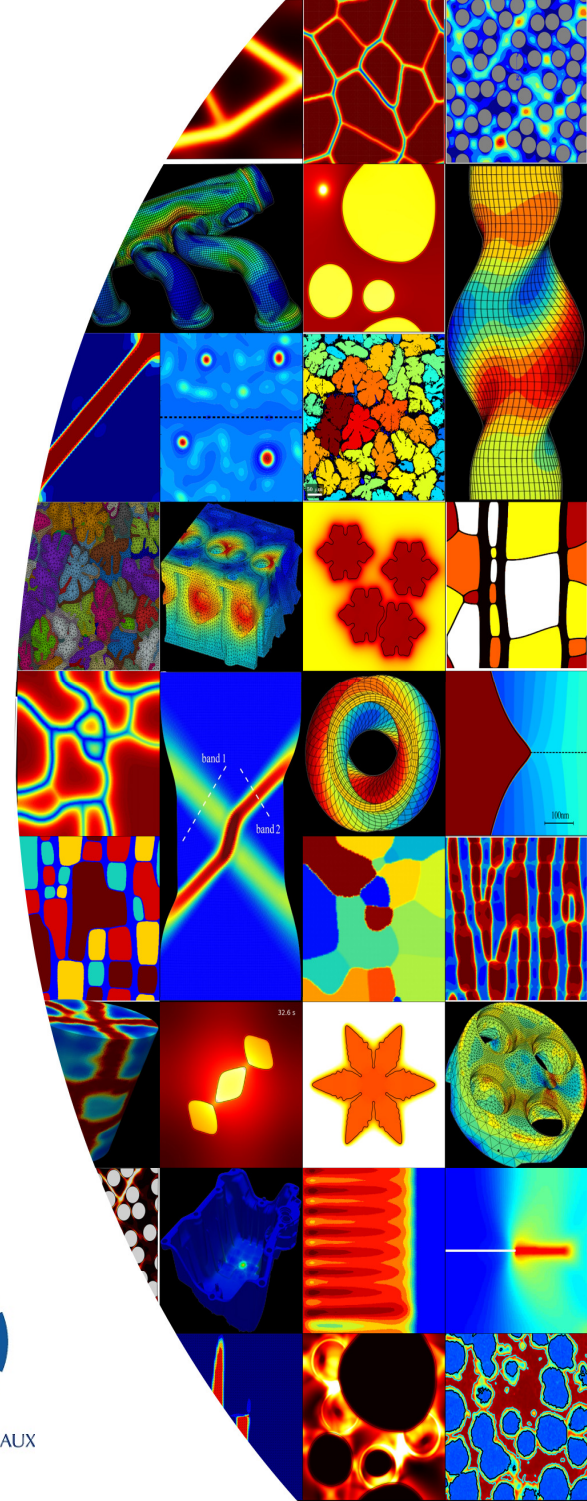
COnCOrD GdR 2081
COuplage méCanique Oxydation Diffusion

CHAMP DE PHASES

Couplage méCanique Oxydation Diffusion



Kais AMMAR

Benoit **APPOLAIRE**, Victor **DE RANCOURT**, Samuel **FOREST**,
Thomas **GHENO**, Wajih **JBARA**, Vincent **MAUREL**

Mines Paris PSL, CNRS UMR 7633
Centre des Matériaux

10 Octobre 2025

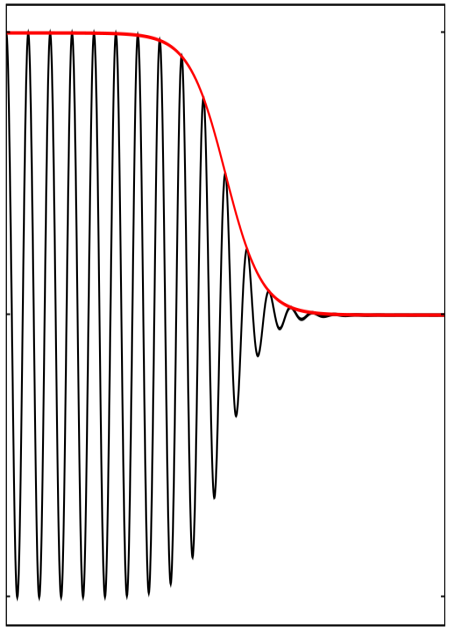
MINES ParisTech | PSL

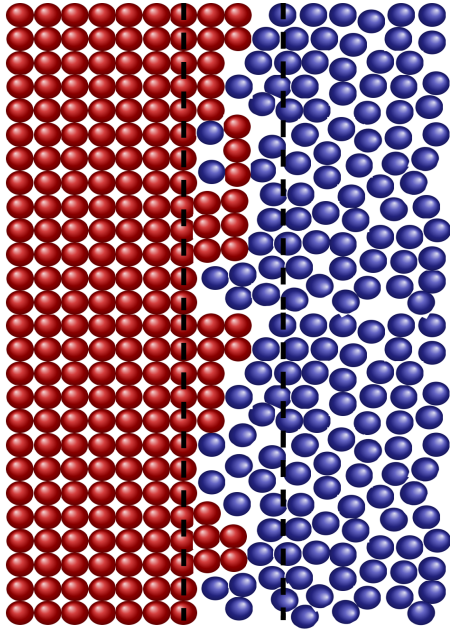
CENTRE DES MATERIAUX P. M. FOURT

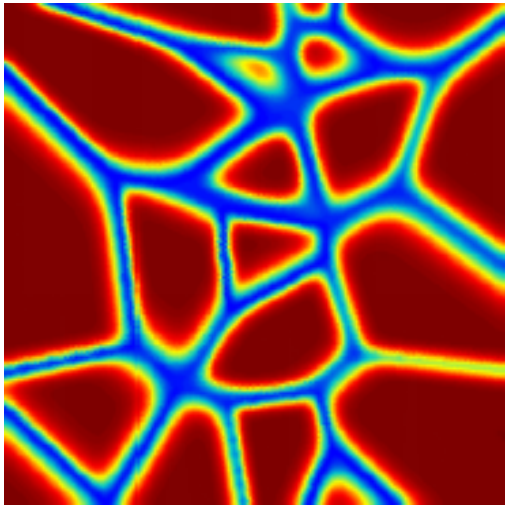
Méthode des champs de phases

Outil de simulation performant pour comprendre la dynamique des surfaces (joints de grains, interfaces)

- Évolution microstructurale (solidification, oxydation et croissance de grains . . .)
- Optimisation de forme
- Recristallisation
- Endommagement



