

## SIMULATION NUMERIQUE DE LA CROISSANCE DE GRAINS. INFLUENCE MORPHOLOGIQUE DU VOISINAGE

Reçu le 20/09/2000– Accepté le 15/01/2002

### Résumé

Les paramètres fondamentaux de la croissance des grains sont la mobilité et l'énergie des joints de grains. La texture de Goss {110}<001> est obtenue, dans les tôles Fe-3%Si de type Hi-B, par une croissance soudaine et rapide de grains de petite taille (5-10µm), en contradiction avec les lois classiques de la recristallisation secondaire. Une simulation de la croissance normale d'une matrice isotrope, par la méthode de Monte-Carlo, montre l'influence d'un paramètre morphologique en plus des paramètres cristallographiques (mobilité et énergie du joint). Ce paramètre est la taille moyenne du voisinage immédiat du grain en évolution; les petits grains peuvent croître s'ils ont un voisinage morphologiquement favorable.

**Mots clés:** Voisinage, Rayon critique, Simulation, Croissance des grains.

### Abstract

The fundamental parameters for grain growth are the mobility and grain boundary energy. Goss texture {110}<001> is obtained, in Fe-3%Si sheets - Hi-B type, by a sudden and fast growth of the small sized grains (5-10µm). This behaviour is not in good agreement with the classical laws of the secondary recrystallization. Grain growth simulation, by Monte-Carlo method, shows the influence of a morphological parameter in addition to crystallographical parameters (mobility and boundary energy). This morphological parameter is the average grain size neighbourhood. The small grains can grow if their neighbourhood is morphological favourable.

**Key words:** Neighborhood, Critical radius, Simulation, Grain growth.

**N. MAZI**

Département de Physique  
Centre Universitaire de Skikda  
Skikda, Algérie

**N. ROUAG**

Faculté des Sciences  
Département de Physique  
Université Mentouri  
Constantine, Algérie

**R. PENELLE**

Laboratoire de Métallurgie Structurale  
Université de Paris Sud  
URA CNRS 1107  
91405 Orsay Cedex, France

### ملخص

تعتبر كل من حركية و طاقة حدود الحبيبات من المتغيرات الأساسية لنمو الحبيبات. يمكن الحصول على النسيج البلوري {110}<001> في الصفائح المغناطيسية Fe-3%Si من النوع Hi-B، بنمو سريع ومفاجئ لحبيبات صغيرة الحجم على حساب حبيبات ذات حجم اكبر. تبين عملية محاكاة النمو العادي للحبيبات في مصفوفة متماثلة المناحي، باستخدام طريقة Monte-Carlo، تأثير عامل مورفولوجي بالإضافة للعوامل البلورية (حركية و طاقة حدود الحبيبات). هذا العامل هو الحجم المتوسط للجوار الأقرب للحبيبة في حالة نمو. تستطيع الحبيبات صغيرة الحجم النمو إذا كان لديها جوار مناسب من الناحية المورفولوجية.

**الكلمات المفتاحية:** الجوار، نصف قطر الحرج، محاكاة، نمو الحبيبات.

La croissance des grains a suscité de nombreux travaux; une revue des différentes méthodes d'approche a été effectuée par Atkinson [1]. Rappelons que, dans la théorie statistique de croissance, développée en premier lieu par Hillert [2] et qui a servi de base à tous les groupes de modèles de croissance, analytique et numérique [3-14], la variation du rayon du grain est donnée par :

$$\frac{dR}{dt} = C m \gamma \left( \frac{1}{R_C} - \frac{1}{R} \right) \quad (1)$$

où :  $C = 0.5$  en 2D,  $C = 1$  en 3D ;  $m$  et  $\gamma$  sont respectivement la mobilité et l'énergie du joint;  $R_C$  est un rayon critique égal au rayon moyen de la matrice  $\bar{R}$ .  $\bar{R}$  augmente avec le temps suivant la relation :

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

$k$  est une constante,  $\bar{R}_0$  est le rayon moyen initial de la matrice.

Un grain sera en croissance si son rayon est supérieur à  $R_C$ , ce qui justifie l'hypothèse classique de la croissance des gros grains de la matrice initiale au détriment des plus petits qui décroissent jusqu'à disparition.

### RAYON CRITIQUE DU VOISINAGE

L'introduction des rayons critiques de voisinage nécessite la reconsidération de la force motrice de croissance qui correspond à la réduction de l'aire totale des joints de grains et qui est donnée par :

$$F = 2\gamma \left( \frac{1}{R_j} - \frac{1}{R_i} \right) \quad (3)$$

$R_i$  et  $R_j$  sont les rayons des grains  $i$  et  $j$  respectivement.

