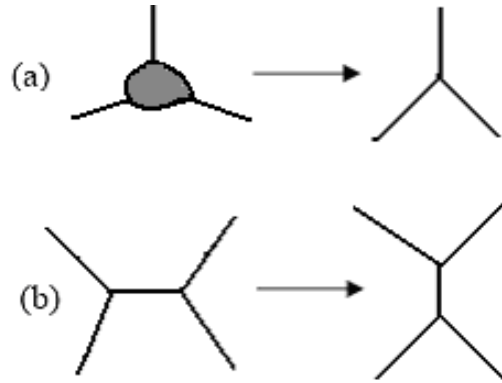


Figure I.7 Les changements topologiques en croissance de grains (2D) :

(a) Disparition d'un grain triangulaire et (b) échange de voisins.

I.5.3 Modèle de Hillert

La théorie de Hillert lie les conditions d'apparition d'une croissance anormale à la répartition des tailles de grains dans l'échantillon et à la présence d'impuretés. Dans son modèle, Hillert prévoit une croissance normale pour une taille de grains suffisamment faible, c'est-à-dire pour une taille moyenne des grains inférieure à une taille critique D_1 . Pour une taille moyenne assez grande, supérieure à une valeur critique D_2 , la matrice devient stable en présence des particules d'une seconde phase ; Entre les deux tailles D_1 et D_2 , on peut observer une croissance exagérée, à condition qu'il existe au moins un grain dont la taille est deux fois supérieure à la taille moyenne de la matrice. Dans ce modèle, la vitesse de croissance d'un grain est donnée par :

$$\frac{dR}{dt} = m\gamma \left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R} \pm z \right) \quad (\text{I-20})$$

où : - m et γ sont la mobilité et l'énergie du joint ;

- R_c est un rayon critique ;

- $z = 3f/4r$ est le facteur de freinage (facteur de Zener).

I.5.4 Modèle d'Abbruzzese et Lucke

Abbruzzese et Lucke [16] développèrent un modèle qui prend en compte la microstructure et la texture cristallographique. Ils introduisent un rayon critique par classe de tailles i et par classe d'orientation H .

La variation du volume d'un grain A aux dépens d'un grain voisin B est donnée par :

$$\left. \frac{dV_A}{dt} \right)_B = S_{AB} \cdot v \quad (\text{I-21})$$

Avec : - S_{AB} est la surface de contact entre les deux grains A et B ;

- v est la vitesse de migration du joint entre A et B.

la vitesse de migration " v " est donnée en fonction de la force motrice " F " et de la mobilité du joint " m " par :

$$\begin{aligned} v &= m \cdot F \\ v &= 2 \frac{m \cdot \gamma}{\rho_{AB}} \end{aligned} \quad (\text{I-22})$$

où ρ_{AB} est le rayon de courbure du joint :

$$\frac{1}{\rho_{AB}} = \frac{1}{R_B} - \frac{1}{R_A} \quad (\text{I-23})$$

R_A et R_B sont les rayons des deux grains A et B respectivement.

On aura ainsi :

$$\left. \frac{dV_A}{dt} \right)_B = M S_{AB} \left(\frac{1}{R_B} - \frac{1}{R_A} \right) \quad (\text{I-24})$$

où $M = 2m\gamma$ est la diffusivité macroscopique.

De l'équation (I-24) on peut déduire la condition de la conservation du volume total :

$$\left. \frac{dV_A}{dt} \right)_B = - \left. \frac{dV_B}{dt} \right)_A \quad (\text{I-25})$$

$$\text{Avec } V_A = \frac{4}{3} \pi R_A^3$$

En faisant intervenir les N_A voisins, l'équation (I-24) nous donne la variation totale du rayon

R_A :

$$\frac{dR_A}{dt} = \frac{M}{4\pi R_A^2} \sum_{B=1}^{N_A} S_{AB} \left(\frac{1}{R_B} - \frac{1}{R_A} \right) \quad (I-26)$$

La surface moyenne de contact a_{ij} d'un grain de la classe "i" (caractérisée par R_i) avec les grains de la classe "j" (caractérisée par R_j) est donnée par :

$$a_{ij} = \frac{A_{ij}}{n_i} \quad (I-27)$$

où :

- A_{ij} est la surface totale de contact entre les deux classes "i" et "j" ;
- " n_i " est le nombre des grains de la classe "i".

En introduisant (I-27), on trouve :

$$\frac{dR_i}{dt} = M \left(\frac{1}{R_{ci}} - \frac{1}{R_i} \right) \quad (I-28)$$

Avec :

$$R_{ci} = \frac{\sum_j a_{ij}}{\sum_j \frac{a_{ij}}{R_j}} \quad (I-29)$$

L'expression (I-28) donne le rayon critique d'une classe "i". Donc, tous les grains de la même classe se comportent de la même façon en croissance :

$$\left. \begin{array}{l} \{ R_i > R_{ci} \quad \text{les grains de la classe "i" vont croître} \\ \{ R_i < R_{ci} \quad \text{les grains de la classe "i" vont décroître} \end{array} \right\}$$

la variation du rayon d'une classe, de taille i et d'orientation H, s'écrit :

$$\frac{dR_i^H}{dt} = \sum_K \eta^K M^{HK} \left(\frac{1}{R_C^K} - \frac{1}{R_i^H} \right) \quad (I-30)$$

I.5.5 Modèle de Hundy et Ryum

Par analogie avec la coalescence des bulles de savon, Hundry et Ryum [18, 19] ont proposé un modèle pour décrire la croissance de grains. Le modèle est appliqué à une chaîne linéaire de bulles, une bulle i est connectée avec un nombre de bulles $(i-n)$ à $(i+n)$ (Figure I.8). Dans une bulle de rayon R_i , la pression interne p_i est égale à :

$$p_i = \frac{2\gamma}{R_i} \quad (\text{I-31})$$

Plus le grain est petit, plus il est apte à disparaître, puisque la pression est plus grande.

Un grain i est connecté uniquement à deux voisins (Figure I.9), la différence de pression nette dans le grain s'écrit donc :

$$\Delta p_{\text{int}} = 2\gamma \left[\left(\frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_{i-1}} \right) + \left(\frac{1}{R_i} - \frac{1}{R_{i+1}} \right) \right] \quad (\text{I-32})$$

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

$$\frac{dv}{dt} = m\Delta p_{\text{int}} \quad (\text{I-33})$$

Donc,

le taux de croissance d'un grain i est :

$$\frac{dR_i}{dt} = 4m\gamma \frac{1}{R_i^2} \left[\frac{1}{R_i} - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_{i-1}} + \frac{1}{R_{i+1}} \right) \right] \quad (\text{I-34})$$

Pour une chaîne de N bulle, il faut résoudre un système de N équations de type (I-34).

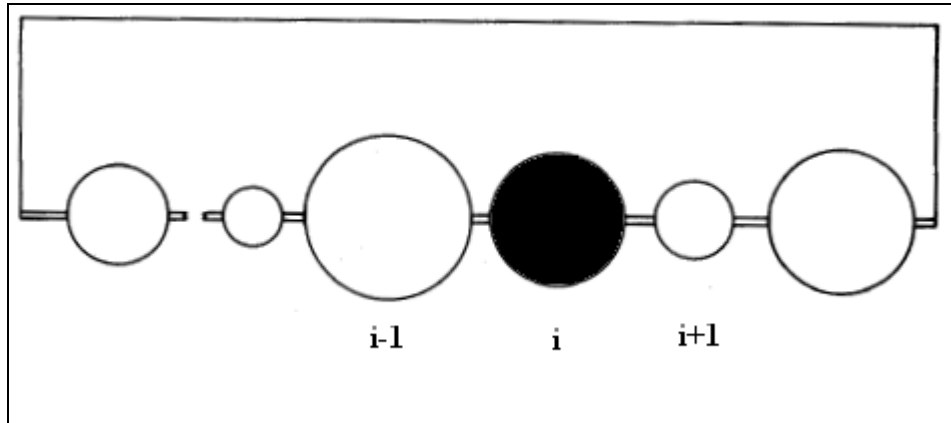


Figure I.8 Modèle des bulles connectées proposé par Ryum et Hunderi [18].

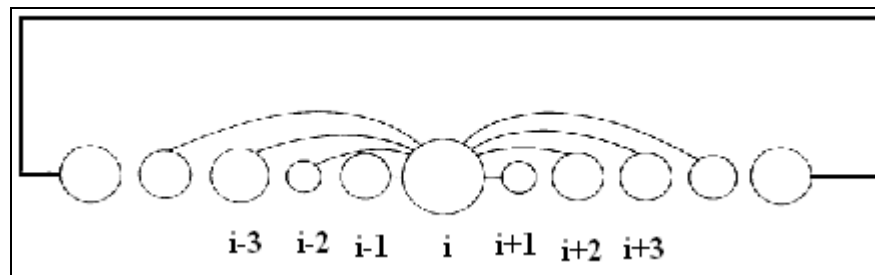


Figure I.9 Modèle des bulles connectées : le grain i est connecté à un nombre donné de Proches voisins [19].

Références Bibliographiques

- [1] V. Novikov, grain growth and control of microstructure and texture in polycrystalline materials CRC press Roton FL.USA (1977) 24.
- [2] R.D. Doherty, Metal Sci. J. 16 (1982) 1.
- [3] J.T. Michalak, H.W. Paxton, Trans Met Soc of AIME 221 (1961) 850.
- [4] R.A. Drew, W.B. Muir, W.M. Williams, Metals Technology 11 (1984) 550.
- [5] L.N. Chaudhary. A.H. Qureshi, IEEE Trans on Magnetics 7 (1971) 165.
- [6] F.J. Humphreys, M. Hatherly, "Recrystallization and related annealing phenomena" Pergamon (1995).
- [7] A. Soares, A.C. Ferro, M.A. Fortes, Scripta Metall. 19 (1985) 1491.
- [8] G.W. Cahn, Acta Met. 10 (1962) 789.
- [9] N. Maazi, Thèse Doctorat d'état, Université Mentouri (2004).
- [10] G. Hasson, C. Goux, Scripta Met. 5 (1971) 889.
- [11] P.J. Goodhew, "Grain boundary structure and kinetics", Ed. R.W. Balluffi, Metals Park, Ohio A.S.M. (1980) 155.
- [12] W.T. Read, W. Shockley, Phys. Rev. 78 (1950) 275.
- [13] A. Brokman, R.W. Balluffi, Acta Met. 29 (1981) 1703.
- [14] G.J. Wang, V. Vitek, Acta Met. 34 (1986) 951.
- [15] P. Gordon, R.A. Vandermeer, Transactions of the Metallurgical Society of A.I.M.E. 224 (1962) 917.
- [16] T. Gladman, Proc. R. Soc. A2 94 (1966) 298.
- [17] P.M. Hazzledine, P.B. HIRSCH, N. Louat, proceeding of 7THRiso international symposium on metallurgy and materials science (1986) 1.
- [18] O. Hunderi, N. Ryum, Acta Met. 29 (1981) 1737.
- [19] O. Hunderi, N. Ryum., Acta Met. 30 (1982) 739.

Chapitre II

Structure et Texture Cristallographique

II.1 Introduction

La connaissance de la structure des joints de grains est nécessaire pour toute étude concernant le comportement du matériau, au cours des sollicitations thermiques (processus de recristallisation primaire, croissance normale et anormale des grains). Le premier modèle de la structure des joints de grains est le modèle du « ciment amorphe » de Rosenhaim [1]. Dans ce modèle, la zone de transition entre les deux cristaux adjacents est décrite comme une couche d'atomes disposés au hasard. L'anisotropie du comportement des joints de grains, révélée par de nombreuses expériences de diffusion et de fluage intergranulaire, a imposé l'idée d'une structure périodique du joint. En 1926 Friedel rend compte de l'existence de sites de coïncidence dans le cas particulier de la structure des joints de macles. Cette notion de structure périodique fut ensuite élargie aux joints quelconques par Hargreaves et Hill [2] vers 1940 la description du joint de grains en termes de dislocation fut introduite par Burgers et Bragg [3]. Read et Scholckley ont appliqué cette hypothèse aux joints de flexion et de torsion à faible désorientation.

Pour décrire la structure des joints de grains, on adopte actuellement deux descriptions : le modèle géométrique et le modèle énergétique.

II.2 Définition géométrique du joint de grains

II.2.1 Introductions

Un joint de grains est la région qui sépare deux grains d'orientations différentes. Les orientations du premier et du second cristal peuvent être repérées par deux référentiels $T_1(ox_1y_1z_1)$ et $T_2(ox_2y_2z_2)$ de même origine O, liés respectivement à chacun des deux réseaux cristallins. Le joint possède 5 degrés de liberté :

- 3 paramètres pour définir la position d'un trièdre par rapport à l'autre.
- Les deux autres définissent le plan du joint.

II.2.2 Angle et axe de désorientation

Les deux trièdres T_1 et T_2 se correspondent par la rotation (R, θ) , d'axe R et d'angle θ . Les indices de l'axe « R » sont les mêmes dans les deux trièdres : nous dirons que R est un « axe géométrique commun aux deux réseaux » (Figure II.1) La différence de position entre T_1 et T_2 , habituellement nommée « désorientation », peut donc être caractérisée par la rotation d'angle θ autour de l'axe R , qui permet d'amener T_1 en coïncidence avec T_2 . Le joint est considéré comme entièrement défini par la connaissance de :

- l'axe commun R ;
- la valeur θ de l'angle de désorientation ;
- la position du plan du joint par rapport au trièdre T_1 (où T_2).

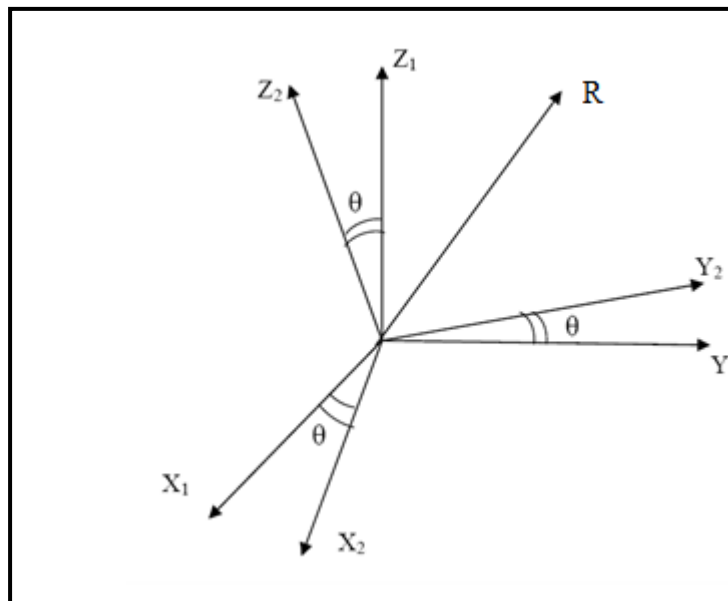


Figure II.1 Axe et angle (R, θ) de désorientation entre deux grains.

II.2.3 Détermination des éléments de la désorientation

A partir de la rotation (R, θ) entre les deux grains adjacents, on peut calculer toutes les

rotations équivalentes, en utilisant la méthode des quaternions unitaires, mise au point par H. Grimmer [4] et développée par R. Bonnet [5]. Cette méthode consiste à associer aux 4 paramètres (u, v, w) un élément du groupe Q des quaternions unitaires, soit :

$$Q = (a_1, a_2, a_3, a_4) \quad (\text{II-1})$$

$$\text{Avec } a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + a_4^2 = 1 \quad (\text{II-2})$$

Ces éléments sont donnés par :

$$a_1 = \cos \frac{\theta}{2} \quad (\text{II-3})$$

$$a_2 = \frac{u}{\sqrt{(u^2 + v^2 + w^2)}} \sin \frac{\theta}{2} \quad (\text{II-4})$$

$$a_3 = \frac{v}{\sqrt{(u^2 + v^2 + w^2)}} \sin \frac{\theta}{2} \quad (\text{II-5})$$

$$a_4 = \frac{w}{\sqrt{(u^2 + v^2 + w^2)}} \sin \frac{\theta}{2} \quad (\text{II-6})$$

Par des combinaisons linéaires des éléments a_1 , a_2 , a_3 et a_4 , nous obtenons les 6 quaternions qui définissent toutes les rotations cubiquement équivalentes. L'angle de désorientation θ_0 correspond à l'élément de plus grande valeur absolue a_0 parmi les 24 possibilités :

$$\theta_0 = 2 \arccos(a_0) \quad (\text{II-7})$$

Aux trois autres éléments du quaternion sont associés les indices (u_0, v_0, w_0) de l'axe de rotation, tels que $u_0 > v_0 > w_0 > 0$, ce qui situe l'axe dans le triangle stéréographique standard (100, 110, 111). La désorientation définie par θ_0 est [u_0, v_0, w_0] est unique.

II.3 Modèles Géométriques

Les modèles géométriques fournissent une description cristallographique de la structure intergranulaire (translation, périodicité, symétrie). La description géométrique de l'organisation idéale au niveau du joint est basée sur l'hypothèse qu'une situation

énergétique favorable est associée à l'existence d'un invariant, c'est-à-dire d'un ordre commun aux deux cristaux.

II.3.1 Réseau de coïncidence CSL

L'intérêt porté aux modèles de coïncidence tient à l'existence de joints « spéciaux » qui présentent des propriétés remarquables. Considérons un cristal (1) fixe et translatons un autre cristal (2) de même structure, de telle façon que le plus grand nombre possible d'atome des deux cristaux coïncident. Les points de Coïncidence forment un réseau périodique appelé C.S.L (Coïncidence Site Lattice) (Figure II.2). Ce réseau ne peut exister que pour des valeurs particulières de la relation d'orientation (R, θ) . Le degré de coïncidence (ou nombre de coïncidence) Σ est défini par :

$$\Sigma = \frac{\text{volume de la maille de coïncidence}}{\text{volume de la maille élémentaire (1 ou 2)}} \quad (\text{II-8})$$

Le désordre du joint est d'autant plus grand que Σ est élevé. C'est pourquoi les joints de grains peuvent être classés globalement en 2 groupes :

- Les joints « spéciaux » pour lesquels on peut déterminer expérimentalement un ordre. Ce sont les joints de faible désorientation ($\theta < 15^\circ$) et les joints à grand angle, proches de la coïncidence.
- Les joints généraux dans lesquels aucune périodicité ne peut être révélée (ce qui n'exclut pas un certain degré d'organisation). Des tables, établies la première fois par Ranganathan [6], donnent les désorientations sous la forme de paires axe-angle correspondant $\Sigma < 15^\circ$. Elles furent complétées par Warrington et Boon [7] jusqu'à $\Sigma = 25$ et enfin par Mykura [8] jusqu'à $\Sigma = 101$.

