



HAL
open science

Evolution de l'espacement primaire pendant la solidification dirigée d'alliages transparents dans DECLIC-DSI: résultats expérimentaux et simulations champ-de-phase

Fatima L Mota, Jorge Pereda, Younggil Song, Kaihua Ji, Rohit Trivedi, Alain Karma, Nathalie Bergeon

► To cite this version:

Fatima L Mota, Jorge Pereda, Younggil Song, Kaihua Ji, Rohit Trivedi, et al.. Evolution de l'espacement primaire pendant la solidification dirigée d'alliages transparents dans DECLIC-DSI: résultats expérimentaux et simulations champ-de-phase. GdR Micro pesanteur fondamentale et appliquée, Oct 2019, La Rochelle, France. hal-02350577

HAL Id: hal-02350577

<https://hal.science/hal-02350577v1>

Submitted on 6 Nov 2019

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Evolution de l'espacement primaire pendant la solidification dirigée d'alliages transparents dans DECLIC-DSI: résultats expérimentaux et simulations champ-de-phase

Fatima L. Mota¹, Jorge Pereda¹, Younggil Song², Kaihua Ji², Rohit Trivedi³, Alain Karma², Nathalie Bergeon¹

¹ Aix-Marseille Université – IM2NP UMR 7334 – Marseille, France

² Physics Department, Northeastern University, Boston, USA

³ Department of Materials Science and Engineering, Iowa State University, Ames, USA

Pendant la solidification d'alliages se développe au niveau de l'interface solide-liquide une microstructure dont les caractéristiques influencent fortement les propriétés macroscopiques du matériau. Sa formation est un processus dynamique dans lequel le réseau se développe, s'organise et s'ordonne progressivement. Une étude détaillée des mécanismes physiques qui contrôlent la formation de cette microstructure est fondamentale pour maîtriser la qualité du matériau. Sur terre, la convection dans la phase liquide affecte fortement la microstructure de solidification en créant par exemple des hétérogénéités dans les paramètres de contrôle le long de l'interface.

Dans le cadre du projet scientifique MISOL3D (Microstructures de SOLidification 3D) sélectionné par le CNES, nous avons participé au développement de l'Instrument DECLIC et de son insert DSI (Directional Solidification Insert) dédié à l'étude in situ de la formation des microstructures colonnaires cellulaires et dendritiques 3D sur des analogues transparents et installé à bord de la Station Spatiale Internationale. En microgravité, le dispositif sert à établir une base de données de référence sur la dynamique des phénomènes dans la limite du transport diffusif et à étudier les mécanismes physiques qui gouvernent la dynamique de formation et de sélection de la microstructure interfaciale. Ces travaux bénéficient d'une collaboration scientifique avec les équipes américaines du Pr. Trivedi (expériences en échantillons minces) et du Pr. Karma (simulations champ-de-phase), sélectionnées par la NASA. Deux campagnes spatiales ont eu lieu sur des échantillons de compositions différentes en 2010-2011 (DSI) et 2017-2018 (DSI-R) qui ont permis d'explorer largement la carte des microstructures en fonction des paramètres de contrôle. Dans ce résumé, nous présenterons des résultats sur l'évolution de l'espacement primaire mettant en évidence l'importance de cette collaboration entre expérience et simulation numérique.

Résultats

L'évolution de l'espacement primaire Λ a été mesurée pour différentes vitesses de tirage V et gradients de température G . Les premières comparaisons entre simulations en champ-de-phase 3D et résultats expérimentaux ont mis en évidence des différences significatives et systématiques. Un travail important a donc été mis en œuvre pour identifier l'origine de ces différences. Dans un premier temps, nous avons travaillé sur les paramètres physiques de l'alliage et redéterminé le coefficient de partage¹, en se focalisant sur la gamme de concentrations de l'alliage utilisées dans les expériences DECLIC-DSI. Ce travail était nécessaire dans une logique de formation d'une banque de données de référence mais le volet qui a conduit aux développements les plus intéressants du point de vue de la compréhension fondamentale des phénomènes, a été d'étudier l'influence de certains phénomènes physiques, non pris en compte généralement dans les modèles de champ-de-phase.

Le premier point est l'influence du champ thermique sur la sélection de l'espacement. L'analyse des expériences DSI² a montré une évolution du champ thermique très éloignée de la situation dite de

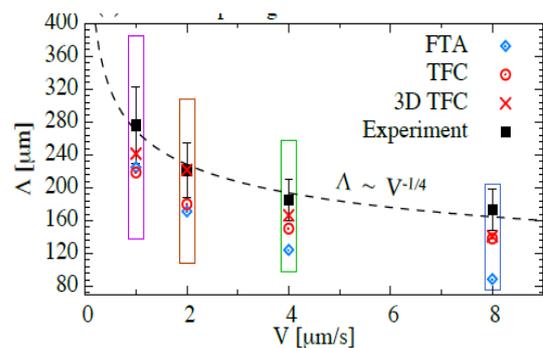


Fig.1 : Espacement primaire en fonction de la vitesse: comparaison expériences et simulations champ-de-phase. ($G=19$ K/cm) Pour les expériences, l'écart type est quantifié par les barres. En simulation, le point reporté correspond à l'espacement moyen sélectionné en grand domaine en partant du repos alors que les boîtes en couleur correspondent aux limites des branches de stabilité (petits domaines).⁴

¹F.L. Mota, et al., J. Cryst. Growth, 447 (2016), 31-35. ²F.L. Mota, et al., Acta Mater., 85 (2015), 362-377. ³Y. Song, et al., Acta Mater, 150 (2018), 139-152.