Si on néglige l'influence de la texture cristallographique, le grain  $i$  peut croître aux dépens de son voisin  $j$  si :

$$F > 0 \Rightarrow R_i > R_j. \quad (4)$$

La considération des  $N$  voisins du grain  $i$  donne :

$$\sum_{i=1}^N R_i > \sum_{j=1}^N R_j \Rightarrow R_i > R_m \quad (5)$$

avec le rayon moyen du voisinage :

$$R_m = \frac{\sum_j R_j}{N}$$

Un grain peut donc croître si son rayon est supérieur à  $R_m$ .

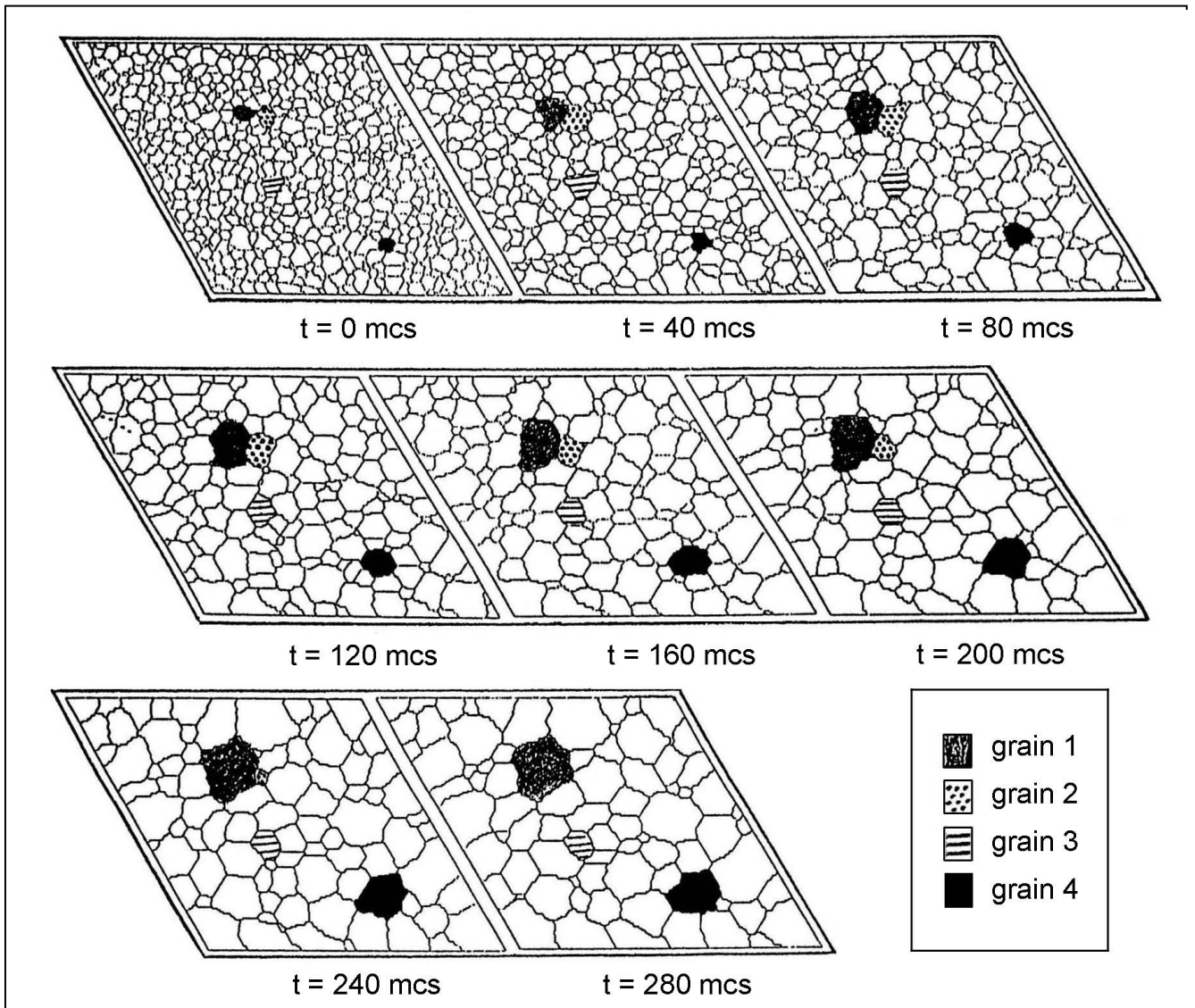
### SIMULATION

Nous avons appliqué une simulation de croissance des grains, en utilisant la technique de Monte-Carlo [15].