II.3.2 Critère géométrique de spécialité

La structure intrinsèque du joint de grains est préservée avec une déviation angulaire maximale à la coïncidence $\Delta\theta_c$. Le critère le plus utilisé est le critère [9] :

$$\Delta\theta_c = \theta_0 \Sigma^{\frac{1}{2}} \tag{II-9}$$

où $\theta_0 = 15^\circ$ est la limite angulaire des joints de faible désorientation L.A. (Low Angle).

| R | θ | Spécialité |
|-----|----------|--------------|
| 111 | 60° | $\Sigma 3$ |
| 100 | 36.87° | $\Sigma 5$ |
| 111 | 38.21 | $\Sigma 7$ |
| 110 | 38.94° | $\Sigma 9$ |
| 110 | 50.48° | $\Sigma 11$ |
| 100 | 22.62° | $\Sigma 13a$ |
| 111 | 27.62° | $\Sigma 13b$ |
| 210 | 48.19° | $\Sigma 15$ |
| 100 | 28.07° | $\Sigma 17a$ |
| 221 | 61.93° | $\Sigma 17b$ |
| 110 | 26.53 | $\Sigma 19a$ |
| 111 | 46.83° | $\Sigma 19b$ |
| 111 | 21.79° | $\Sigma 21a$ |
| 211 | 44.4° | $\Sigma 21b$ |
| 311 | 40.45° | $\Sigma 23$ |
| 100 | 16.25 | $\Sigma 25a$ |
| 331 | 51.68° | $\Sigma 25b$ |

Tableau II.1 Classification des joints de grains par Mykura [8].

| Σ | 1 | 3 | 5 | 7 | 9 | 11 | 13 | 15 | 17 | 19 | 21 | 23 | 25 |
|------------------|-----|------|------|------|----|------|------|------|------|------|------|------|----|
| $\Delta\theta_c$ | 15° | 8.7° | 6.7° | 5.7° | 5° | 4.5° | 4.2° | 3.9° | 3.6° | 3.4° | 3.3° | 3.1° | 3° |

Tableau II.2 Ecart à la coïncidence avec le critère de $\Delta\theta_c = \theta_0 \Sigma^{\frac{1}{2}}$, 15° est la limite retenue pour les joints L.A. (Low Angle).

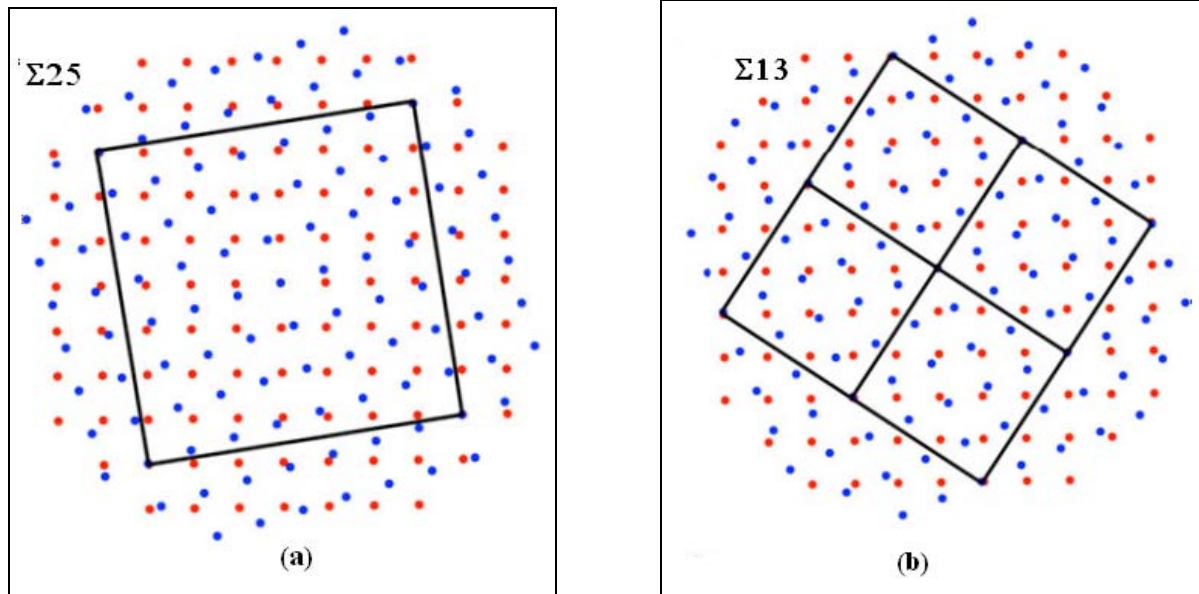


Figure II.2 Réseau de coïncidence C.S.L. (a) $\Sigma 25$, (b) $\Sigma 13$.

II .3.3 Réseau «O» et dislocations primaires

Bollman [10] a généralisé le concept de coïncidence en introduisant la notion du réseau «O» qui est constitué de tous les points communs aux deux mailles élémentaires des cristaux adjacents. Le réseau «O» est un réseau de points de bon raccordement plus complet que le réseau «C.S.L» qui en est un sous-ensemble. Dans l'interface, les deux réseaux 1 et 2 se correspondent par une rotation $R(O, \theta)$, O étant un point commun appartenant au joint ; les autres points communs sont obtenus à partir des points des points du réseau 1 (ou 2) par une rotation d'axe R passant par O et d'une homothétie de centre O [9].

Le problème précédent a été résolu analytiquement [10], en considérant la matrice A de la transformation faisant passer d'un réseau à l'autre. Si I est la matrice unité et b un vecteur de burgers pour la matrice, les coordonnées x^0 des points-zéros sont définies par l'équation :

$$\left(I - A^{-1}\right)x^0 = b \quad (\text{II-10})$$

Les zones de mauvais raccordement des deux cristaux 1 et 2 situées entre les sites «O» constituent les cœurs de dislocations intrinsèques appelées primaires.

II.3.4 Réseau « D.S.C » et dislocations secondaires

Considérons deux réseaux cristallins pour lesquels un réseau de coïncidence C.S.L. existe. Le réseau D.S.C. est défini à partir des vecteurs déplacements, qui permettent de passer du cristal 1 au cristal 2, en conservant seulement la structure du motif cristallin. Lorsque les deux cristaux sont fortement désorientés, le joint tend à préserver la configuration atomique du réseau de coïncidence le plus proche. la déviation angulaire par rapport à cette position est traitée par analogie à l'écart au cristal parfait dans le modèle C.S.L.. Un réseau de dislocations dites « secondaires », est superposé à la structure primaire pour accommoder cette déviation [11]. Une équation analogue à la précédente (II-10), permet de déterminer les caractéristiques de ce réseau :

$$(I - A') x'^0 = b' \quad (II-11)$$

où :

- b' est le vecteur de burgers du réseau D.S.C.
- A' est la matrice de la transformation représentant la déviation à la coïncidence ;
- x'^0 sont les coordonnées de points de coïncidence entre deux réseaux D.S.C. reliés par la transformation A' .

II.4 Modèle énergétique

Les performances des ordinateurs modernes ont ouvert la voie à une nouvelle approche de la structure intergranulaire à partir de la minimisation de l'énergie du joint de grains. L'intérêt des modèles énergétiques est de fournir une description de la structure atomique des joints par la recherche de la configuration atomique dans le joint d'énergie libre minimale. Le principe consiste à effectuer la sommation des énergies d'interaction entre atomes dans un volume fini autour du joint. Le système constitué par le joint et une certaine région entre les deux cristaux voisins est ensuite relaxée, jusqu'à obtention d'un minimum énergétique

II .5 Principales méthodes de simulation

II .5.1 Introduction

La simulation numérique occupe, aujourd'hui, une place aussi importante que la théorie et l'expérience. C'est la troisième voie qui complète ces deux dernières. Une des raisons du développement rapide des méthodes de simulation est le fait que l'on étudie de plus en plus des systèmes très complexes. La simulation permet de tester la validité des approximations théoriques et de proposer des mécanismes qui permettent à la théorie d'améliorer à son tour les modèles. De même la simulation numérique permet une comparaison quantitative avec les données expérimentales. Parmi les techniques utilisées pour simuler la croissance de grains, on peut citer :

II .5.2. Dynamique Moléculaire (DM)

La dynamique moléculaire (DM) est une méthode de simulation du mouvement des atomes et des molécules en calculant leurs déplacements. Cette technique est largement utilisée pour simuler les propriétés des solides, des liquides et des gaz (Figure II.3).

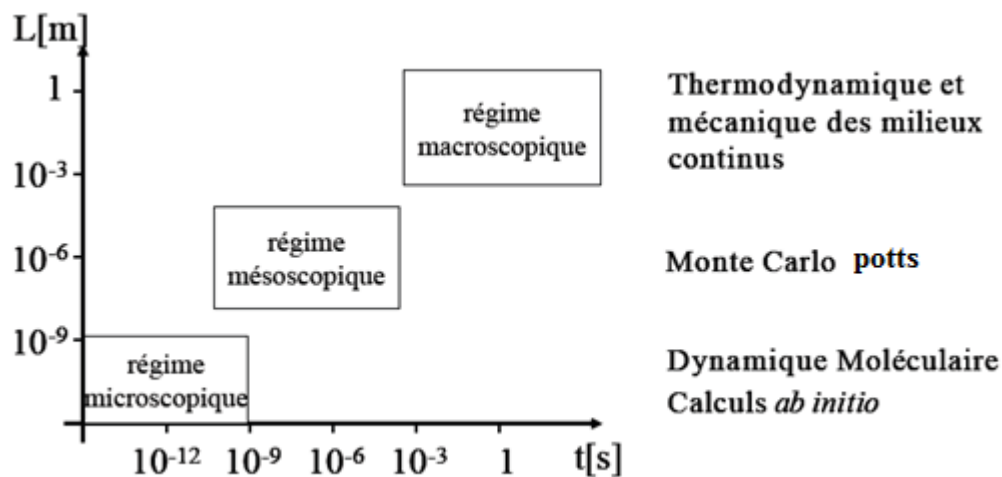


Figure II.3 Principales techniques utilisées en simulation.

II.5.3 Technique des vertex

Kawasaki et ses collaborateurs [12] ont appliqué la méthode des vertex en 2D puis en 3D. Cette technique est basée sur le mouvement des points triples. L'évolution de la

microstructure est décrite par le mouvement de sommets (points triples en 2D et points quadruples en 3D). Pour s'approcher de la réalité des joints de grains, des vertex virtuels ont été ajoutés entre les sommets [13]. Ce modèle permet de considérer les énergies d'interface et les mobilités des joints de grains.

II.5.4 Méthode de Monte Carlo

La technique Monte Carlo (MC) est basée sur les idées d'utilisation du tirage de nombres aléatoires pour des calculs approchés. Ces idées sont apparues à la fin du XVIII^{ème} siècle. Il s'agit de l'expérience du Comte de Buffon [14] qui permet d'estimer la valeur du nombre π par les jets aléatoires d'une aiguille sur un parquet de lattes de bois dont les fentes sont équidistantes. Il est intéressant de remarquer que les idées du MC ne se sont réellement développées qu'après l'année 1944 dans le cadre du travail sur la bombe atomique. John von Neumann a proposé l'utilisation des ordinateurs et la théorie des probabilités pour la résolution de problèmes appliqués. Le premier travail réalisé à l'aide de cette approche revient à Metropolis et Ulam [15].

Les problèmes traités par les méthodes de Monte Carlo concernent de nombreux domaines numériques. Ces méthodes sont efficaces pour l'estimation numérique des intégrales multidimensionnelles [16] qui ne peuvent pas, en général, être calculées analytiquement, et sont hors de portée des méthodes numériques traditionnelles. La deuxième application est la simulation des processus de diffusion en mécanique statistique et en physique de la matière condensée [17]. La détection et l'émission de particules (neutrons, photons, particules chargées) pendant leur déplacement dans les systèmes hors équilibre sont un autre domaine important d'applications. La modélisation de la croissance cristalline, de l'implantation ionique, des effets d'irradiation et d'autres systèmes hors équilibre repose souvent sur la génération de nombres aléatoires. Par exemple, dans les modèles de diffusion de surface, comme la croissance cristalline, c'est un nombre aléatoire qui détermine la direction de migration d'une particule. On reviendra en détails sur l'utilisation de cette technique au chapitre III.

II.6 La texture cristallographique

II.6.1 Introduction

Les matériaux présentent une anisotrope cristallographique ou texture lorsqu'un certain nombre de leurs grains, ou cristallites, possèdent une ou plusieurs orientations préférentielles (Figure II.4). Cette texture est souvent obtenue après un traitement thermique, une déformation mécanique ou les deux en même temps lors de transformation thermomécaniques. L'origine de l'évolution des textures est la solidification, la déformation, la recristallisation et les transformations de phases [18].

Les textures de déformation dépendent essentiellement de :

- La composition chimique ;
- Les mécanismes de déformation (glissement) ;
- Mode de déformation (laminage, filage,.....) ;
- Taux de réduction ;
- La texture initiale.

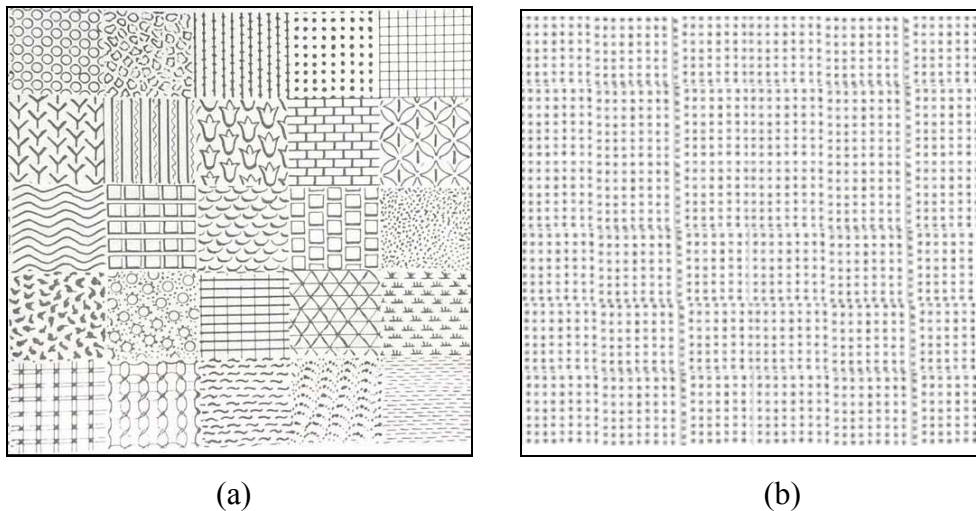


Figure II.4 (a) Cas anisotrope (texturé) ; (b) Cas isotrope (non texturé)

Les textures de recristallisation évoluent selon :

- La texture de déformation initiale ;
- La température et la durée de recuit ;

- La chimie du matériau.

Les changements de phase induisent généralement une transformation de texture selon une relation entre les grains de la phase initiale et ceux de la phase obtenue, en présence de relation d'orientation

II.6.2 Orientation d'un grain

L'orientation d'un grain sera déterminée par la connaissance des angles que font les plans réticulaires du grain avec des plans ou des directions fixes par rapport à l'échantillon étudié (Figure II.5).

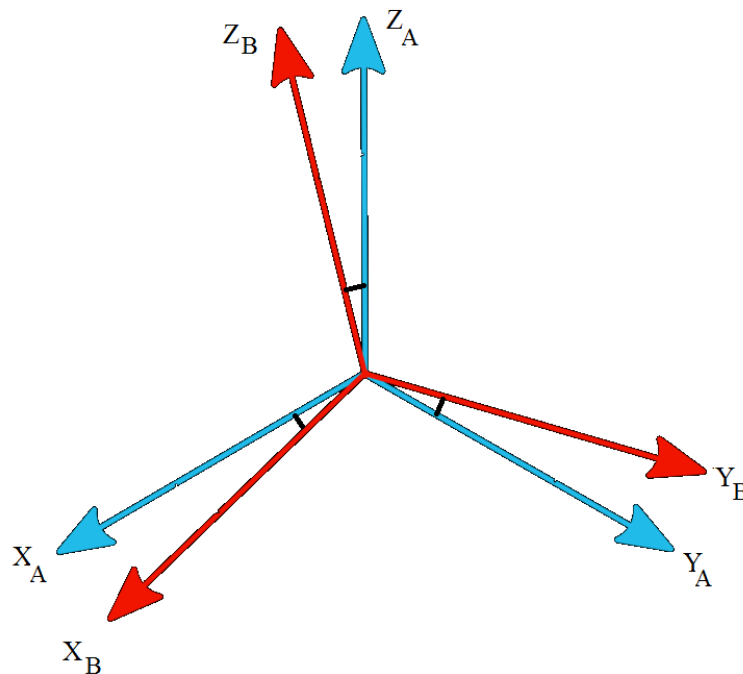


Figure II.5 Définition d'une orientation.

Pour décrire cette orientation, on fait appel à deux référentiels (Figure II.6) :

- Le référentiel échantillon (s) (DL, DT, DN) avec les vecteurs de base s_1, s_2, s_3 ;
- Le référentiel cristal (c) avec les vecteurs de base c_1, c_2, c_3 .

