

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



**UNIVERSITE MOHAMED SEDDIK  
BEN YAHIA - JIJEL**



**FACULTE DES SCIENCES EXACTES ET  
INFORMATIQUE**

**DEPARTEMENT DE PHYSIQUE**

Série :

**Mémoire présenté pour obtenir le diplôme de**

**Master en physique**

**Spécialité : Physique Des Matériaux**

**Par**

**KHADIDJA MECHAAR**

**Thème**

***Simulation de l'influence du nombre  
d'orientations sur l'évolution de la croissance  
cristalline dans les matériaux métalliques***

Soutenu le : **31/10 /2020** devant le jury:

<b>Président :</b>	<b>A. BOUMAIZA</b>	<b>Prof. Université de Jijel</b>
<b>Rapporteur :</b>	<b>H. AFER</b>	<b>M.A.A. Université de Jijel</b>
<b>Co-encadreur :</b>	<b>R. HERIECHE</b>	<b>M.A.A. Université de Jijel</b>
<b>Examineurs :</b>	<b>D. KENIECHE</b>	<b>M.C.B. Université de Jijel</b>

Année universitaire : 2019/2020

## Remerciement

*Je tiens tout d'abord à remercier Dieu le tout Puissant et Miséricordieux, qui m'a donnée la force et la patience d'accomplir ce travail.*

*Je tiens aussi à exprimer mes sincères reconnaissances et ma profonde gratitude à mon encadreur M<sup>me</sup> "HASNA AFER" pour son soutien, sa disponibilité, ses orientations, ses précieux conseils et ses encouragements qui m'ont permis de réaliser ce travail dans de bonnes conditions.*

*Je présente mes gratitude les plus sincères à mon co-encadreur M<sup>me</sup> RATIBA HERJACHE pour ses conseils et son aide.*

*Mes vifs remerciements également aux membres du jury professeur "AHSEN BOUMAIZA" et M<sup>r</sup> "DAOUDE KENIACHE" pour leurs attentions et intérêts portés envers mon travail. Merci de nous avoir honorés de votre présence.*

*Je tient à remercier également A. LAOUR et M. FAZANI pour tous leurs conseils, ainsi que pour les discussions enrichissantes autour langage Matlab.*

*Je suis reconnaissante envers tous mes collègues au département de physique, en particulier le chef de département professeur "A. BOUAINE", de nous avoir soutenu pour mener à bien travail ainsi que pour les efforts et les organisations administratives dans ces circonstances.*

*Sans oublier de présenter mes sincères remerciements à mes parents qui ont étaient toujours avec moi et pour leurs encouragements durant le parcours de mes études, ainsi que pour leurs aides, leurs compréhensions et leurs soutiens.*

*Mes remerciements s'adressent aussi au corps professoral et administratif de la Faculté des Sciences Exactes et Informatique "département de physique", pour la richesse et la qualité de leurs enseignements et qui ont employé des efforts au profit de leurs étudiants.*

*Je souhaite adresser mes remerciements les plus sincères aux personnes qui m'ont apporté leur aide et qui ont contribué à l'élaboration de ce mémoire.*

*Enfin, j'adresse mes plus sincères remerciements à tous mes proches et amis de près ou de loin, qui m'ont toujours encouragée au cours de la réalisation de ce mémoire.*

## *Sommaire*

Introduction générale.....	1
----------------------------	---

### **Chapitre I : CROISSANCE ET JOINTS DE GRAINS**

I-1-Introduction .....	3
I-2- L'Etat de déformation .....	3
I-3 - Diminution de l'énergie libre (Gibse) et la réaction des défauts .....	5
I-4-La Restauration .....	5
I-5-La Recristallisation .....	7
I-6-La croissance normale .....	8
I-7-La croissance anormale .....	9
I-8-L'orientation des grains .....	10
I-9-La désorientation entre deux grains .....	12
I-10-Les Joints de grains .....	12
I-11-Types des joints de grains .....	13
I-11-1-Les joints à faible angle (LA :Low angle) .....	14
I-11-2-Les joints CSL (Coïncidence Site Lattice).....	15
I-11-3-Les joints CAD (Coïncidence Axis Lattice) .....	16
I-11-4-Les joints de grains à grand angle.....	16

### **Chapitre II : MODELE DE SIMULATION ET MODELISATION DE LA CROISSANCE CRISTALLINE**

II -1-Introduction .....	17
II- 2-Modélisation et la croissance des graines .....	17
II-3-Modèles statistiques .....	18
II-3-1 Modèle de Hillert .....	19
II-4-Modèles déterministes .....	20
II-4-1 Modèle de Hunderi et Ryum .....	20
II-5 -Rôle de la topologie .....	22
II-6 Techniques de simulation .....	23
II-6-1-La dynamique moléculaire .....	24
II-6-2 modèle de vertex .....	25
II-6-3 L'automate cellulaire .....	25
II-6-4-Méthode MONTE CARLO (Modèle de potts) .....	26

## **Chapitre III : EVOLUTION DU NOMBRE DE GRAINS ET DE LA TAILLE**

### **MOYENNE DES GRAINS**

III-1-Introduction .....	29
III-2- Procédure de simulation .....	29
III-3- Algorithme de croissance .....	29
III-4- Résultats et discussion .....	32
III-4- 1 -Matrices initiales .....	32
III-4- 2 -Evolution de la croissance .....	33
III-4- 3 -Evolution globale des microstructures .....	34
III-4- 4 -L'influence de l'effet de taille à croissance des grains .....	40
Conclusion générale .....	49
Références bibliographiques .....	51

*Introduction*  
*Générale*

### **INTRODUCTION GENERALE**

Les propriétés d'emploi des métaux et alliages sont déterminées en grande partie par la nature, la morphologie et le degré de dispersion des phases qui les constituent .c'est à dire par la microstructure. Aujourd'hui, maîtriser la microstructure en vu d'optimiser telle ou telle propriété est réalisable par des traitements thermique ou thermomécanique appropriés sont fondé sur les possibilités de transformation structurelles.

Il est bien connu que la microstructure influence fortement les propriété des matériaux (mécanique, électrique, magnétique..etc).

Au cours du laminage à froid, le matériau subit une détérioration des propriétés de microstructure; C'est la raison pour laquelle, le matériau est généralement recuit pour que la recristallisation et la croissance de grains aient lieu et pour régénérer ainsi les propriétés, donc la maîtrise de la microstructure des propriétés des matériaux industriels, nécessite la compréhension des différents phénomènes physico-chimique qui régissent les étapes du processus de recristallisation. Cette dernière est utilisée d'une part pour faciliter la mise en forme par déformation plastique et, d'autre parte pour améliorer la qualité métallurgique du produit final de raison de son influence sur la taille et les orientations des grains .Il s'agit notamment la comprendre et de modéliser de changements microstructuraux qui ont lieu pendant les processus de la recristallisation et de la croissance normale des grains.Les forces motrices impliquées dans ces processus sont de nature différente. Dans le premier cas ces forces sont due à l'énergie associée à la densité de dislocation, alors que dans le second cas elles sont contrôlées par des joints de grains.

Dans ce mémoire, nous avons effectué une étude détaillée de l'évolution de la microstructure a l'état déformé au cours de la recristallisation puis la croissance normale de grains .Nous relient cette étude par des techniques informatique permettant actuellement la simulation de l'évolution microstructurale des matériaux polycristallins.

Dans ce travaille, nous utilisons la technique MONTE CARLO pour suivi l'évolution de la microstructure métallurgique, Cette technique est largement appliquée à la croissance des grains.

## *Introduction générale*

---

Le travail de ce mémoire est structuré en trois chapitres :

- Le premier chapitre comporte deux parties : la première présente une synthèse sur les concepts théorique de la déformation plastique, de la recristallisation et de la croissance des grains. Nous présentons dans la deuxième partie des rappels bibliographique sur la théorie géométrique et la modélisation des joints de grains, en plus la description des orientations cristallographiques.
- Le second chapitre regroupe les différents modèles qui sont partagés en deux catégories : les modèles statistiques et les modèles déterministes.les différents techniques de simulation utilisées sont également considérés.
- La troisième chapitre est consacré la simulation de la croissance des grains. Nous présentons notre contribution à la méthode Monte Carlo avec une comparaison entre les résultats.

Nous terminerons notre mémoire par une conclusion général présentant la synthèse des démarches entreprises et différents résultats obtenus en simulation.

***CHAPITRE I***  
***CROISSANCE ET JOINTS DE***  
***GRAINS***



### I-1-Introduction :

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

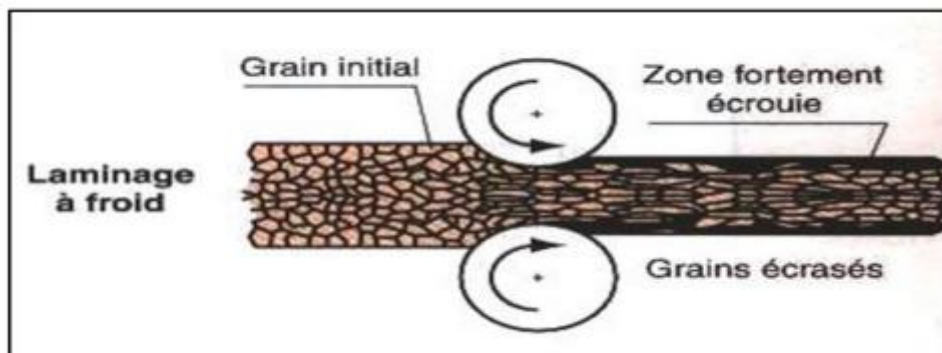
Dans cette étude, on s'intéresse particulièrement aux procédés de mise en forme à froid par la déformation plastique, cette dernière entraîne des changements visibles de formes, des changements en plus de microstructure de propriétés physiques et mécaniques. Le contrôle de l'évolution de la microstructure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

### I-2- L'état de déformation :

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

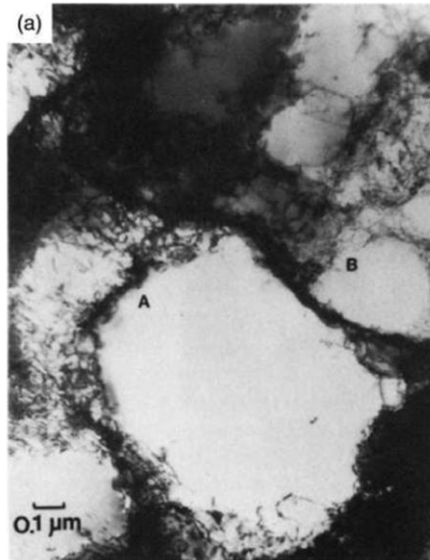
$$\varepsilon = \frac{l_0 - l_f}{l_0} \quad (\text{I.1})$$

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



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

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



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

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

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

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

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

c : une constance sans dimension de l'ordre 0.5

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

$\rho$  : la densité de dislocation ;  $\alpha$  : facteur géométrique

$\gamma_s$  : L'énergie des sous-joints.

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

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

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

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

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

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

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

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

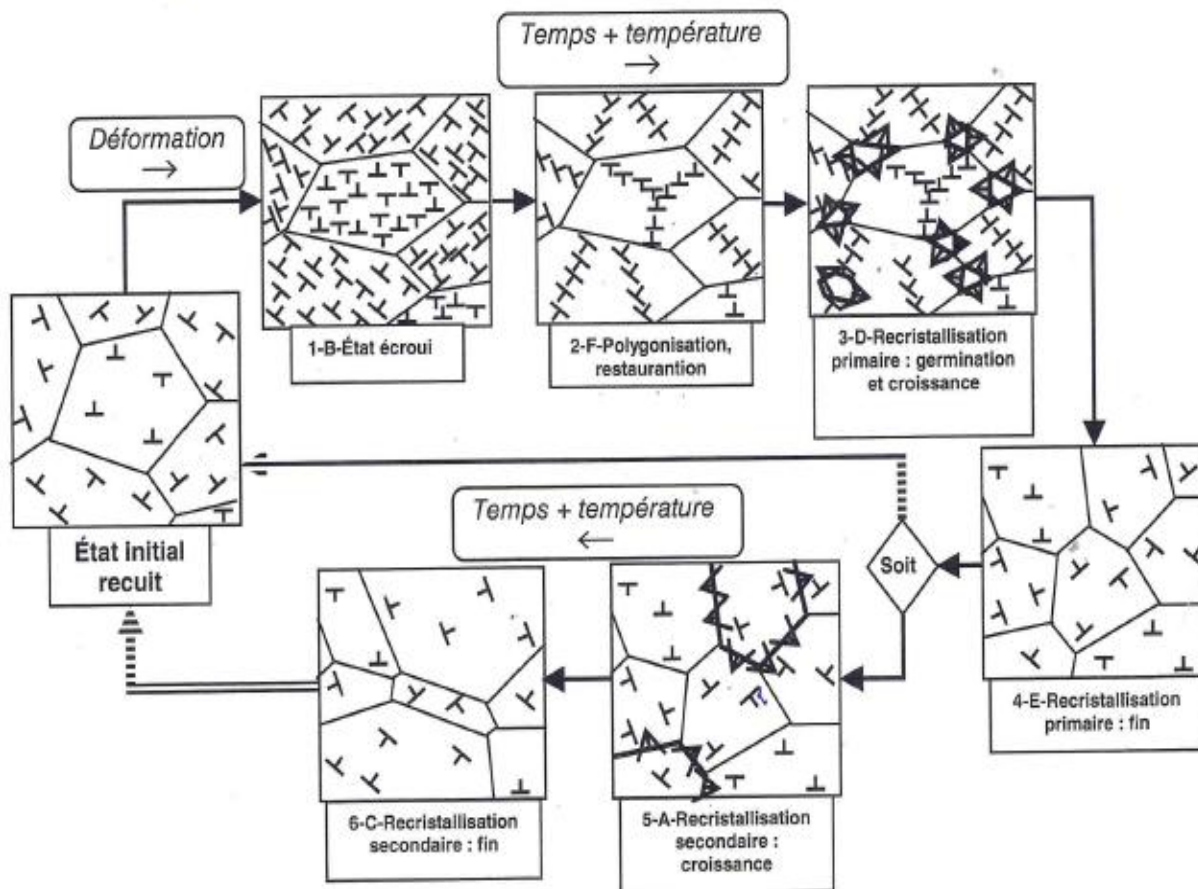
Les processus(1) et (2) sont appelés restauration et le processus (4) et (5) représentent le phénomène de recristallisation (migration des joints à grand angle) alors que le processus (3) constitué le premier stade de recristallisation dit germination, cette dernière qui conduit à la formation des nouveaux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