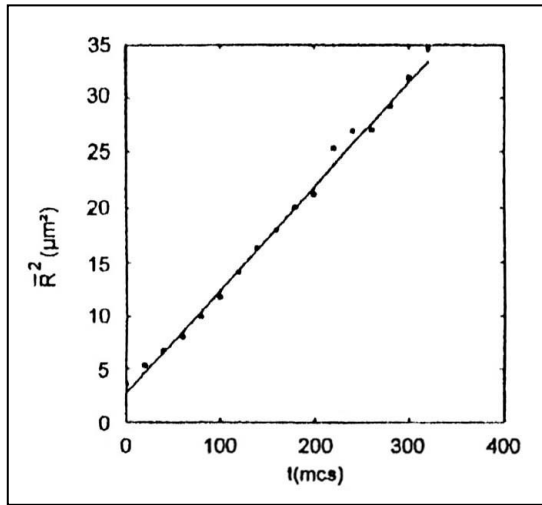
La microstructure bidimensionnelle est représentée par un maillage triangulaire 150x150 sites. A chaque nœud (ou site) du maillage, sera affecté un entier  $S$  entre 1 et  $Q$ , qui correspond à l'orientation cristallographique du grain. Ici, on a choisi 64 orientations ( $Q = 64$ ). Un grain est constitué par un ensemble de nombres adjacents de même valeur. Un joint de grains sépare deux sites adjacents qui ont deux nombres d'orientations ( $S$ ) différents. L'énergie de chaque site est donnée par :

$$E = J \sum_N (1 - \delta_{S_i, S_j}) \quad (6)$$

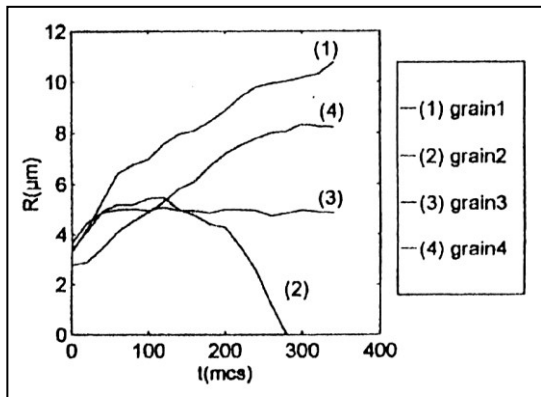
où  $N$  est le nombre de voisins ( $N = 6$  pour un maillage triangulaire),  $S_i$  ( $S_j$ ) l'orientation du site  $i$  ( $j$ ),  $\delta_{ij}$  la fonction de Kronecker, et  $J$  une constante positive qui représente l'énergie du joint.



**Figure 1:** Evolution de la microstructure.



**Figure 2:** Variation de la taille moyenne de la matrice avec le temps.



**Figure 3:** Variation du rayon de grain avec le temps pour les 4 grains.

Parmi les sites du maillage, un site noté  $S(1)$  est choisi au hasard. L'énergie de ce site est calculée à partir de l'équation (6). 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 (6). La variation d'énergie  $\Delta E$  est évaluée par :  $\Delta E = E(2) - E(1)$ . La réorientation du site est acceptée si  $\Delta E < 0$ .

Le temps de simulation est comptabilisée en unités mcs (Monté Carlo Step). Un mcs représente la durée nécessaire à la réorientation de tous les sites du maillage (22500 essais).

La simulation est faite pour le cas sans texture (cas isotrope) à  $T=0K$ .

## RESULTATS ET DISCUSSION

La figure 1 montre l'évolution d'une microstructure avec le temps ( $t = 0$  à 280 mcs).

La variation du rayon moyen de la matrice  $\bar{R}$  avec le temps est reportée sur la figure 2. Cette variation obéit à la loi générale de type :

$$\bar{R}^n - \bar{R}_0^n = kt \quad \text{avec } n=2 \quad (7)$$

Les évolutions en comportement de croissance en fonction du temps pour 4 grains sont reportées sur la figure 3.

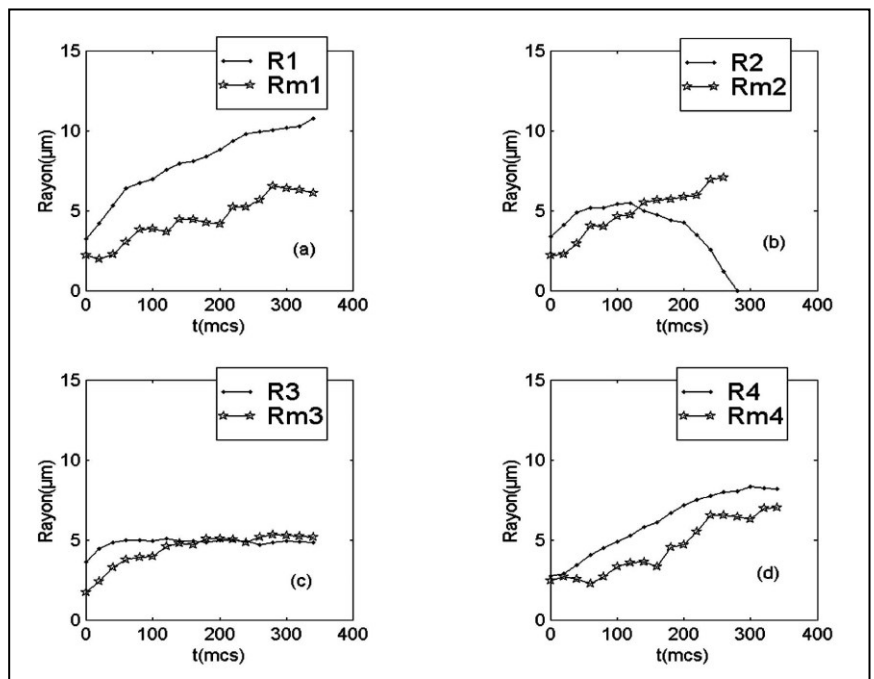
Nous pouvons distinguer les comportements suivants :