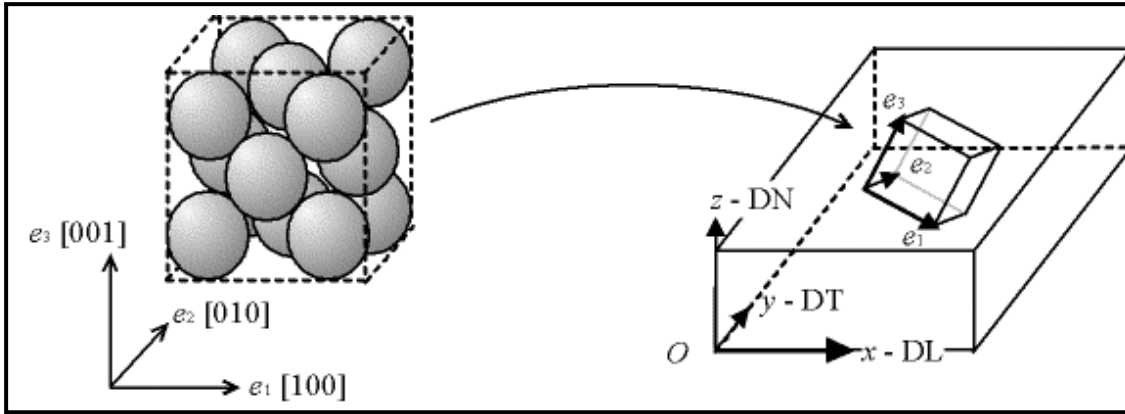


Figure II.6 Référentiel échantillon et référentiel cristal.

$$\begin{pmatrix} \bar{c}_1 \\ \bar{c}_2 \\ \bar{c}_3 \end{pmatrix} = g \begin{pmatrix} \bar{s}_1 \\ \bar{s}_2 \\ \bar{s}_3 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \{c\} = g \{s\}$$

Les coordonnées x_s, y_s, z_s et x_c, y_c, z_c d'un vecteur \vec{R} dans (s) et (c) sont transformées par les matrices de rotation g et g^{-1} :

$$\begin{pmatrix} x_c \\ y_c \\ z_c \end{pmatrix} = g \begin{pmatrix} x_s \\ y_s \\ z_s \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} x_s \\ y_s \\ z_s \end{pmatrix} = g^{-1} \begin{pmatrix} x_c \\ y_c \\ z_c \end{pmatrix}$$

II.6.3 Description d'une orientation par les indices d'Euler

Dans l'étude des textures, l'orientation g d'un grain est définie par rapport à l'échantillon, elle correspond au passage du référentiel cristal au référentiel échantillon. Il existe différentes manières pour représenter une orientation [19] :

- une direction cristallographique et les trois angles que fait cette direction avec le référentiel échantillon ;
- le doublet (hkl)[uvw], respectivement la normale au plan de laminage et la direction de laminage, utilisé pour la caractérisation descriptive classique des textures ;
- les trois angles d'Euler (Figure II.7) avec :

- ✓ φ_1 : l'angle de rotation autour de l'axe oz ;
- ✓ φ : l'angle de rotation autour de l'axe ox' ;
- ✓ φ_2 : l'angles de rotation autour de l'axe oz'.

La dernière méthode est la plus utilisée pour définir une orientation $g = (\varphi_1, \varphi, \varphi_2)$ dans l'étude quantitative des textures (Figure II-8). C'est la triple rotation définie dans l'espace d'Euler, dans le formalisme de Bunge [20]. Chacune des trois rotations est décrite par une matrice et le produit des trois matrices donne la matrice de rotation correspondant à l'orientation g :

$$g(\varphi_1) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_1 & \sin \varphi_1 & 0 \\ -\sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$g(\varphi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & \sin \varphi \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}$$

$$g(\varphi_2) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_2 & \sin \varphi_2 & 0 \\ -\sin \varphi_2 & \cos \varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$g(\varphi_1 \varphi \varphi_2) = g(\varphi_2) \cdot g(\varphi) \cdot g(\varphi_1) \Leftrightarrow g(\varphi_1 \varphi \varphi_2) = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix}$$

où:

$$g_{11} = \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \varphi$$

$$g_{12} = \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \varphi$$

$$g_{13} = \sin \varphi_2 \sin \varphi$$

$$g_{21} = -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \varphi$$

$$g_{22} = -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \varphi$$

$$g_{23} = \cos \varphi_2 \sin \varphi$$

$$g_{31} = \sin \varphi_1 \sin \varphi$$

$$g_{32} = -\cos \varphi_1 \sin \varphi$$

$$g_{33} = \cos \varphi$$

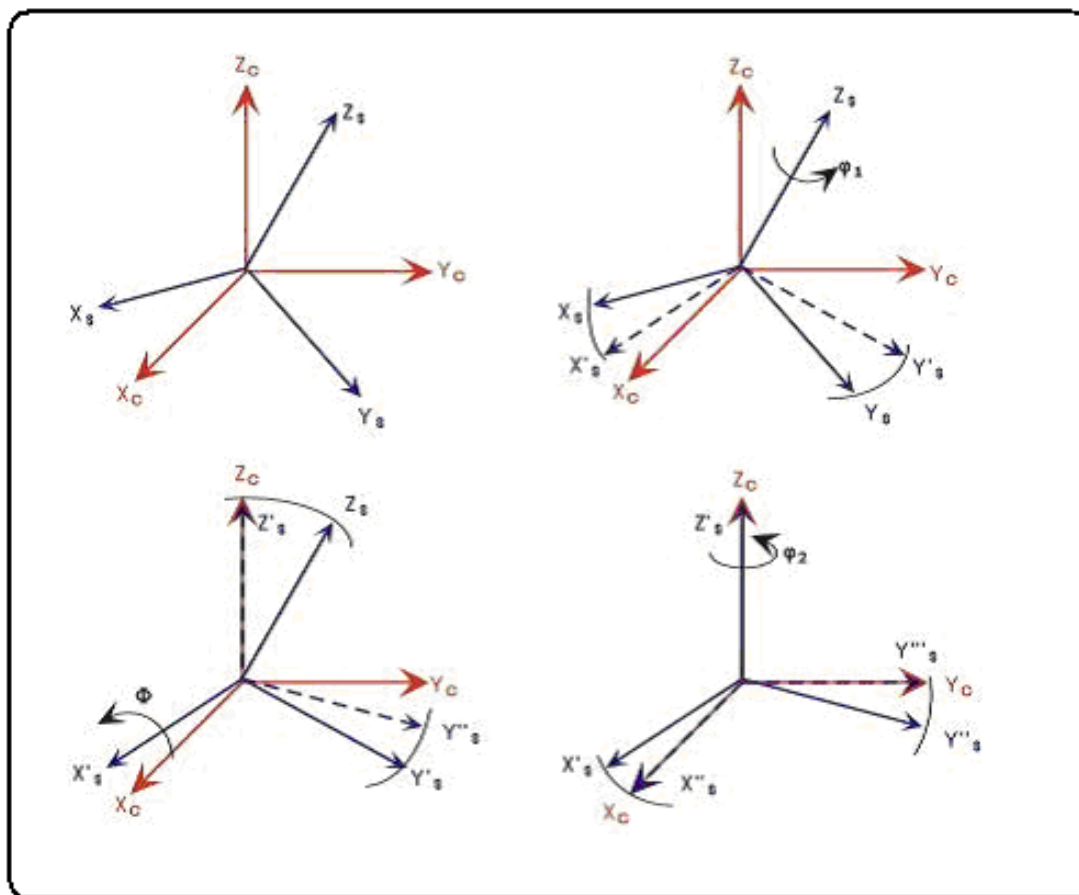


Figure II.7 Définition des trois angles d'Euler dans le formalisme de Bunge [20].

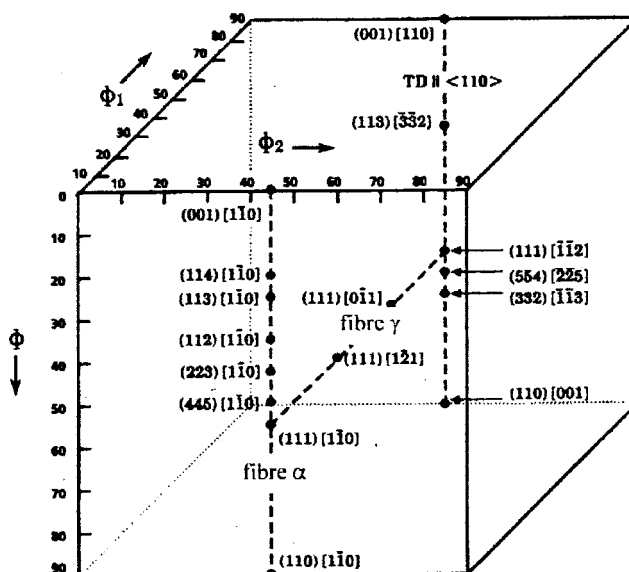


Figure II.8 Représentation des principales orientations dans l'espace d'Euler.

II.6.4 Figures de pôles

II.6.4.1 Figures de pôles directs

La figure de pôles directe est la projection stéréographique, sur le plan de l'échantillon, de la distribution de la densité d'une famille de plans $\{hkl\}$, dans toutes les directions de l'échantillon (Figure II.9). Elle est constituée des différents points P obtenus par projection stéréographique sur le plan équatorial, des points P' appartenant à la sphère des pôles ; ces points P' sont les intersections des normales des différents plans $\{hkl\}$ avec une sphère de rayon fixé, centrée sur la même origine que le cristal [22].

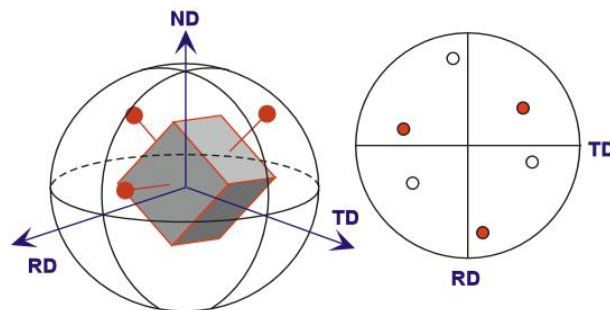


Figure II.9 Obtention d'une figure de pôles directe.

II.6.4.2 Figure de pôles inverses

Une figure de pôle inverse est la distribution, dans le référentiel cristal, de la densité des pôles de différentes familles $\{hkl\}$, dans une direction donnée de l'échantillon (Figure II.10). La symétrie du système cubique implique la possibilité d'une représentation dans le triangle stéréographique standard $[001][011][111]$.

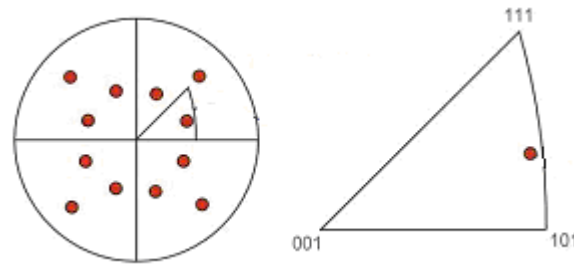


Figure II.10 Description d'une figure de pôles inverse.

II.6.5 Fonction de Distribution des Orientations Cristallines (FDOC)

La FDOC est une fonction qui décrit la distribution de la densité des points de l'espace d'Euler (chaque point de l'espace d'Euler correspond à une orientation g d'un grain). En d'autres termes, la FDOC peut être également considérée comme la probabilité de trouver des grains d'orientation g dans le métal étudié. La fraction volumique de cristaux ayant l'orientation g à dg près dans un volume global v_0 , sera donc proportionnelle à la fonction de distributions cristallines $F(g)$. On peut alors écrire :

$$\frac{dv}{v_0} = k.f.dg \quad (\text{II-12})$$

où :

- K est une constante de normalisation, dépendant des différentes symétries ;
- V est le volume total ;
- $dV(g)$ est le volume élémentaire attribué à l'orientation g dans l'espace des orientations:

$$dg = \sin(\varphi) d\varphi_1 . d\varphi . d\varphi_2 \quad (\text{dans le formalisme de Bunge})$$

$$dg = \frac{1}{8\pi^2} \sin(\theta) d\varphi . d\theta . d\psi \quad (\text{Dans le formalisme de Roe})$$

La fonction $F(g)$ décrit la distribution de la densité d'orientations dans l'espace d'Euler pour l'échantillon considérée, ramenée à l'ensemble des grains d'un échantillon isotrope.

La fonction $F(g)$ a été étudiée en utilisant la méthode du développement en séries sur la base des harmoniques sphériques, par Bunge [20] et Roe [21] séparément

II.6.6 Analyse des orientations par diffraction des électrons rétrodiffusés EBSD (Electron BackScattered Diffraction)

C'est la technique que nous avons utilisé dans notre travail. La diffraction des électrons rétrodiffusés est une technique de caractérisation de la microstructure. Mise au point à la fin des années 80, utilisée comme outil de recherche depuis le début des années 90, c'est actuellement l'une des techniques les plus complètes et les plus performantes de la microscopie électronique à balayage. A partir de mesures ponctuelles, elle permet une caractérisation statistique ou locale de la microstructure, tant morphologique que cristallographique

Cette technique expérimentale (EBSD) est devenue un outil indispensable pour la simulation des microstructures (Figure II.11). En effet, elle permet, d'une part, de fournir des données d'entrée pour la simulation (microstructure, texture) et, d'autre part, de valider les résultats simulés en recristallisation et en croissance de grains.

Lorsqu'un faisceau d'électrons bombarde la surface d'un matériau, il réémet plusieurs signaux caractéristiques, dont les électrons rétrodiffusés. La caractérisation de l'orientation cristallographique individuelle des grains dans un polycristal est possible grâce aux électrons rétrodiffusés. Ces électrons ont permis d'introduire une nouvelle technique d'analyse OIM (Orientation Imaging Microscopy). La microscopie à imager les orientations (OIM) est une technique qui a permis aux chercheurs d'analyser la texture locale et la structure des joints de grains dans un polycristal.

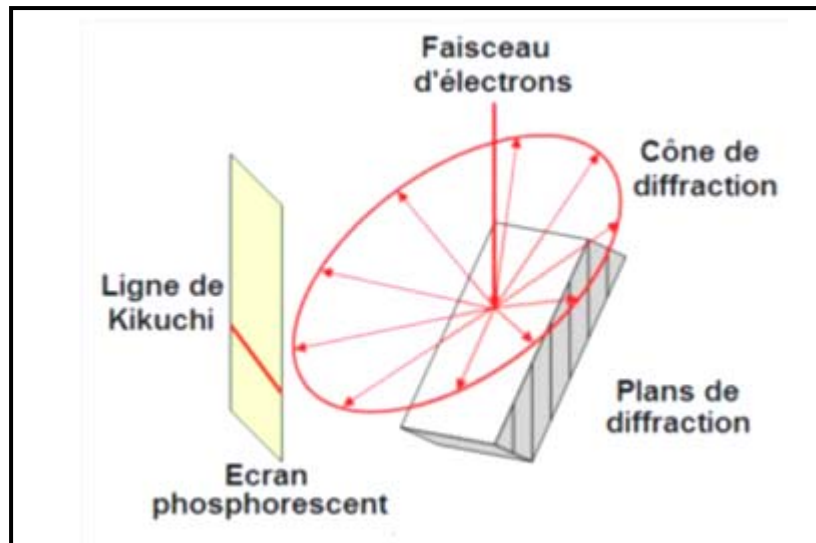


Figure II.11 Analyse des orientations individuelles par diffraction des électrons rétrodiffusés (EBSD).

La technique de l'EBSD utilise la diffraction des électrons dans un microscope électronique à balayage (MEB) qui crée des diagrammes de Kikuchi de façon similaire à ce que l'on peut observer en microscopie électronique à transmission.

Les électrons du faisceau incident sont diffusés élastiquement dans un large domaine angulaire lorsqu'ils pénètrent dans le matériau. Les électrons sont alors diffractés par les plans cristallins en position de Bragg. Les électrons diffractés forment des cônes de diffraction, chaque famille de plans formant deux cônes de diffraction symétriques séparés d'un angle. L'intersection de ces cônes avec un écran plan donne des hyperboles 2θ (Fig. II.12).

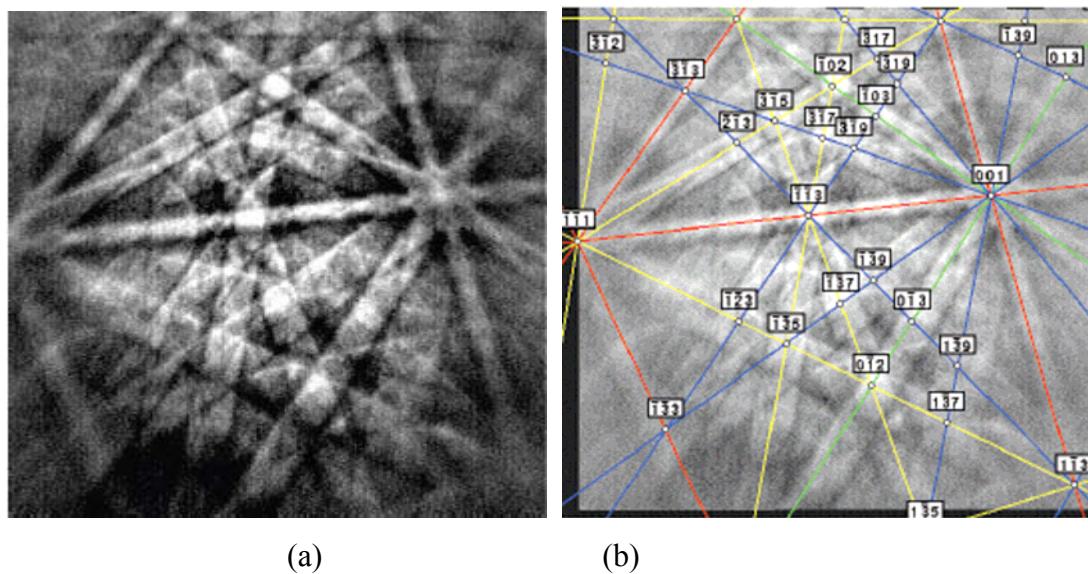


Figure II.12 a) Diagramme de Kikuchi, b) Indexation du cliché.