### **I-4-La restauration :**

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

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

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

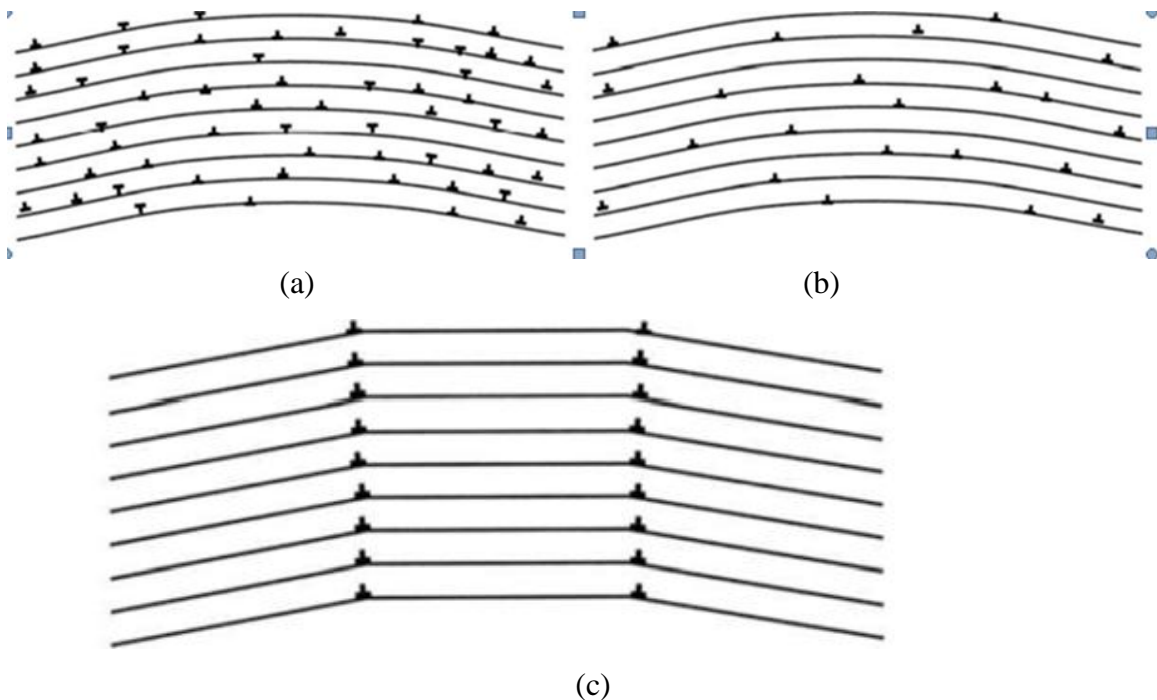


**Figure (I-3) :** les étapes de variation de la microstructure d'un métal qui subit un cycle d'écroutissage suivant de recuit [5].

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

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

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



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

### I-5-La recristallisation :

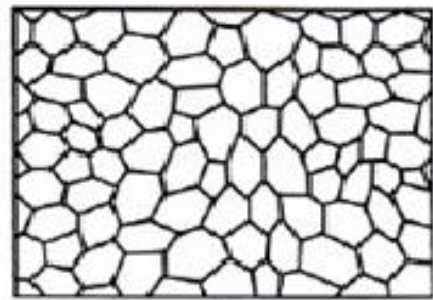
La recristallisation se traduit par la formation de nouveaux grains et migration des joints de grains à fortes désorientations. Ce phénomène nécessite un matériau déformé plastiquement et une énergie suffisante pour produire des germes et également soumis à l'action de l'énergie stockée de déformation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

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

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



a) état déformé



b) état recristallisé

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

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

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

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

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

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

### **I-6-La croissance normale :**

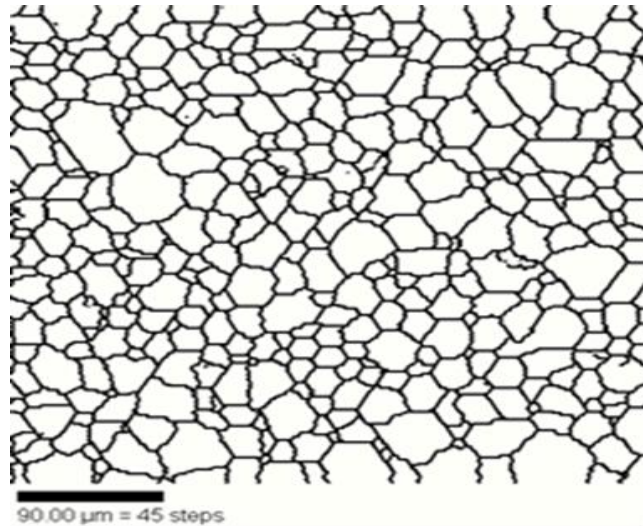
La croissance normale des grains est une croissance uniforme de nouveaux grains recristallisés, elle est classée comme un processus continu de recristallisation primaire. Ce dernier phénomène se termine lorsque le matériau déformé (écroui) est consommé, dans ce cas le matériau devient stable.

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

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

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

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



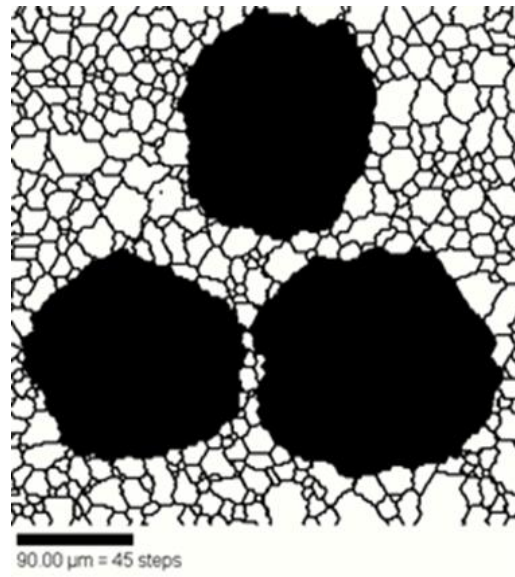
**Figure. I-6 :** croissance normale des grains.

### **I-6-La croissance anormale :**

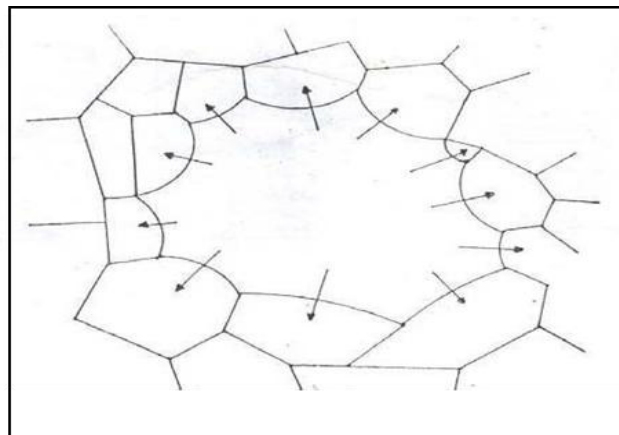
Lorsqu'on poursuit à l'augmentation de la température après la recristallisation totale, cette dernière est suivie d'un réarrangement de structure ; au cours duquel, un petit nombre de grains grossissent au dépend d'autres et certains grains de petites tailles disparaissent.

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

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



**Figure. I-7:** Croissance anormale des grains.



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

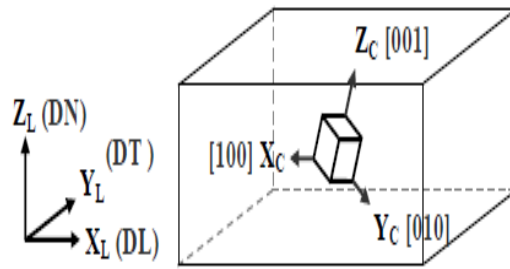
### **I-7-L'orientation des grains :**

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

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

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





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

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

➤ Les indices de Miller qui sont décrits par :

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

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

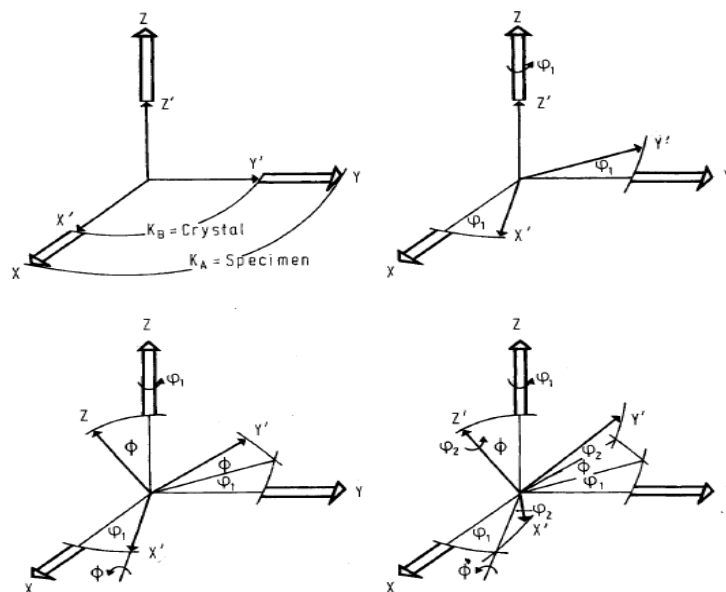
Les orientations sont notées  $g = \{h k l\} \langle u v w \rangle$  où  $h k l u v w$  sont les indices de Miller.

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

-la rotation autour de l'axe  $OZ$  d'un angle  $\varphi_1$ .

-la rotation autour de l'axe  $OX'$  d'un angle  $\Phi$ .

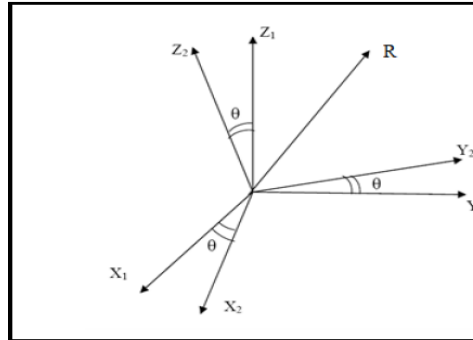
- la rotation autour de l'axe  $OZ'$  d'un angle  $\varphi_2$ .



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

**I-7-La désorientation entre deux grains :**

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



**Figure I-11 :** Axe et angle (R,  $\theta$ ) de désorientation entre deux grains.

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

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

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

L'angle de rotation donné par [2] :

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

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

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

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

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

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

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

**I-8-Les Joints de grains :**

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

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

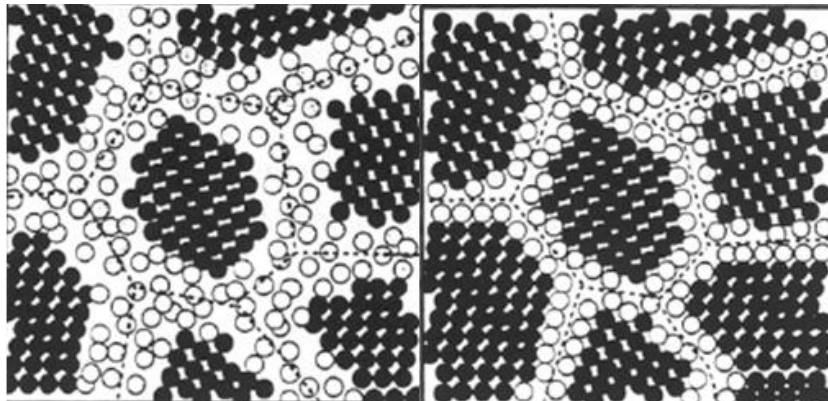
Dans la microstructure d'un matériau, deux grains adjacents ont des orientations différentes, les atomes localisés dans les joints accommodent leurs positions en répulsion avec les atomes appartenant aux grains voir figure (I-12). Ceci est une description générale d'orientation des de joints de grains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

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

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

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

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



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

### **I-9-Types des joints de grains :**

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

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

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

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

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

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

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

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

Où  $G$  : module de cisaillement.

$b$  : vecteur de Burgers.

$r_0$  : rayon de courbure de dislocation.

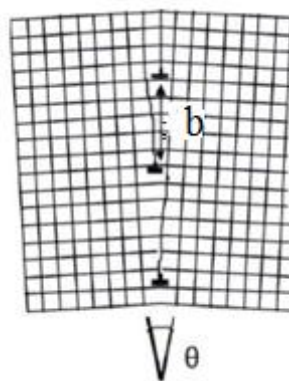
$\nu$  : le coefficient de poisson

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

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

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

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



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

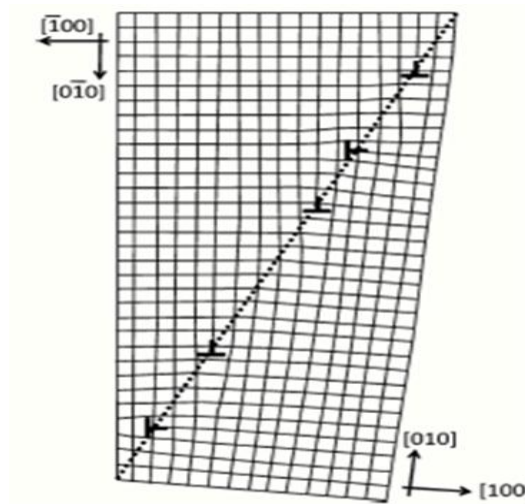


Figure I-14 : un joint à faible angle .

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

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

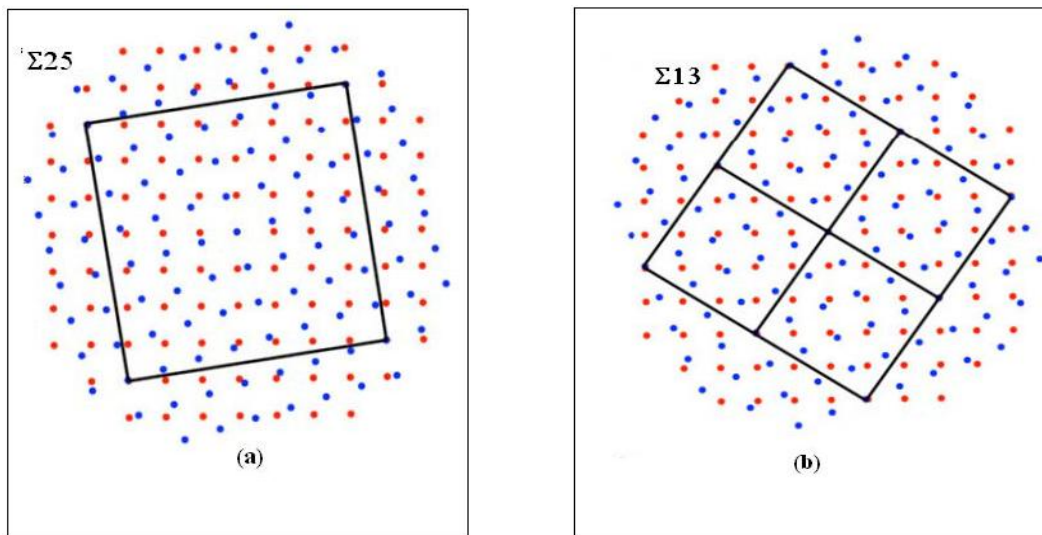


Figure I-15 : Réseau de coïncidence C.S.L (a)  $\Sigma_{25}$ , ( b)  $\Sigma_{13}$ .

