

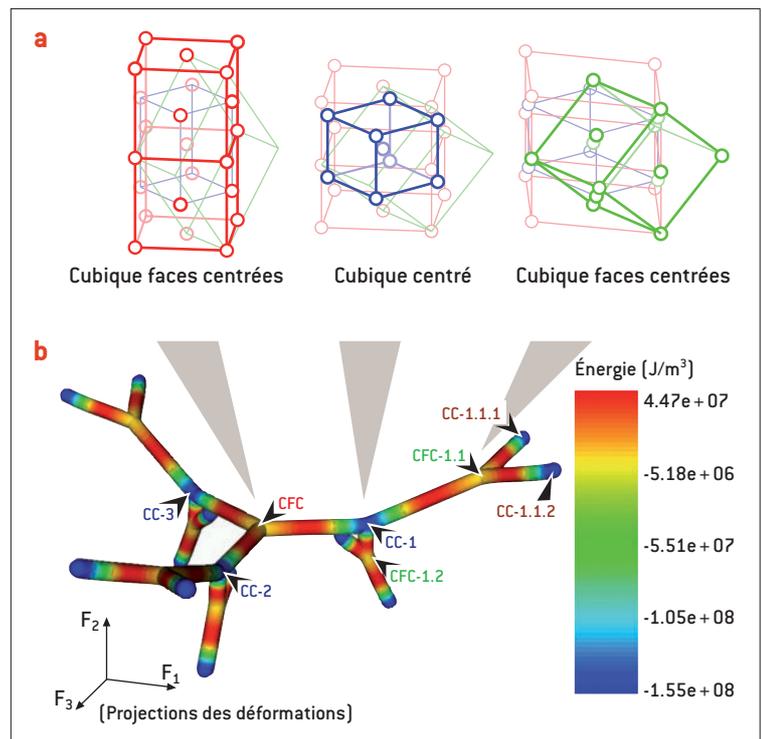
# Modélisation des transitions de phase martensitiques par champ de phase avec chemins de réaction

Les microstructures obtenues lors de changements de phase sont généralement très complexes et possèdent plusieurs échelles caractéristiques, comme par exemple les aiguilles de martensite dans les alliages à base de fer, elles-mêmes constituées d'un ensemble de lamelles de phases différentes. Cette richesse de microstructures est le résultat de la compétition entre une énergie élastique, responsable des interactions à longue portée entre les différentes phases, et une énergie cristalline, extrêmement complexe car possédant de nombreux minima représentant l'énergie de chacune des phases. Une modélisation précise des changements de phase nécessite à la fois une description rigoureuse de ce paysage énergétique et un coût de calcul permettant la modélisation sur de grands volumes.

C. Denoual • A.-M. Caucci • L. Souillard • Y.-P. Pelligrini CEA - DAM Île-de-France

Les changements de phase martensitiques jouent un rôle crucial dans le comportement de certains alliages, essentiellement en raison des déformations importantes mises en jeu et de leur couplage avec les sollicitations macroscopiques. Ils sont en général très rapides (à petite échelle, ils peuvent se produire en quelques picosecondes), ce qui limite considérablement les possibilités d'observations résolues en temps et contraint à utiliser des techniques de simulation pour en comprendre les mécanismes. La plupart de ces mécanismes peuvent être étudiés par dynamique moléculaire, en particulier pour les sollicitations très brèves produites par exemple par une onde de choc. Cette méthode est cependant limitée à des temps de simulations relativement courts, et par conséquent à des échelles de microstructures relativement petites. En effet, un million de pas de temps de 1 fs correspondent à une propagation des ondes élastiques sur seulement 3 mm, limitant de fait l'apparition de microstructures aux échelles supérieures. Si l'émergence de moyens de calculs téraflopiques a permis d'étendre les volumes accessibles par la dynamique moléculaire à une fraction de micromètre cube (10 milliards d'atomes = 0,5  $\mu\text{m}$  au cube), l'obtention de microstructures à l'échelle de quelques dizaines de microns nécessite une révolution d'une autre nature, notamment pour réaliser des simulations sur des temps longs, de l'ordre de la microseconde.

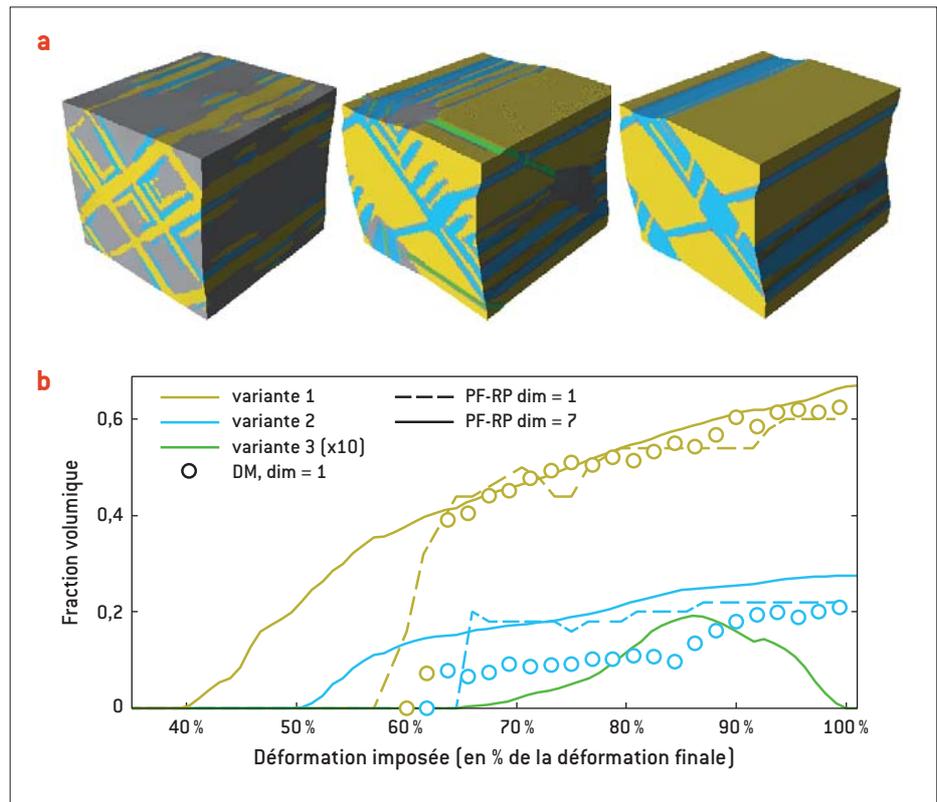
La méthode que nous proposons en [1] permet de telles simulations à l'échelle mésoscopique, tout en assurant l'équivalence énergétique, pour l'essentiel des déformations entre phases, avec les simulations de dynamique moléculaire réalisées à la même échelle. L'ensemble de ces états intermédiaires entre phases (que nous englobons sous le terme de chemin de réaction, ou «reaction pathway») peuvent être très complexes, notamment en raison de l'existence de phases intermédiaires [2]. Notre