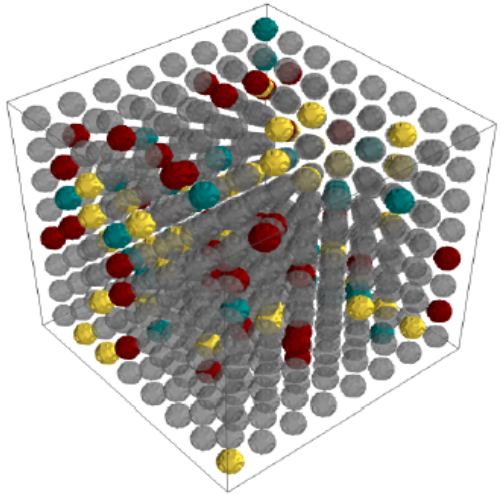




[Abrivard, 2009]



[J. Vitek, MICRESS®]



[Settefrati, 2012]

Plan

1. Modélisation de l'oxydation intergranulaire

2. Evolution microstructurale dans les superalliages

Plan

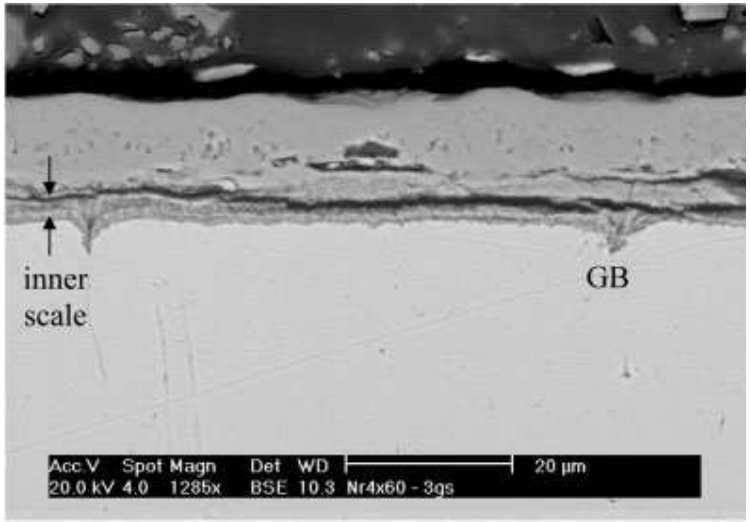
1 Modélisation de l'oxydation intergranulaire

2 Evolution microstructurale dans les superalliages

Modélisation de l'oxydation des aciers inoxydables polycristallins couplée avec la mécanique [V. de Rancourt, 2016].

- Formulation d'un cadre multicomposants couplé diffusion/plasticité cristalline/transformation de phase pour étudier :

  - La croissance des oxydes et **la diffusion multicomposantes** (O et Cr)
  - **L'oxydation intergranulaire**, la diffusion dans les défauts cristallins, i.e. **joints de grains**.
  - Les propriétés mécaniques des deux phases oxydes et métal, modifiées par la diffusion.
  - L'initiation de la fissuration par corrosion sous contrainte SCC



Oxydation dans les joints de grains [Krupp et al., 2006]

Construire un modèle champs de phases, en prenant en compte:

- Système binaire Oxyde-γ; Diffusion Multi-composontes *O* et *Cr*;

Fonctionnelle de l'énergie libre:

$$\begin{aligned}\mathcal{F} &= \int f(\phi, \nabla\phi, c^{O}_{ox}, c^{O}_{\gamma}, c^{Cr}_{ox}, c^{Cr}_{\gamma}, \underset{\sim}{\varepsilon}_{ox}, \underset{\sim}{\varepsilon}_{\gamma}, V_{ox}, V_{\gamma})\mathrm{d}V \\ &= \int \left[f^{ch} + f^{el} + f^{pl} + \frac{\alpha}{2}|\nabla\phi|^2\right]\mathrm{d}V\end{aligned}$$

Densité d'énergie chimique:

$$f^{ch} = h(\phi)f^{ch}_{ox} + \bar{h}(\phi)f^{ch}_{\gamma} + W\phi^2(1-\phi)^2$$

Densité d'énergie quadratique pour chaque phase:

$$f^{ch}_{\psi}(c^{O}_{\psi}, c^{Cr}_{\psi}) = \frac{1}{2}k^{O}_{\psi}(c^{O}_{\psi} - a^{O}_{\psi})^2 + \frac{1}{2}k^{Cr}_{ox}(c^{Cr}_{\psi} - a^{Cr}_{\psi})^2 \quad \text{avec} \quad \psi = \{ox, \gamma\}$$

Densité d'énergie élastique et plastique:

$$f^{el} = h(\phi)f^{el}_{ox} + \bar{h}(\phi)f^{el}_{\gamma} \qquad \text{et} \qquad f^{pl} = h(\phi)f^{pl}_{ox} + \bar{h}(\phi)f^{pl}_{\gamma}$$

Construire un modèle champs de phases, en prenant en compte:

- Système binaire Oxyde-γ; Diffusion Multi-composontes *O* et *Cr*;
- Endommagements induits par l'oxydation.

Fonctionnelle de l'énergie libre:

$$\begin{aligned}\mathcal{F} &= \int f(\phi, \boldsymbol{\nabla}\phi, c_{\text{ox}}^{O}, c_{\gamma}^{O}, c_{\text{ox}}^{\text{Cr}}, c_{\gamma}^{\text{Cr}}, \underset{\sim}{\varepsilon}_{\text{ox}}, \underset{\sim}{\varepsilon}_{\gamma}, \underset{\sim}{\varepsilon}^{d}_{\text{ox}}, \underset{\sim}{\varepsilon}^{d}_{\gamma}, V_{\text{ox}}, V_{\gamma})\,\mathrm{d}V \\ &= \int \left[f^{\text{ch}} + f^{\text{el}} + f^{\text{pl}} + \frac{\alpha}{2}|\boldsymbol{\nabla}\phi|^2\right]\mathrm{d}V\end{aligned}$$

Partition de la déformation: $\underset{\sim}{\varepsilon}_{\psi} = \underset{\sim}{\varepsilon}^{e}_{\psi} + \underset{\sim}{\varepsilon}^{p}_{\psi} + \underset{\sim}{\varepsilon}^{\star}_{\psi} + \underset{\sim}{\varepsilon}^{d}_{\psi}$ avec $\psi = \{\text{ox}, \gamma\}$