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

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

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

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

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

### **I-13-Les joints de grains à grand angle**

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

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

***CHAPITRE II***  
***MODELES DE SIMULATION ET***  
***MODELISATION DE LA***  
***CROISSANCE CRISTALLINE***

## **II -1-Introduction :**

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

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

## **II- 2- Modélisation et croissance des grains :**

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

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

La vitesse de migration est définie par la relation suivante :

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

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

La pression P est proportionnelle à la courbure du joint :

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

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

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

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

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



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

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

En supposant que  $\alpha$  est une constante géométrique, on obtient après intégration :

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

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

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

De façon générale

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

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

$k$  est un constant.

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

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

### **II-3-Modèles statistiques :**

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

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

### **II-3-1 Modèle de Hillert:**

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

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

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

Où  $\alpha$  est un facteur géométrique.  $m$  et  $\gamma$  sont respectivement la mobilité et l'énergie des joints de grains.

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

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

et résout cette équation en 2 et 3 dimensions.

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

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

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

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

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

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

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

### **II-4-Modèles déterministes :**

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

#### **II-4-1Modèle de Hunderi et Ryum :**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Où  $m$  est une constante de proportionnalité.

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

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

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

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

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

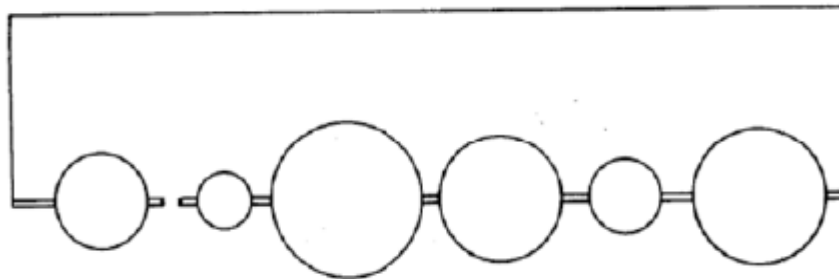
Où  $A_i$  : est l'aire du grain  $i$ .

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

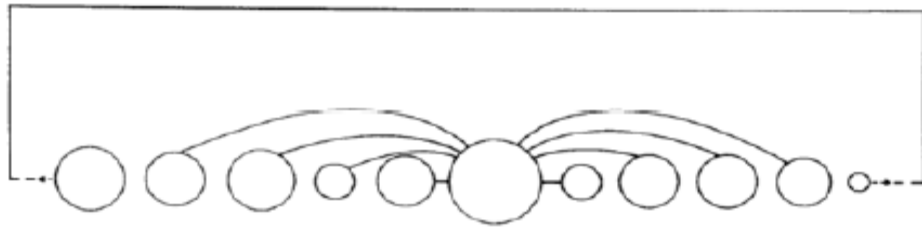
$R_i$  : est le rayon du grain  $i$ .

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

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



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



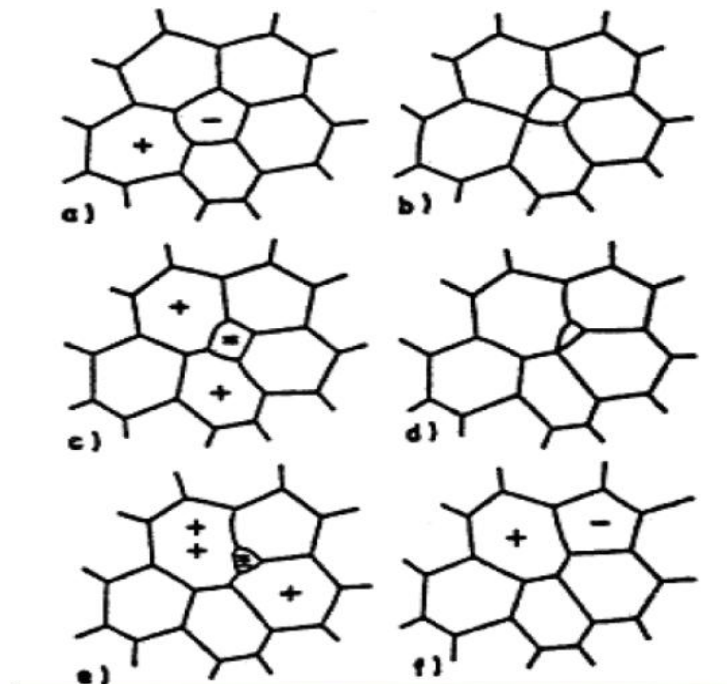
**Figure II-2 :** Modèle des bulles connectées : le grain  $i$  est connecté à nombre donné de proches voisins [21].

**II-5 -Rôle de la topologie :**

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

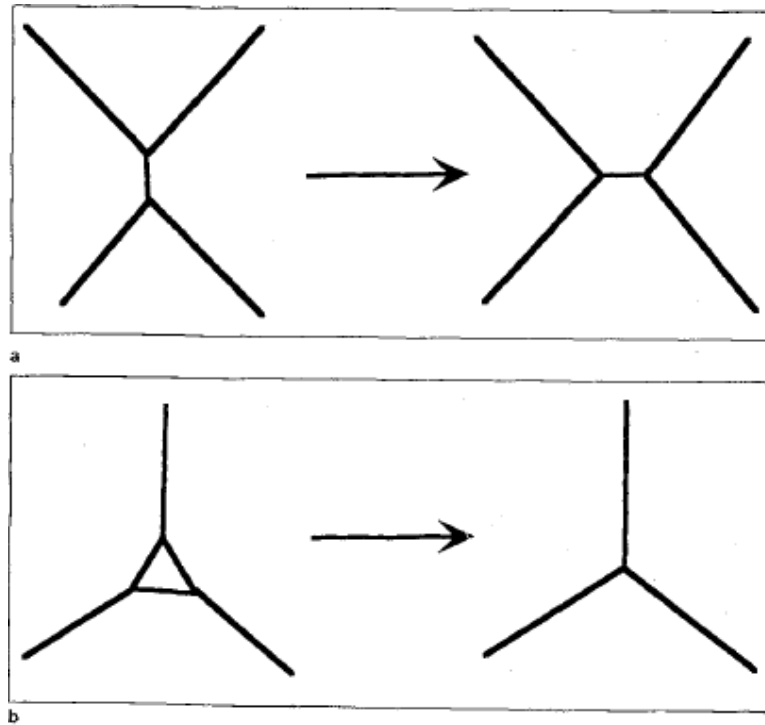
$$P-E+C = 1$$

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



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

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

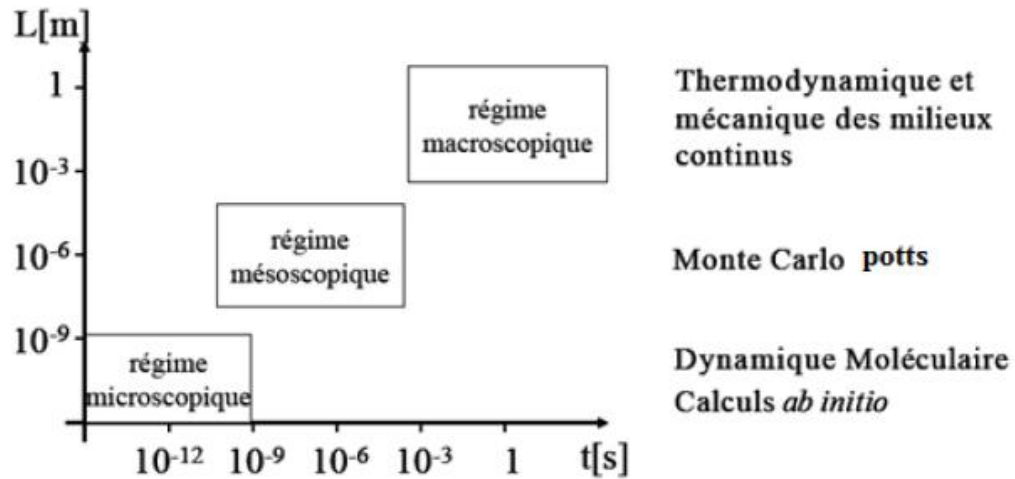


**Figure II-4** : les changements topologiques en croissance des grains (2D) [24].

### **II-6 Techniques de simulation :**

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

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



**Figure II-5** : principales techniques utilisées en simulation.

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

### **II-6-1-La dynamique moléculaire :**

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

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

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

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

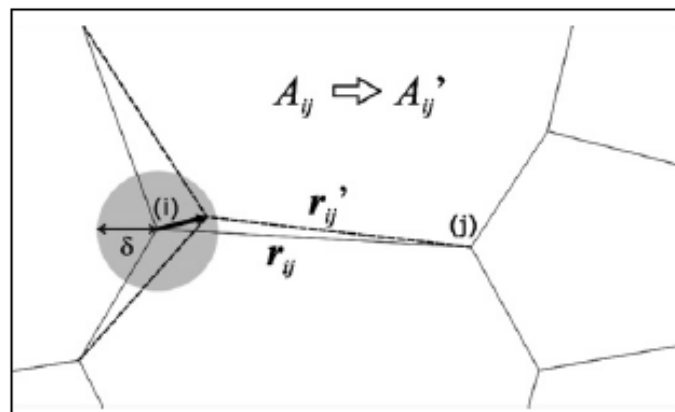
**II-6-2 modèle de vertex :**

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

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

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

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



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

**II-6-3 L'automate cellulaire :**

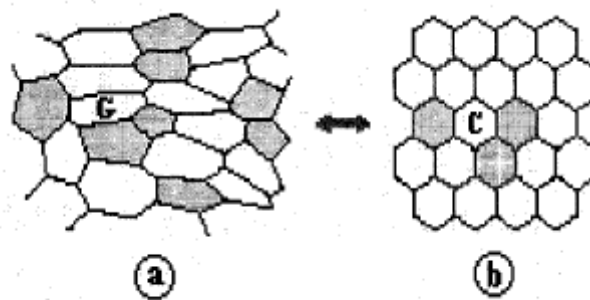
Les automates cellulaires (AC) ont été utilisés pour la première fois dans le domaine des matériaux par Hesselbarth et Gobel en 1991[29] pour modéliser la cinétique de germination



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

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

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



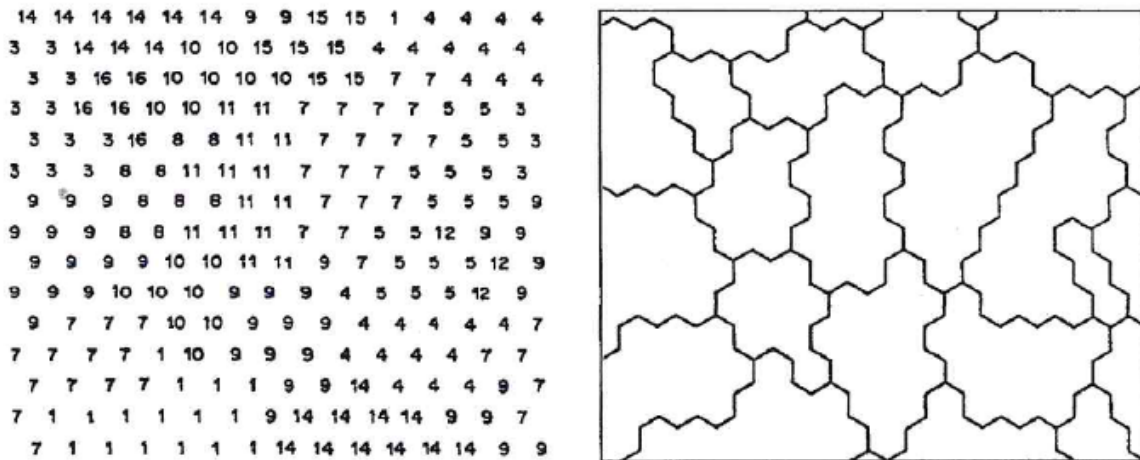
**Figure II-7 :** Représentation schématique du modèle automate cellulaire : chaque grain G du matériau (a) est mis en correspondance bijective avec une cellule C de l'automate (b) [30].

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

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

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

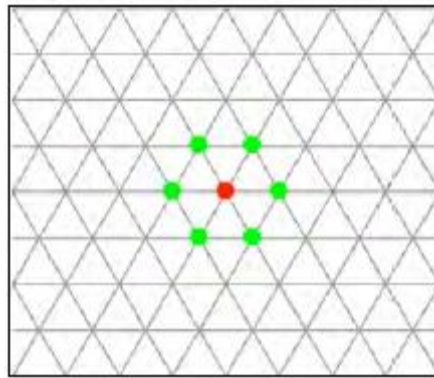
segment frontière, cette propriété du modèle de Potts le rend très polyvalent pour décrire des phénomènes grossiers Figure (II-8).



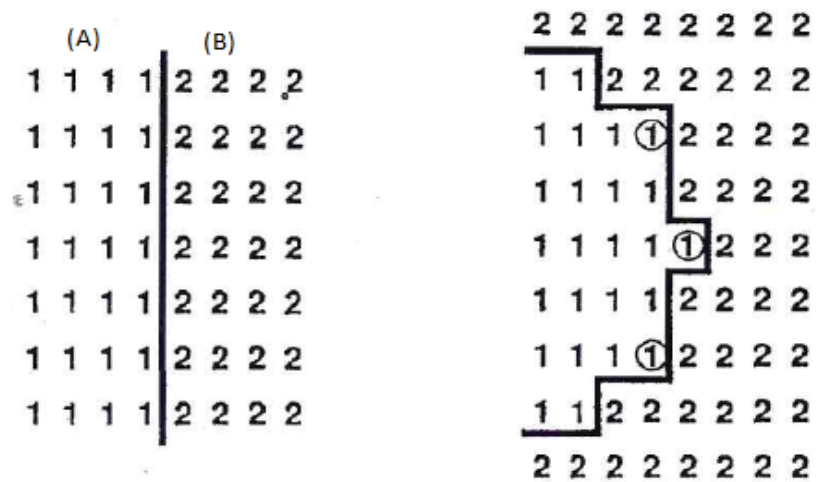
**Figure II-8 :** Cartographie des nombres généralisée aux sites dans un modèle de Potts [31].