**Figure 1.** (a) Passage d'une structure CFC à une structure CC, puis de nouveau CFC par déformations successives (les mailles des trois structures sont superposées en teintes pâles). On remarque que la première et la dernière maille peuvent se déduire l'une de l'autre par une simple rotation de 90°.

(b) Chemins de réaction menant d'une phase à une autre (les conditions de projections en 3D sont données en [1]). La phase cubique centrée [CC-1] produite à partir de la phase CFC centrale peut se transformer en trois phases CFC, dont deux sont d'orientation différente de la phase initiale [CFC-1.1 et CFC-1.2]. Le cycle CFC  $\rightarrow$  CC  $\rightarrow$  CFC peut continuer, suivant des déformations différentes des deux premières transformations et ne pouvant pas s'en déduire par une combinaison linéaire. L'ensemble des variantes accessibles depuis la phase CFC initiale est donc infini.

**Figure 1.** Simulation à déformation imposée.  
**(a)** La martensite [en couleurs] forme une microstructure complexe dans l'austénite initiale [en gris]. Une des phases [en vert] apparaît comme un état intermédiaire seulement dans les simulations à grande échelle [dim = 7].  
**(b)** Les fractions volumiques en DM (disques) sont utilisées pour ajuster le paramètre de cinétique de réaction du PF-RP (traits pointillés).



modélisation des transitions martensitiques, de type «phase field», utilise les chemins de transitions comme constituants élémentaires, que l'on peut connecter pour former un arbre de chemin de réaction aux nombreuses ramifications (figure 1).

Pour valider ce concept de «Phase field» par «Reaction pathway» (PF-RP), nous avons utilisé une transition martensitique modèle, caractérisée par la transformation d'une phase Cubique centrée (CC) en une phase Cubique à faces centrées (CFC) pour un alliage de fer et de nickel. Trois types de simulations ont été réalisés.

Dans un premier temps, un potentiel de Dynamique moléculaire (DM) issu de la littérature (Embedded Atom Model, EAM) a été utilisé pour définir les chemins de réaction entre les différentes phases, les énergies le long de ces chemins, et les modules de raideurs des phases de départ et d'arrivée. L'ensemble de ces données définit un chemin de réaction, ensuite dupliqué et tourné pour former un arbre complexe de sorte que le comportement global respecte l'ensemble des symétries du cristal.

Nous avons ensuite comparé, pour une même échelle et une même sollicitation, une simulation réalisée en PF-RP et une simulation de dynamique moléculaire. Le seul paramètre libre, la cinétique de réaction, a été ajusté pour restituer les temps de nucléation des phases (figure 2). La très bonne concordance entre les différentes phases obtenues [1], malgré le caractère très instable de cette transition, permet de considérer les simulations PF-RP comme un bon substitut des simulations DM, pour un coût de calcul inférieur de plusieurs ordres de grandeurs.

Pour la troisième simulation (figure 2), dont les dimensions et la durée ont été multipliés par 7 relativement aux simulations de validation, la microstructure obtenue est complexe, avec en particulier une phase intermédiaire (figure 2, en vert) disparaissant en fin de simulation.

Cette première étude ouvre la voie aux simulations de transitions de phase martensitiques sur des volumes de plusieurs micromètres cubes. L'utilisation de chemins de réaction assemblés en arbre rend extrêmement flexible la définition du paysage énergétique. Elle autorise notamment l'étude des transformations très complexes pour lesquelles des états intermédiaires et instables peuvent être introduits. L'utilisation de données synthétiques pour définir les chemins (énergie sur les chemins, raideurs, etc.) nous permet d'envisager un couplage fort avec les méthodes *ab initio* que nous développons [3].

RÉFÉRENCES

[1] C. DENOVAL, A.-M. CAUCCI, L. SOULARD, Y.-P. PELLEGRINI, "Phase field reaction pathway kinetics of martensitic transformations in a model Fe<sub>3</sub>Ni alloy", *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 035703 (2010).  
 [2] C. CAYRON, F. BARCELO, Y. DE CARLAN, "The mechanisms of the fcc-bcc martensitic transformation revealed by pole figures", *Acta Mater.*, **58**, p. 1395-1402 (2010).  
 [3] B. AMADON, F. LECHERMANN, A. GEORGES, F. JOLLET, T. O.WEHLING, A. I. LICHTENSTEIN, "Plane-wave based electronic structure calculations for correlated materials using dynamical mean-field theory and projected local orbitals", *Phys. Rev. B*, **77**(20), 205112 (2008).