

Towards a more realistic discrete element model of solid-state sintering: grain growth and non-spherical particles

Brayan PAREDES GOYES

Sous la direction de Christophe MARTIN et David JAUFFRES

Vendredi 2 décembre 2022 à 14h00

Amphi Wilfrid Kilian (ISTerre, Domaine Universitaire)

Jury :

- Marc BERNACKI, Professeur, Mines ParisTech (Rapporteur)
- Guillaume BERNARD-GRANGER, Directeur de Recherche, CEA Marcoule (Rapporteur)
- Rajendra BORDIA, Professeur, Clemson University (Rapporteur)
- Helen REVERON, Directrice de Recherche CNRS, MATEIS (Examinatrice)
- Jérôme DURIEZ, Charge de Recherche INRAe, RECOVER (Examineur)
- Bruno CHAREYRE, Maître de conférences, UGA (Examineur)

Résumé : Le frittage à l'état solide est un procédé de mise en œuvre des poudres largement utilisée pour les céramiques et les métaux. Le traitement s'effectue à des températures élevées, inférieures au point de fusion. Consolidation, densification et croissance des grains se produisent au cours du frittage. La méthode des éléments discrets (DEM) a été appliquée efficacement pour modéliser la densification et la consolidation à l'échelle mésoscopique pour des particules sphériques. Néanmoins, la croissance des grains affecte le frittage pendant les étapes intermédiaires et finales. Elle n'est pas prise en compte par les simulations DEM actuelles. Dans ce travail, un modèle réaliste de croissance des grains est développé. Les mécanismes considérés sont la diffusion de surface et la migration des joints de grain. Le modèle de densification standard, basé sur la diffusion aux joints de grain et la diffusion de surface, est raffiné pour prendre en compte les grands rapports de taille des particules. Les deux modèles sont couplés pour étudier l'évolution microstructurale pendant le frittage jusqu'à des densités relatives proches de 0,90. La cinétique de densification et de croissance des grains, les trajectoires de frittage et l'évolution de la distribution de taille des particules sont analysées pour un empilement initial avec une distribution de taille réaliste. Les résultats sont en bon accord avec les données expérimentales de la littérature sur la croissance des grains pour le frittage conventionnel de l'alumine. La croissance des grains est particulièrement problématique et difficile à éviter pour les nanopoudres. Une approche possible pour limiter la croissance des grains est le frittage en deux étapes, qui utilise une combinaison de températures élevées et basses pendant le cycle thermique de frittage. Les simulations DEM sont utilisées pour explorer les mécanismes qui peuvent expliquer le succès du frittage en deux étapes. Un autre moyen d'améliorer le réalisme des modèles de frittage DEM est de considérer les formes réelles des particules plutôt que des sphères. Ceci est particulièrement pertinent pour le frittage puisque la force motrice est la courbure locale. La forme réelle des particules peut être capturée à l'aide de la méthode des éléments discrets Level-Sets (LS-

DEM). Un algorithme de détection des contacts basé sur l'optimisation est proposé pour réduire le temps de calcul. La mise en œuvre proposée de la LS-DEM est une preuve de concept de son efficacité potentielle pour le frittage. À titre d'illustration, des simulations d'empilement de particules ellipsoïdales avec des interactions élastiques et de frittage sont présentées. Les simulations de frittage permettent d'analyser l'influence du rapport d'aspect des particules sur le retrait.

Mots-clés : frittage, méthode des éléments discrets, croissance des grains, nanopoudres, frittage en deux étapes, particules non sphériques, Level-Sets