Modèle d'endommagement quasi-fragile dans le joint de grains

$$\underset{\sim}{\dot{\varepsilon}}_{d}^{\text{ox},\gamma} = \dot{d}^{\text{ox},\gamma}\,\underline{\boldsymbol{n}}^{\text{GB}} \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^{\text{GB}} \quad \text{et} \quad \dot{d}^{\text{ox},\gamma} = \left\langle \frac{|\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{ox},\gamma} : (\underline{\boldsymbol{n}}^{\text{GB}} \otimes \underline{\boldsymbol{n}}^{\text{GB}})| - Y^{\text{ox},\gamma}}{K_d^{\text{ox},\gamma}} \right\rangle^{n_d^{\text{ox},\gamma}} \text{sign}\left(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{ox},\gamma}\right)$$

Couplage de l'endommagement avec la diffusion:

$$D(d) = D_{\text{undamaged}} + (1 - \exp(-\tau_d d))\left(D_{\text{damaged}} - D_{\text{undamaged}}\right)$$

Construire un modèle champs de phases, en prenant en compte:

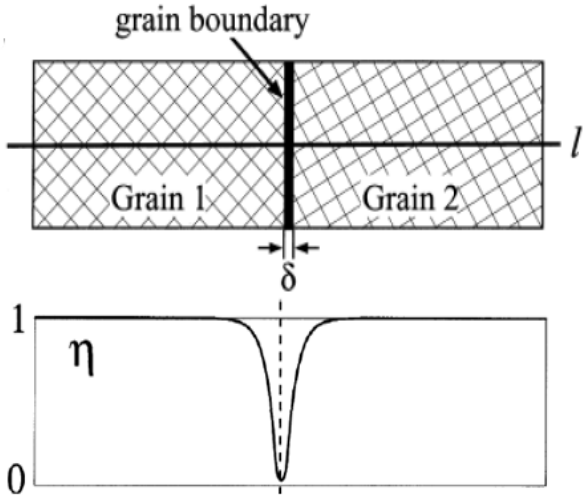
- Système binaire Oxyde-γ; Diffusion Multi-composontes *O* et *Cr*;
- Endommagements induits par l'oxydation.
- Presence des joints de grain.

Fonctionnelle de l'énergie libre:

$$\mathcal{F} = \int f(\phi, \nabla\phi, \eta, c_{ox}^{O}, c_{\gamma}^{O}, c_{ox}^{Cr}, c_{\gamma}^{Cr}, \underset{\sim}{\varepsilon}_{ox}, \underset{\sim}{\varepsilon}_{\gamma}, \underset{\sim}{\varepsilon}_{ox}^{d}, \underset{\sim}{\varepsilon}_{\gamma}^{d}, V_{ox}, V_{\gamma}) \mathrm{d}V$$

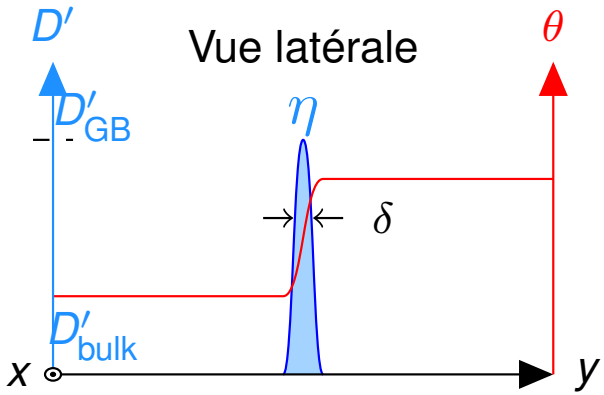
$$= \int \left[f^{ch} + f^{el} + f^{pl} + f^{GB} + \frac{\alpha}{2} |\nabla\phi|^2 \right] \mathrm{d}V$$

Modèle des joints de grains



Variable supplémentaire statique η pour localiser le joint de grain.

Hétérogénéité de la diffusion:
$D^{\gamma}(\eta) = \eta D_{GB} + \overline{\eta} D_{G}^{\gamma}$



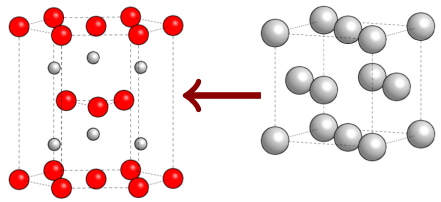
Phase Oxyde

Fluage: Loi de puissance

$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{p}_{ox} = \frac{3}{2}\left\langle \frac{J2_{ox} - R^{0}_{ox}}{K_{ox}} \right\rangle^{n_{ox}} \frac{\underset{\sim}{\sigma}^{dev}_{ox}}{J2_{ox}}$$

$$J2_{ox} = \sqrt{\frac{3}{2}\underset{\sim}{\sigma}^{dev}_{ox} : \underset{\sim}{\sigma}^{dev}_{ox}}$$

Déformation libre anisotrope



$$\underset{\sim}{\varepsilon}^{\star}_{ox} = \begin{pmatrix} 0.02 & 0 & 0 \\ 0 & 0.01 & 0 \\ 0 & 0 & 0.01 \end{pmatrix}$$

