HAL
open science

Etude de la coalescence dans les alliages Al-Sc et Al-Zr-Sc par simulation en champ de phase

M Certain, Julien Boisse, N. Lecoq, Renaud Patte, H. Zapolsky

To cite this version:

M Certain, Julien Boisse, N. Lecoq, Renaud Patte, H. Zapolsky. Etude de la coalescence dans les alliages Al-Sc et Al-Zr-Sc par simulation en champ de phase. Journées de la Simulation Numérique, 2008, paris, France. hal-02506322

HAL Id: hal-02506322

https://hal.science/hal-02506322v1

Submitted on 12 Mar 2020

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.

Etude de la coalescence dans les alliages Al-Sc et Al-Zr-Sc par simulation en champ de phase

M. Certain, J. Boisse, N. Lecoq, R. Patte, H. Zapolsky
Groupe de Physique des Matériaux, UMR CNRS 6634,
Université de Rouen, F-76801 Saint Etienne du Rouvray Cedex

La très grande majorité des matériaux d'intérêt industriel ont un caractère commun générique : ils sont très souvent hétérogènes et/ou constitués de différentes phases. La maîtrise de la microstructure de ces alliages passe par une meilleure compréhension des mécanismes de formation de ces phases et par la modélisation des cinétiques dans des conditions diverses (température, contrainte externe, irradiation…).

Les alliages Al-Sc, riches en aluminium, sont très utilisés dans l'industrie en raison leurs propriétés mécaniques. Après homogénéisation à haute température, on observe en effet, l'apparition d'une forte densité de petits précipités cohérents, répartis de façon homogène avec la matrice d'aluminium. Ces précipités ordonnés sont de composition Al_3Sc et possèdent la structure $L1_2$. Ils bloquent le mouvement des dislocations ainsi que celui des joints de grains, ce qui durci l'alliage et lui confère un fort pouvoir anti-recristallisant.

L'addition de zirconium, en plus du scandium, améliore encore les propriétés mécaniques du matériau. Les précipités obtenus dans cet alliage sont en effet, plus fins et leur distribution est plus dense que dans les alliages Al-Sc. L'origine de ces observations expérimentales est attribuée à la composition chimique hétérogène des précipités qui apparaissent dans l'alliage ternaire. Ces précipités, de structure $L1_2$ et de composition $Al_3(Zr_xSc_{1-x})$, sont en effet formés, d'un cœur riche en scandium et d'une coquille riche en zirconium.

Pour comprendre les phénomènes qui ont lieu dans ces matériaux, il est nécessaire de mettre au point un modèle mathématique capable de décrire les cinétiques de précipitation et de coalescence.

La méthode de champ de phase a émergée récemment comme un outil performant pour étudier l'évolution microstructurale dans les alliages. Ce modèle décrit un alliage à l'échelle mésoscopique. Il permet d'appréhender l'évolution de la taille, de la forme et de la distribution des précipités dans le matériau. Le principe de cette méthode est de décrire l'état de la matière à l'aide d'une ou plusieurs variables de champ, conservatives ou non-conservatives. L'évolution temporelle de ces variables est pilotée par la minimisation de l'énergie libre du système.

Dans un problème de transformation de phase avec mise en ordre, les variables de champ sont les concentrations des éléments ainsi que les paramètres d'ordre correspondant aux structures étudiées. L'évolution temporelle de la concentration, qui est une variable conservative, est décrite par l'équation de Cahn-Hilliard :

$$\frac{\partial c(\vec{r},t)}{\partial t} = \vec{\nabla}.\left(M\vec{\nabla}\left(\frac{\delta F}{\delta c(\vec{r},t)}\right)\right) + \zeta_c(\vec{r},t)$$

et celle du paramètre d'ordre, qui est une variable non conservative, par l'équation de Ginzburg-Landau :

$$\frac{\partial \eta(\vec{r},t)}{\partial t} = -L\left(\frac{\delta F}{\delta \eta(\vec{r},t)}\right) + \zeta_\eta(\vec{r},t)$$

où **M** et **L** sont les coefficients cinétiques qui caractérisent respectivement la diffusion et la relaxation structurale du système, **F** est l'énergie libre du système et ζ□ et ζ_c sont des bruits de Langevin qui caractérisent l'agitation thermique.
En utilisant cette méthode, nous avons simulé la cinétique de coalescence dans les alliages Al-Sc et Al-Zr-Sc. Sur la figure 1 sont présentées des images, obtenues par simulation numériques, de la microstructure dans un alliage Al-Zr-Sc, vieilli à 475°C, avec une fraction volumique de précipité égale à 36%.

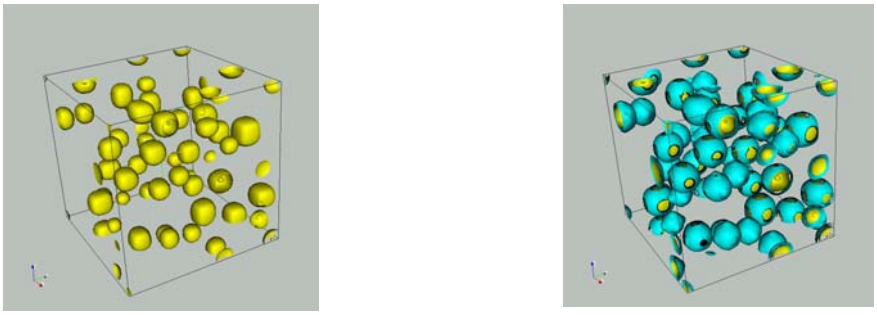

Figure 1 : Microstructure simulée de l'alliage Al-Zr-Sc au temps réduit t*= 50000.
a) isoconcentration des particules riches en Sc (en jaune) - b) isoconcentration de Zr autour des particules riches en scandium (en bleu).

Sur ces images, nous pouvons remarquer que les atomes de zirconium forment une coquille autour des précipités riches en scandium, comme observé expérimentalement.

Le but de notre étude était de montrer que la méthode champ de phase permettait reproduire les résultats obtenus expérimentalement dans les alliages Al-Sc et Al-Zr-Sc en y apportant une meilleure compréhension. Le second objectif était d'étudier la coalescence dans l'alliage Al-Zr-Sc, qui est peu accessible expérimentalement car elle requière des temps de vieillissement très longs.

Référence :

1- J. Boisse, N. Lecoq, R. Patte and H. Zapolsky "Phase field simulation of coarsening of γ precipitates in an ordered γ' matrix.", Acta. Mat., 2007, p. 6151-6158

2- Y. Wang, D. Banerjee, C.C. Su and A.G. Khachaturyan "Field kinetic model and computer simulation of precipitation of $L1_2$ ordered intermetallics from f.c.c. solid solution", Acta. Mat., Volume 46, Issue 9, 22may 1998, p. 2983-3001

3- L.Q. Chen and J. Shen, "Application of Semi-Implicit Fourier-Spectral Method to Phase Field Equations", Comp.Phys.Commun.108, 1998, p.147-158

4- B. Fordbord, W. Lefebvre, F. Danoix, H. Hallem and K. Marthinsen "Three dimensional atom probe investigation on the formation of Al_3(Sc,Zr)-dispersoids in aluminium alloys", Scripta Mat. 51, 2004, p.333-337