«thermique gelée» (FTA), du fait de la modification des échanges en tirage et du dégagement de la chaleur latente. Un champ-de-phase couplé à un calcul de diffusion thermique axiale (TFC) a été développé pour prendre en compte une diffusivité réelle finie et le rejet de chaleur latente. La figure 1 montre que le mode de simulation du champ thermique affecte la sélection de Λ : le TFC conduit à des Λ plus grands et améliore significativement l'accord entre les simulations et les expériences. La modélisation précise du champ thermique dans la zone adiabatique est donc essentielle pour prédire quantitativement la sélection dynamique de l'espacement primaire³.

Le deuxième point très intéressant est le comportement des sous-joints de grains, défauts extrêmement nombreux dans nos échantillons 3D, ainsi que leur rôle sur la distribution de l'espacement primaire. Certains sous-joints présentent une instabilité morphologique qui se manifeste par la pénétration locale de cellules d'un grain dans l'autre sous forme de doigts (Fig. 2a) ; la cellule en tête de l'invasion peut se détacher du groupe et poursuivre seule sa progression créant ainsi un défaut dans la structure cristalline locale du grain subissant l'invasion. Les simulations en champ de phase 3D ont permis de mettre en évidence différents comportements du sous-joint dépendants des relations cristallographiques entre les grains et de préciser les conditions d'apparition de cette instabilité : Fig. 2b. L'étude de la distribution spatiale et de l'évolution de Λ nous a par ailleurs permis de mettre en évidence un effet significatif et à longue distance de la présence de sous-joints divergents, et ce même si les désorientations entre les sous grains restent très faibles. La modélisation numérique de ces effets en réseaux étendus 3D a pu être réalisée.

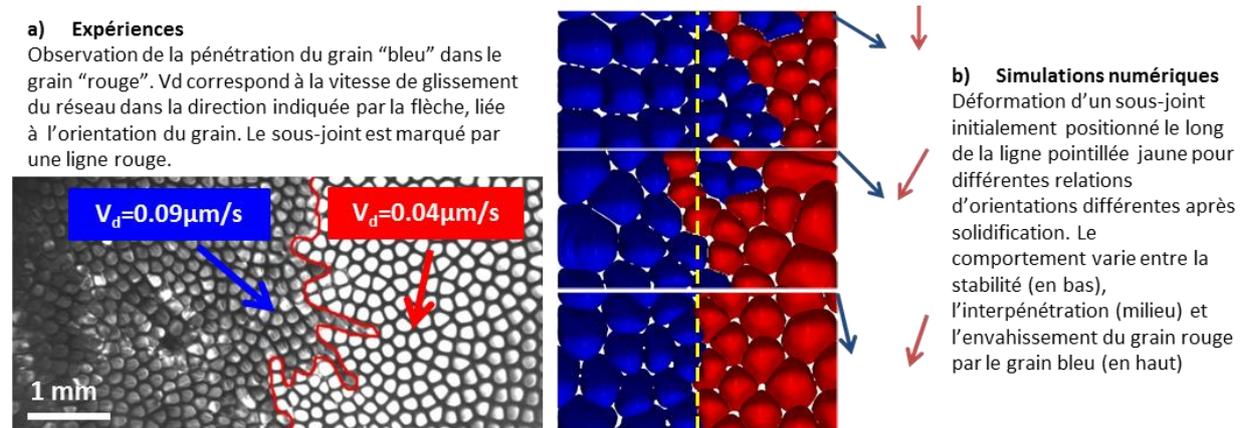


Fig. 2

En conclusion, ces études mettent en évidence l'importance de phénomènes qui peuvent être vus comme des écarts à l'idéalité mais dont le caractère inévitable dès lors que la taille de l'échantillon augmente rend critique leur prise en compte, en particulier dans les codes de simulation numérique.

Perspectives

La campagne DSI-R était essentiellement focalisée sur le régime dendritique, régime assez peu étudié pendant DSI pour lequel les dynamiques sont également très riches et le rôle des sous-joints apparaît critique. La problématique de la stabilité et de la sélection de l'espacement primaire sera approfondie via l'analyse des expériences avec sauts de vitesse menées dans les deux campagnes d'expériences.

Références 2019

- Song Y, Mota FL, Turret D, Pereda J, Ji K, Billia B, Trivedi R, Bergeon N, Karma A, *Grain boundary roughening and branching in pattern forming polycrystalline growth*. Nature materials (to be submitted).
- Mota FL, Ji K, Lyons T, Strutzenberg LL, Trivedi R, Karma A, Bergeon N, *In situ observation of growth dynamics in DECLIC Directional Solidification Insert onboard ISS: DSI-R flight campaign*. Proceedings of 70th International Astronautical Congress (IAC), Washington D.C., United States.

Remerciements : Les auteurs expriment leur gratitude au CNES et à l'équipe du CADMOS-Toulouse, pour sa disponibilité, son efficacité et sa réactivité dans la préparation, réalisation et suivi des expériences en μ g.

¹F.L. Mota, et al., J. Cryst. Growth, 447 (2016), 31-35. ²F.L. Mota, et al., Acta Mater., 85 (2015), 362-377. ³Y. Song, et al., Acta Mater, 150 (2018), 139-152.