Références bibliographiques

- [1] W. Rosenhaim, J.C.W. Humphrey, J. Iron Steel Inst. 87 (1913) 219.
- [2] F. Hargreaves, R.J. Hills, J. Inst. Metals 41 (1929) 217.
- [3] J.M. Burgers, (1939), W.L. Bragg, (1940).
- [4] H. Grimmer, Acta Cryst. A30 (1974) 685.
- [5] R. Bonnet, Acta Cryst. A36 (1980) 116.
- [6] S. Ranganathan, Acta Cryst. 21 (1966) 197.
- [7] D.H. Warrington, M. Boon, Acta Met. 23 (1975) 599.
- [8] H. Mykura, "Grain boundary structure and kinetics", Ed. R.W. Balluffi, Metals Park, Ohio A.S.M. (1980) 445.
- [9] C. Goux, J. physique 36 (1975) 111.
- [10] W. Bollman, (Crystal defects and Crystalline interfaces); Ed. Springer Veriage, Berlin (1970).
- [11] T. Schober, R.W. Balluffi, Phys. Status Solids 44 (1971) 115.
- [12] K. Kawazaki, T. Nagai, K. Nakashima, Phi. Mag. B 60 n° 3 (1989) 399.
- [13] D. Weygand, Y. Bréchet, J. Lépinoux, J. Phil.Mag. B78, 4 (1998) 329.
- [14] Compte de Buffon, Essai d'arithmétique (1777).
- [15] N. Metropolis, S. Ulam, « The Monte Carlo method », Journal American Statical Association 44 (1949) 335.
- [16] E. J. Janse van Rensburg, G. M. Torrie, Estimation of multidimensional integrals, Journal of Physics A26 (1993) 943.
- [17] A. R. Kansal, S. Torquato, « Prediction of trapping rates in mixtures of partially absorbing spheres », Journal of Chemical Phyics 116 (2002) 10589.
- [18] R. Penelle, Ecole d'été Oléron (France), Ed. F .Moussy et P.Francisosi IRSID Paris (1990) 156.
- [19] H.J. Bunge, C. Eslingm Quantitative Texture Analysis (1982).
- [20] H.J. Bunge, Z. Met. 56 (1965) 872.
- [21] R.J. Roe, J. Appl. Phys. 36 (1965) 2024.
- [22] D. Raabe, Acta Metall. Mater. 43 (1995) 1531

Chapitre III

Simulation Monte Carlo de la Croissance *de Grains*

III.1 Introduction

Parmi les techniques de simulation, la simulation Monte Carlo a été introduite dans les années 1950. La montée en puissance des ordinateurs en particulier les ordinateurs personnels, a donné un essor considérable aux méthodes de simulation de l'évolution de la microstructure. D'abord concernées par la croissance des grains ou des sous-grains, elles se sont étendues à tous les stades de la recristallisation, y compris l'épinglage par les particules étrangères et la formation des textures. La méthode de Monte Carlo appliquée à la croissance granulaire est une méthode d'essais-erreurs. Cette technique de simulation devient populaire et indispensable dans l'étude des propriétés de la matière. En utilisant le logiciel matlab, nous avons choisi cette méthode pour simuler la croissance de grains.

En simulation Monte Carlo, la microstructure est généralement décrite par un ensemble de sites, avec les mêmes propriétés chimiques et physiques. Les sites sont distribués sur un réseau triangulaire. Un nombre entier, représentant l'orientation cristallographique, est affecté à chaque site. Un grain est constitué d'un ensemble de sites adjacents de même orientation. Entre deux sites adjacents d'orientations différentes passera un joint de grains (Figure III.1). C'est ainsi que sont définis les grains et les joints de grains de la microstructure.

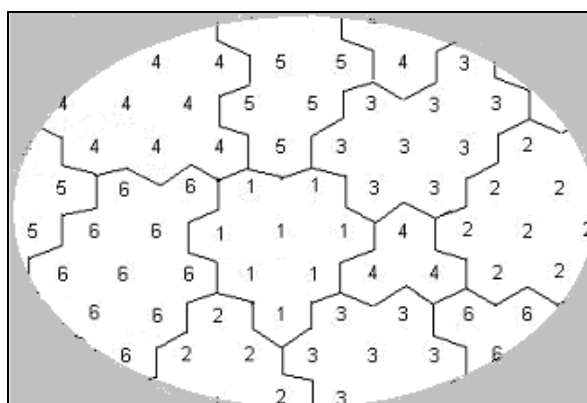


Figure III.1 Définition du maillage de la microstructure.

L'énergie de chaque site est calculée par :

$$E = \sum_{k=1}^6 J \left(1 - \delta_{s_k s_m} \right) \quad (\text{III-1})$$

où s_m (s_k) est l'orientation du site m (k), δ est la fonction de Krönecker, et J une constante positive qui représente l'énergie du joint.

Parmi les sites du maillage, un site noté $S(1)$ est choisi au hasard [1, 2]. L'énergie de ce site est calculée à partir de l'équation (III-1). Une nouvelle valeur $S(2)$, prise au hasard parmi les 6 plus proche voisins, est affectée à ce site. La nouvelle énergie $E(2)$ correspondant à ce site sera calculée à partir de l'équation (III-1). La variation d'énergie ΔE est évaluée par : $\Delta E = E(2) - E(1)$.

Si la variation d'énergie est négative ou nulle, alors le changement d'orientation du site est accepté. Par contre, si la variation d'énergie est positive, le changement d'orientation sera accepté avec la probabilité $\exp(-\Delta E / k_B T)$ (Figure III-2).

Donc, la probabilité de la transition d'un nombre d'orientation à un autre est donnée par :

$$P = \begin{cases} 1 & (\Delta E \leq 0) \\ e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}} & (\Delta E > 0) \end{cases} \quad (\text{III-2})$$

où k_B est la constante de Boltzman et T la Température.

La durée des simulations est mesurée en unités arbitraires mcs (monte carlo step). Un mcs représente le temps nécessaire à la réorientation de tous les sites du maillage (ici 46000 essais).

III.2 Simulation de croissance de grains à partir des cartographies d'orientations d'un matériau Fe-3%Si

III.2.1 Introduction

A l'aide de la diffraction des électrons rétrodiffusés (Electron BackScattered Diffraction, EBSD) dans un microscope électronique à balayage (MEB), on peut mesurer des cartographies d'orientations, ce qu'il permet de reconstruire la microstructure. Cette microstructure représente les textures morphologique (la taille et la forme des grains) et cristallographique (distribution des orientations cristallographiques). Ces deux paramètres

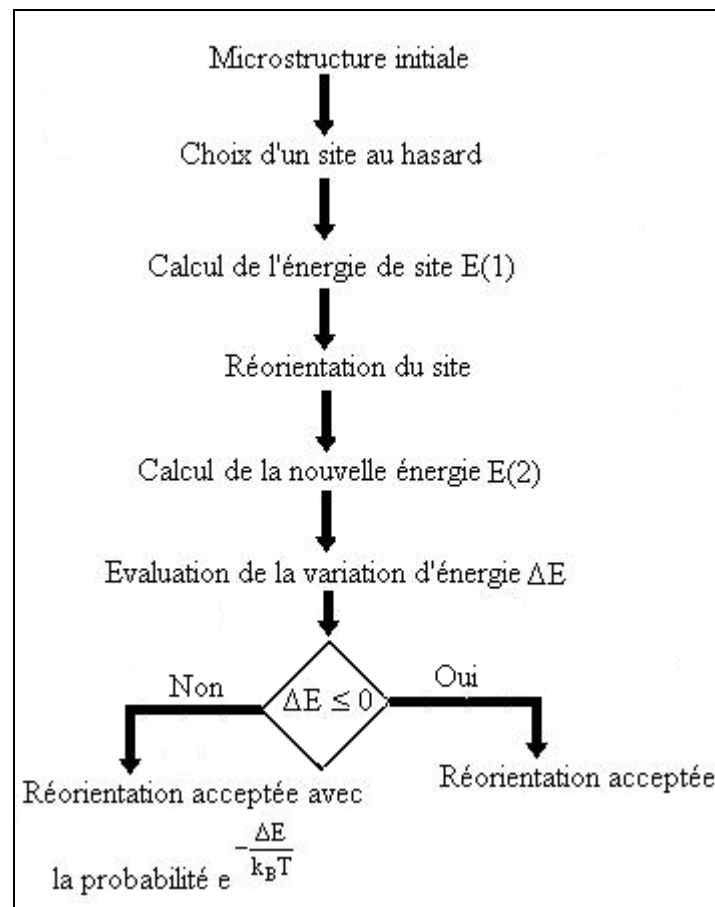


Figure III.2 Organigramme de simulation MC de croissance granulaire.

contrôlent largement les propriétés des matériaux métalliques.

La technique de l'EBSD permet de fournir des données d'entrée pour simuler l'évolution de la microstructure. De plus, on peut facilement valider et analyser les résultats simulés en recristallisation et croissance de grains.

Pour prendre en compte l'effet de l'hétérogénéité structurale sur la croissance de grains, une nouvelle simulation Monte Carlo basée sur un couplage entre l'expérience et la simulation a été utilisée (Figure III-3) [3].

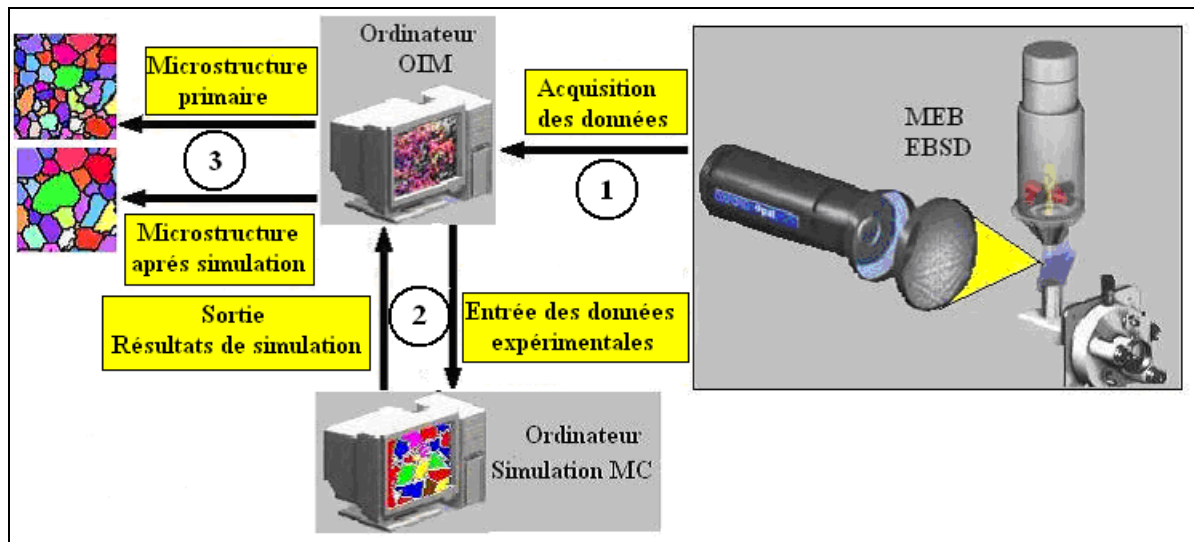


Figure III.3 Couplage entre l'expérience et la simulation de la croissance de grains.

III.2.2 Couplage entre le MEB (EBSD) et la simulation

La simulation à partir des cartographies d'orientations obtenues par microscope électronique à balayage (MEB) équipé de la technique de l'EBSD, comporte trois étapes (Figure III-3) :

1- Acquisition des données expérimentales : Après l'analyse de la surface du matériau par le MEB, le fichier résultats comporte pour chaque point (site) (Figure III.4) :

- les trois angles d'Euler ($\varphi_1, \varphi, \varphi_2$) qui représentent l'orientation du point (site) ;
- la position du point (x, y) ;
- l'indice de la qualité des lignes de Kikuchi (IQ). Si le diagramme de Kikuchi est de bonne qualité, le point correspondant est plutôt blanc, dans le cas contraire, par exemple lorsque le faisceau d'électron tombe sur un joint de grains, le point est plutôt noir.

2- Entrée des données expérimentales : Si deux points ont la même orientation, alors ils appartiennent au même grain, dans le cas contraire, un segment de joint sépare les deux points. La microstructure est reconstruite suivant cette définition.

3- Analyse des fichiers résultats par OIMTM (Orientation Imaging Microscopy) : A partir du fichier résultats (Figure III-4), la microscopie à imager les orientations (OIMTM)

permet de reconstruire la microstructure sur une grille carrée ou hexagonale. Les principaux modes de reconstruction de la microstructure sont (Figure III-5):

- En indice de qualité (IQ) ;
- En joints de grains ;
- En orientation cristallographique (chaque point de mesure à une couleur suivant son orientation).

III.2.3 Matériau utilisé

Dans cette étude on a utilisé un matériau Fe-3%Si dont la composition chimique et le diagramme de phase sont reportés dans le tableau III.1 et sur la figure III-6 respectivement.

| | | | | | | | | |
|---------|-------|------|---------|-------|-------|--------|--------|-------|
| élément | C | Si | S | P | Mn | Cr | Ni | Mo |
| %poids | 0.057 | 3.08 | 0.021 | 0.008 | 0.078 | 0.059 | 0.0066 | 0.009 |
| élément | Ti | Al | B | Cu | Sn | Pb | N | |
| %poids | 0.018 | 0.03 | 0.00001 | 0.11 | 0.011 | 0.0025 | 0.0072 | |

Tableau III.1 Composition chimique du matériau Fer-Silicium utilisé.

L'état recristallisé primaire du matériau Fe-3%Si a été caractérisé à l'aide de la diffraction des électrons retrodiffusés (EBSD) permettant de reconstruire la microstructure grâce à l'OIMTM (Orientation Imaging Microscopy).

III.2.4 Préparation des échantillons

Les échantillons doivent tout d'abord subir un polissage mécanique de façon à ce qu'ils présentent une surface plane, suivi ensuite d'un polissage électrolytique.

III.2.4.1 Polissage mécanique

Ce polissage consiste à faire disparaître progressivement les irrégularités superficielles par frottement de l'échantillon sur différents papiers abrasifs (du papier 600 jusqu'au

```
# x-star 453
# y-star 324
# z-star 543
# workingDistance 34
# MaterialName bcc_generic
# Symmetry 43
# LatticeConstants 5.000 5.000 5.000 90.000 90.000 90.000
# NumberFamilies 4
# hklFamilies 1 1 0
# hklFamilies 2 0 0
# hklFamilies 2 1 1
# hklFamilies 3 1 0
#
#  $\phi_1$   $\phi$   $\phi_2$  x y IQ
2.5940000e+000 1.0300000e-001 4.7130000e+000 0.0000000e+000 0.0000000e+000 5.3760000e+002
2.3560000e+000 5.9100000e-001 5.2340000e+000 2.0000000e+000 0.0000000e+000 7.7040000e+002
2.3560000e+000 5.9100000e-001 5.2340000e+000 4.0000000e+000 0.0000000e+000 7.7040000e+002
2.3550000e+000 5.9100000e-001 5.2340000e+000 6.0000000e+000 0.0000000e+000 8.0250000e+002
2.3560000e+000 5.9100000e-001 5.2340000e+000 8.0000000e+000 0.0000000e+000 7.8780000e+002
2.3560000e+000 5.9100000e-001 5.2340000e+000 1.0000000e+001 0.0000000e+000 7.5840000e+002
2.3510000e+000 5.9200000e-001 5.2380000e+000 1.2000000e+001 0.0000000e+000 5.7030000e+002
9.1000000e-001 6.2000000e-002 3.4500000e-001 1.4000000e+001 0.0000000e+000 8.0540000e+002
9.1000000e-001 6.2000000e-002 3.4500000e-001 1.6000000e+001 0.0000000e+000 8.1790000e+002
9.1000000e-001 6.2000000e-002 3.4500000e-001 1.8000000e+001 0.0000000e+000 8.2960000e+002
8.0300000e-001 8.8200000e-001 2.9300000e-001 2.0000000e+001 0.0000000e+000 7.4910000e+002
7.9500000e-001 8.8300000e-001 2.9800000e-001 2.2000000e+001 0.0000000e+000 8.2110000e+002
7.9700000e-001 8.8400000e-001 2.9700000e-001 2.4000000e+001 0.0000000e+000 8.0200000e+002
1.1630000e+000 4.4400000e-001 6.5000000e-002 2.6000000e+001 0.0000000e+000 7.3810000e+002
1.1630000e+000 4.4400000e-001 6.5000000e-002 2.8000000e+001 0.0000000e+000 7.3810000e+002
9.3500000e-001 7.8000000e-001 3.7600000e-001 3.0000000e+001 0.0000000e+000 7.4050000e+002
```

Figure III.4 Fichier résultats obtenu à partir du MEB (EBSD).

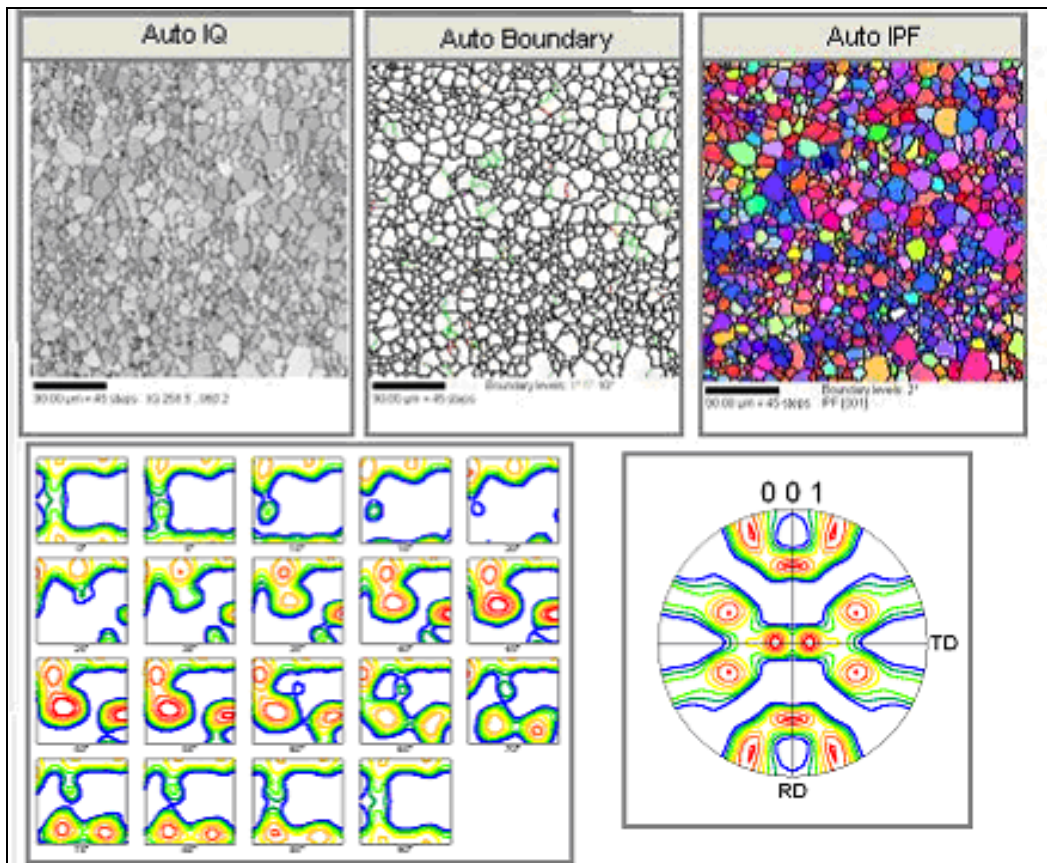


Figure III.5 Analyse du fichier résultats par OIMTM (Orientation Imaging Microscopy).

