



**HAL**  
open science

## Prévision de l'effet de la taille de grain sur les traitements thermochimiques

Victor Lacaille, Constance Morel, Eric Feulvarch, Guillaume Kermouche,  
Jean-Michel Bergheau

► **To cite this version:**

Victor Lacaille, Constance Morel, Eric Feulvarch, Guillaume Kermouche, Jean-Michel Bergheau.  
Prévision de l'effet de la taille de grain sur les traitements thermochimiques. CFM 2015 - 22ème  
Congrès Français de Mécanique, Aug 2015, Lyon, France. hal-03446228

**HAL Id: hal-03446228**

**<https://hal.science/hal-03446228>**

Submitted on 24 Nov 2021

**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.

# Analyse de l'effet de la forme des grains sur la prévision du coefficient de diffusion macroscopique lors des traitements thermochimiques de matériaux cristallins.

V. LACAILLE<sup>abc</sup>, C. MOREL<sup>a</sup>, E. FEULVARCH<sup>b</sup>, G. KERMOUCHE<sup>c</sup>, J.-M. BERGHEAU<sup>b</sup>

victor.lacaille@enise.fr

a. Winoa, 528 avenue de Savoie, BP3, 38570, Le Cheylas, France

b. Université de Lyon, ENISE, LTDS, UMR 5513 CNRS, 58 rue Jean Parot, 42023 Saint-Étienne CEDEX 02, France

c. École des Mines de Saint-Étienne, Science of Materials and Structures (SMS) Division, LGF UMR 5307 CNRS, 158 Cours Fauriel, 42023 Saint-Étienne, France

## Résumé

*Les matériaux nanocristallins présentent des propriétés de diffusion accrues dues à leur forte densité de joints de grain. Afin de maîtriser totalement le processus de diffusion lors de traitements thermochimiques de tels matériaux, ces travaux s'attachent à donner un modèle de coefficient de diffusion macroscopique en fonction de la taille et de la forme des grains dans un polycristal. Ils s'appuient sur une technique d'homogénéisation effectuée après une analyse par éléments finis sur des volumes élémentaires représentatifs. On construit ainsi une expression analytique du coefficient de diffusion macroscopique en fonction de la taille de grain et de la surface de joints de grain projetée sur la direction de diffusion. Par une analyse de schémas élémentaires en deux dimensions, on extrapole le modèle trouvé à toute microstructure périodique.*

**Mots clés : Diffusion, taille de grain, forme de grain, nitruration, éléments finis.**

## 1 Introduction

Les matériaux nanostructurés sont connus pour avoir des propriétés de surfaces accrues comme une haute dureté ou une forte résistance à la fatigue [1]. Ils présentent également de très bonnes propriétés de diffusion dues à leur forte densité de joints de grain que l'on peut considérer comme des canaux de diffusion rapide. Pour prévoir cor-

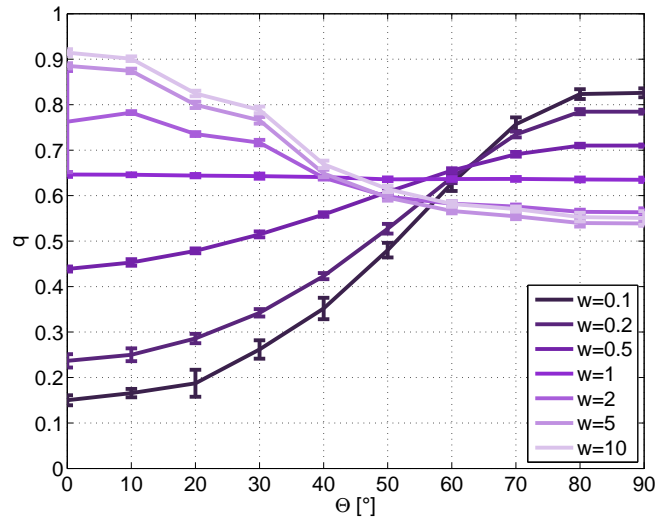


Figure 1: Abaque du paramètre  $q$  en fonction des paramètres de forme des grains lorsque ceux-ci sont considérés comme des ellipsoïdes de révolution.  $w$  est le rapport d'aspect et  $\Theta$  l'angle entre la direction de diffusion et l'axe de révolution des ellipsoïdes.