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

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



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



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

***CHAPITRE III***  
***EVOLUTION DU NOMBRE DE***  
***GRAINS ET DE LA TAILLE***  
***MOYENNE DES GRAINS***

## *Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*

---

### **III-1- Introduction :**

Ce chapitre est consacré à la simulation de la croissance des grains dans les matériaux et l'influence du nombre d'orientation sur l'évolution de cette croissance par la méthode Monte Carlo modifiée. Cette dernière a donné un essor considérable aux simulations de l'évolution de la microstructure. Cette technique de simulation est devenue populaire et indispensable dans l'étude des propriétés de la matière.

### **III-2- Procédure de simulation :**

Dans notre travail, nous avons utilisé la technique de Monte Carlo pour simuler la croissance des grains. Cette méthode est effectuée sur un maillage de 200x200 sites représentant la microstructure bidimensionnelle. Le réseau contient donc 40000 sites distribués sur un motif hexagonal de réseau triangulaire dont ses nœuds sont appelés sites. En outre, chaque site possède 6 voisins. On associe à chaque site un numéro variant entre 1 et Q (Q est un entier) représentant le nombre d'orientation ou spin. Dans notre étude Q prend quatre valeurs différentes 50, 500, 2000, 4000 ce qui nous a permis de générer quatre matrices diverses.

Dans la matrice réelle, chaque site est décrit par les trois angles d'Euler ( $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ ). Un grain est constitué d'un ensemble de sites adjacents ayant la même valeur d'orientation. Cependant, un joint de grain sépare deux sites voisins ayant deux nombre d'orientations différentes.

Dans notre travail, nous avons utilisé le logiciel Matlab pour écrire nos propres programmes afin de pouvoir :

- Tracer les microstructures.
- Réaliser la croissance normale des grains.
- Calculer le nombre de grains et tracer la distribution de taille des grains.

### **III-3- Algorithme de croissance :**

La simulation de la croissance des grains dans les matériaux polycristallins par la méthode MC est basée principalement sur l'évolution de l'énergie potentielle des sites du réseau. Cette énergie est déterminée de l'interaction des sites avec leurs sites voisins dans le réseau. Autrement dit, la croissance des grains prend en considération l'énergie des joints de grains, elle tend à minimiser l'aire totale de ces derniers.

### *Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*

---

La simulation de la croissance correspond à une réorientation des sites basée sur la minimisation de l'énergie du système, le processus de réorientation continue jusqu'à la stabilisation du système.

Dans cette étude, nous avons généré un état initial en attribuant à chaque site un entier  $Q$ . Parmi les 40000 sites du millage, un site est tiré au hasard, ce site «  $i$  » a pour nombre caractérisant l'orientation  $Q(1)$ .

L'énergie associée à chaque réorientation est donnée par la relation :

$$E_i = J \sum_{j=1}^6 (1 - \delta_{ij}) \quad (\text{III-1})$$

Où :  $J$  est une constante d'énergie définie à une échelle d'énergie du joint de grains,

$\delta_{ij}$  est le delta Kronecker.

Soit  $E(1)$  l'énergie initiale du micro-système ( site considéré – sites voisins) calculée par la relation (III-1). Une nouvelle valeur d'orientation  $Q(2)$  attribuée au hasard au site  $i$  parmi les orientations de ses 6 proches voisins permet de calculer l'énergie  $E(2)$  considérée comme état final.

L'excès d'énergie  $\Delta E$  est donné par :

$$\Delta E = E(2) - E(1) \quad (\text{III-2})$$

Si  $\Delta E$  est négatif ou nul la tentative de réorientation est acceptée, sinon le site garde son orientation initiale.

Par contre, si l'excès d'énergie est positif, le changement d'orientation est accepté avec une probabilité  $P$ , donnée par la relation :

$$P = \exp\left(-\frac{\Delta E}{K_B T}\right) \quad (\text{III-3})$$

$K_B$  et  $T$  sont la constante de Boltzman et la température en degré Kelvin respectivement.

Pour accepter la nouvelle configuration, on tire au hasard un nombre entre 0 et 1 : s'il est inférieur à la probabilité  $P$ , la réorientation est acceptée, sinon elle est rejetée.

Le temps de calcul dans la simulation MC est mesuré en pas MONTE CARLO (MCS = MONTE CARLO Step), sachant qu'un pas MONTE CARLO est atteint lorsque tous les sites du millage, soit 200x200 sites, ont subi une tentative de réorientation.

### Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains

---

Les étapes de calcul sont résumées sur l'organigramme suivant :

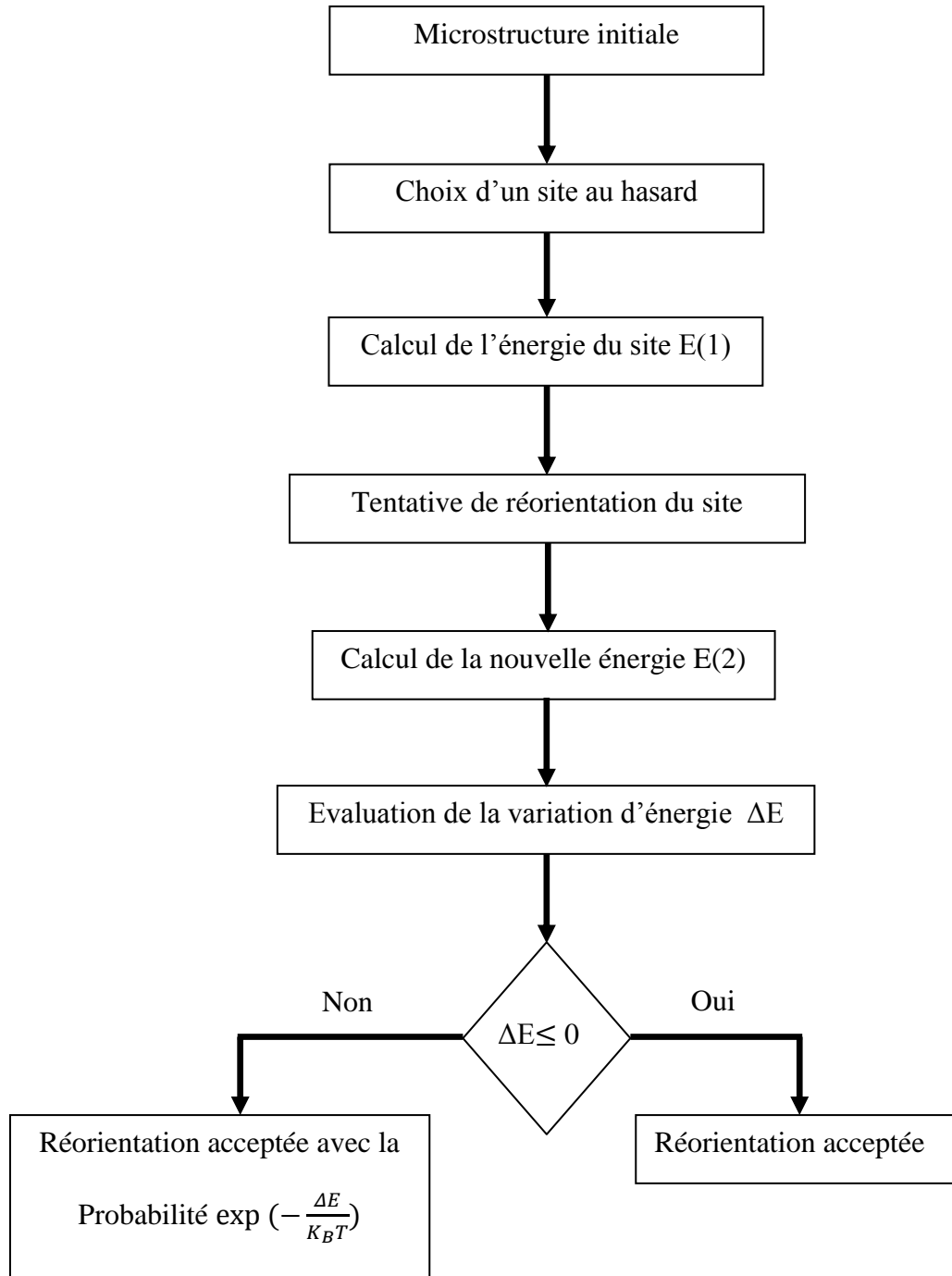


Figure III-3 : Organigramme de la simulation de la croissance cristalline par la méthode MC.

### *Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*

---

#### **III-4- Résultats et discussion :**

##### **III-4- 1 -Matrices initiales :**

Dans notre travail, à l'aide du langage Matlab, nous avons généralisé plusieurs matrices avec des nombres d'orientations différents 50, 500, 2000, 4000 orientations que nous noterons  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$  respectivement, afin de pouvoir suivre l'évolution de la croissance cristalline et de pouvoir déterminer l'impact de ce paramètre sur la croissance.

Le nombre des amas obtenus dans chacune des matrices généralisées  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$  est 36935, 38990, 39159, 39176 respectivement. Il croît avec le nombre d'orientations car la probabilité de trouver deux sites voisins de même orientation diminue lorsque le nombre des orientations augmente et vis versa. La taille moyenne de ces amas dans les quatre matrices est de 1.06, 1.01, 1, 1 sites respectivement. Ce qu'il signifie que la majorité des sites voisins sont d'orientations différentes, ainsi, on ne peut pas parler de grains.

Afin d'obtenir des microstructures avec des grains bien clairs, nous subissons les matrices précédentes à une croissance pendant 20 mcs. Les sites voisins distribués sur un réseau hexagonal, ayant le même chiffre représente le même grain. Une telle indexation des sites permet de calculer le nombre total des grains de chaque matrice. A la fin, nous obtenons 1832, 2090, 2142, 2109 grains dans  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$  respectivement. Ces matrices étant considérées comme matrices initiales (à 0 mcs), à partir de quelles nous allons étudier la croissance des grains. A cette étape, les grains de petits volumes envahissent tout l'espace des matrices avec une distribution de taille bien homogène comme le montre les figures (III-4, III-5, III-6, III-7) à 0 mcs. Le tableau (III-1) récapitule les résultats obtenus.

Matrice	$M_1$	$M_2$	$M_3$	$M_4$
Nombre d'orientations	50	500	2000	4000
Nombre des amas dans les matrices généralisées	36935	38990	39159	39176
Nombre de grains dans les matrices considérées initiales	1832	2090	2109	2142

**Tableau III -1:** Les nombres des grains à partir de nombre d'orientations.



### **Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains**

Les tableaux (III -2, III -3, III -4, III -5) résume l'évolution du nombre de grains dans les matrices  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$  au cours de la croissance avec un relè de données chaque 200 mcs. Il est bien clair que le nombre des grains dans les quatre matrices diminue dans le temps, cela explique que certains grains croissent au dépend d'autres parfois jusqu'à leur disparition.

Temps (mcs)	0	200	400	600	800	1000
Nombre de grains	1832	270	141	99	74	53

**Tableau III -2 :** Evolution du nombre de grains dans la matrice  $M_1$  (50 orientations).

Temps (mcs)	0	200	400	600	800	1000
Nombre de grains	2090	321	168	112	87	73

**Tableau III-3 :** Evolution du nombre de grains dans la matrice  $M_2$  (500 orientations).

Temps (mcs)	0	200	400	600	800	1000
Nombre de grains	2109	355	183	114	89	68

**Tableau III -4 :** Evolution du nombre de grains dans la matrice  $M_3$  (2000 orientations).

Temps (mcs)	0	200	400	600	800	1000
Nombre de grains	2142	373	208	117	96	81

**Tableau III -5 :** Evolution du nombre de grains dans la matrice  $M_4$  (4000 orientations).

#### **III-4- 2. Evolution de la croissance :**

Dans cette simulation consacrée à la croissance normale des grains, nous avons suivi l'évolution des matrices  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$  dont leurs données étaient stockées chaque 20 mcs. Pour faciliter l'étude de l'évolution de la croissance, nous avons utilisé un code de couleur, des cercles et des cadres sur les microstructures afin de pouvoir suivre certains grains dans les microstructures.

Dans les quatre matrices, nous avons suivi l'évolution de deux types de grains au cours de la croissance. Nous avons marqué « grain1 » les grains ayant 6 voisins, autrement dit, 6 joints de grains. Dans le deuxième, type les grains possèdent plus de 6 joints de grains. Ils sont notés « grain2 ».

Le poursuit des grains « grain1 » dans les matrices  $M_1$  et  $M_2$  (à 50 et 500 orientations) montre que ces grains croissent jusqu'à 400 mcs. A cette étape, ils gardent toujours 6 grains voisins. Après 600 mcs, le nombre de joints de grains diminue, ce qui cause une décroissance continue des grains (figure III-4, III-5).

### ***Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains***

---

Dans la matrice  $M_3$  (2000 orientations), le grain1 décroît à partir de 200 mcs jusqu'à disparition à  $t = 600$  mcs (figure III-6).

Dans la matrice,  $M_4$  (4000 orientations) contrairement aux autres matrices, le grain 1 commence à croître entre 200 mcs et 400 mcs, puis il commence à décroître après 400 mcs malgré qu'il possède 6 voisins. Cette décroissance peut être due à la courbure des joints de grains et aussi à la taille de ces voisins, car il acquiert des voisins plus gros que lui (figure III-7).

Le dépouillement des microstructures montre que cette différences de comportement dans la croissance des grains « grain1 » est due à la forme des joints des grains, car nous remarquons que les joint de grains se déplacent vers leur centre de courbure [7].

Dans le cas des grains notés « grain2 », dont le nombre de voisins est supérieure à 6, nous remarquons qu'ils continuent à croître jusqu'à 1000 mcs dans toutes les matrices car ils ont un entourage favorable à la croissance.

Il est important de noter que la croissance ne se fait pas de la même manière à travers tous les joints, les joints courbés sont plus mobiles que les joint ayant un forme de segment, comme le montre le grain2 de la matrice  $M_4$  entre 600 et 1000 mcs (indiqué par des flèches).

#### **III-4- 3 - Evolution globale des microstructures :**

L'évolution globale des microstructures sur les figures (III-4, III-5, III-6, III-7) montrent qu'il y a une croissance de certains grains au détriment de leurs voisins.