Phase métal

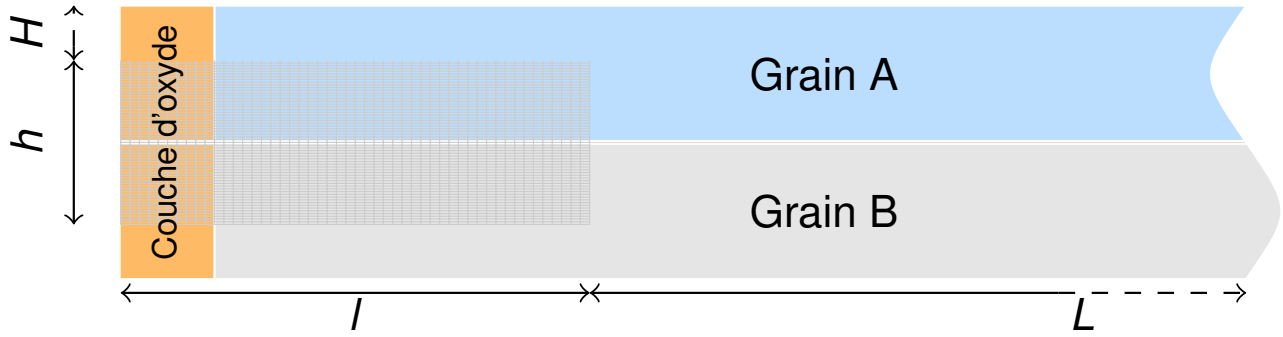
Plasticité cristalline

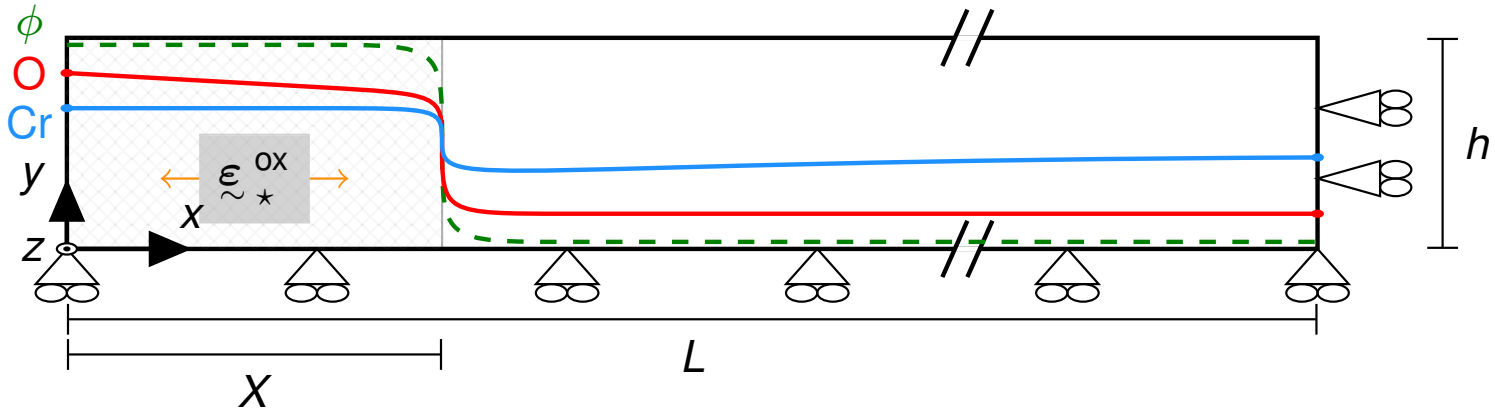
$$\dot{\underset{\sim}{\varepsilon}}^{p}_{\gamma} = \sum_{s} \dot{\gamma}^{s}_{\gamma} \underset{\sim}{m}^{s}_{\gamma}$$

$$\dot{\gamma}^{s}_{\gamma} = \left\langle \frac{|\tau^{s}_{\gamma} - x^{s}_{\gamma}| - R^{s}_{\gamma}}{K_{\gamma}} \right\rangle^{n_{\gamma}} \text{sign}\left(|\tau^{s}_{\gamma} - x^{s}_{\gamma}| - R^{s}_{\gamma}\right)$$

$$\underset{\sim}{m}^{s}_{\gamma} = \frac{1}{2}\left(\underline{l}^{s}_{\gamma} \otimes \underline{n}^{s}_{\gamma} + \underline{n}^{s}_{\gamma} \otimes \underline{l}^{s}_{\gamma}\right),$$

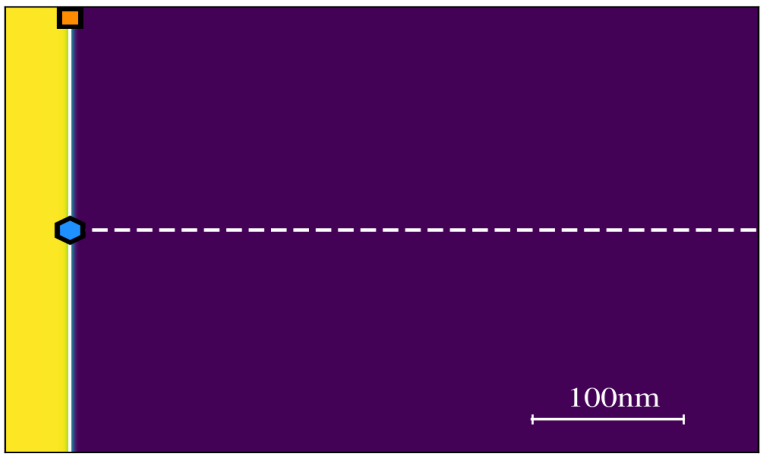
Géométrie du problème et conditions aux limites et initiales