rectement le processus de diffusion dans de tels matériaux, notamment dans le cadre de la simulation des traitements thermochimiques, nous avons récemment proposé un modèle de coefficient de diffusion macroscopique  $D$  en fonction de la fraction volumique de joints de grains  $f_v$  et des coefficients de diffusion  $D_g$  et  $D_{gb}$  respectivement aux grains et aux joints de grain [2] :

$$D = (1 - qf_v) D_g + qf_v D_{gb} \quad (1)$$

Ce modèle est issu de calculs par éléments finis sur des volumes élémentaires représentatifs (VER) à grains équiaxes générés par le logiciel NEPER [3]. Le paramètre  $q$  dépend de la forme des grains et semble être représentatif de la proportion de joints de grains participant à la diffusion. Dans le cas des grains équiaxes il vaut  $q = 0,64$ . Cela constitue une avancée majeure dans le domaine de la transition d'échelle vis à vis de la diffusion car ce coefficient prend en compte les grains dont la forme présente les joints de grain non parallèles à la direction de diffusion. De plus, l'application de la méthode ayant servi à construire ce modèle, sur des VER à grains non équiaxes (générés grâce à DREAM3D [4]) permet de construire un abaque des valeurs de  $q$  en fonction des paramètres de forme des grains (Figure 1).

Bien que donnant accès à la forme du coefficient de diffusion macroscopique en fonction de la taille et de la forme des grains, ce résultat est empirique et est uniquement basé sur des mesures numériques.

Cette étude propose d'étudier la relation entre le paramètre de forme  $q$  et la morphologie des joints de grain en s'appuyant d'une part sur un calcul de projection des

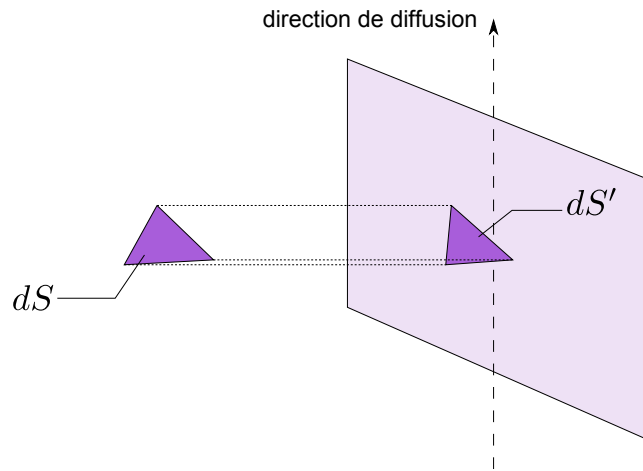


Figure 2: Projection d'une surface sur une direction.

jointes de grain sur la direction de diffusion et ensuite sur une étude de schémas élémentaires en deux dimensions.

## 2 Constat : Relation entre paramètre de forme et surface projetée

### 2.1 Méthode

Étant donné que le paramètre de forme  $q$  semble être représentatif de la proportion de joints de grains participant à la diffusion, on se propose d'étudier la relation entre ce paramètre et la projection de la surface de joints de grains sur la direction de diffusion (Figure 2). En réalité, il s'agit de la somme des projections  $dS'$  de chaque élément de cette surface de joint de grain  $dS$  sur un plan contenant la direction de diffusion et pour lequel chaque projection est maximale.

### 2.2 Résultat

En effectuant le calcul de la surface projetée sur la direction de diffusion pour tous les VER ayant servi à construire la figure 1, on obtient la relation suivante :

$$q \approx \left( \frac{S'}{S} \right)^2 = \left( \frac{\int dS'}{\int dS} \right)^2 \quad (2)$$

### 2.3 Discussion

Ainsi, pour une forme de grain quelconque, si l'on connaît le rapport  $\frac{S'}{S}$ , on peut

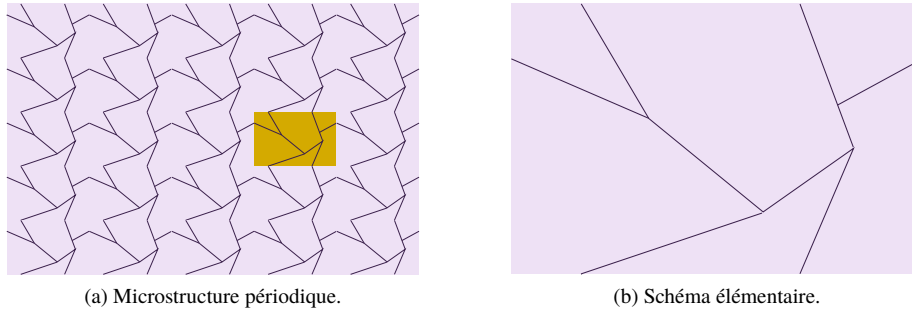


Figure 3: Microstructure périodique et schéma élémentaire associé.

connaître le paramètre de forme  $q$  et déduire le coefficient de diffusion macroscopique de la microstructure correspondante. On observe cependant que l'exposant 2 de cette relation est à nouveau un constat empirique. On se propose dans la seconde partie de cette étude d'expliquer la forme de cette relation et la valeur de cet exposant à partir de modèles de diffusion en deux dimensions.