- pour les grains 1 et 4, on observe une croissance continue,
- pour le grain 3, il y a croissance jusqu'à  $t=160$  mcs, puis une quasi-stabilisation,
- pour le grain 2, il y a croissance jusqu'à  $t=120$  mcs, puis une décroissance jusqu'à disparition totale.

Il faut noter que, à l'état initial ( $t = 0$  mcs), le grain 4 est le plus petit parmi les grains considérés ; son comportement n'est donc pas en accord avec les lois classiques de la recristallisation, qui prévoient une croissance pour les grains de rayon supérieur au rayon moyen de la matrice et une décroissance pour les grains de rayon inférieur.

Le comportement en croissance d'un grain peut être expliqué par la considération du rayon moyen de son voisinage  $R_m$ , à chaque étape de sa croissance, au lieu du rayon moyen de la matrice. La figure 4 montre l'évolution en fonction du temps de  $R_i$  et  $R_m$  pour les 4 grains ( $i=1 : 4$ ) :

- la croissance des grains 1 et 4 a lieu avec  $R_i > R_{m1}$  et  $R_4 > R_{m4}$  respectivement (Fig. 4a et 4d),
- la croissance du grain 3 jusqu'à  $t=160$  mcs est observée tant que  $R_3 > R_{m3}$ , ensuite la stabilisation est observée quand  $R_3$  et  $R_{m3}$  deviennent équivalents (figure 4c),



**Figure 4:** Comparaison du grain en croissance avec ses voisins.

- sur la figure 4b, la croissance du grain 2 est observée tant que  $R_2 > R_{m2}$ , jusqu'à  $t=120$  mcs ensuite, quand  $R_{m2}$  devient supérieur à  $R_2$ , il y a décroissance du grain jusqu'à disparition totale vers  $t = 280$  mcs.

### CONCLUSION

Ces évolutions, avec l'introduction du rayon critique de voisinage, permettent de vérifier le modèle précédemment proposé, à savoir qu'un grain peut croître si son rayon est supérieur au rayon de son voisinage, même s'il fait partie des plus petits grains de la matrice ; en plus du facteur cristallographique, la croissance est donc contrôlée également par l'effet local du facteur morphologique.

### REFERENCES

- [1]- Atkinson H.V., *Acta Metall.*, 36, (1988), p.469.
- [2]- Hillert M., *Acta Metall.*, 13, (1965), p.227.
- [3]- Burke J.E. and Turnbull D., *Prog. Metal Phys.*, 3, (1952), p.220.
- [4]- Rhines F.N. and Craig K.R., *Metall. Trans.*, 5A, (1974), p.413.
- [5]- Louat N. P., *Acta Metall.*, 22, (1974), p.721.
- [6]- Feltham P., *Acta Metall.*, 5, (1957), p.97.
- [7]- Rivier N., *Phil. Mag.*, B52, (1985), p.795.
- [8]- Mulins W.W., *Scripta Metall.*, 22, (1988), p. 1441.
- [9]- Abbruzzese G. and Lücke K., *Acta Metall.*, 34, (1986), p.905.
- [10]- Lücke K., Heckelmann I. and Abbruzzese G., *Acta Metall.*, 40, (1992), p.533.
- [11]- Mullins W.W. , *J. Appl. Phys.*, 59, (1986), p.1341.
- [12]- Kawasaki K., Nagai T. and Nakashima K., *Phil. Mag.*, B60, (1989), p.399.
- [13]- Fan D., Geng C. and Chen L.Q., *Acta Mater.*, 45, (1997), p.611.
- [14]- Mehnert K. and Klimanek P., *Scripta Metall.*, 35, (1996), p.699.
- [15]- Srolovitz D.J, Anderson M.P., Sahni P.S. and Grest G.S., *Acta Metall.*, 32, (1984), p.793. □