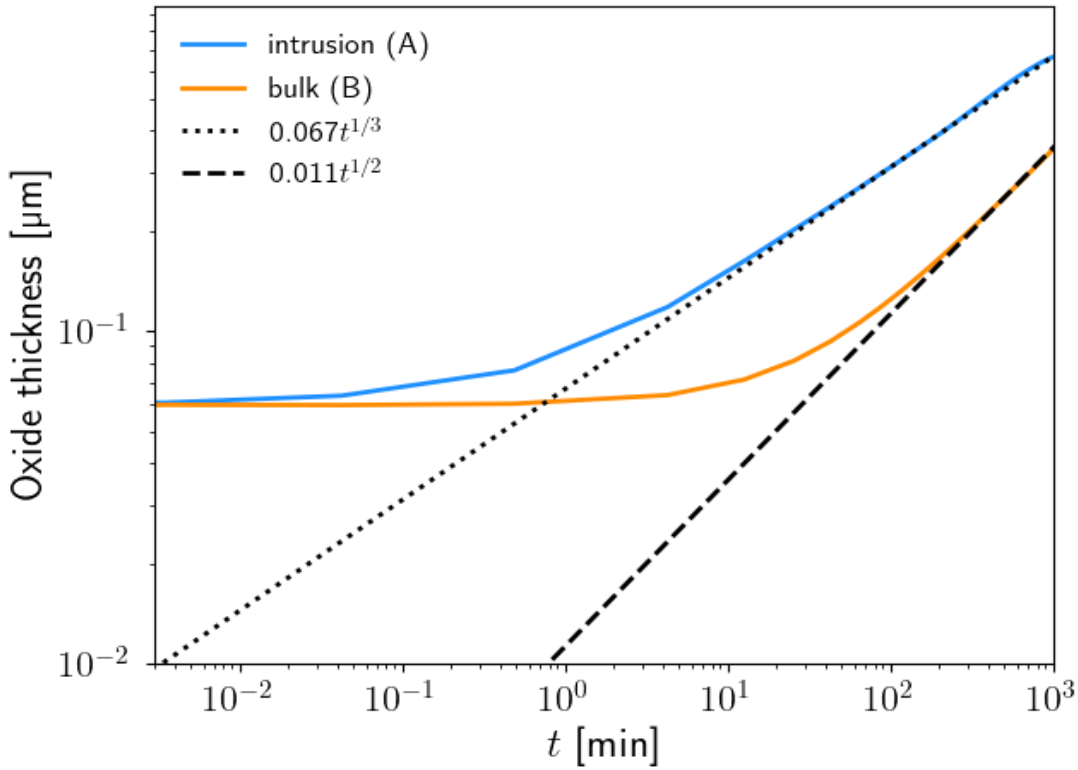




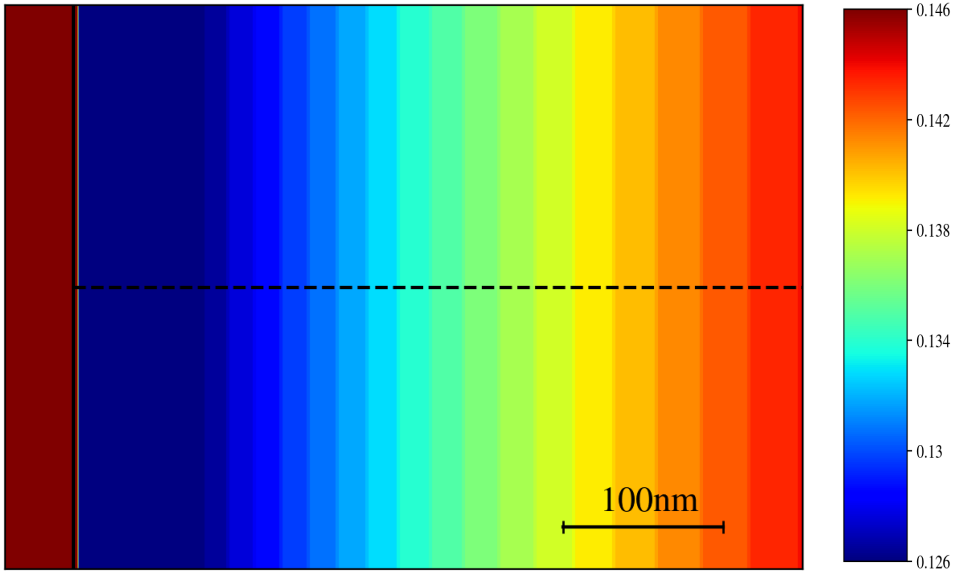
Cinétique de croissance hétérogène:

- Croissance **parabolique** à travers les grains.
- Croissance **cubique** des intrusions d'oxyde

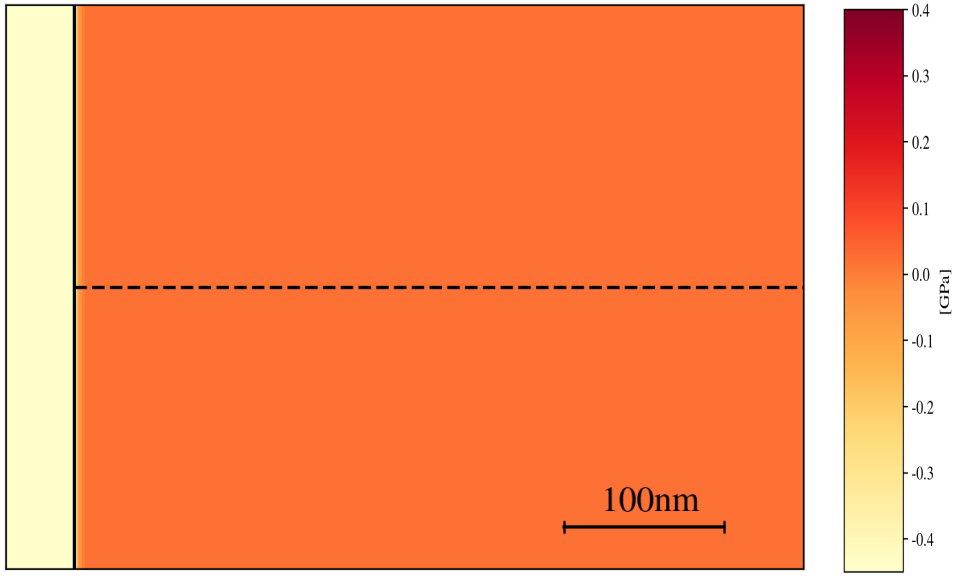




Simulation de l'oxydation intergranulaire



Concentration de chrome

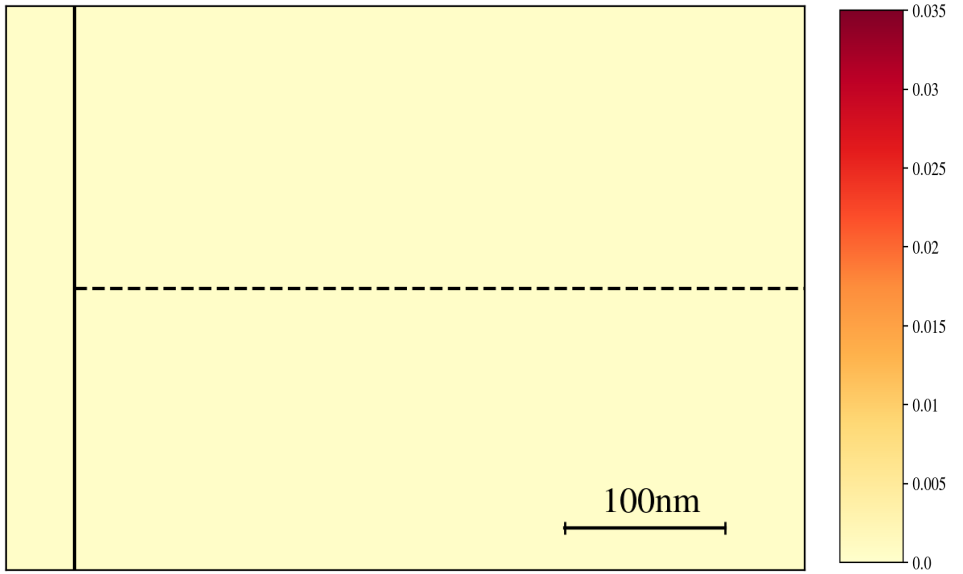


Contrainte d'ouverture σ_{22}

Ouverture possible au joint de grain:

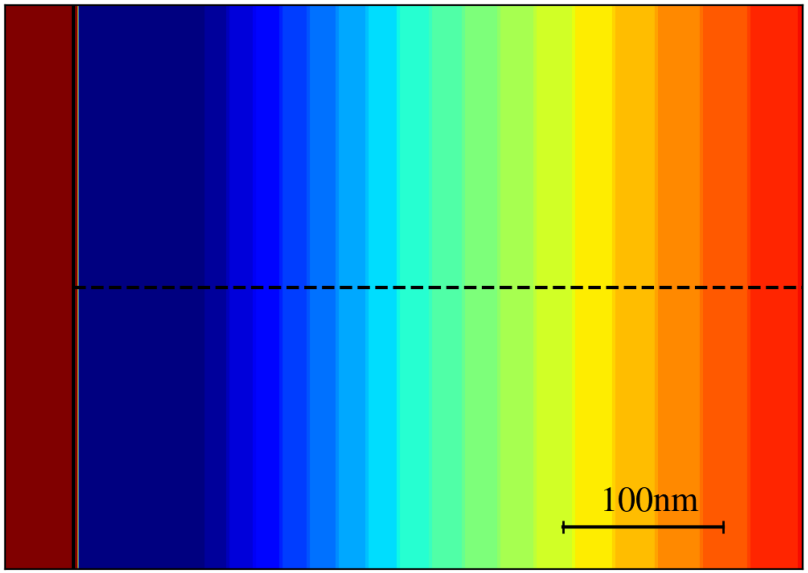
Deux mécanismes de défaillance possibles induits par l'oxydation

- Défaillance des joints de grains dans la pointe d'intrusion d'oxyde
- Défaillance du joint de grain oxydé à la surface libre?

