

# METHODE DE CHAMP DE PHASE POUR L'ETUDE DES MICROSTRUCTURES ISSUES DE TRANSFORMATION DE PHASE

**Y. Le Bouar et A. Finel** *Laboratoire d'Etude des Microstructures, CNRS/ONERA BP 72, 92322 Châtillon Cedex. Téléphone : 01 46 73 45 92, Télécopie : 01 46 73 41 55 Adresse(s) électronique(s): yann.lebouar@onera.fr, alphonse.finel@onera.fr*

**Mots clés :** Champ de phase, transition de phase, microstructure, élasticité, simulations

## 1 INTRODUCTION

Les surfaces en mouvement sont un élément essentiel de notre environnement naturel et technologique. Leur description mathématique est pourtant loin d'être triviale, surtout quand il s'agit de surfaces libres telles que les interfaces entre deux fluides ou entre deux phases thermodynamiques distinctes ou encore des membranes déformables en biologie. La difficulté essentielle vient du fait que de telles surfaces développent souvent des formes extrêmement complexes et façonnées par la dynamique, comme par exemple lors de l'éclatement d'une goutte, ou lors de la formation de microstructures dans les matériaux.

La méthode du champ de phase a émergé récemment comme un outil élégant et universel pour traiter ce genre de problèmes. Ses origines se trouvent dans la thermodynamique hors d'équilibre et la dynamique des transitions de phase. Son principe est de décrire l'état local de la matière à l'aide d'un ou plusieurs champs de phase, qui peuvent souvent être assimilés à des paramètres d'ordre. Le point clé est que ces champs prennent des valeurs bien déterminées en volume, et qu'ils varient entre ces valeurs de manière continue à travers des interfaces diffuses. Les équations cinétiques pour les champs de phase sont couplées aux équations de transport qui pilotent le mouvement des interfaces (diffusion, hydrodynamique, contraintes élastiques, ...). Il en résulte un système couplé d'équations aux dérivées partielles qui est plus simple à traiter que le problème à frontière libre original. Cet outil conceptuel peut être rendu quantitatif dans de nombreux cas en établissant une relation précise entre les paramètres du modèle et les grandeurs macroscopiques qui interviennent dans le problème à frontière libre.

Les applications les plus poussées de la méthode du champ de phase se font en science des matériaux. En effet, le champ de phase est en train de devenir la "méthode standard" de simulation pour la dynamique à l'échelle mésoscopique (l'échelle des microstructures), au même titre que l'est déjà la dynamique moléculaire à l'échelle microscopique. La méthode de champ de phase est encore en plein essor avec une augmentation très forte du nombre de publications. En science des matériaux, la méthode est intensivement utilisée pour décrire les microstructures de solidification et les microstructures issues de transitions de phase à l'état solide. Notons que depuis 2002, une nouvelle technique, appelée champ de phase cristallin a vu le jour. Cette nouvelle méthode se base également sur un formalisme continu, mais se distingue très sensiblement des méthodes de champ de phase "traditionnelles" puisque la matière est décrite à l'échelle atomique.

Les pages qui suivent constituent un cours introductif aux méthodes de champ de phase lors de transformation de phase à l'état solide.

Quelques articles de revues ou chapitres de livres sont proposés pour ceux qui souhaiteraient mieux appréhender les potentialités et limitations des méthodes de champ de phase en science des matériaux:

- (Singer 2008) est une revue récente des méthodes de champ de phase, en solidification et à l'état solide, avec une liste de référence assez complète sur le sujet. Ce papier contient également une brève description du champ de phase cristallin.
- (Battacharjee 2007) Cet ouvrage présente plusieurs modèles pour décrire la dynamique de système près ou loin de l'équilibre: modèle de Ginzburg-Landau dépendant du temps (i.e. modèle de champ de phase), approche de Langevin, description de Fokker-Planck ...
- (Langer 1992) Ce chapitre d'ouvrage traitant des transitions de phase du premier ordre aborde

la modélisation continue, les modèles Ginzburg-Landau dépendant du temps, approche de Langevin, équations de Fokker-Planck. Les notions de changement d'échelle (coarse graining) et d'énergie libre mésoscopique sont discutées.

- (Karma 2003) Cet article d'école d'été est une introduction aux méthodes de champ de phase avec des illustrations sur les microstructures de solidification.
- (Emmerich 2008) Ce ouvrage introduit le champ de phase dans une présentation thermodynamique. L'ouvrage contient des applications dans le domaine de la croissance dendritique. Le lien entre les modèles de champ de phase et les propriétés des interfaces est réalisé à l'aide de l'analyse asymptotique. Certains aspects numériques sont également décrits, telle que la technique de remaillage.
- (Wang 1995) Cet article est une revue (déjà un peu ancienne) sur les modélisations de champ de phase, avec des illustrations sur l'influence de l'élasticité sur les microstructures obtenues à l'état solide.
- (Khachaturyan 1983) Cet ouvrage traite des transformations structurales dans les solides. Il contient notamment une présentation détaillée (et technique) du formalisme de l'énergie élastique et de ses conséquences sur les microstructures.

## REFERENCES

- Singer-Loginova I., Singer H. M. , "The phase field technique for modeling multiphase materials", Rep. Prog. Phys. **71**,106501, (2008), pp. 1-32.
- Battacharjee J.K., Battacharyya S., *Non-linear dynamics near and far from equilibrium*, Springer et Hindustan Book Agency (2007).
- Langer J.S., "An introduction to the kinetics of first-order phase transition", dans *Solids far from equilibrium*, édité par C. Godrèche, Cambridge University Press (1992).
- Karma A., "Phase field models of microstructural pattern formation", dans *Thermodynamics, microstructure and plasticity*, édité par A. Finel, D. Mazière et M. Véron, Kluwer Academic Publishers, NATO Science Series II, **108**, (2003), pp. 65-89.
- Emmerich H. , *The diffuse interface approach in materials science*, Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag Berlin (2003).
- Wang Y., Chen L.Q. et Khachaturyan A. G., "Modelling of dynamical evolution of micro/mesoscopic morphological patterns in coherent phase transformation", in *Computer Simulation in Materials Science: Nano/meso/macrosopic space and time scales*, édité par H. O. Kirchner, L. P. Kubin, V. Pontikis, Kluwer academic publishers, NATO ASI Series E, **308**, 2, (1995), pp. 325-371.
- Khachaturyan A. G. , *The Theory of Structural Transformations in Solids*, Wiley, New York (1983).