Afin de pouvoir donner un aspect quantitatif à cette étude, nous avons conçu un programme permettant de calculer le nombre de grains dans les matrices et suivre leurs évolutions dans le temps, ce qu'il nous a permis de tracer la courbe schématisée sur la figure (III-8).

La figure (III-8) montre que le nombre de grains diminue rapidement dans les quatre matrices, cette diminution est due à la disparition d'un nombre important de grains comme le montre les tableaux (III -2, III -3, III -4, III -5) car on passe 1832, 2090, 2109, 2142 à 270, 321, 355, 373, dans les matrices  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$  respectivement, en 200 mcs seulement. Pendant les 200 mcs suivant le nombre de grains continue de baisser. Entre 400 et 600 mcs, les grains continuent à croître mais d'une manière plus lente que précédemment. Au delà de 600 mcs, la microstructure tend vers une stabilité où le nombre de grains devient pratiquement

### *Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*

---

constant dans l'ensemble des matrices  $M_1, M_2, M_3, M_4$  où on note 53, 63, 73, 81 grains respectivement, à ce stade les gros grains envahissent les microstructures.

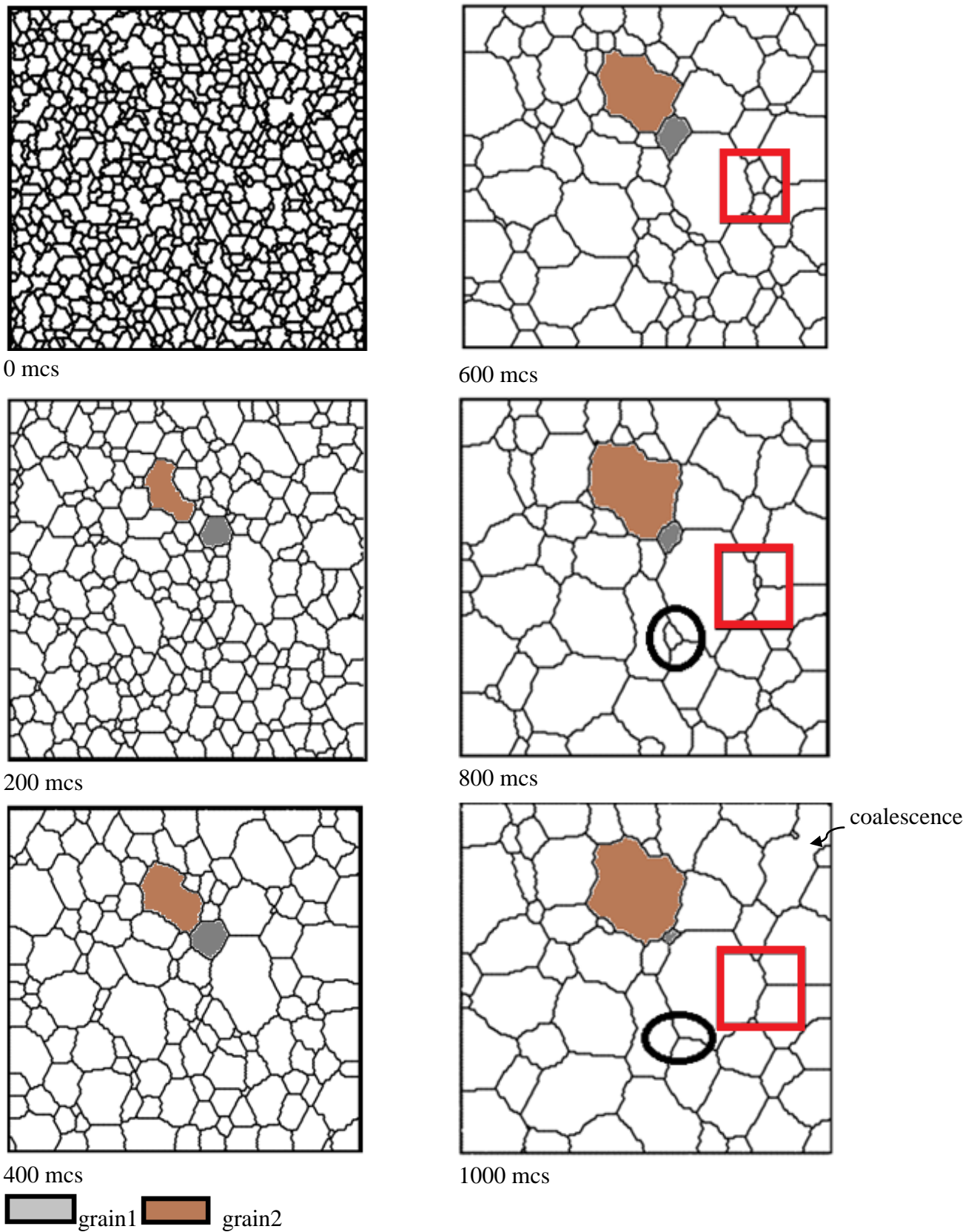
Le suivi des microstructures montre que les joints de grains disparaissent de deux manières si on prend en considération l'aspect topologique :

- 1- le mouvement des points triples : les zones cernées par des cercles montrent que leurs grains peuvent disparaître lorsque plusieurs points triples se rencontrent pour former un seul point triple.
- 2- le changement de voisins ; dans ce cas deux points triples se rencontrent le long d'un joint. Puis ils séparent perpendiculaire comme il est illustré sur les zones en cadrées en rouge [16].

La figure (III -5) montre que le nombre d'orientations avait un impact sur la croissance des grains mais d'une manière moins pertinente comme nous l'avons prévu. Parmi les paramètres qui peuvent être la cause de ces résultats l'apparition de problème de la coalescence des grains. Cette dernière se produit lorsque deux grains de même orientation sont en contact, le joint qui les sépare disparaît et les deux grains deviennent un seul grain, comme le montre nettement la figure (III -4) à 1000 mcs. Afin d'éviter ce problème, il faut réindexer les matrices de sorte que les grains ayant la même orientation doivent prendre des indices différents.

**Remarque :** Nous avons commencé de nouveaux calculs mais malheureusement le temps était assez court pour améliorer et réexécuter les programmes.

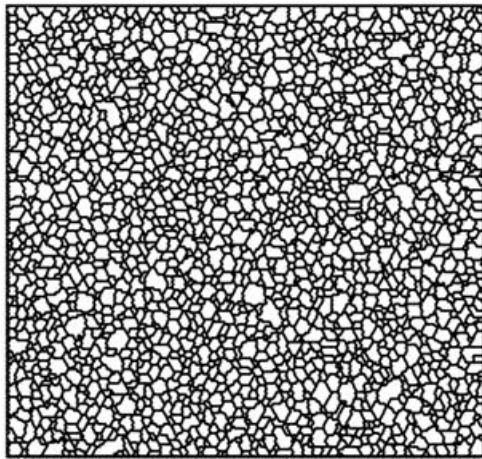
*Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*



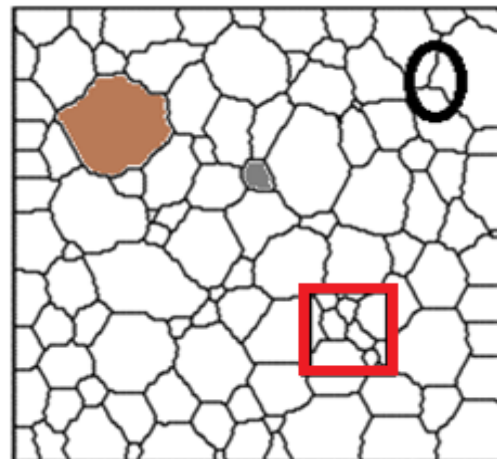
**Figure III-4 :** Evolution de la microstructure de croissance de la matrice  $M_1$  (50 Orientation ).

*Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*

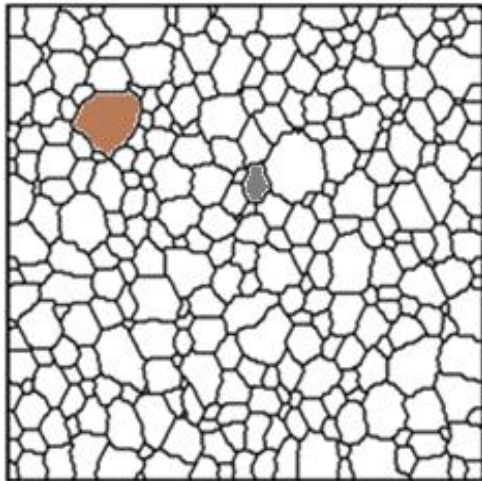
---



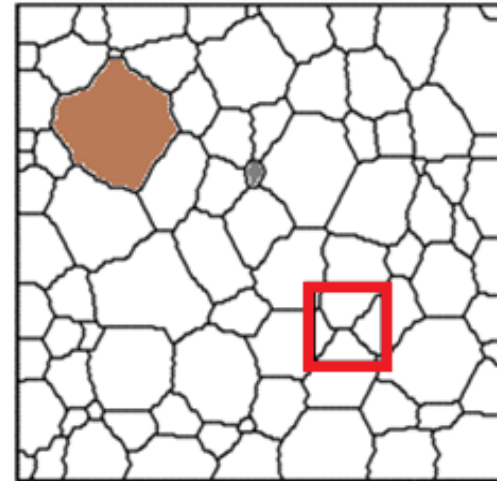
0mcs



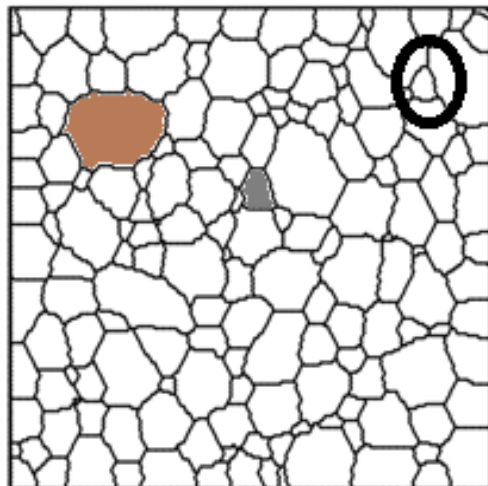
600mcs



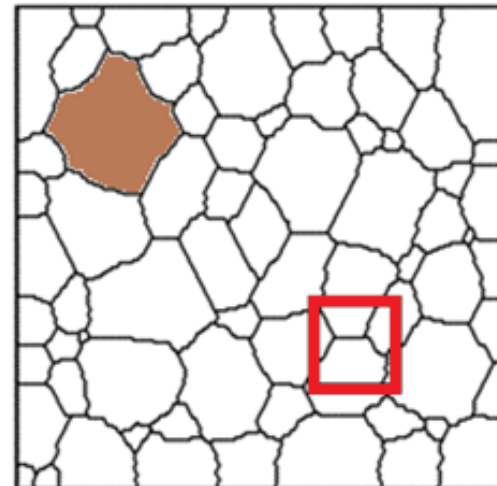
200mcs



800mcs



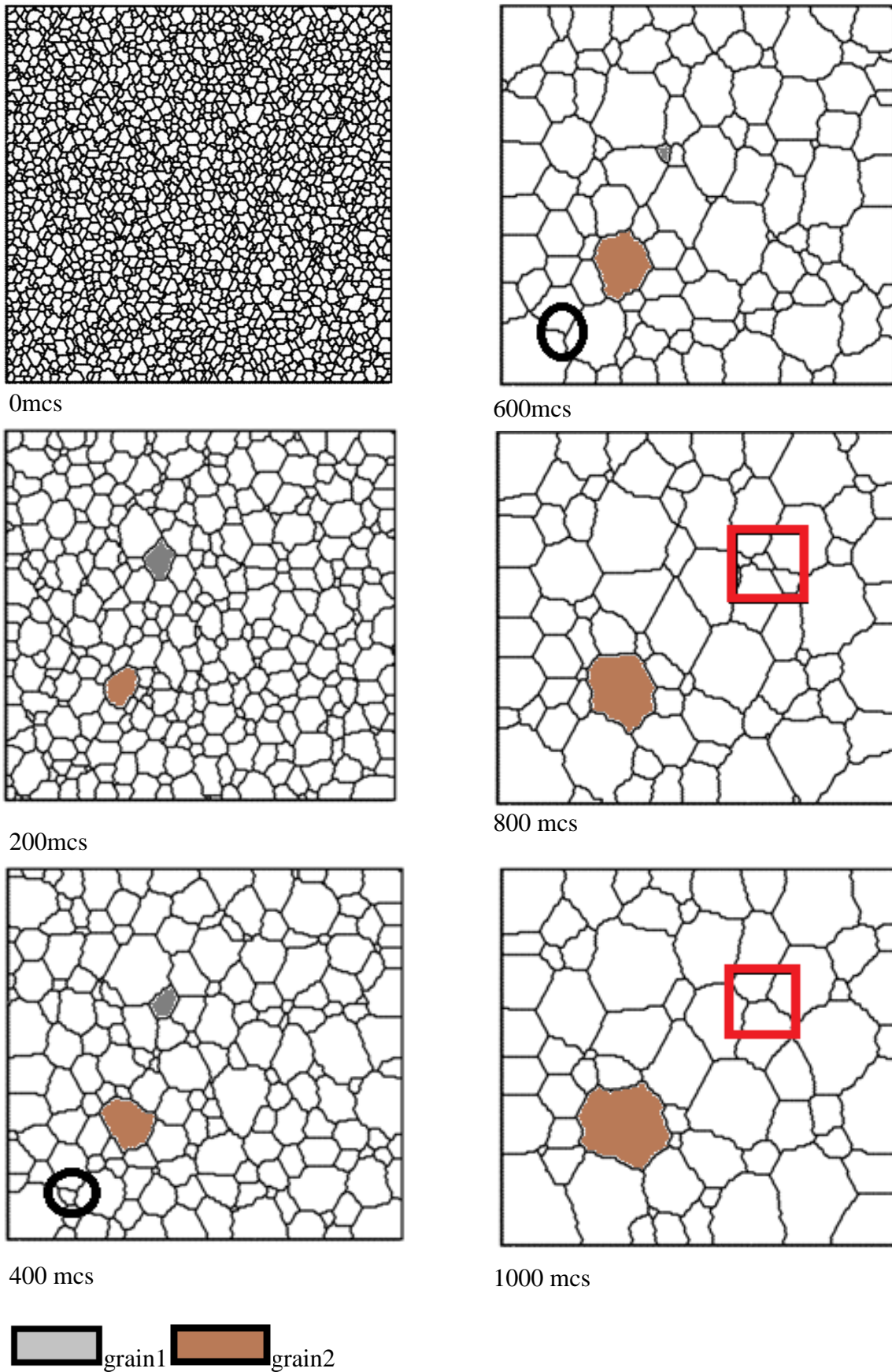
400mcs



1000mcs

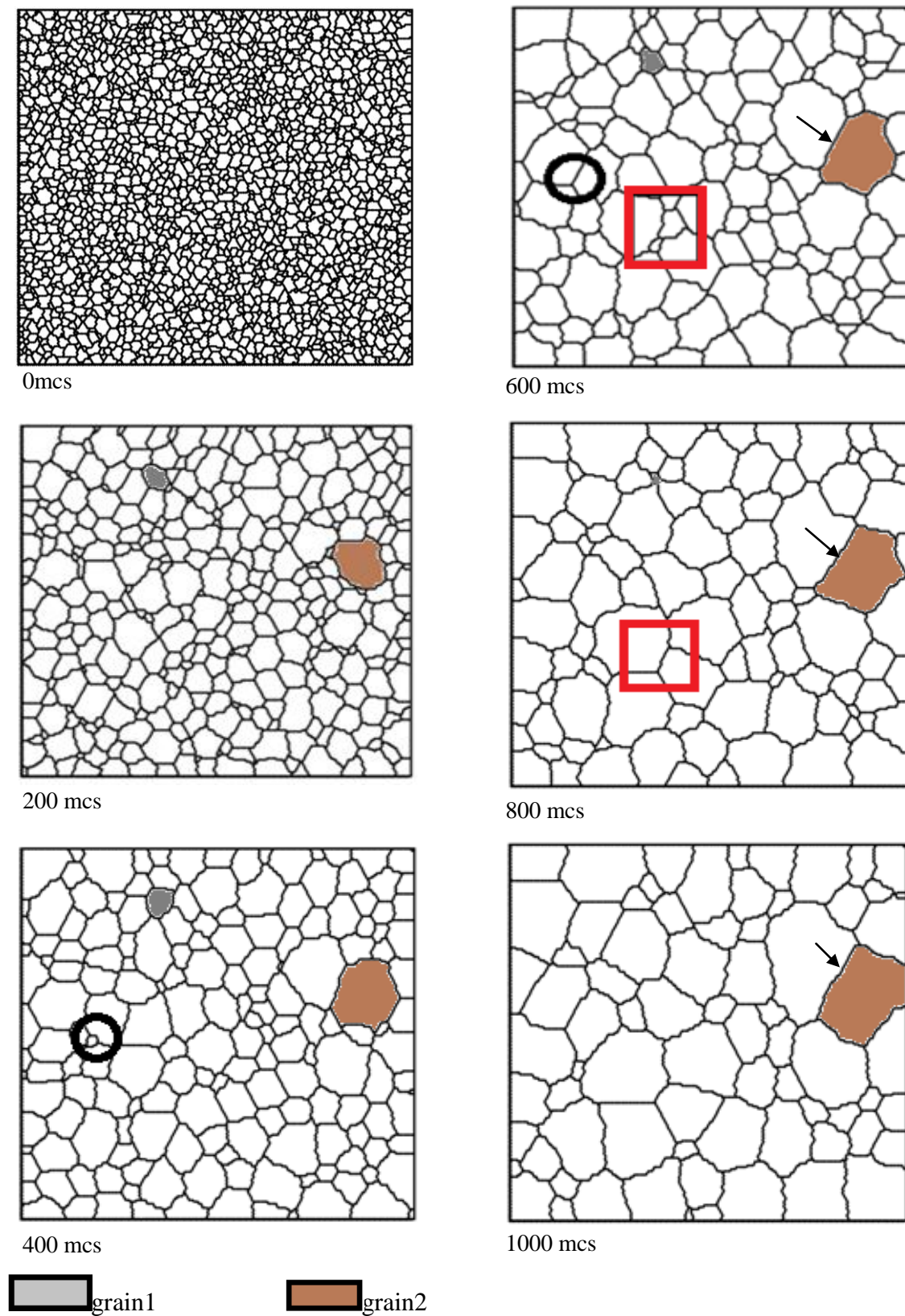


**Figure III-5** : Evolution de la microstructure de croissance de la matrice  $M_2$  (500Orientation )

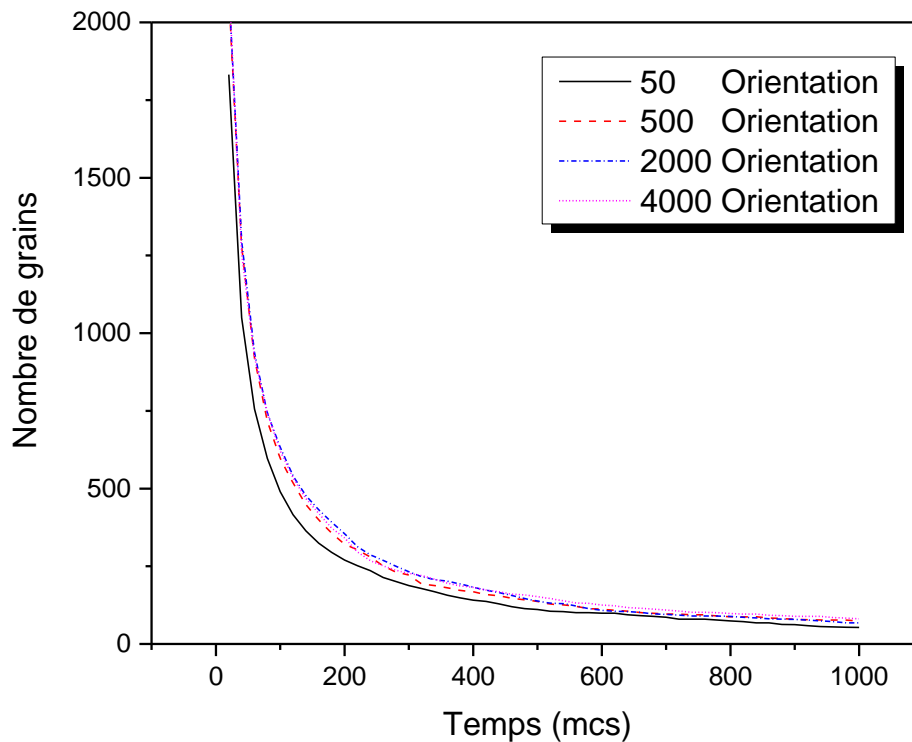


**Figure III-6** : Evolution de la microstructure de croissance de la matrice  $M_3$  (2000Orientation)

*Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*



**Figure III-7** : Evolution de la microstructure de croissance de la matrice  $M_4$  (4000 Orientation).



**Figure III-8 :** Evolution de nombre de grains au cours de la croissance à différentes orientations.

#### **III-4- 4 -L'influence de l'effet de taille sur la croissance des grains :**

Nous avons suivi l'évolution de la croissance et contrôlé son comportement par l'effet de taille en traçant les distributions de tailles, après caractérisation des matrices  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$  par indexation des sites. Les figures (III-9, III-10, III-11, III-12) représentant ces distributions de tailles des grains au cours de la croissance montrent que :

- à 0 mcs : la distribution de tailles montre que les classes de tailles ayant 0 à 40 sites sont très importantes dans les 4 matrices. Elles représentent plus de trois quart du nombre total des grains dans les matrices  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$ . Les tailles moyennes des grains dans ces dernières à 0 mcs sont respectivement  $\langle t_{M_1} \rangle = 21.40$  sites,  $\langle t_{M_2} \rangle = 18.76$  sites,  $\langle t_{M_3} \rangle = 18.60$  sites et  $\langle t_{M_4} \rangle = 18.31$  sites. Nous remarquons que toutes ces tailles appartiennent à la fourchette [0 - 40 sites]. D'une autre part, ces tailles moyennes sont trop proches à l'exception de celle de la matrice  $M_1$  (50 orientations) qui est un peu supérieure à toutes les autres valeurs. En se rapportant aux histogrammes à 0 mcs, nous trouvons que cette matrice possède des grains ayant des tailles entre 100 et 160 sites, alors que les tailles des grains dans les trois autres



### *Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*

---

matrices ne dépassent pas les 100 sites. En y retournant à la microstructure initiale (0mcs), nous pouvons remarquer que d'après la forme de certains grains, il y a une disparition brusque de certains joints de grains due à la rencontre des grains de même orientation provoquent le phénomène de coalescence.

D'après les figures (III-9, III-10, III-11, III-12), nous déduisons que les classe de tailles des grains évoluent dans le temps et changent régulièrement.

- à 200 mcs : les classes de tailles s'étalent comme suit : la matrice  $M_1$  de 0 à 1000 sites,  $M_2$  de 0 à 600 sites,  $M_3$  de 0 à 440 sites et  $M_4$  de 0 à 600 sites. La majorité des grains prennent une taille entre 0 et 200 sites dont les tailles moyennes des matrices 145.73 sites, 122.51 sites, 120.74 sites et 115.30 sites en faites partie. En revanche, il y a une minorité de grains qui croît excessivement.

- à 400 mcs : à cette étape les classes de taille s'élargissent toujours, elles atteignent les 1000 sites dans les matrices  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$  alors que dans la matrice  $M_1$  on trouve un grain de taille supérieure à 1500 sites. Les tailles moyennes des matrices ( $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$ ) sont 280.03 sites, 234.75 sites ,225.41 sites et 216.60 sites respectivement, ces tailles appartiennent à la fourchette des tailles de grains les plus fréquents dans les matrices.

-à 600 mcs : nous remarquons l'apparition de nouvelles classes de tailles entre 1000 et 2300 sites dans la matrice  $M_1$  et entre 800 et 1500 sites dans les autres, alors que la majorité des grains sont de tailles entre 0 et 400 sites dont les tailles moyennes des matrices 353.19 sites, 346.39 sites, 316.13 sites y appartiennent.

- à 800 mcs : les distributions de tailles évoluent toujours, mais cette fois-ci d'une manière plus lente que précédemment, car il y a seulement quelques nouvelles classes de tailles qui apparaissent par rapport aux temps antérieurs.

Les tailles moyennes sont : 552.17 sites, 455.86 sites, 441.22 sites et 412.67 sites. A cette étape de la croissance, la distribution de tailles évolue vers des classes de grandes tailles [32].

- à 1000 mcs : nous n'observons pas une variation rapide des classes de tailles, ces dernières prennent de grandes valeurs par rapport au volume total de la matrice. Les tailles moyennes des quatre matrices à cette étape sont : 753.92 sites, 544.31 sites, 553.143 sites et 490.09 sites. Lorsqu'on compare ces valeurs avec les classes de tailles de cet état final qui sont entre 1500 et 3000 sites, on remarque que les grains sont largement gros par rapport à la taille moyenne de chaque matrice.

### *Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*

---

Lorsqu'on regarde les grains dans les microstructures sur les figures (III-9, III-10, III-11, III-12) et les distributions de tailles à l'état final, on trouve que les grains prennent presque les mêmes tailles et que la croissance des ces grains tend à être stable par rapport à 800 mcs.

Maintenant, si on poursuit l'évolution des distributions de tailles dans une même matrice de 0 mcs à 1000 mcs, on remarque que certaines classes restent le long de la croissance par rapport aux autres classes comme exemple la classe à 200 sites entre 400 mcs et 1000 mcs.

En revanche, quand on poursuit l'évolution de cette classe dans le temps, on trouve que son nombre de grains diminue d'une manière très marquante, comme dans le cas des classes (0 - 40 sites) pendant les 200 mcs premiers. Vu qu'on a une conservation de la matière durant toute la croissance la disparition rapide de ces grains met en évidence un grossissement rapide des autres grains surtout aux premiers stades de la croissance.

Autrement dit, au début de la croissance, le nombre de grains qui disparaissent est élevé. Dans les états avancés de la croissance, la distribution des tailles de grains évolue vers les classes des grandes tailles où elle se rapproche de la stabilité.

Lors de la croissance, nous observons l'étalement de tailles vers les classes de tailles plus importantes, avec un maintien des petites classes de tailles. Le nombre des petits grains n'est plus important, indiquant que la matrice va atteindre le palier de stabilité.

La courbe schématisée sur la figure (III-13) représente l'évolution de la taille moyenne des grains au cours de la croissance dans les 4 matrices ayant des nombres d'orientations différents. Lorsqu'on augmente le temps de calcul, on observe que la courbe de la taille moyenne dans la matrice à 50 orientations augmente plus rapidement que les autres matrices à 500, 2000 et 4000 orientations. Le tableau (III -6) résume l'évolution du taille moyenne de grains dans ces matrices  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$  au cours de la croissance avec une relevé de données chaque 200 mcs. Lorsque le nombre d'orientations est petit, il conduit à une augmentation des diamètres des grains considérable. Dans le cas contraire, la taille moyenne des grains (diamètre) s'accroît plus lentement que le nombre d'orientations augmente.

L'explication donnée à un tel résultat est que lorsque le nombre d'orientations est faible la probabilité de trouver un voisinage adéquat à la croissance est plus importante.