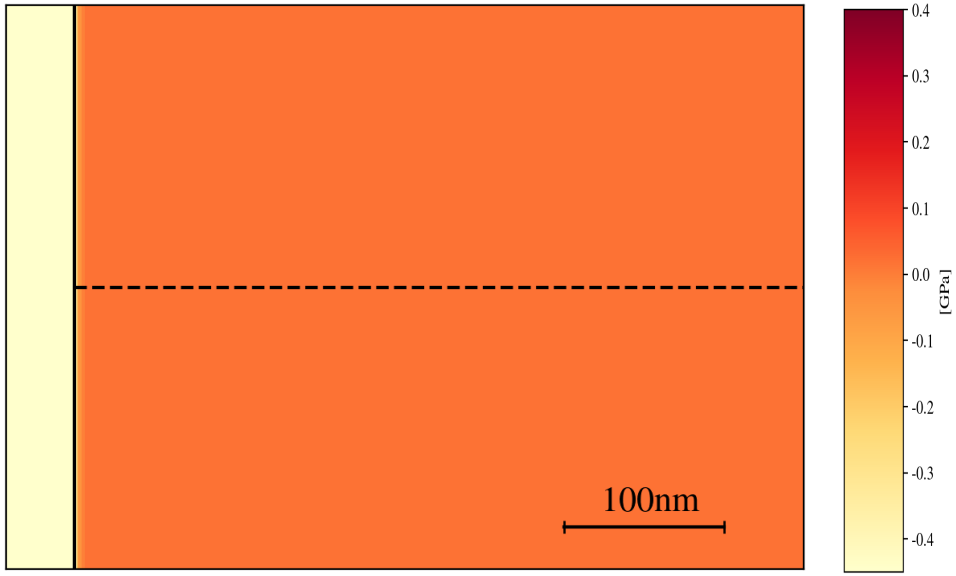


Variable d'endommagement dans l'oxyde

Simulation de l'oxydation intergranulaire



Concentrationdechrome

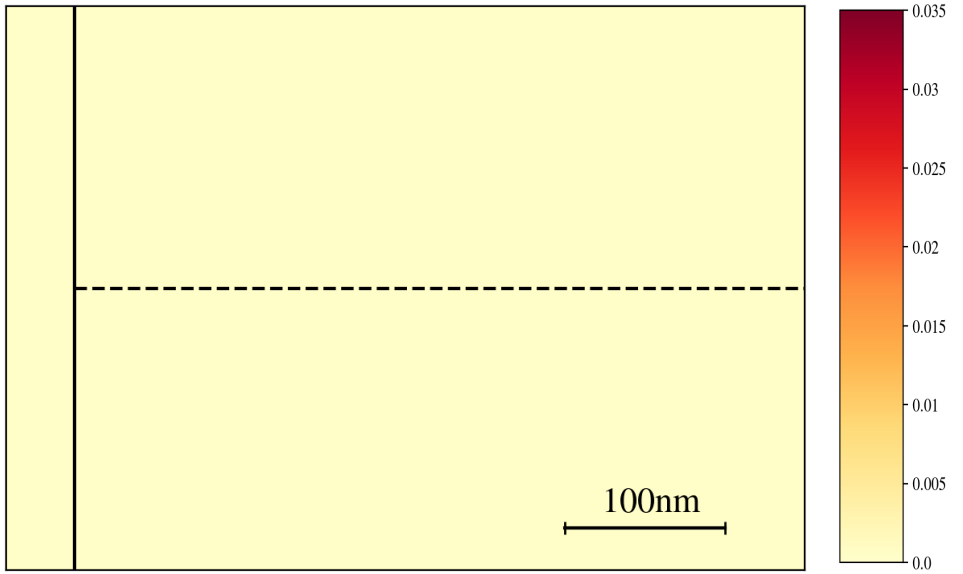


Contrainted'ouverture σ_{22}

Ouverture possible au joint de grain:

Deux mécanismes de défaillance possibles induits par l'oxydation

- Défaillance des joints de grains dans la pointe d'intrusion d'oxyde
- Défaillance du joint de grain oxydé à la surface libre?



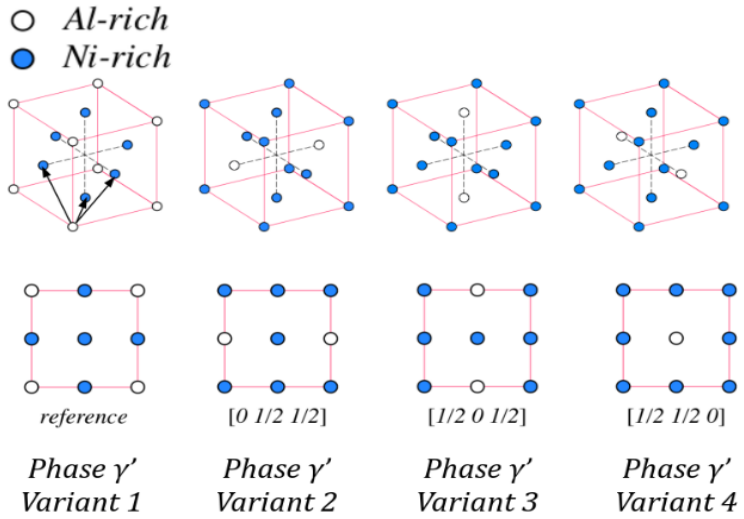
Variabled'endommagementdansl'oxyde

Plan

1 Modélisation de l'oxydation intergranulaire

2 Evolution microstructurale dans les superalliages

- Alliage binaire effectif (Ni-Al) et biphasé (γ/γ'): Les phases sont décrites par le champs de concentration: $C_{Al} = 0.15$ pour la phase γ et $C_{Al} = 0.231$ pour la phase γ' à $T = 950°$
- Les quatres variants translationels de γ' sont décrites à l'aide de trois paramètres d'ordre (ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3). [Cottura et al., 2012]