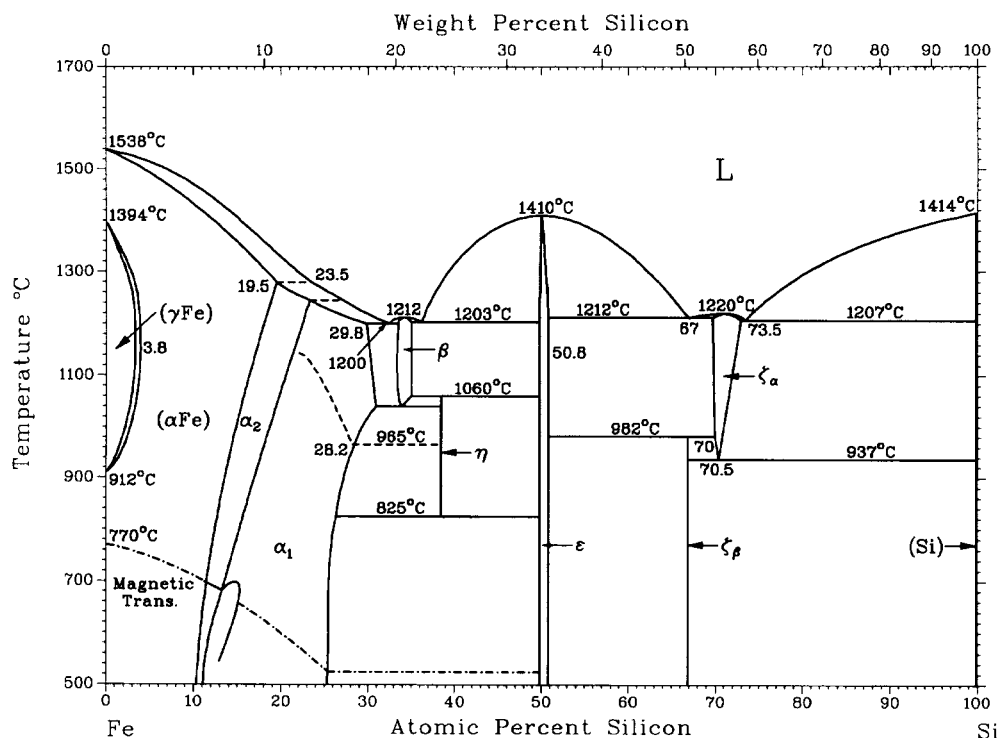


Figure III.6 Diagramme de phase Fe-Si.

papier 4000) dont les grains ont une finesse décroissante à chaque étape. Le polissage de finition consiste à utiliser successivement trois disques différents avec des poudres de diamant dont la granulométrie moyenne est de 6 μm , 3 μm et 1 μm .

III.2.4.2 Polissage électrolytique

Le polissage électrolytique est utilisé après un polissage mécanique afin d'éliminer les effets d'érouissage dus aux papiers abrasifs et les raies causées par le polissage de finition, et conduit à des surfaces polies.

Pour notre échantillon Fe-3%Si le bain électrolytique est constitué de :

- 250 volumes d'éther monobutylique de l'éthylène glycol,
- 235 volumes d'acide acétique,
- 25 volumes d'acide perchlorique.

L'échantillon est poli à 42 V et à -2°C pendant 2 min (Figure III.7).

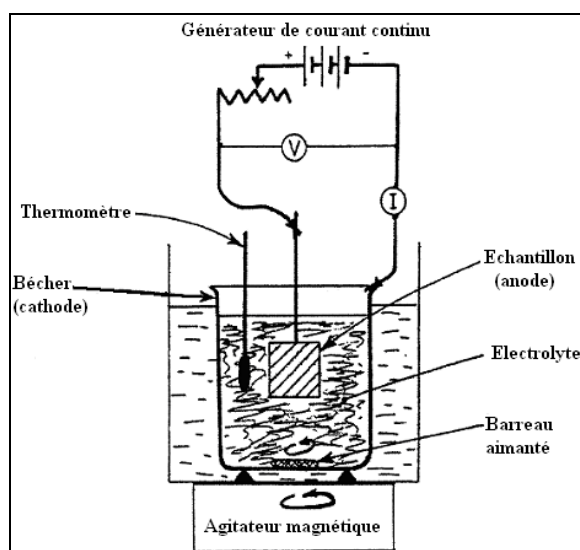


Figure III.7 Cellule de polissage électrolytique.

III.2.4.3 Attaque des échantillons

L'attaque des échantillons polis a pour but de mettre en évidence les contours de grains. L'attaque chimique des échantillons provoque une dissolution différente des cristaux, suivant leur orientation, leur nature ou bien une attaque spécifique des joints de grains. Dans notre cas, pour l'alliage Fe-3%Si l'attaque chimique se fait durant quelques secondes au Nital :

- 5% d'acide nitrique ;
- 95% d'éthanol

III.2.5 Caractérisation par OIMTM des cartographies d'orientations de la tôle Fe-3%Si

La croissance de grains qu'elle soit normale ou anormale dépend de la taille des grains, de leur distribution, de leur orientation cristallographique et bien entendu de l'énergie du joint qui tend à réduire l'aire totale des joints de grains. Donc, La caractérisation de la microstructure est nécessaire pour mieux comprendre le phénomène de la croissance de grains et particulièrement, pour cette étude, la croissance anormale des grains d'orientation $\{110\}\langle 001 \rangle$ (Grains de Goss). Cela est possible grâce à la microscopie à imager les orientations (OIMTM). La microstructure expérimentale utilisée dans cette étude (400x400

μm^2 , $\Delta x = 2$ et $\Delta y = 1.7 \mu\text{m}$) correspond à une matrice de 200×230 sites avec un rayon moyen \bar{R}_0 égal à $5.8 \mu\text{m}$ (Figure III.8). Les sites de cette microstructure sont définis par les angles d'Euler ($\varphi_1, \varphi, \varphi_2$).

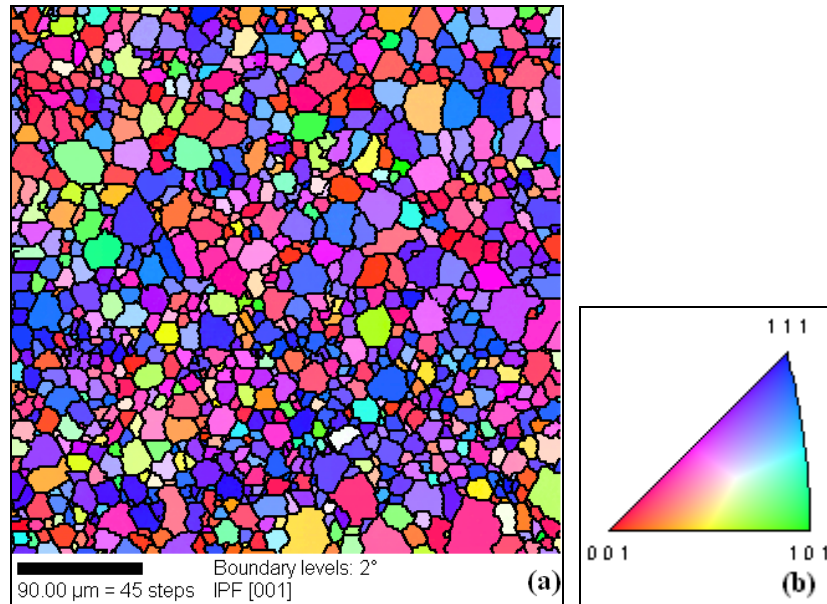


Figure III.8 (a) Cartographie d'orientation [001] de Fe-3%Si analysée par OIMTM.
(b) Triangle standard.

Pour chercher une texture spéciale, par exemple la texture de Goss $\{110\} \langle 001 \rangle$, il suffit d'utiliser les coupes à angle constant des orientations idéales (Figure III-9) ou bien les figures de pôles (Figure III-10). La texture de la matrice expérimentale est représentée par les coupes de l'espace d'Euler à angle φ_2 constant (Figure III-11) et les figures de pôles $\{100\}$ (Figure III-12). Il est clair que la texture de la matrice expérimentale est différente de la texture de Goss $\{110\} \langle 001 \rangle$. Selon la théorie classique de Hillert [4], l'existence d'un grain dont le rayon dépasse deux fois le rayon moyen de la matrice est une condition nécessaire pour le déclenchement de la croissance anormale.

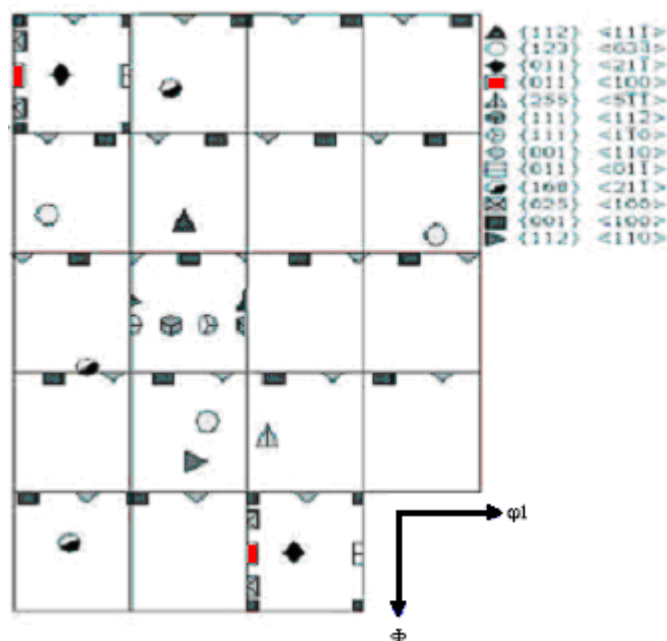


Figure III.9 Sections à angle φ_2 constant de la FDOC pour des orientations idéales.

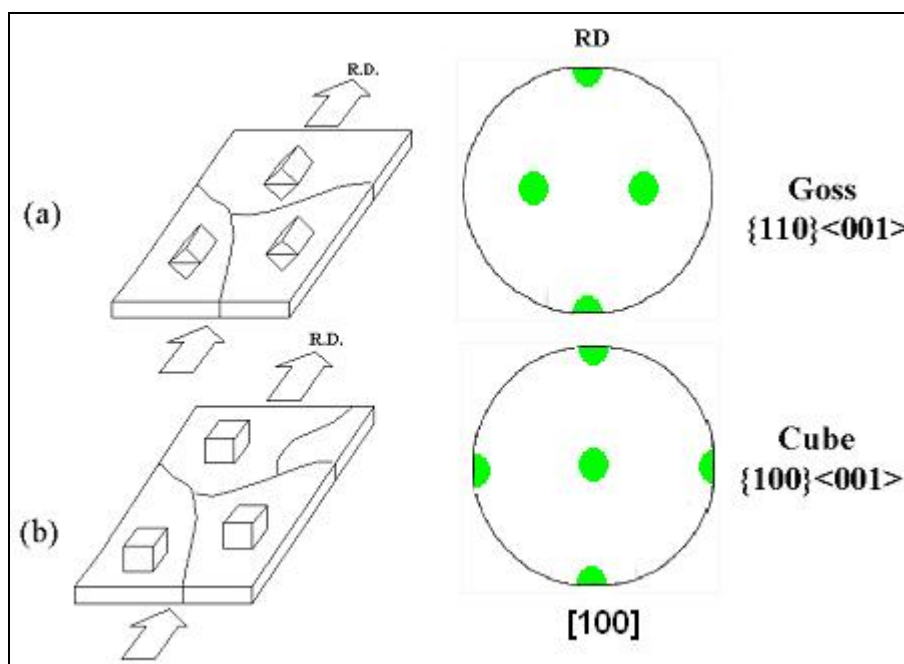


Figure III.10 Représentation de la texture par des figures de pôles $\{100\}$:

(a) Goss $\{110\}\langle 001\rangle$ et (b) la cubique $\{100\}\langle 001\rangle$.

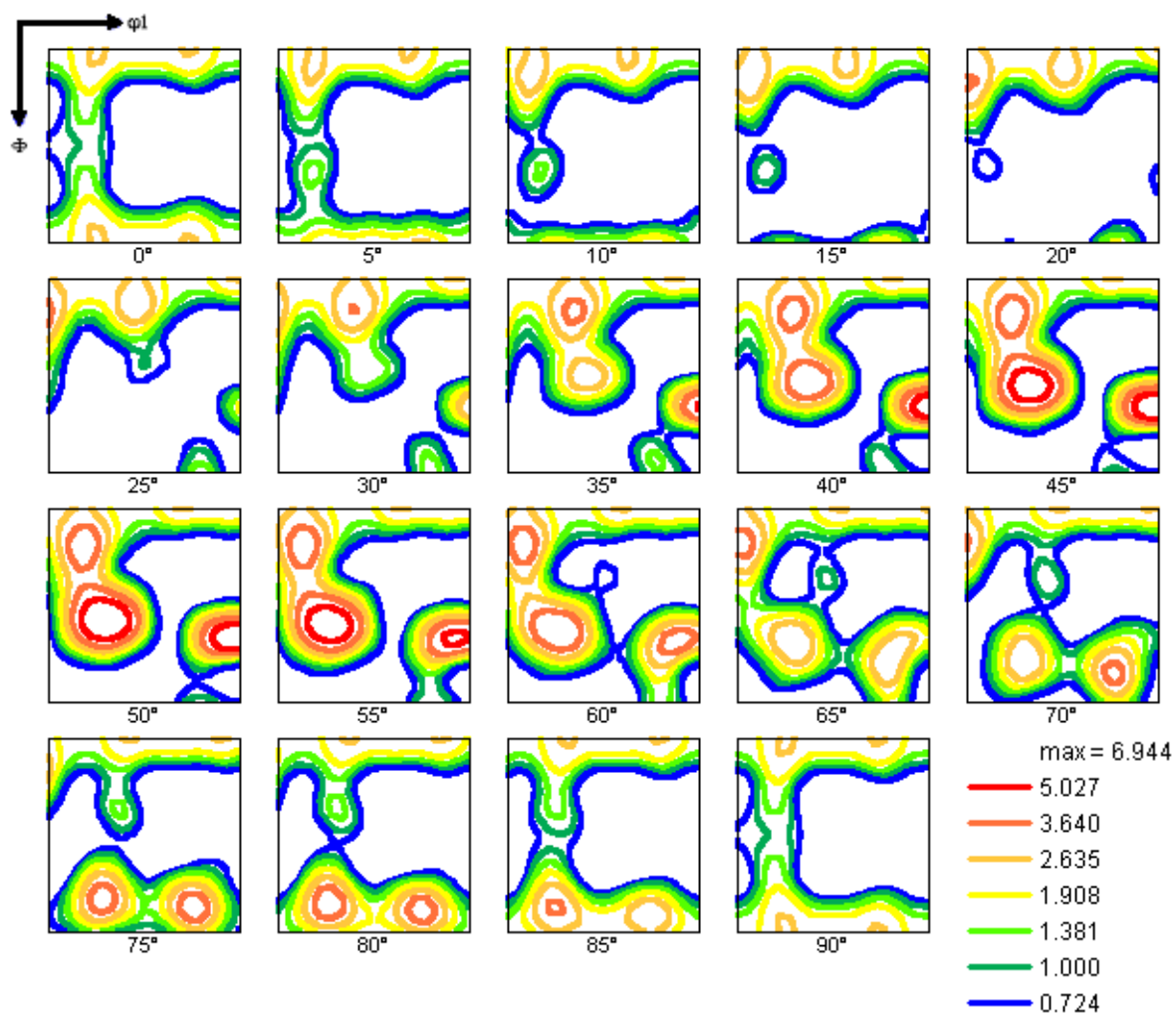


Figure III.11 Sections à angle φ_2 constant de la FDOC de la matrice primaire.

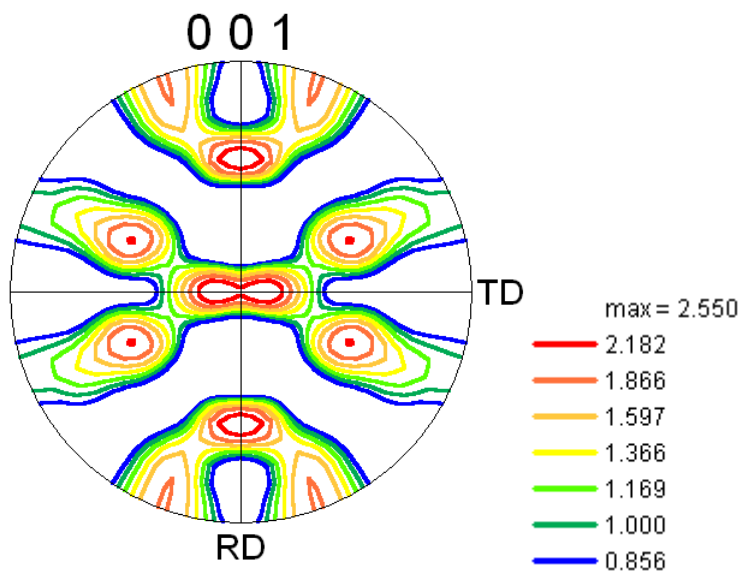


Figure III.12 Figure de pôles $\{100\}$ de la matrice primaire.

La figure III.13 représente la distribution en taille de grains. Il existe des grains dont leur taille est largement supérieure à la taille moyenne de la microstructure. Donc, Ces grains sont candidats à croître d'une façon anormale.

