



### **Science Arts & Métiers (SAM)**

is an open access repository that collects the work of Arts et Métiers Institute of Technology researchers and makes it freely available over the web where possible.

This is an author-deposited version published in: <https://sam.ensam.eu>  
Handle ID: <http://hdl.handle.net/10985/10898>

#### **To cite this version :**

Laurent BARRALLIER, Sébastien JÉGOU, Regis KUBLER - Modélisation multiphysique et analyse de contraintes dans les aciers nitrurés - In: Congrès Français de Mécanique (19; Marseille ; 2009), France, 2009-08 - 19<sup>ème</sup> Congrès Français de Mécanique - 2009

Any correspondence concerning this service should be sent to the repository

Administrator : [scienceouverte@ensam.eu](mailto:scienceouverte@ensam.eu)



# Modélisation multiphysique et analyse de contraintes dans les aciers nitrurés

R.F. KUBLER, S. JEGOU, L. BARRALLIER

Arts et Metiers ParisTech, Laboratoire Mecasurf, 2 cours des Arts et Métiers, 13617, Aix-en-Provence  
regis.kubler@ensam.eu

## Résumé :

*Cette étude présente les capacités d'une modélisation de la nitruration, procédé thermo-chimique destiné à améliorer la tenue en service des pièces mécaniques. La formation d'un gradient de microstructure accompagné d'une variation de volume génère un gradient de contraintes résiduelles. Le modèle se base sur une étape de diffusion/précipitation décrivant les évolutions thermo-chimiques lors du traitement. Une description micromécanique multi-échelles permet de déterminer la distribution des contraintes résiduelles accompagnant le gradient de microstructure via la formation de nitrures. Les simulations sont confrontées à des analyses de contraintes par diffraction des rayons X.*

## Abstract :

*This work deals with the presentation of a modelling tool for nitriding. Nitriding is a thermochemical process which is used to improve the fatigue life of structural parts. A microstructural gradient is created accompanied by a volume change, generating a residual stress profile. The model is based on a diffusion/precipitation step describing the thermochemical evolutions during the process. A micromechanical multiscale modelling enables the determination of the residual stress distribution accompanying the microstructural gradient via nitrides formation. Stress estimations are compared to experimental X-ray diffraction stress analysis.*

**Mots clés :** Nitruration, modélisation micromécanique, contraintes résiduelles.

## 1 Introduction

La nitruration gazeuse est un traitement thermo-chimique qui a pour but l'augmentation de durée de vie des pièces mécaniques [1],[2] par génération de contraintes résiduelles de compression. Ce traitement consiste à faire diffuser des atomes d'azote en surface à des températures comprises entre  $400^{\circ}C$  et  $580^{\circ}C$  et ce pour des temps pouvant atteindre plus d'une centaine d'heures dans le cas d'une nitruration profonde. Dans la microstructure initiale, les éléments d'addition (Cr, Mo, V, ...) sont présents en solution solide de substitution dans la ferrite ainsi que dans des carbures issues des traitements thermiques. Lors de la nitruration, des changements microstructuraux en proche surface créent une couche de combinaison (  $5 - 50 \mu m$  ) composée de nitrures de fer ( $Fe_4N-\gamma'$ ,  $Fe_{2-3}N-\varepsilon$ ) et une couche de diffusion (  $100 - 1000 \mu m$  ) où des nitrures nanométriques se forment au sein d'une matrice polycristalline de ferrite. Les nitrures formés sont de deux types, des nitrures cohérents se formant à partir des éléments en solution solide et des nitrures incohérents se formant à partir des carbures de revenu. Ces derniers provenant de la transformation des carbures ( $M_{23}C_6$ ,  $M_7C_3$ ) engendrent une diffusion du carbone qui précipite sous forme de cémentite  $M_3C$  polycristalline aux joints de grains ferritiques parallèles à la surface. Les nitrures sont du type  $MN$  avec  $M=Cr, V, Mo$ .