D'une autre part, nous remarquons que dans le cas des quatre matrices la croissance est restée normale, sans avoir déclenchement de la croissance anormale, ce qui conduit à dire qu'il existe d'autres paramètres qui peuvent provoquer une croissance sélective de certains grains

### *Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*

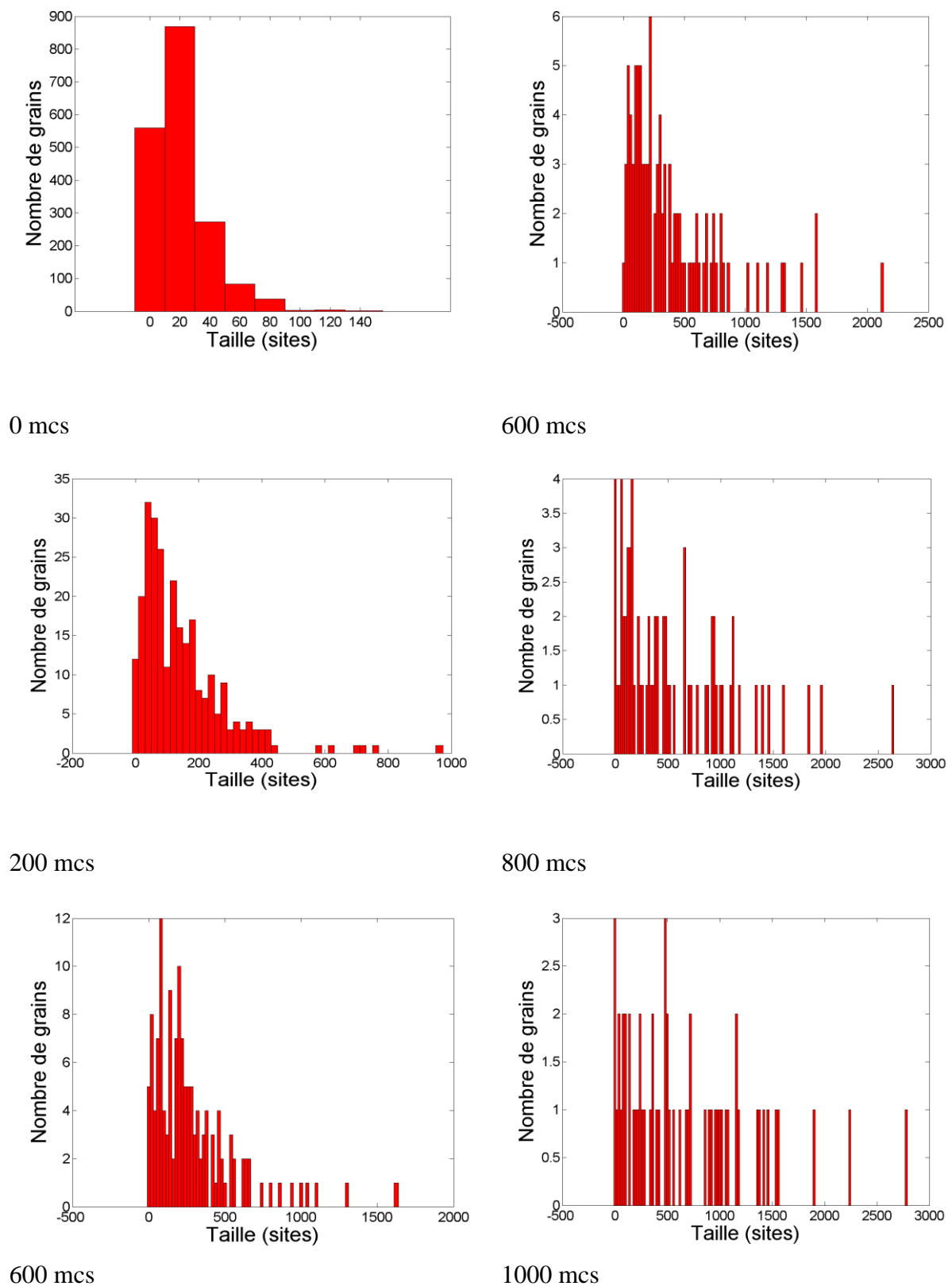
---

au dépend des autres. On ne conclut que ce paramètre d'orientations à une influence sur l'évolution des microstructures et la cinétique de la croissance.

Matrice	M <sub>1</sub>	M <sub>2</sub>	M <sub>3</sub>	M <sub>4</sub>
Temps (mcs)	Taille moyenne (sites)			
0	21.41	18.77	18.59	18.31
200	145.73	122.75	120.74	115.30
400	280.03	234.75	225.41	216.59
600	400.04	353.19	346.39	316.16
800	552.17	455.86	441.22	412.67
1000mcs	753.92	544.50	535.13	490.05

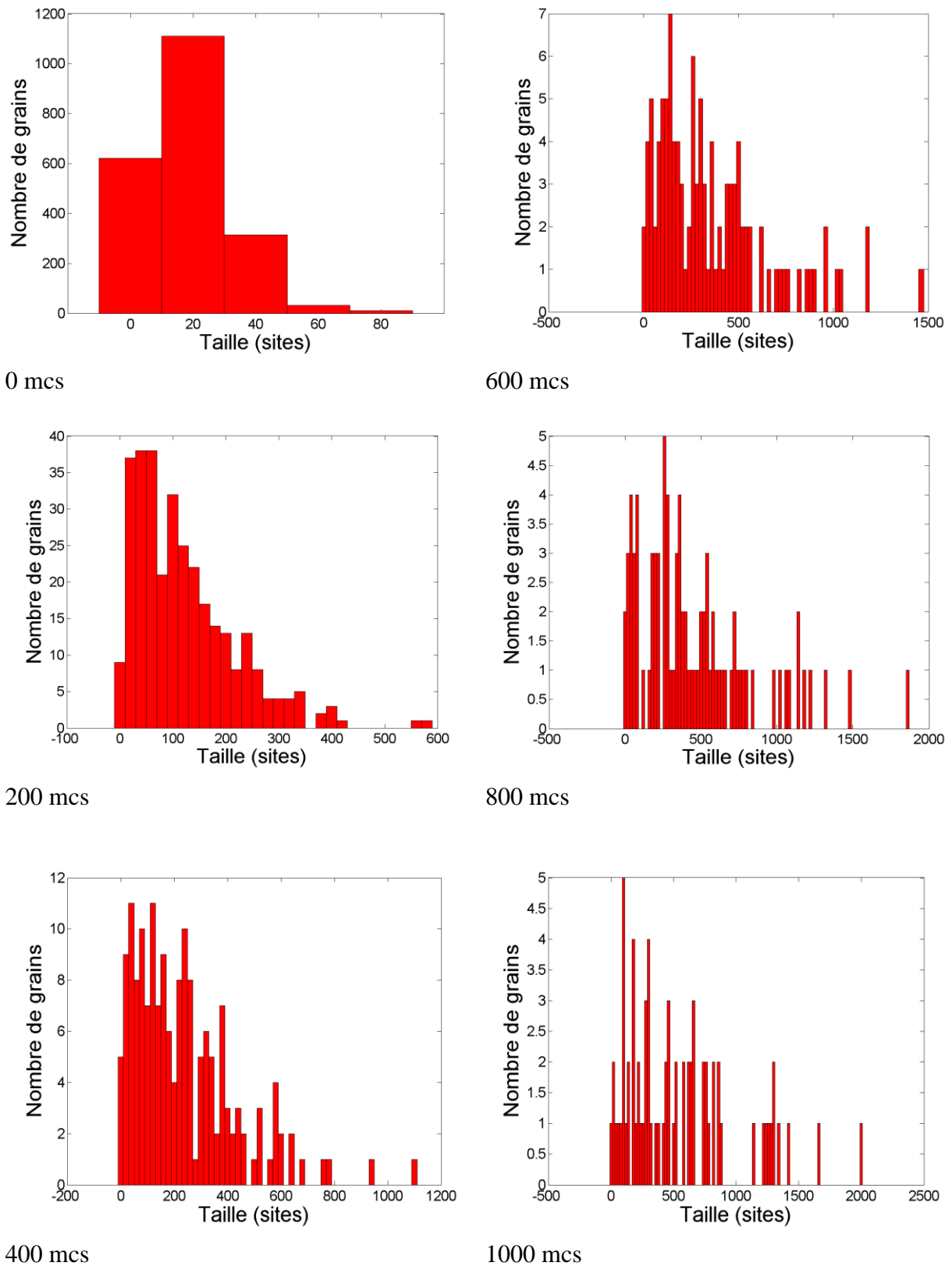
**Tableau III -6** : Evolution de la taille moyenne des grains dans les matrices M<sub>1</sub>, M<sub>2</sub>, M<sub>3</sub>, M<sub>4</sub>.

## *Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*



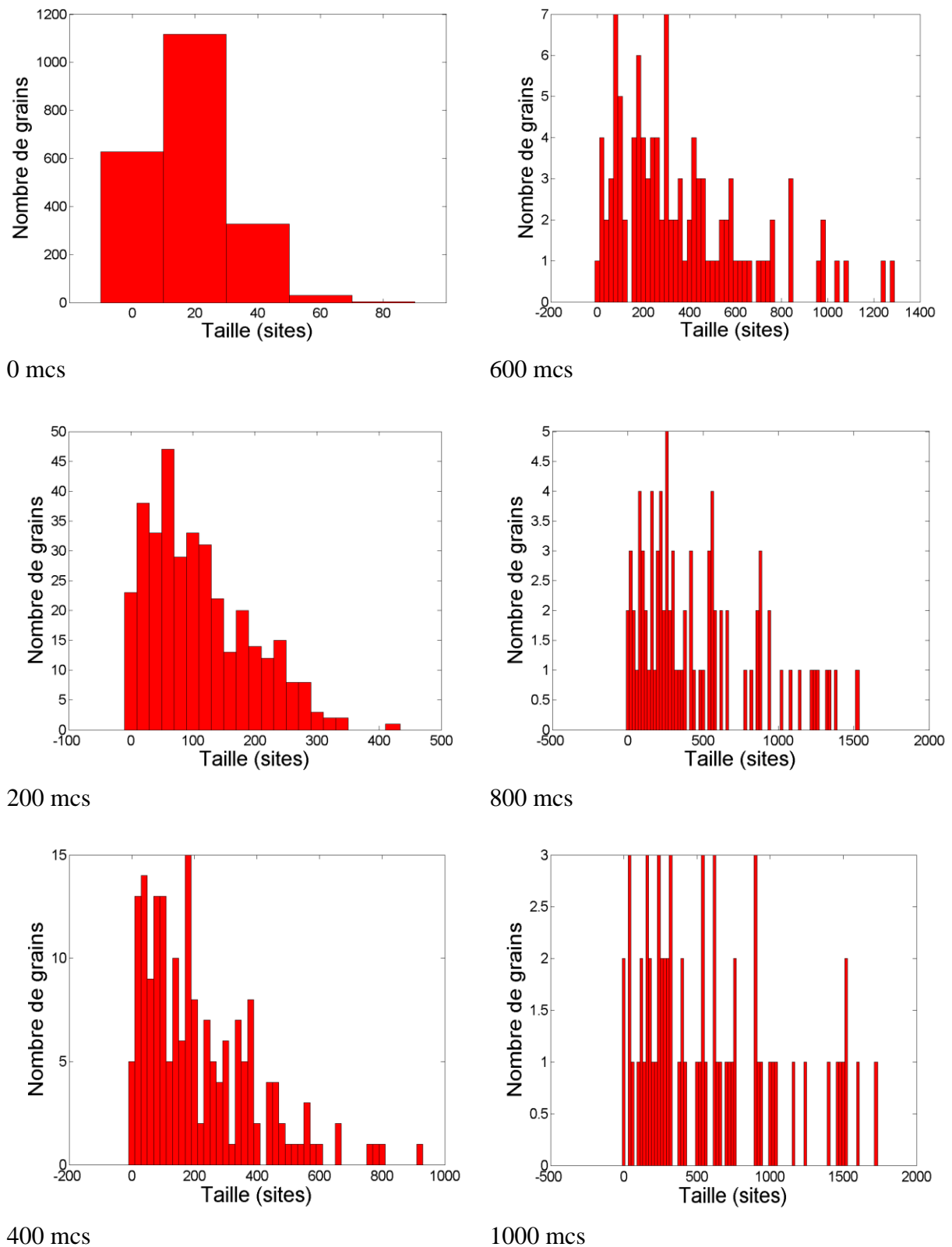
**Figure III-9 :** Evolution de la distribution des tailles de grains dans la matrice  $M_1$  à 50 orientations au cours de l'évolution de la croissance.

### *Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*



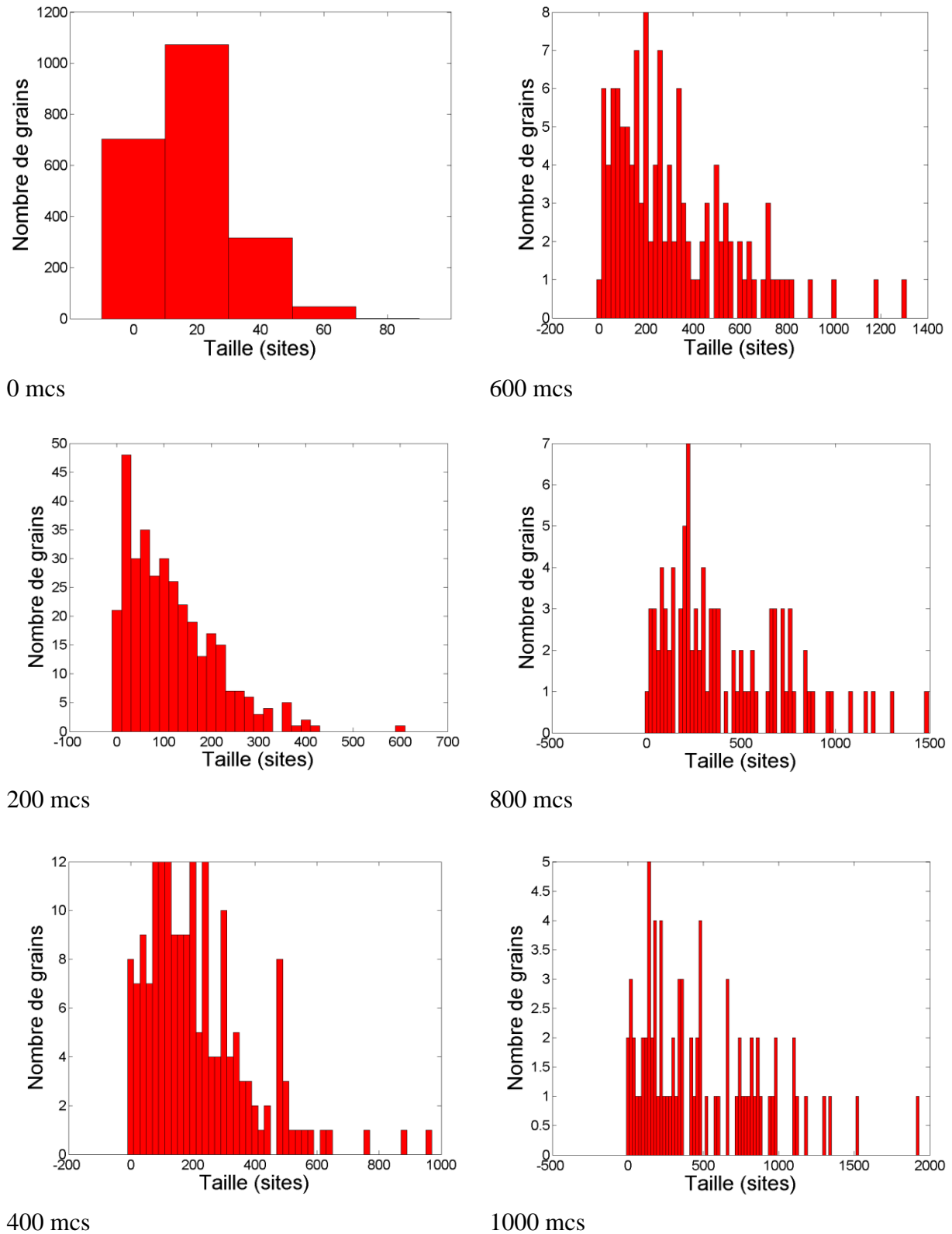
**Figure III-10 :** Evolution de la distribution des tailles de grains dans la matrice  $M_2$  à 500 orientation au cours de l'évolution de la croissance.