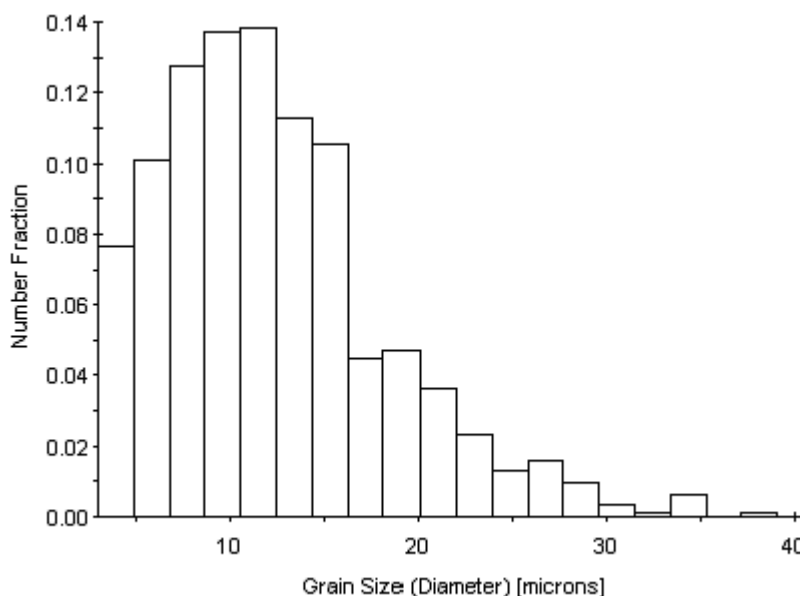


Figure III.13 Distribution en taille des grains de la matrice primaire.

III.3 Simulation Monte Carlo de croissance de grains

La croissance de grains est simulée à l'aide de la technique Monte Carlo. Cette simulation est faite à partir d'une microstructure bidimensionnelle 200x230 sites sur un maillage triangulaire (Figure III-8). Nos propres programmes de simulation nous permettent de :

- Tracer la microstructure ;
- Réaliser la croissance de grains ;
- Analyser des résultats de simulation.

On a utilisé le logiciel Matlab.

III.3.1 Tests de validation

En simulation, il y a toujours des risques d'avoir des résultats erronés. Pour vérifier nos programmes de simulation, il faut toujours commencer la procédure de simulation par des

tests de validation. Ces tests doivent permettre de retrouver des résultats connus. Parmi les tests de validation connus, nous avons retenu les tests habituellement utilisés dans les simulations de croissance normale de grains:

- 1- La variation de la taille moyenne de la microstructure \bar{R} obéit à la loi théorique :

$$\bar{R}^2 - \bar{R}_0^2 = kt \quad (\text{III-3})$$

où \bar{R}_0 est la taille moyenne initiale de la matrice ($t = 0$) et k est une constante.

- 2- Au cours de la croissance (2D), deux changements topologiques se produisent. Le premier est la disparition d'un grain triangulaire. Cela permet aux trois sommets voisins de former un seul sommet (Figure III.14a). Le deuxième est l'échange de voisins lorsque deux sommets d'un joint se rencontrent puis se séparent dans une direction perpendiculaire (Figure III.14b) ;

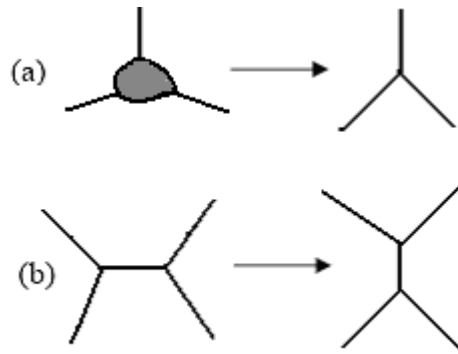


Figure III.14 Les changements topologiques en croissance de grains (2D) :

(a) Disparition d'un grain triangulaire et (b) échange de voisins.

- 3- Un grain possédant moins de 6 voisins aura tendance à disparaître et s'il en possède plus de 6 voisins il aura tendance à croître. Un grain entouré par 6 joints à 120° sera stable.

Donc, pour valider nos propres programmes de simulation Monte Carlo, la première simulation est consacrée à la croissance normale de grains. La représentation de la microstructure simulée est reportée sur la figure III.15.

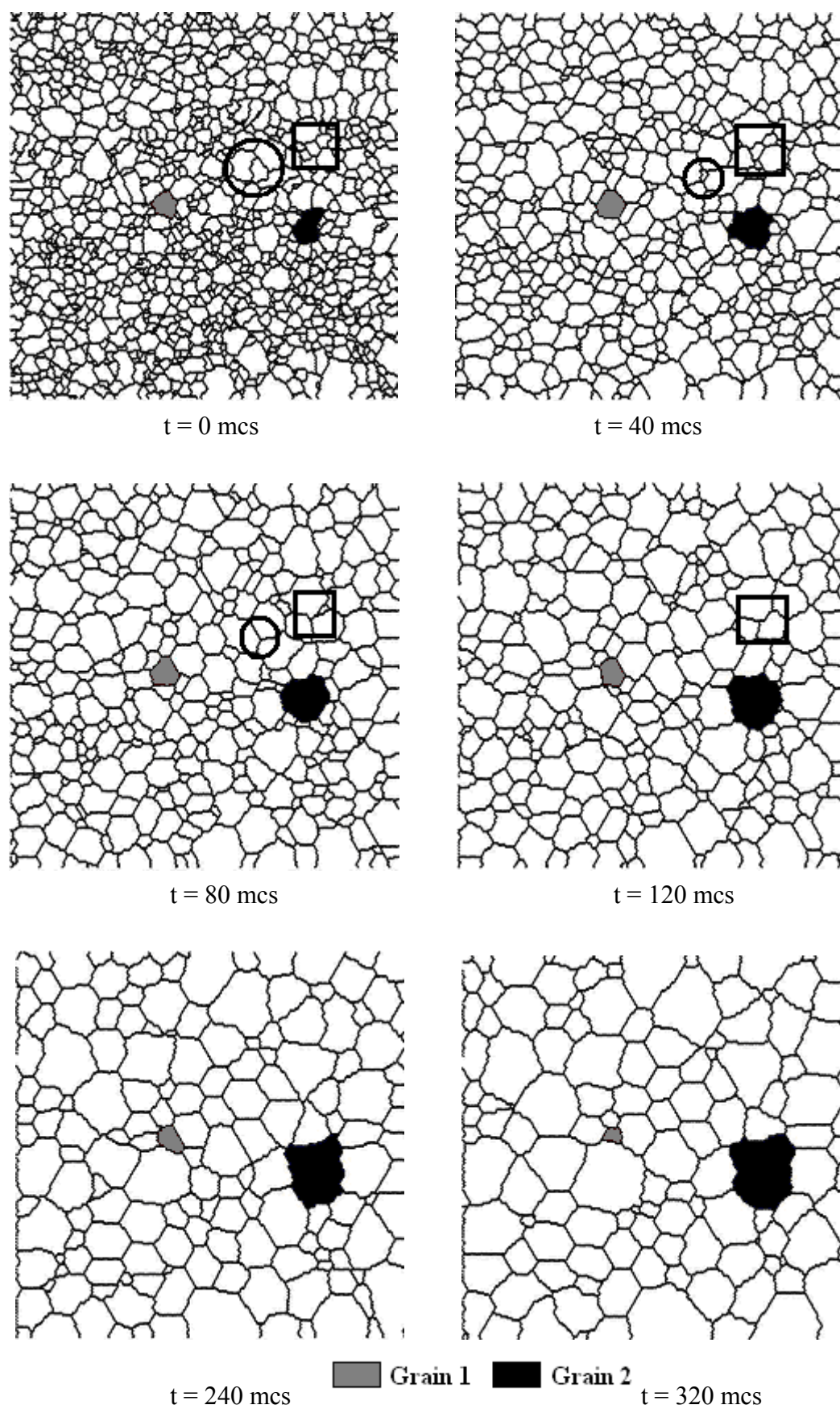


Figure III.15 Evolution de la microstructure pour différents temps MC ($t = 0-320$ mcs)

1- En traçant la variation du rayon moyen des grains \bar{R} en fonction du temps (Figure III-16), la loi de croissance qu'il est possible d'en déduire est de la forme :

$$\bar{R}^2 = At + B \quad \text{avec } A = 0.4 \text{ et } B = 47.4$$

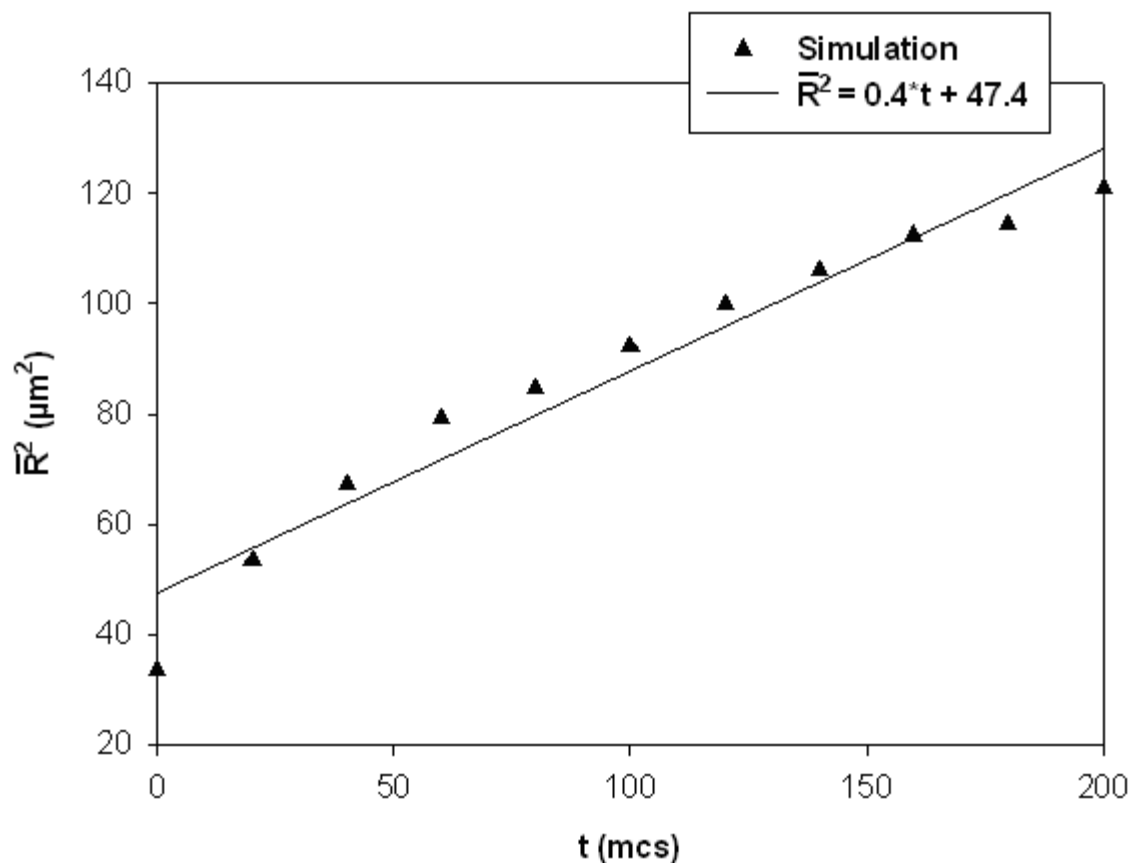


Figure III.16 Variation de la taille moyenne en fonction du temps de simulation.

2- L'évolution de grains (Figure III.15) montre un comportement de croissance normale. Un suivi de changements topologiques est possible. Par exemple, on a utilisé un cadre (Figure III-15) pour montrer l'échange de voisins et un cercle pour la disparition d'un grain triangulaire.

3- Pour montrer la relation entre un grain en croissance et le nombre de ses voisins, un suivi est fait pour deux grains 1 et 2 (Figure III-15). nous pouvons distinguer les comportements suivants :

- Pour $t = 0-200$ mcs, le grain 1 dont le nombre de voisins égale à 6 est presque stable. Après, le nombre de voisins diminue et devient inférieur à 6. le grain 1 décroît jusqu'à disparition à $t = 380$ mcs;

- Pour le grain 2, il y a une croissance continue tant que le nombre de voisins est supérieur à 6.

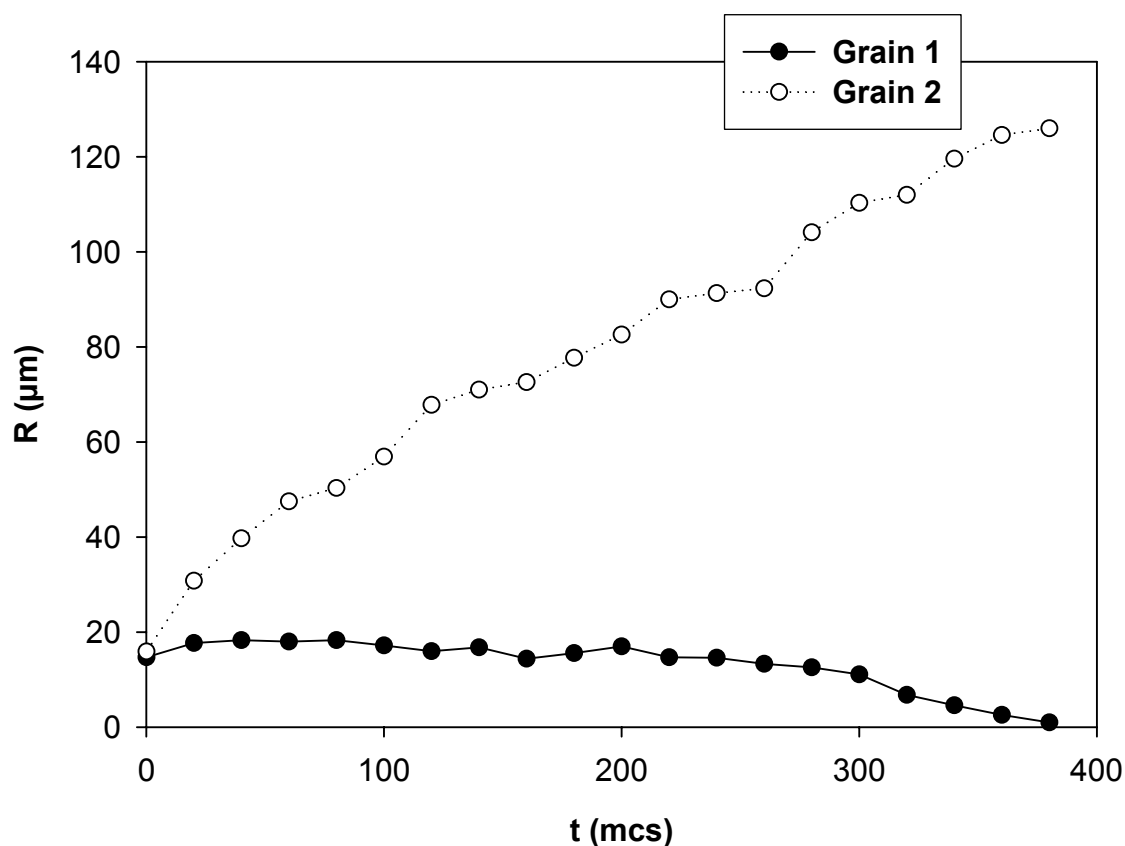


Figure III.17 Variation de la taille de deux grains en fonction du temps de simulation.

Après vérification de nos propres programmes de simulation, nous passerons maintenant à l'étude de l'influence d'un paramètre cristallographique (l'énergie des joints de grains) sur la croissance de grains et spécialement les grains de Goss.

III.3.2 Influence de l'énergie des joints de grains sur la croissance des grains de Goss

La croissance anormale des grains de Goss implique que leurs joints soient très mobiles. La croissance préférentielle des grains de Goss au stade initial de la recristallisation secondaire serait donc liée à un voisinage cristallographique favorable [5-11]. Plusieurs hypothèses ont été suggérées pour expliquer cette croissance. Actuellement, il existe deux théories principales. Une grande vitesse de migration est attribuée aux joints à faible énergie de type C.S.L (Coincidence site Lattice) dans la première théorie [12-15] et aux joints de forte

énergie (HE) dans la deuxième théorie [16,17]. Dans la deuxième simulation, on considère un grain de Goss (G) dans une matrice isotrope (M). En plus de la microstructure, seule l'anisotropie d'énergie des joints de grains a été prise en compte dans cette simulation. Les valeurs de l'énergie des joints de grains sont données pour les joints M-M (Matrice-Matrice) et G-M (Goss-Matrice) (Tableau III.1).

| Joint de grains | | M-M | G-M |
|------------------------------|-----|-----|-----|
| Energie (j.m ⁻²) | (a) | 0,7 | 0,7 |
| | (b) | 0,3 | 0,7 |
| | (c) | 0,7 | 0,3 |

Tableau III.2 Energie du joint de grains utilisé dans la simulation.

La procédure de simulation pour le cas anisotrope, avec l'énergie des joints de grains, est la même que dans le cas isotrope sans énergie des joints de grains.

Pour faire une comparaison de croissance de grains entre microstructures théorique et expérimentale, la simulation de croissance a été effectuée dans un premier temps à partir d'une microstructure théorique.

III.3.2.1 Microstructure théorique

La simulation classique de croissance de grains est faite généralement à partir d'une microstructure théorique (Figure III-18).

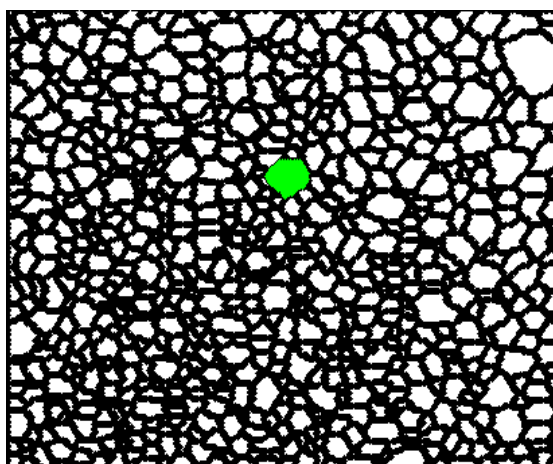


Figure III.18 Microstructure théorique initiale.