Cette évolution microstructurale s'accompagne de variations de volume dans les phases, générant un gradient de contraintes résiduelles lors de la nitruration [3]. L'objet de cette étude est la présentation d'un modèle thermo-chimico-mécanique de prédiction du champ de contraintes résiduelles des aciers ([4], [5], [6]) et son adaptation à plusieurs métallurgies. Les équations constitutives sont données dans la section 2. Une application à la nuance 32CrMoV13 est présentée dans la section 3.

## 2 Equations constitutives

Le modèle procède en trois étapes à partir des résultats de diffusion de l'azote et du carbone :

- une étape de calcul des fractions massiques des phases formées par précipitation lors de la nitruration,
- une étape de calcul de la variation de volume accompagnant les phases formées,
- un calcul mécanique multiphasé autocohérent.

Concernant la modélisation de la précipitation, les calculs thermodynamiques sont effectués, à l'équilibre à l'aide du logiciel Thermocalc, à partir des profils de diffusion d'azote et de carbone. Les natures des phases en

présence et leurs fractions massiques  $w_{\phi_i}$  respectives permettent de calculer leurs fractions volumiques  $y_{\phi_i}$  et leurs variations de volume  $\Delta V/V$ . Les calculs des variations de volume et des champs mécaniques se font en comparant l'état final à l'état initial.

## 2.1 Variation de volume accompagnant la précipitation

La fraction volumique de chaque phase  $\phi_i$  (ferrite,  $MN$ ,  $M_{23}C_6$ ,  $M_3C$ ,  $Fe_{2-3}N$ ...) se calcule à partir des fractions massiques  $w_{\phi_i}$  et des volumes massiques  $v_{\phi_i}$

$$y_{\phi_i} = \frac{w_{\phi_i} v_{\phi_i}}{\sum_{i=1}^n w_{\phi_i} v_{\phi_i}} \quad (1)$$

où le volume massique est le rapport entre le volume molaire de la phase dépendant essentiellement de sa structure cristalline, et sa masse molaire fonction des coefficients stoechiométriques.

La variation de volume  $\Delta V/V$  est déterminée en comparant le volume des précipités après nitruration au volume de matière dont les transformations sont issues.

Le volume total de matière est calculé par :

$$V = m \sum_{i=1}^n w_{\phi_i} v_{\phi_i} \quad (2)$$

où  $w_{\phi_i}$  est la fraction massique et  $v_{\phi_i}$  le volume massique de la phase  $\phi_i$ .

Un bilan de matière permet de calculer la variation de masse au cours de la cinétique de diffusion/précipitation. Au cours de la nitruration, la diffusion d'azote et de carbone engendre un gain de masse  $\Delta m = m' - m$ ,  $m$  et  $m'$  étant les masses totales avant et après nitruration.

En faisant l'hypothèse que la masse des éléments lourds (Fe, Cr, V...) est conservée et donc que seule la masse des éléments légers participe au gain de masse, la variation de masse totale s'écrit :

$$\Delta m = m \left( \frac{1 - \sum_{\text{lourds}} w_{Z_j}}{1 - \sum_{\text{lourds}} w'_{Z_j}} - 1 \right) \quad (3)$$

où  $w_{Z_j}$  et  $w'_{Z_j}$  sont les fractions massiques de l'élément  $Z_j$  respectivement avant et après la nitruration.

Les volumes  $V_p$  et  $V'_p$  de précipités respectivement avant et après nitruration se déterminent par :

$$V_p = m \sum_{i=2}^n w_{\phi_i} v_{\phi_i} ; V'_p = m' \sum_{i=2}^{n'} w'_{\phi_i} v'_{\phi_i} \quad (4)$$

Le calcul de la variation de volume  $\Delta V/V$  accompagnant la formation des précipités au cours de la nitruration est effectué différemment si :

- la ferrite se transforme en précipités, ce qui s'observe par une augmentation de la masse de fer contenue dans la masse totale des précipités (i.e.  $m_{Fe}^p > m_{Fe}^p$ ). Le volume de ferrite se transformant en précipités s'exprime par :

$$V_{ferrite \rightarrow precipites} = (m_{Fe}^{ferrite} - m_{Fe}^{iferrite}) v_{ferrite} \quad (5)$$

où  $m_{Fe}^{ferrite}$  est la masse de fer dans la ferrite avant nitruration et  $v_{ferrite}$  le volume massique de ferrite. La variation de volume est :