Phase	Variant	ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3
γ	-	0	0	0
γ'	1	1	1	1
	2	-1	-1	1
	3	1	-1	-1
	4	-1	1	-1

- Fonctionnelle d'énergie libre :

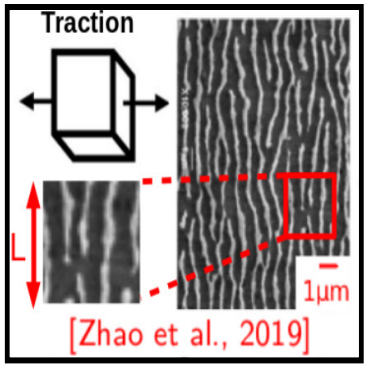
$$\mathcal{F} = \int \left[f^{\mathrm{ch}}(c, \phi_i) + f^{\mathrm{mech}} + \frac{\alpha}{2} \sum_{i=1}^{3} |\nabla \phi_i|^2 \right] \mathrm{d}V$$

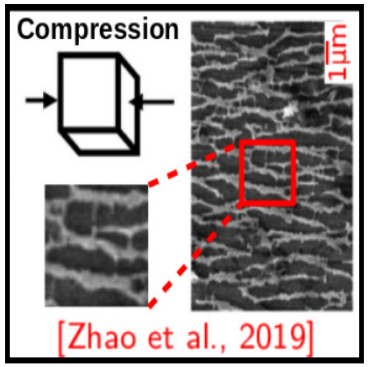
- L'énergie chimique $f^{\mathrm{ch}}(c, \phi_i)$ de l'alliage binaire (Ni-Al) : [Boussinot et al., 2007]

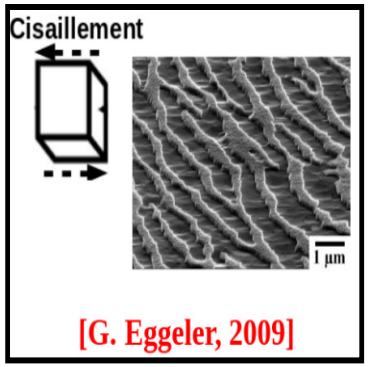
$$f^{\mathrm{ch}}(c, \phi_i) = \Delta f \left[\frac{1}{2}(c - c_\gamma)^2 + \frac{B}{6}(c_2 - c) \sum_{i=1}^{3} \phi_i^2 - \frac{C}{3} \phi_1 \phi_2 \phi_3 + \frac{D}{12} \sum_{i=1}^{3} \phi_i^4 \right] \mathrm{d}V$$

Effet de type de chargement sur l'évolution de la morphologie des phases
[W. Jbara, 2024]

- Essai de fluage ($\sigma_{app} = 240\text{MPa}$)
- Comportement élastique



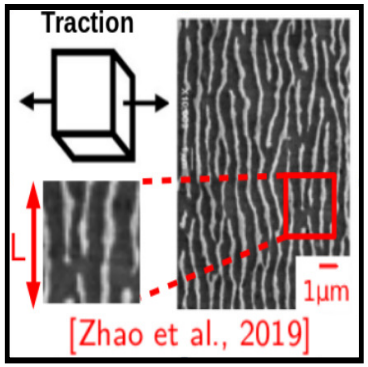


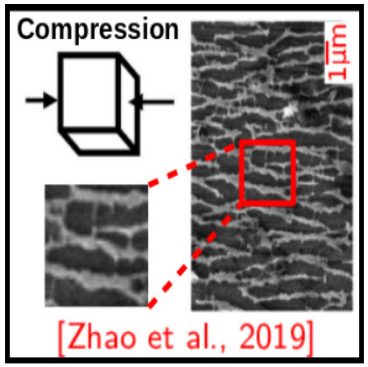


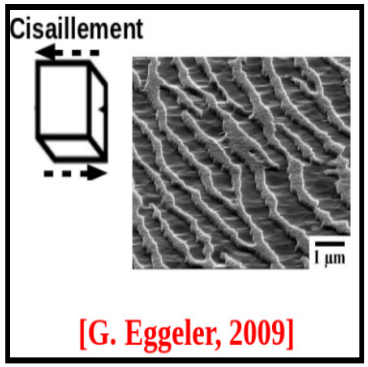
Effet de type de chargement sur l'évolution de la morphologie des phases [W. Jbara, 2024]

- Essai de fluage ($\sigma_{app} = 240\text{MPa}$)
- Comportement élastique
- Les quatre variants translationnels pour la phase γ' sont décrits par les 3 paramètres d'ordres.

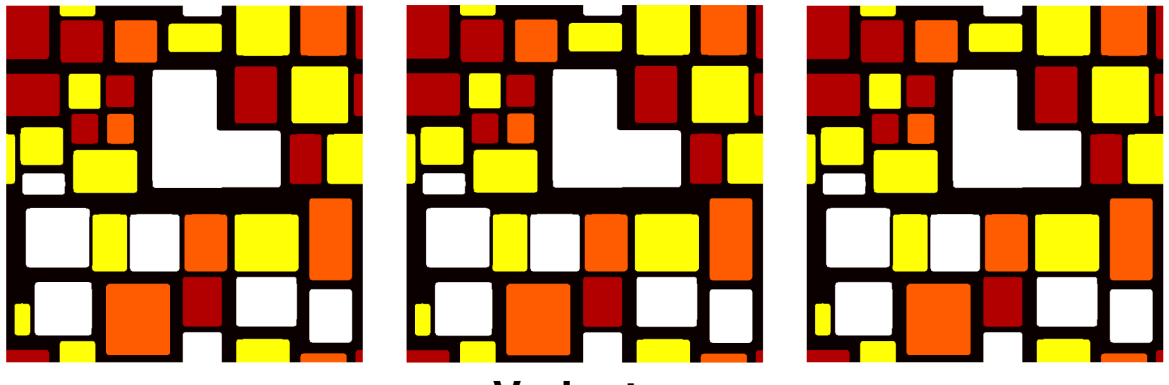
Phase γ
Variant = 0
(ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3) =(0,0,0)
Phase γ'
Variant = 1
$(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = (1,1,1)$
Variant = 2
$(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = (-1,-1,1)$
Variant = 3
$(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = (1,-1,-1)$
Variant = 4
$(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = (-1,1,-1)$