La figure III.19 représente l'évolution du grain de Goss pour les trois cas dans le tableau III.2.

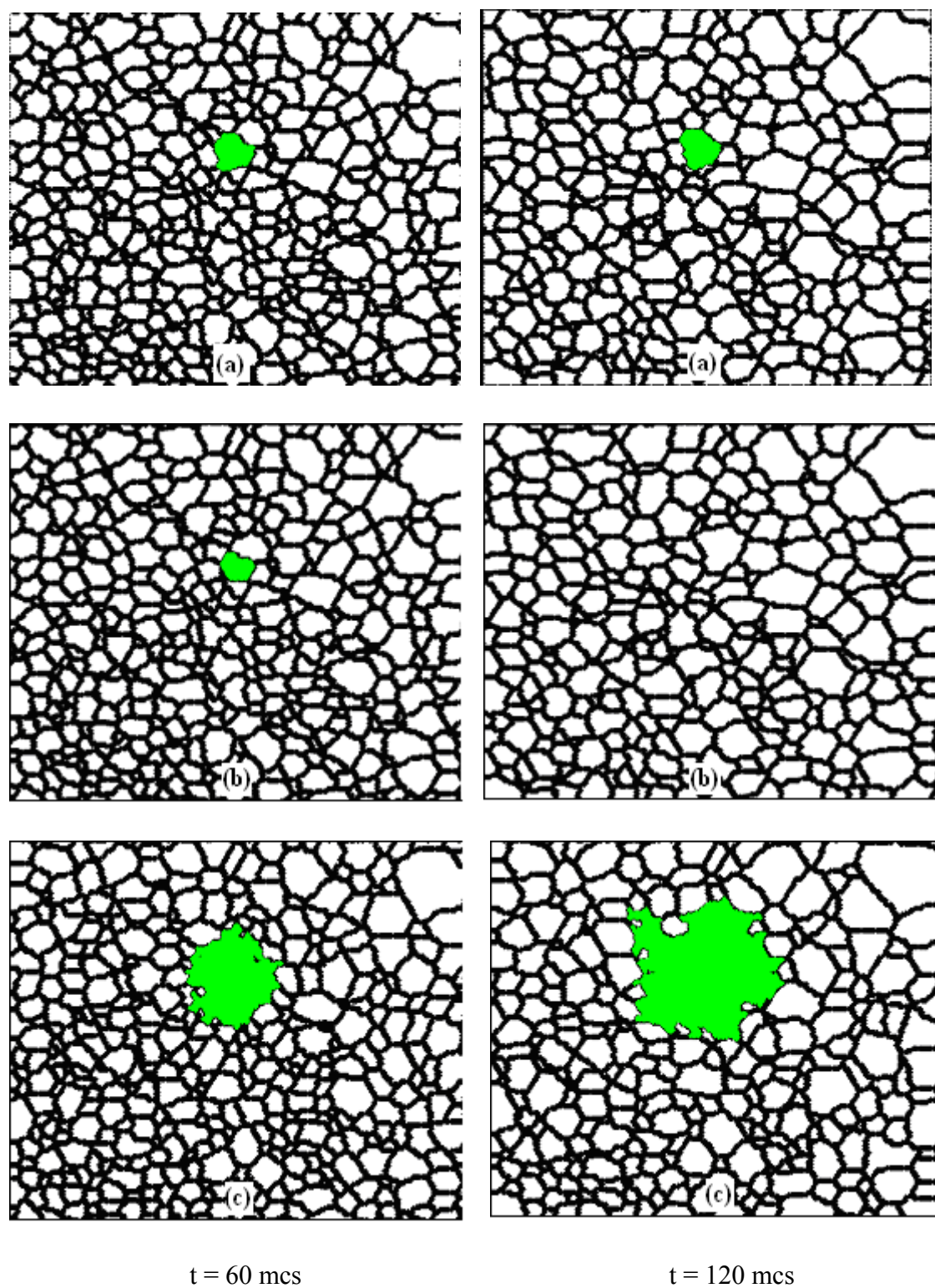


Figure III.19 Evolution de microstructure pour les cas (a), (b) et (c) dans le tableau III.2.

On constate :

- Croissance normale du grain de Goss pour le cas (a) ;
- Décroissance jusqu'à disparition du grain de Goss pour le cas (b) ;
- Croissance anormale du grain de Goss pour le dernier cas (c).

Donc, l'existence des joints spéciaux autour du grain de Goss (G-M) avec une faible énergie lui assure de continuer sa croissance d'une façon anormale.

III.3.2.2 Microstructure expérimentale

Pour comparer l'influence de la distribution en taille de la microstructure initiale sur la croissance de grain de Goss, on va refaire la simulation précédente (Tableau III.2) à partir d'une microstructure expérimentale (Figure III-8). Le grain encadré représente un grain de Goss. Avant de commencer cette simulation, il est intéressant de noter que la taille de grain de Goss ($R = 12.6 \mu\text{m}$) est deux fois supérieur à la taille moyenne de la microstructure ($\bar{R}_0 = 5.8\mu\text{m}$). Donc, selon la théorie de Hiller, ce grain va croître d'une façon anormale.

La figure III.20 représente l'évolution du grain de Goss pour le premier cas (a) dans le tableau III.2. l'énergie du joint Goss-Matrice (G-M) égale 0.7 et l'énergie Matrice-Matrice (M-M) égale 0.7. On constate une croissance normale pour le grain de Goss. Donc, la théorie de Hillert n'est pas vérifiée. On peut avancer l'hypothèse que le facteur taille n'est pas suffisant seul pour le déclenchement de la croissance anormale des grains de Goss. La figure III-21 montre la croissance des grains de la matrice pour le deuxième cas (b). L'énergie du joint Goss-Matrice (G-M) égale 0.7 et l'énergie Matrice-Matrice (M-M) égale 0.3. On constate une décroissance pour le grain de Goss jusqu'à disparition. Donc, un grain de Goss entouré de joints à haute énergie (Joint générale) disparaît dans matrice à joints à faible énergie (Joint de coïncidence). La texture finale (Figure III-22) est presque la même pour la microstructure primaire (Figure III-12). La dernière simulation est faite pour le cas (c). L'énergie du joint Goss-Matrice (G-M) égale 0.3 et l'énergie Matrice-Matrice (M-M) égale 0.7. le grain de Goss croît au dépend des grains de la matrice d'une façon anormale (Figure. III. 22). La texture majoritaire pour la microstructure à $t = 200 \text{ mcs}$ (Figures III-24 et III-25) est la texture $\{110\}\langle 001\rangle$ (Texture de Goss).

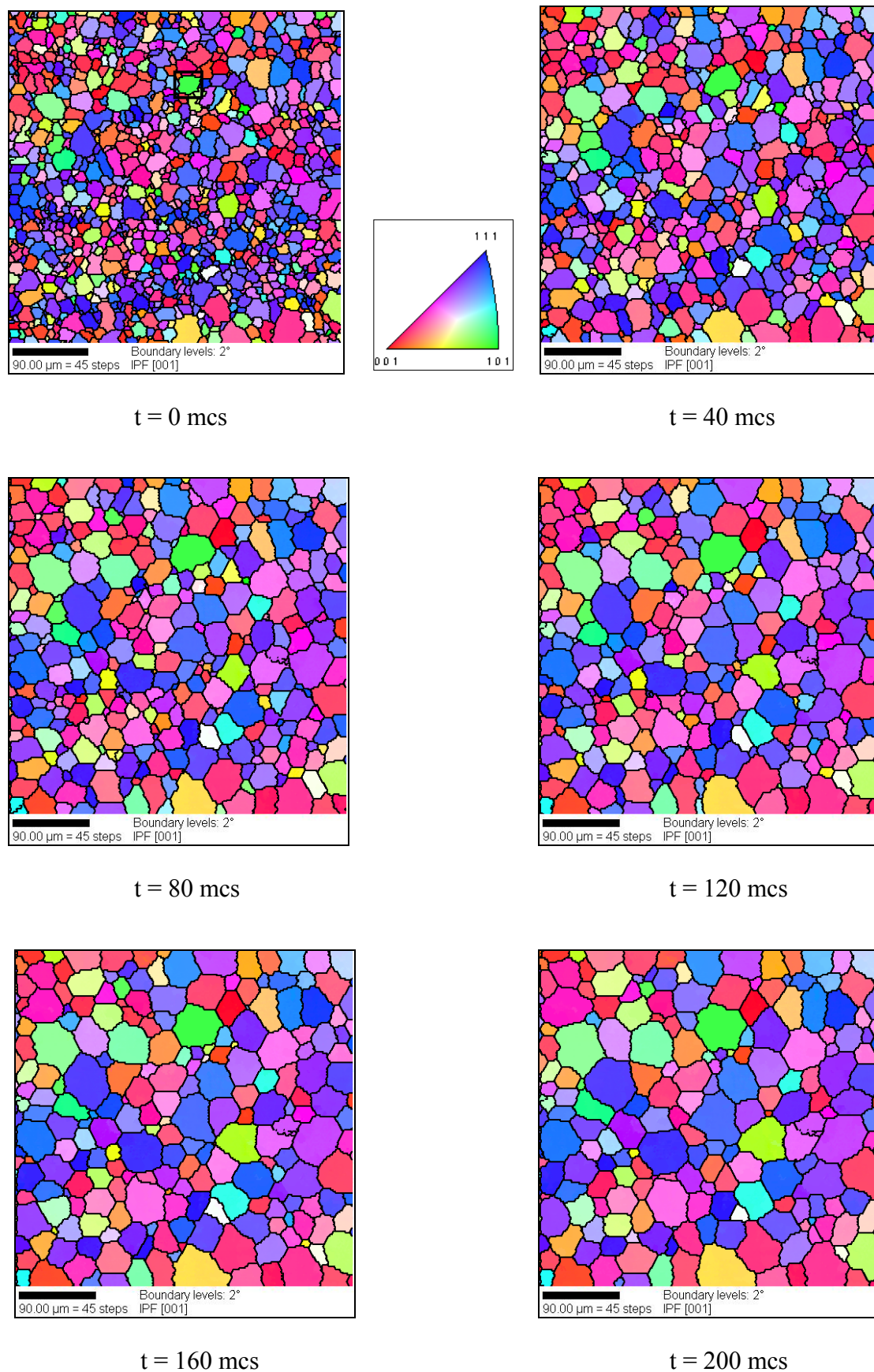


Figure III.20. Evolution du grain de Goss pour l'énergie : $e(\text{G-M}) = 0.7$ et $e(\text{M-M}) = 0.7$.

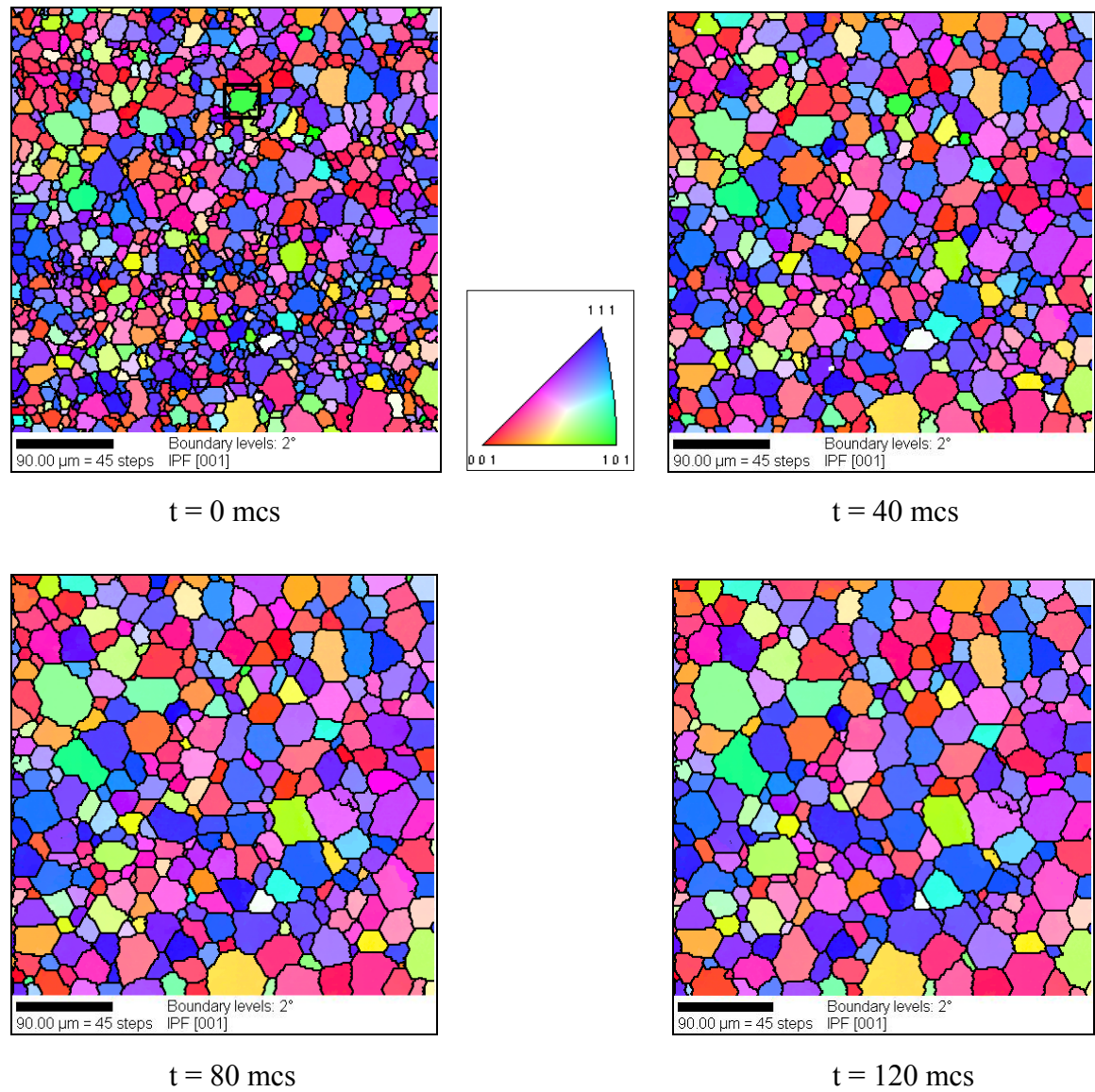


Figure III.21 Evolution du grain de Goss pour l'énergie : $e(\text{G-M}) = 0.7$ et $e(\text{M-M}) = 0.3$.

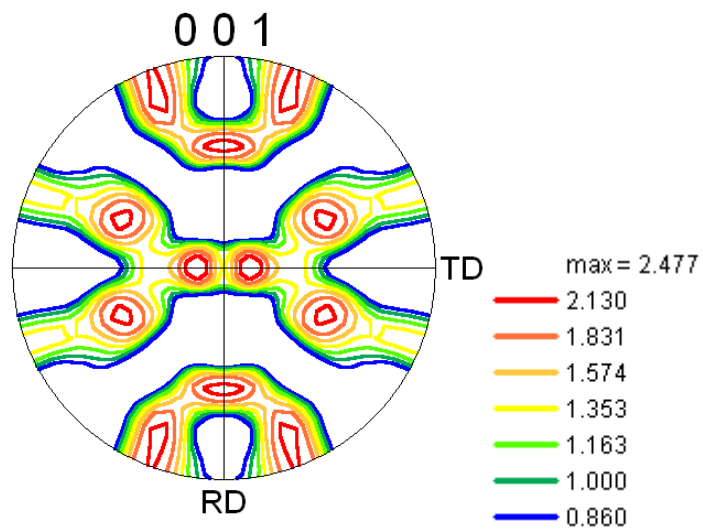


Figure III.22 Figure de pôles $\{100\}$ $t = 200$ mcs pour le cas (b) dans le tableau III.2.

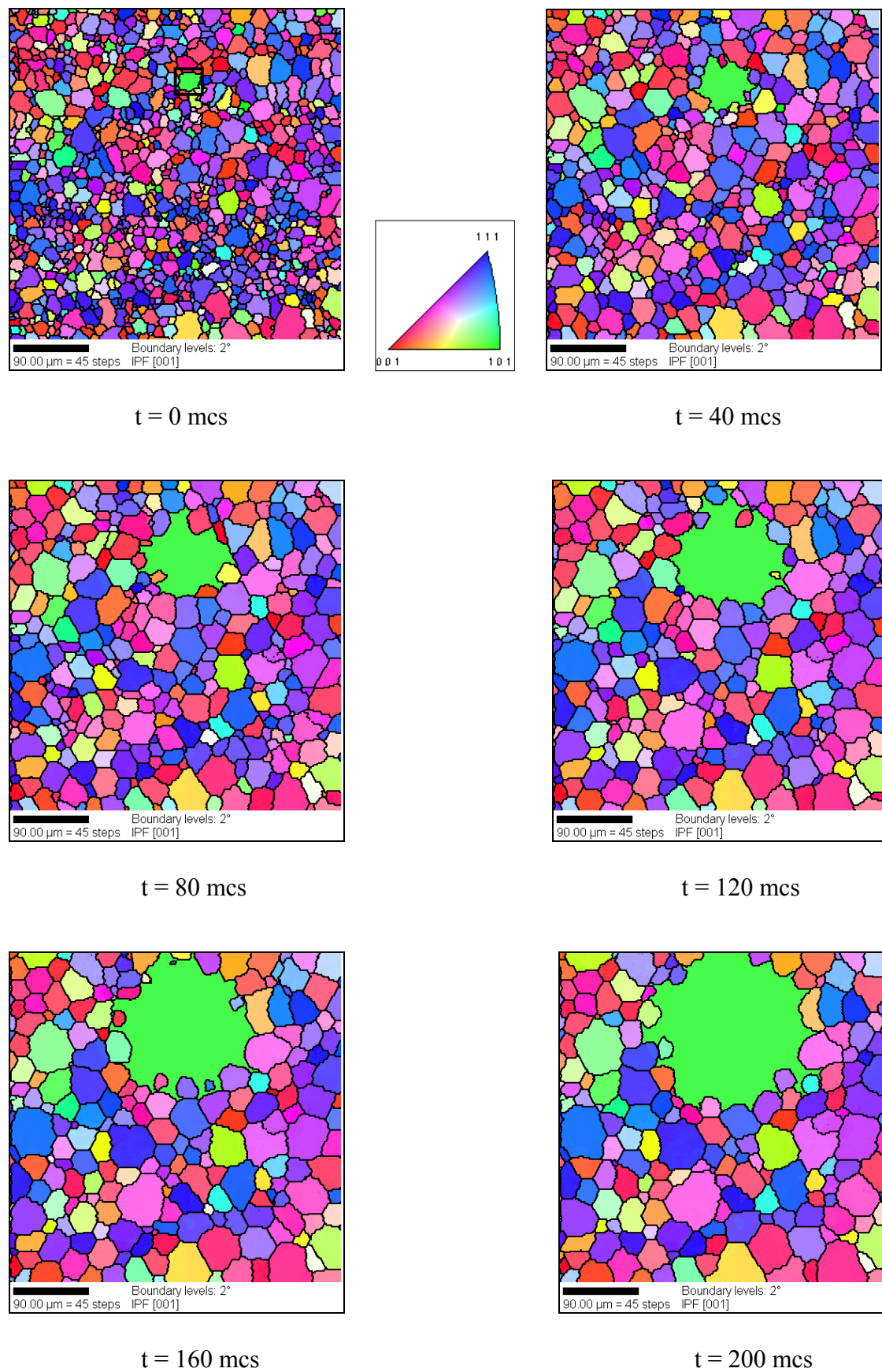


Figure III.23 Evolution du grain de Goss pour l'énergie : $e(G-M) = 0.3$ et $e(M-M) = 0.7$.