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{V'_p}{V_{ferrite \rightarrow precipites} + V_p} - 1 \quad (6)$$

- les précipités se transforment en ferrite, se traduisant par une diminution de la masse de fer contenue dans la masse totale des précipités (i.e.  $m_{Fe}^p < m_{Fe}^p$ ). Le volume de précipités se transformant en ferrite s'exprime par :

$$V_{precipites \rightarrow ferrite} = (m_{Fe}^p - m_{Fe}^{iferrite}) v_{ferrite} \quad (7)$$

La variation de volume est :

$$\frac{\Delta V}{V} = \frac{V'_p + V_{precipites \rightarrow ferrite}}{V_p} - 1 \quad (8)$$

## 2.2 Modélisation micromécanique multiéchelles

La variation de volume et la fraction volumique des précipités sont des données d'entrée pour une modélisation autocohérente à deux phases type inclusion/matrice. La ferrite affectée d'un comportement élastoplastique représente la matrice et les précipités avec un comportement élastique et une déformation libre jouent le rôle des inclusions. La variation de volume isotrope est considérée comme une partie de la déformation libre  $\varepsilon^l$ . Dans l'hypothèse d'une matrice ferritique isotrope, les précipités sont modélisés par des inclusions sphériques. Les grandeurs locales  $X$  sont liées aux grandeurs macroscopiques  $\hat{X}$  par des relations de localisation issues d'un schéma autocohérent classique. Les déformations élastiques dans chaque phase  $\phi_i$  s'expriment en fonction de la déformation élastique macroscopique  $\hat{\varepsilon}^e$ , des déformations libres par phase  $\varepsilon_{\phi_i}^l$  et macroscopiques :

$$\varepsilon_{\phi_i}^e = (I + U_{\phi_i}) : \left( \hat{\varepsilon}^e + (I - S) : (\hat{\varepsilon}^l - \varepsilon_{\phi_i}^l) \right) \quad (9)$$

où la déformation libre macroscopique s'écrit :

$$\hat{\varepsilon}^l = S^{-1} : \sum_{i=1}^n \left[ [I - (I + U_{\phi_i})] : (I - S) \right] : \varepsilon_{\phi_i}^l y_{\phi_i} \quad (10)$$

Ainsi, les contraintes par phase s'expriment par :

$$\sigma_{\phi_i} = C_{\phi_i} : \varepsilon_{\phi_i}^e \quad (11)$$

$C_{\phi_i}$  est le tenseur des modules d'élasticité de la phase  $\phi_i$ ,  $S$  le tenseur d'Eshelby calculé pour des inclusions sphériques et  $U$  le tenseur de polarisation.

La contrainte macroscopique s'obtient par homogénéisation :

$$\hat{\sigma} = \sum_{\phi_i} y_{\phi_i} \sigma_{\phi_i} \quad (12)$$

Le comportement élastoplastique de la ferrite est décrit par un critère de plasticité de Von-Mises avec un écrouissage isotrope suivant une loi d'Hollomon ( $\sigma = \sigma_y + (\varepsilon^p)^n$ ). Les conditions aux limites d'un massif semi-infini définissent un état de contrainte macroscopique plan ( $\hat{\sigma}_{zz} = 0$ ). L'application du modèle à la nitruration d'un massif semi-infini générant un gradient de contraintes tient compte de l'équilibre mécanique global du massif. Le modèle permet l'estimation de la distribution des contraintes ( $\sigma_{xx} - \sigma_{zz}$ ) par phases telle que déterminée par une analyse par diffraction des rayons X dans un plan parallèle à la surface de nitruration.