### *Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*



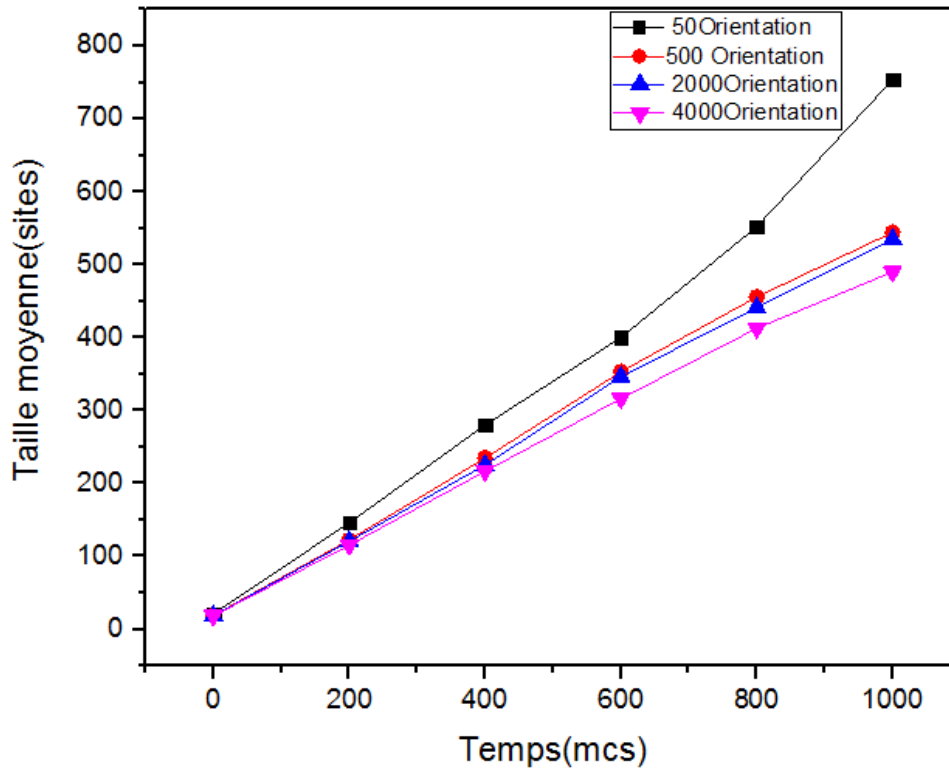
**Figure III-11 :** Evolution de la distribution des tailles de grains dans la matrice  $M_3$  à 2000 orientation au cours de l'évolution de la croissance.

*Chapitre III : Evolution du nombre de grains et de la taille moyenne des grains*



**Figure III-12 :** Evolution de la distribution des tailles de grains dans la matrice  $M_4$  à 4000

orientation au cours de l'évolution de la croissance.



**Figure III-13** : l'évolution de la taille moyenne des grains au cours de la croissance dans les matrices à 50,500,2000,4000 orientation au cours de croissance.



*Conclusion*  
*Générale*

### *CONCLUSION*

Le travail présenté dans ce mémoire a pour objectif l'étude de la croissance des grains en terme de cinétique d'évolution microstructurale. La maîtrise de la microstructure, pour l'optimisation des propriétés des matériaux industriels, nécessite la compréhension des différents phénomènes physico-chimiques qui régissent les étapes des processus de recristallisation et de la croissance des grains après la mise en forme « laminage à froid ».

Les propriétés et la structure que le métal possédait avant la déformation, nécessite un apport d'énergie pour les restaurer après traitements thermiques et mécaniques. Ces derniers induisent des processus de relaxation de la microstructure sous forme de restauration, recristallisation et croissance. Les processus précédents ne peuvent se produire sans la participation des défauts cristallins, parmi les joints de grains. Pendant la restauration, il n'y a pas de création de nouveaux joints de grains mais par contre une réorganisation de certains défauts tels les dislocations. Le phénomène de croissance se déclenche une fois les germes, apparaissant lors de la recristallisation, croissent et deviennent en contact. Ce qui induit un mouvement de joints de grains pour minimiser leur air et par conséquent, minimiser l'énergie totale du matériau.

Plusieurs modèles ont été proposés afin de simuler la croissance cristalline. Ces modèles peuvent être classés en deux catégories : modèles statistiques et modèles déterministes. Parmi les techniques utilisées pour la simulation de la croissance de grains nous citons : le modèle de vertex, les automates cellulaires, la dynamique moléculaire et la méthode Monté Carlo.

Dans notre étude, nous avons utilisé pour l'étude de la croissance la méthode de simulation Monte Carlo basée sur le modèle de Potts. Cette technique reste l'un des meilleurs moyens dans ce type de simulation, car elle permet d'étudier et de prédire le comportement de la croissance au cours du temps. Elle est basée sur le choix aléatoire des sites.

Il faut noter que le temps de calcul dans cette technique est un temps virtuel connu sous le nom de Monte Carlo Step (mcs).

Dans notre travail, nous avons généré des matrices avec des nombres d'orientations différents (50, 500, 2000 et 40000 orientations). La simulation effectuée a permis de montrer tout changement microstructurale au cours de la croissance.

Le but principale de cette étude est d'étudier l'influence du nombre d'orientations sur l'évolution de la croissance cristalline et de connaître à quel point ce paramètre contrôle la

## *Conclusion générale*

---

croissance des grains. Nous avons mis en œuvre des programmes, à l'aide du langage Matlab, qui permettent de suivre l'évolution du nombre de grains dans les différentes matrices, de calculer la taille moyenne des grains au cours de la croissance et aussi de tracer les microstructures.

Nous avons trouvé que les grains croissent rapidement lorsque le nombre d'orientations est faible. Autrement dit, lorsque le nombre d'orientations augmente la probabilité de trouver deux grains voisins de même orientation diminue, par conséquent, on a une croissance lente des grains puisque la réorientation des sites est moins probable.

L'analyse des résultats obtenus, nous a permis de voir sur les microstructures les changements topologiques et morphologiques des joints de grains, qui jouent un rôle très important dans la croissance et la disparition des grains. Dans le même grain, un joint courbé est plus mobiles qu'un joint sous forme de segment.

Pendant les premiers 200 mcs de la croissance, nous avons remarqué la disparition de la majorité des grains dans les quatre matrices ce qui provoque une croissance considérable des grains restant. Dans les temps qui suivent, cette croissance devient de plus en plus lente, et la microstructure tend à se stabiliser vers les 1000 mcs.

Le traçage des distributions de tailles, en fonction du temps sous forme d'histogrammes, nous a permis de poursuivre l'évolution des classes de tailles durant toute la croissance. Au début de la croissance, les tailles de grains ne dépassaient pas 80 sites, à l'exception de quelques uns dans la matrice à 50 orientations qui ont des tailles qui se rapprochent de 160 sites. Au cours de la croissance le nombre de grains diminue et les classes de tailles s'élargissent pour atteindre des tailles extrêmement grandes (2000 sites).

La taille moyenne (diamètres des grains) évolue dans le temps d'une manière lente lorsque le nombre d'orientations augmente et vis versa.

Vu les résultats obtenus, nous concluons que ce paramètre de nombre d'orientations a une influence sur l'évolution des microstructures et la cinétique de la croissance. Il est important de noter que durant tout le temps de calcul la croissance était normale sans qu'il y est un déclenchement de croissance sélective des grains.

Cette étude nous a ouvert la porte sur certaines perspectives :

- Mettre au point d'autres programme afin d'éviter le problème de coalescence des grains.
- Considérer d'autres paramètres tels les précipités et la mobilité des joints de grains.

**REFERENCES**  
**BIBLIOGRAPHIQUES**

## ***Références bibliographique***

---

- [1]- Develay. R., " Mise en forme de l'aluminium - Filage ou extrusion", technique de l'ingénieur M651(1997).
- [2] - Humphreys F. J. and Hatherly .M., Recrystallization and related annealing phenomena, second edition, Elsevier, Oxford (2004).
- [3]- Humphreys .F.J, Hatherly .M., Recrystallization and related annealing phenomena, Pergamon Press, Oxford (1995).
- [4]- Haessner .F, Recrystallization of metallic material, Dr. RiedererVerlagGmbH, Stuttgart (1971).
- [5]- Dupeux.M and Gerbaud.J, Exercices et problèmes de sciences des matériaux , Dunod, Paris, 2010.
- [6]- Carpenter. H.C.H and Elam. C.F, J.Inst.Met.,24(1920)83.
- [7]- Burke.J.E. and Turnbull .D, "recrystallization and grain growth" in Progress Metal Physics 3, Pergoman Press (1952) 220
- [8]- Detert .K, Recrystallization of Metallic Materials; ed. F. Haessner, RiedererVerlag GmbH, Stuttgart, (1978) , p 97.
- [9]- Bunge .H.J., Texture Analysis in Materials Science ,Clausthal, English edition first published 1982.
- [10]- Gleiter .H, Nanostructured materials: Basic concepts and microstructure.Acta mater, 48 pp: 1-29, (2000).
- [11]- Reade.W .T, Shockley, Dislocation models of crystal boundaries, Phys.Rev78, p .275,1950
- [12]- Read .W.T, Dislocations in crystals, Mc-Graw-Hill (1953).
- [13]- Philibert .J, Vignes. A, Bréchet .Y, Combrade. P, Métallurgie de minerai au matériau, Ed. Masson, Paris (1998).
- [14]- Martin .G, Levy .J, Oudar. J, Saada. G, Sainfort. G, Interfaces et surfaces en métallurgie, Trans. Tech Publications (1973) .
- [15]- Humphreys .F.J, Hatherly .M dans "Recrystallization and related annealing phenomena "Pergamon press, O xford,1 996.
- [16]-Smith, C.S.,Metal Interfaces (Materials Park, OH : ASM, (1 952), 65.
- [17]- Sutoki, T., Sc. Rep. Tohoku Univ., 17 (1928), 857.
- [18]- Felthma. p,Acta metal.5,97(1957); N.P.Louat, Acta metal.22,721(1974)
- [19]- Lifshitz, I.M. and Slyozov, V.V., J. Phys. Chem. Solids, 19, (1 961), 35.
- [20] – Hillert. M, Acta Met, 13 (1 965), 227.
- [21]- Hunderi. O , Ryum. N, Acta metal .30 (1982) 739.

## ***Références bibliographique***

---

- [ 22]- Hunderi. O and Ryum. N, Acta metall. 29 (1981) 1737-1745.
- [23]- Hunderi. O, Ryum. N, Westengen. H., Acta metall. 79, (1979)161-165.
- [24]- Ashby, M.F. and Verrall, R.A., Acta Met., 21, (1973) 149.
- [25]- Allen .P and Tildesley. D. J, Computer simulation of liquids, ser. Oxford science publications. Clarendon Press, 1987.
- [26]- Kawazaki .K , Nagai .T and Nakashima .K, Phi.Mag. B 60 n°3(1989)399.
- [27]- Humphreys.F.J and Hurley.P.J , proc.5th IntConf . On recrystallization , ed. Gottstein and Molodov, Aachen(2001).
- [28]- Piekos´. K et al. ComputationalMaterials Science 42 (2008) 36–42.
- [29]- Hesselbarth. H.W et Gobel .I.R, Acta Metall.39, 2135 (1991).
- [30]- Boutana. N et Bocher .P, "Modèle des automates cellulaires," pp. 6-11, 2005.
- [31]- Raab .D, Computational materials science, Wiley –VCH (1998) 226-227.
- [32]- Afer.H , mémoire de magister en physique, université Mentouri Constantine(2003).

### Résumé :

Notre étude est une contribution dans compréhension du processus de la croissance des grains. Afin de mieux comprendre l'influence du nombre d'orientations sur l'évolution de la croissance cristalline, nous avons généralisé des matrices de dimensions 200x200 ayant 50, 500, 2000 et 4000 orientations et simulé la croissance cristalline par la méthode Monté Carlo.

L'indexation des matrices nous a permis de donner un aspect quantitatif à cette étude. Le suivi du nombre des grains dans les quatre matrices avait montré que les grains croissent plus rapidement dans la matrice à 50 orientations que dans les autres matrices. D'une autre part, cette étude nous a permis de montrer que le nombre d'orientations influe d'une manière significative sur l'évolution de la taille moyenne.

**Mots clés :** simulation Monte Carlo - croissance – nombre d'orientations - grains - joints de grains.

---

### Abstract:

Our study is a contribution in understanding the process of grain growth and the influence of number of orientations on the course of growth. In materials science, controlling the evolution of the microstructure remains essential. Allows the parameters that control the evolution of microstructures that is the grain boundary energy. This energy plays an important role in materials during different stages of growth. This latter preference seems to be linked to a particularity of the joints which enter them and at the expense of the orientations of the matrix with the morphological and chemical crystallographic characteristics of the matrix. In this work, we used the Monte Carlo simulation technique. To follow the evolution of growth, by introducing the influence of orientations from the initial matrices different orientation.

In our work, we followed the behaviour of grains and the evolution of growth over time from the distribution and the influence of size and introduced an original concept of taking into account the effect of size seeds. The introduction of joint energy in Monte Carlo simulation. Has allowed us to better understand the phenomenon of grain growth observed in materials.

**Key word:** simulation - growth - orientation - Monte Carlo.

---

### المخلص :

هذه الدراسة عبارة عن مساهمة في فهم عملية نمو الحبيبات. حتى تتمكن من فهم تأثير عدد التوجهات على مسار نمو البلورات قمنا بتوليد عدة مصفوفات ذات أبعاد (200x200) تحتوي على 50, 500, 2000 و 4000 توجيهها ثم محاكاة نمو البلورات بطريقة مونت كارلو.

سمح لنا ترقيم هذه المصفوفات بإعطاء هذه الدراسة جانبا كيميا. حيث أظهرت مراقبة عدد الحبيبات في المصفوفات الأربع أن نمو الحبيبات في المصفوفة ذات 50 توجهها يكون أسرع منه في باقي المصفوفات. من جهة أخرى, أظهرت هذه الدراسة أن عدد التوجهات يؤثر بشكل كبير على تغير متوسط حجم الحبيبات.

**الكلمات المفتاحية :** محاكاة مونت كارلو - نمو - عدد توجهات - حبيبات - حدود الحبيبات.