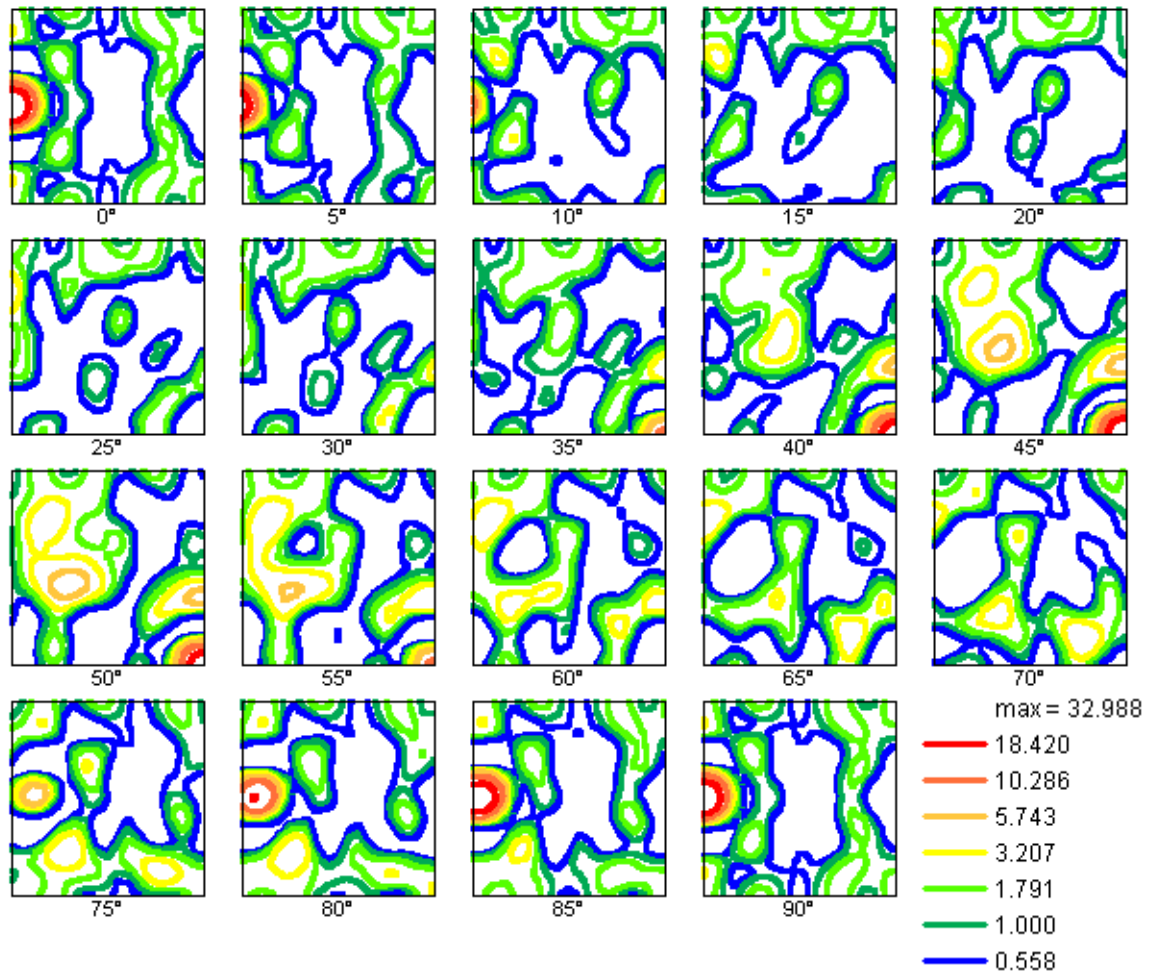


Figure III.24 Sections à angle φ_2 constant de la FDOC de la matrice à $t = 200$ mcs.

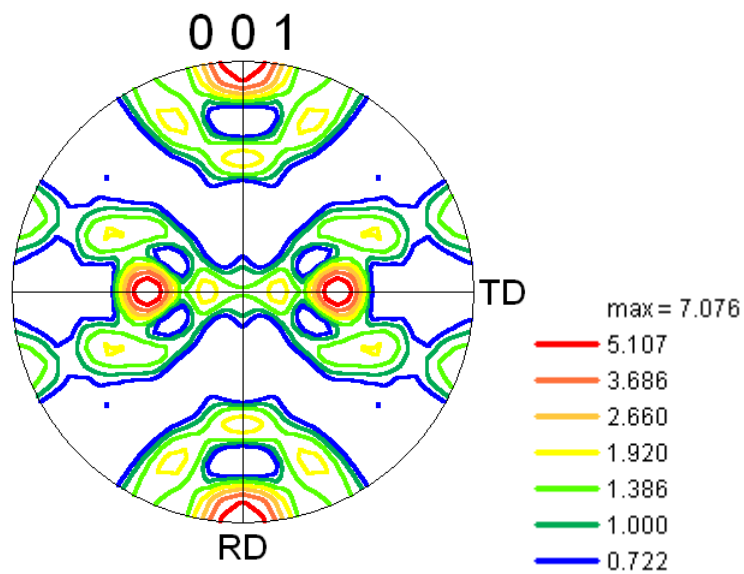


Figure III.25 Figure de pôles $\{100\}$ $t = 200$ mcs pour le cas (c) dans le tableau III-2.

Cela est en bon accord avec les modèles qui prévoient que la croissance anormale du grain de Goss est due à l'existence autour de lui de joints de grains à faible énergie (Joints de coïncidence).

Par comparaison de l'évolution d'un grain de Goss par croissance anormale dans une microstructure simulée (Figure 26a) et une microstructure expérimentale (Figure 26b), le front des grains qui sont en contact avec le grain de Goss devient circulaire.

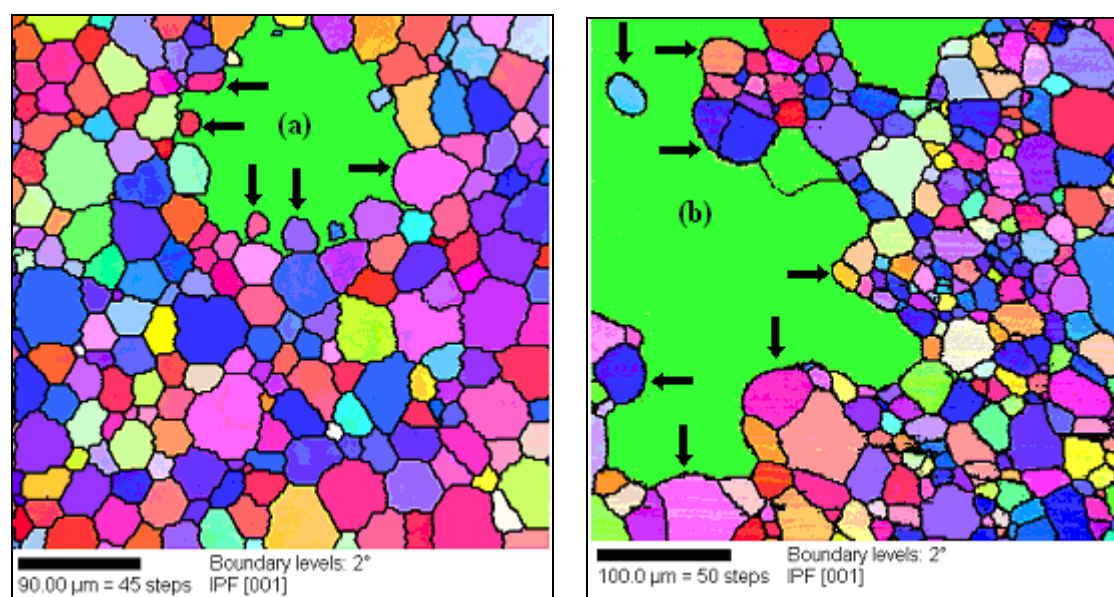


Figure III.26 Croissance anormale d'un grain de Goss :

(a) Microstructure simulée et (b) microstructure expérimentale.

En conclusion, la croissance anormale des grains de Goss est contrôlée par le paramètre morphologique (la taille du grain de Goss) et un paramètre cristallographique (spécialité des joints qui entourent le grain de Goss). L'existence d'un grain de Goss, avec une taille deux fois supérieure à la taille moyenne de la matrice, entouré de joints spéciaux à faible énergie (joints de coïncidence), peut croître d'une façon anormale.

Références bibliographiques

- [1] M.P. Anderson., D. JSrolovitz, G. S. Greast, P. S Sahni, Acta Metall. 32 (1984) 783.
- [2] D. J.Srolovitz., M. P Anderson.,G. S Greast., P. SSahni, Acta Metall. 32 (1984) 1429.
- [3] T. Baudin, P. Paillard, R. Penelle, Scripta Mater. 40 (1999) 1111.
- [4] M. Hillert, Acta Metall. 36 (1988) 3177.
- [5] J. Harase, R. Shimizu, Transaction of JIM 29 (1988) 388.
- [6] R. D. Doherty, Metal Sci. J. 16 (1982) 1.
- [7] P. R. Rios, Acta Metall. 35 (1987) 2805.
- [8] R. D. Doherty, D. J. Srolovitz, A. D. Rollet, M. P. Anderson, Scripta Met. 21 (1987) 675.
- [9] P. M. Hazzledine, R. D. J. Oldershaw, Phil. Mag. A61 (1990) 579.
- [10] O. Krichevsky, J. Stavans, Phys. Rev. B46 (1992) 1057.
- [11] N. Maazi, R. Penelle, Mat. Sci. and engi. A 504 (2009) 135.
- [12] J. Harase, R. Shimizu, D. J. Dingley, Acta Metall. Mater. 39 (1991), 5 763.
- [13] J. Harase, Mater. Sci. Forum. 94–96, N°6 (1991), 405.
- [14] Y. Yoshitomi, Ushigami, Y., Harase, J., Nakayama, T., Matsui, H., Takahashi, N., Mater. Sci. Forum. 113–115 (1993), 715.
- [15] P. Lin, Palumbo, G., Harase, J., Aust, K.T., Acta Mater. 44, N°12 (1996), 4677.
- [16] Y. Hayakawa, J.A. Szpunar, G. Palumbo, P. Lin, Journal of Magnetism and Magnetic Materials 160 (1996), 143.
- [17] Y. Hayakawa, J.A. Szpunar, G.. Palumbo, P. Lin, Acta Mater. 45 (1997), 1285.

Conclusions et Perspectives

La microstructure contrôle largement les propriétés des matériaux métalliques. Elle représente les textures morphologique (la taille et la forme des grains) et cristallographique (distribution des orientations cristallographiques). L'évolution de la microstructure est réalisée par croissance de grains. La croissance de grains qu'elle soit normale ou anormale dépend de la taille des grains, de leur distribution et de leur orientation cristallographique. Au cours du processus de croissance de grains, la force motrice est contrôlée par **l'énergie du joint** qui tend à réduire l'aire totale des joints de grains.

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à l'étude de l'influence de **l'énergie des joints de grains** sur la croissance des grains d'orientation $\{110\}\langle 001\rangle$ (grains de Goss) dans les tôles magnétiques Fe-3%Si.

La croissance préférentielle des grains de Goss au stade initial de la recristallisation secondaire implique que leurs joints soient très mobiles. Plusieurs hypothèses ont été suggérées pour expliquer cette croissance. Actuellement, il existe deux théories principales. Une grande vitesse de migration est attribuée aux **joints à faible énergie** de type C.S.L (Coincidence site Lattice) dans la première théorie et aux **joints de forte énergie** (HE) dans la deuxième théorie.

Au cours de cette étude, nous avons simulé la croissance normale et anormale de grains par la méthode de Monte Carlo. Pour prendre en compte l'effet de l'hétérogénéité structurale sur la croissance de grains, une nouvelle simulation Monte Carlo basée sur un couplage entre l'expérience et la simulation a été utilisée.

En premier lieu, nous avons caractérisé notre matrice initiale, à partir d'une microstructure expérimentale obtenue par EBSD. Pour valider nos propres programmes de simulation, nous avons commencé la simulation par une croissance normale isotrope (tous les joints de grains sont identiques). Dans la deuxième simulation, on a suivi l'évolution d'un grain de Goss dans une matrice isotrope. En plus de la microstructure, seule l'anisotropie d'énergie des joints de grains a été considérée au cours de cette simulation. La simulation a été faite pour trois cas différents :

- 1- Tous les joints de grains ont la **même énergie** ;

2- **Une grande énergie** est attribuée préférentiellement aux joints autour du grain de Goss ;

3- Les joints entourant le grain de Goss ont **une faible énergie**.

De plus, pour voir l'influence de l'hétérogénéité structurale sur la croissance de grains, chaque simulation de ces trois cas a été faite pour deux microstructures, une théorique et l'autre expérimentale.

Nos résultats de simulation ont montré pour les deux microstructures :

- 1- Une croissance normale du grain de Goss pour le premier cas ;
- 2- Une décroissance et disparition du grain de Goss pour le deuxième cas ;
- 3- Une croissance anormale du grain de Goss pour le troisième cas.

Il est intéressant de noter que la taille du grain de Goss était deux fois supérieure à la taille moyenne de la matrice primaire (théorie de Hillert).

Suivant nos résultats de simulation, la croissance anormale des grains de Goss est contrôlée par deux facteurs :

- Un facteur **morphologique** : La taille du grain de Goss est **supérieure** à la taille moyenne de la microstructure ;
- Un facteur **crystallographique** : le grain de Goss est entouré préférentiellement par des joints à **faible énergie (C.S.L.)**.

En réalité, la croissance de grains est un phénomène à 3 dimensions. Avec la possibilité expérimentale actuelle de caractérisation des matériaux en 3D, il est possible d'élargir notre simulation Monte Carlo à une distribution spatiale de grains (microstructure en 3D).

ملخص

تبقى مراقبة و فهم تغيرات البنية المجهرية عامل أساسي في علوم المواد. تعتبر طاقة حدود الحبيبات من بين أهم العوامل المؤثرة في هاته التغيرات. تلعب هاته الطاقة دورا فعالا خلال مختلف مراحل نمو الحبيبات في المواد ذات النسيج البلوري في الصفائح المغناطيسية.

يمكن الحصول على النسيج البلوري $\langle 001 \rangle$ {110} في الصفائح المغناطيسية بنمو سريع و مفاجئ لحبيبات أقلية على حساب الأغلبية في المصفوفة الابتدائية. تبقى آلية هذا النمو غير مفهومة. تعتبر المحاكاة وسيلة فعالة لتحليل و فهم الظواهر الفيزيائية .

إدخال طاقة الحدود في عملية المحاكاة بطريقة Monte Carlo سمح لنا بفهم ظاهرة نمو الحبيبات ذات النسيج البلوري $\langle 001 \rangle$ {110} بشكل غير عادي و الملاحظة في الصفائح المغناطيسية Fe-3%Si.

الكلمات المفتاحية/ المحاكاة، النمو، حبيبات غوص، النسيج البلوري.

Abstract

In materials sciences the control and the understanding of the microstructure evolution remain essential. Among parameters that control this evolution, the grain boundaries energy. This energy plays an important role in textured materials during different stages of the grain growth. In magnetic materials Fe-3%Si, the abnormal growth of Goss grains $\langle 001 \rangle$ {110} is obtained by a sudden and fast growth of a minor component of the primary matrix, at the expense of the major components. The mechanism of this growth is not well known. The numeric simulation is an effective means of analysis and understanding of physical phenomenons. Introduction of the grain boundaries energy in Monte Carlo simulation permitted us better understanding the phenomenon of the abnormal growth of grains with orientation $\langle 001 \rangle$ {110} observed in magnetic sheets Fe-3%Si.

keywords/ Simulation- Growth- Goss Grains- Cristallographic Texture.

Résumé

En sciences des matériaux, le contrôle et la compréhension de l'évolution de la microstructure restent essentiels. Parmi les paramètres qui contrôlent cette évolution, l'énergie des joints de grains. Cette énergie joue un rôle important dans les matériaux texturés au cours de différentes étapes de la croissance des grains. Dans les tôles magnétiques Fe-3%Si, la croissance anormale des grains de Goss $\{110\} \langle 001 \rangle$ est obtenue par une croissance soudaine et rapide d'une composante mineure de la matrice primaire, aux dépens des composantes majeures. Le mécanisme de cette croissance n'est pas encore bien connu. La simulation numérique est un moyen performant d'analyse et de compréhension des phénomènes physiques. L'introduction de l'énergie des joints en simulation Monte Carlo, nous a permis de mieux comprendre le phénomène de la croissance anormale des grains d'orientation $\{110\} \langle 001 \rangle$ observé dans les tôles magnétiques Fe-3%Si.

Mots-clés/ Simulation- Croissance- Grains de Goss- Texture Cristallographique.