## 3 Résultats et discussions

Les équations constitutives sont implémentées dans une routine ADA avec un algorithme de convergence de type Newton-Raphson. La modélisation est appliquée au calcul du champ de contraintes résiduelles d'un acier industriel pour nitruration 32CrMoV13 dont la composition nominale est donnée dans le tableau 1. La nitruration est effectuée à 560°C pendant 100 h. Les modules de Young de la ferrite et des précipités sont respectivement 210 GPa et 400 GPa avec un coefficient de Poisson de 0.29. Les paramètres d'écrouissage de la ferrite sont  $\sigma_y = 360$  MPa et  $n = 0.17$ . Le modèle utilise les profils expérimentaux de carbone et

TAB. 1 – Composition nominale de la nuance 32CrMoV13

%C	%Cr	%Mo	%V
0.3	3	1	0.2

d'azote déterminés par évaporation de copeaux et microsonde en fonction de la profondeur (figure 1) [6]. La concentration en azote est maximale en surface et décroît pour s'annuler au delà de 800  $\mu m$ . La diffusion du carbone est constatée en surface et à coeur (500  $\mu m$ ). La figure 2 présente les profils de fraction massique des phases formées après nitruration. Les carbures de type  $M_{23}C_6$  initialement présents ont été dissous jusqu'à une profondeur de 600  $\mu m$ . On constate que le carbone diffusé se combine aux éléments d'alliage pour former de la cémentite alliée  $M_3C$ . Le profil de cémentite alliée  $M_3C$  suit le profil du carbone rétrodiffusé. Concernant les nitrures, la fraction d'azote en surface forme des nitrures de fer de type  $Fe_{2-3}N$  sur une profondeur de 50  $\mu m$  correspondant à la couche de combinaison. La fraction volumique de nitrures  $MN$  est constante sur la couche nitrurée et vaut 10%.

La figure 3 présente le profil de la variation de volume tel que calculé dans les équations (6) et (8) et la fraction volumique totale de précipités en fonction de la profondeur. Dans la couche de diffusion, une variation de

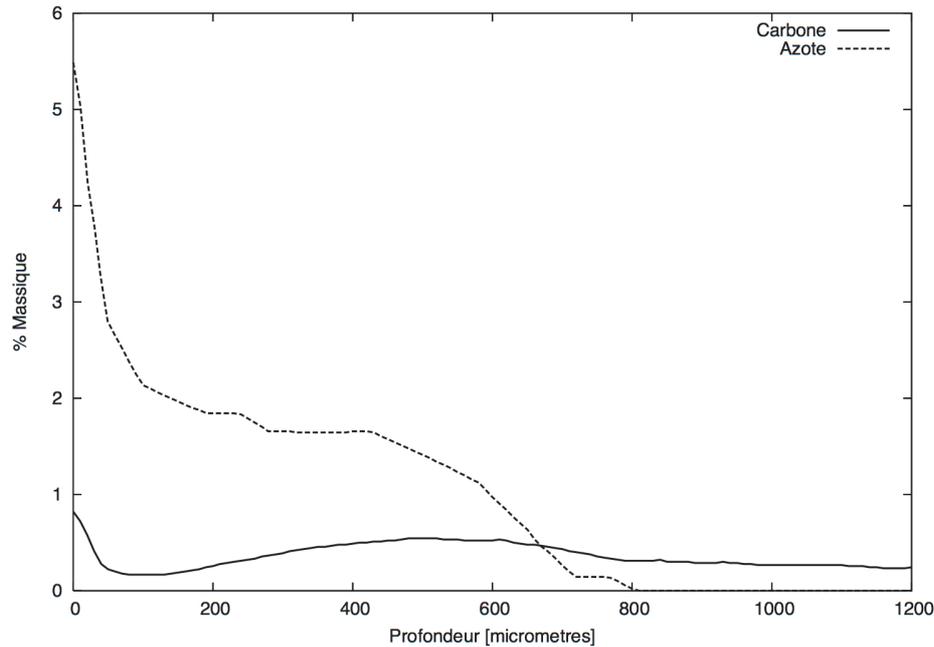


FIG. 1 – Profils expérimentaux d'azote et de carbone pour une nitruration de 96h à 560°C.

volume de l'ensemble des précipités peut atteindre 37% pour une fraction volumique de 17% à une profondeur de 520  $\mu m$ .

Le champ de contraintes ( $\sigma_{xx} - \sigma_{zz}$ ) est calculé dans la ferrite. La figure 4 présente la comparaison entre l'estimation des contraintes et la détermination des contraintes par une analyse par DRX (méthode des  $\sin^2(\psi)$ ) avec enlèvement de matière par voie électrochimique). Le champ de contraintes résiduelle est surestimé par rapport aux résultats expérimentaux. Le maximum de contraintes simulé correspond au maximum de variation de volume et de fraction volumique de précipités à une profondeur de 520  $\mu m$ .