## 3 Explication : Étude de schémas élémentaires

### 3.1 Méthode

Dans cette partie, on étudie des modèles en deux dimensions de diffusion différenciée aux joints de grain de façon analytique. Les modèles étudiés sont des schémas élémentaires d'une microstructure périodique (Figure 3). Par un bilan des flux de diffusion à travers ces motifs à l'équilibre, on extrait le coefficient  $q$  en fonction des paramètres géométriques du modèle. Les trois types de modèles étudiés sont :

1. Joint de grain unique ;
2. Joints de grains multiples ;
3. Joints de grains avec embranchements.

On compare les résultats obtenus à ceux obtenus par éléments finis en appliquant sur les schémas élémentaires, la même méthode que pour obtenir le modèle en équation (1).

### 3.2 Joint unique

Dans le cas d'un joint unique, l'analyse des flux à l'équilibre donne pour  $q$  le modèle suivant :

$$q = \left( \frac{L}{L_{gb}} \right)^2 \quad (3)$$

où  $L$  est la hauteur du motif élémentaire et  $L_{gb}$  la longueur du joint de grain. On retrouve ainsi exactement le modèle proposée en équation (2) car la projection de  $L_{gb}$  sur la verticale est exactement la longueur  $L$ .

### 3.3 Joints multiples

Dans le cas de joints multiples ne comportant pas d'intersection, l'analyse des flux à l'équilibre donne pour  $q$  le modèle suivant :

$$q = L^2 \frac{\sum_{i=1}^n \frac{1}{L_{gbi}}}{\sum_{i=1}^n L_{gbi}} \quad (4)$$

où  $L$  est la hauteur du motif élémentaire,  $n$  est le nombre de joints de grains et  $L_{gbi}$  la longueur du  $i^{\text{ème}}$  joint de grain. On retrouve encore le carré la longueur projetée  $L$  au numérateur.

### 3.4 Joints embranchés

Dans le cas de joints multiples comportant des intersection, on sépare le schéma en  $p$  étages délimités par les convergences et divergences de joints de grain. L'analyse des flux à l'équilibre donne pour  $q$  le modèle suivant :

$$q = \frac{L^2 \left( \sum_{k=1}^p (B_{k+1,p+1} - B_{k,p+1}) \sum_{i=1}^{n_k} \frac{1}{L_{gb(k,i)}} \right)}{p \sum_{k=1}^p \sum_{i=1}^{n_k} L_{gb(k,i)}} \quad (5)$$

où  $L$  est la hauteur du motif élémentaire,  $n_k$  est le nombre de joints de grains dans l'étage  $k$  et  $L_{gb(k,i)}$  la longueur du  $i^{\text{ème}}$  joint de grain de l'étage  $k$  et  $[B]$  est la matrice inverse de  $[A]$  où  $[A]$  est définie comme :

$$[A] = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & & & & \vdots \\ & & -(\alpha_{k-1} + \alpha_k) & & & & & & 0 \\ 0 & \cdots & \alpha_k & -(\alpha_k + \alpha_{k+1}) & & & & & \vdots \\ & & 0 & \alpha_{k+1} & -(\alpha_{k+1} + \alpha_{k+2}) & & & & 0 \\ & & & & & & & & \vdots \\ 0 & & & & 0 & & & & \ddots \\ & & & & & & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (6)$$

Avec

$$\alpha_k = \sum_{i=1}^{n_k} \frac{1}{L_{gb(k,i)}} \quad (7)$$

Une fois de plus, le carré de la longueur projetée sur la verticale se trouve au numérateur de l'expression.

## 4 Conclusion et perspectives

D'une manière générale, les résultats obtenus avec le modèle présenté sont en bon accord avec les calculs par éléments finis. La surface projetée des joints de grains apparaît toujours au carré et au numérateur de chaque modèle, ce qui appuie la forme trouvée en équation (2). Afin d'adapter ce modèle à des microstructures réelles, un modèle de schémas élémentaires en trois dimensions est à élaborer.

## Références

- [1] T. Prezeau, T. Muller, E. Dransart, and Y. Giraud. Amélioration par un prétraitement mécanique de "nanopeening" des performances des traitements thermo-chimiques : Cas de la nitruration et de la carbonitruration basse pression. *Traitements et Matériaux*, 412:37–43, 2011.
- [2] V. Lacaille, C. Morel, E. Feulvarch, G. Kermouche, and J.-M. Bergheau. Finite element analysis of the grain size effect on diffusion in polycrystalline materials. *Computational Materials Science*, 95:187 – 191, 2014.
- [3] R. Quey, P.R. Dawson, and F. Barbe. Large-scale 3d random polycrystals for the finite element method: Generation, meshing and remeshing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 200(17-20):1729 – 1745, 2011.
- [4] Michael Groeber and Michael Jackson. Dream.3d: A digital representation environment for the analysis of microstructure in 3d. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 3(1):5, 2014.