#### 4 Conclusion et perspectives

Le modèle présenté dans cette étude permet d'estimer le niveau de contraintes générées lors d'une nitruration d'une nuance d'acier industriel. Il est implémentable dans des codes de calcul éléments finis pour simuler le comportement de composants mécaniques [7]. Il est également un outil de design pour le métallurgiste pour une meilleure compréhension de l'influence des éléments d'alliage sur la génération de contraintes. A cet effet, le modèle présenté est aussi appliqué à des compositions d'aciers de laboratoire (Fe-C-Cr).

#### Références

- [1] Rozendaal H., Colijn P., and Mittemeijer E. Surf Eng, 5, 30, 1985.
- [2] Mittemeijer E. Mater Sci Forum, 223(102-104), 1992.
- [3] Mittemeijer E., Vogels A., and Van der Schaaf P. J. Mater Sci, 3, 153, 1980.
- [4] Barrallier L. Genèse des contraintes résiduelles de nitruration - Etude expérimentale et modélisation. PhD thesis, ENSAM, 1992.
- [5] Barrallier L. and Barrallis J. In Proceedings of ICRS4, pages 498–505, 1994.
- [6] Jegou S., Kubler R., Barrallier L., and Roch F. Proceedings ICRS8, 2008.
- [7] Goret V. Modélisation de la nitruration : prise en compte de la géométrie des pièces traitées. PhD thesis, ENSAM, 2006.

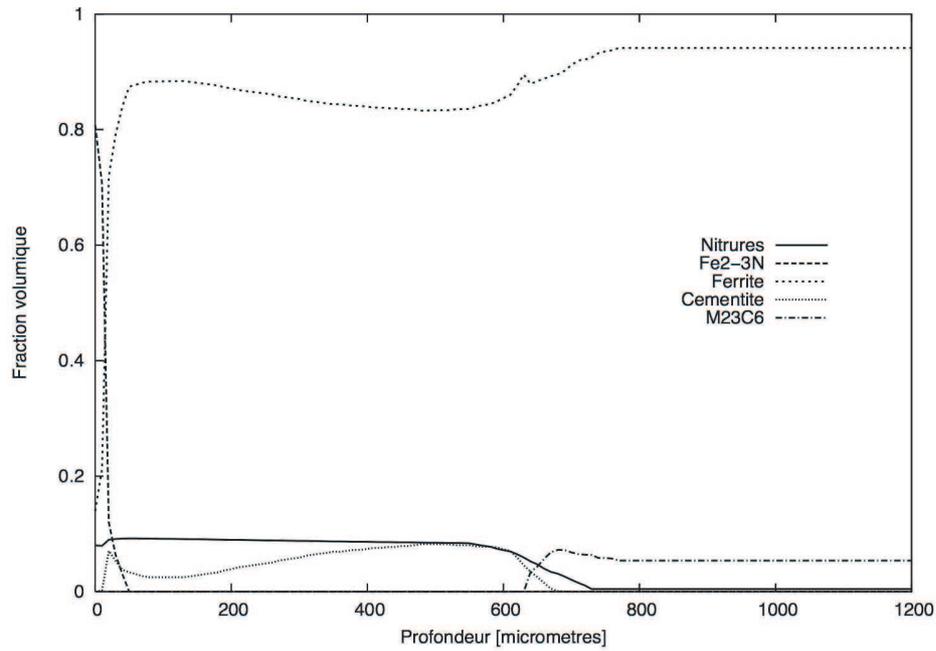


FIG. 2 – Profils des fractions volumiques de phases pour une nitruration de 96h à 560°C.

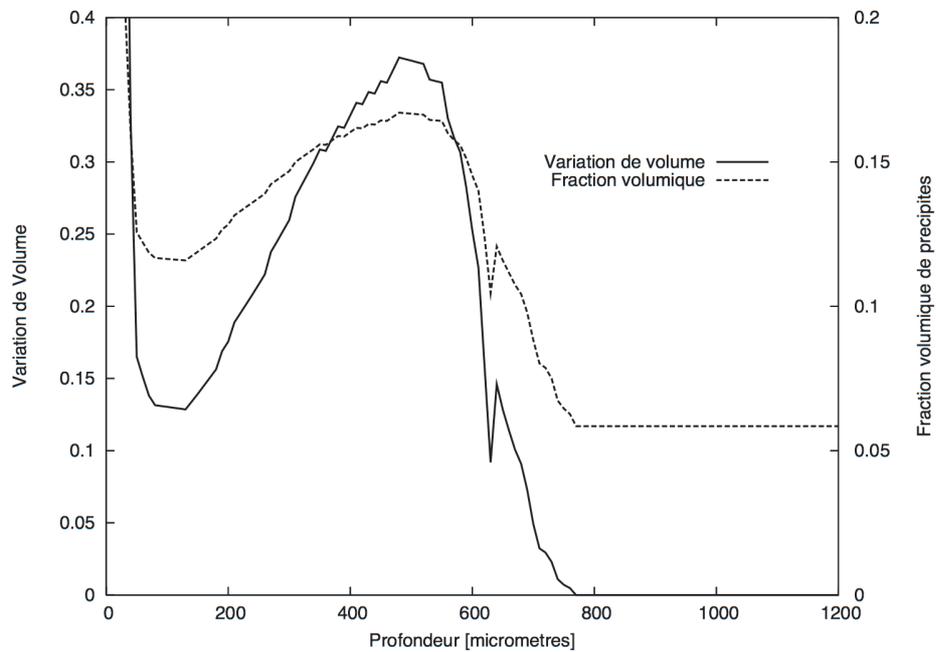


FIG. 3 – Fraction volumique de précipités et variation de volume en fonction de la profondeur pour une nitruration de 96h à 560°C.

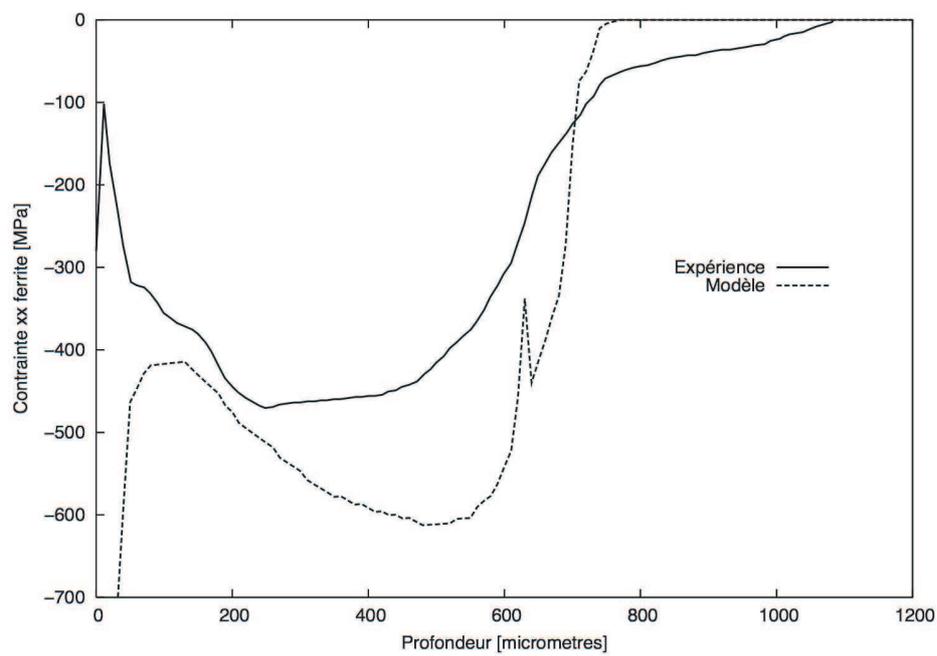


FIG. 4 – Profil de contraintes résiduelles dans la ferrite pour une nitruration de 96h à  $560^{\circ}C$ . Modèle vs. analyse par diffraction des rayons X.