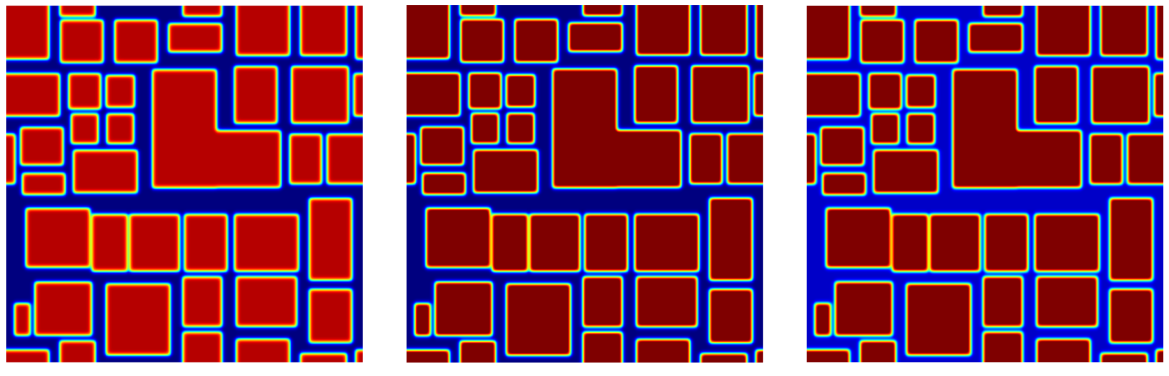




Traction **Compression** **Cisaillement**



Variant

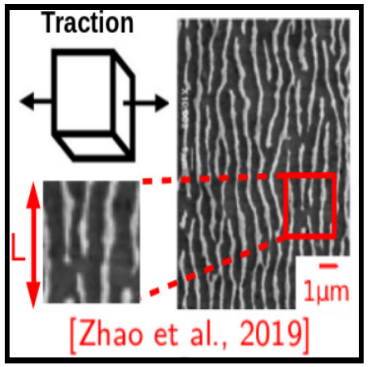


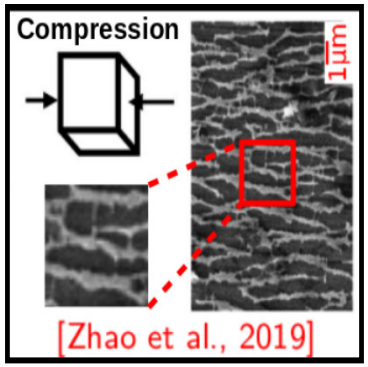
Concentration C_{Al}

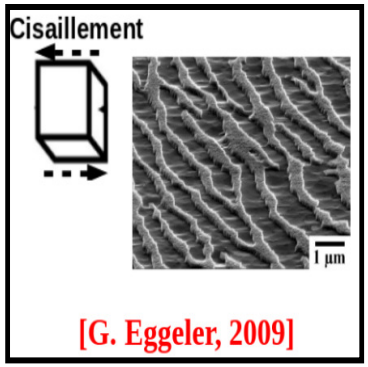
Effet de type de chargement sur l'évolution de la morphologie des phases [W. Jbara, 2024]

- Essai de fluage ($\sigma_{app} = 240\text{MPa}$)
- Comportement élastique
- Les quatre variants translationnels pour la phase γ' sont décrits par les 3 paramètres d'ordres.

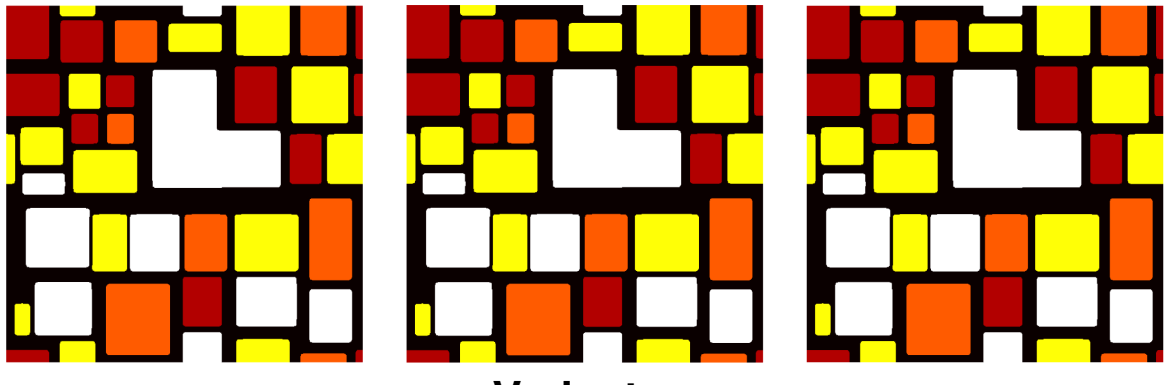
Phase γ
Variant = 0
(ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3) =(0,0,0)
Phase γ'
Variant = 1
$(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = (1,1,1)$
Variant = 2
$(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = (-1,-1,1)$
Variant = 3
$(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = (1,-1,-1)$
Variant = 4
$(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = (-1,1,-1)$



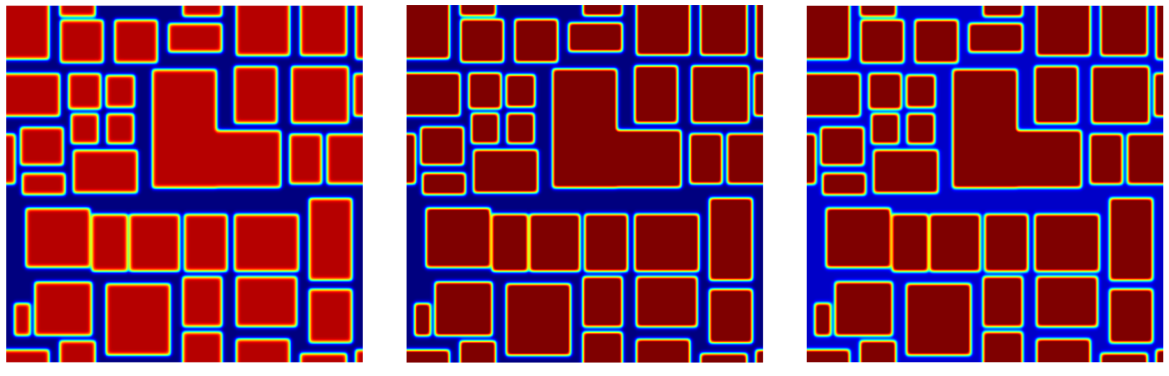




Traction **Compression** **Cisaillement**



Variant



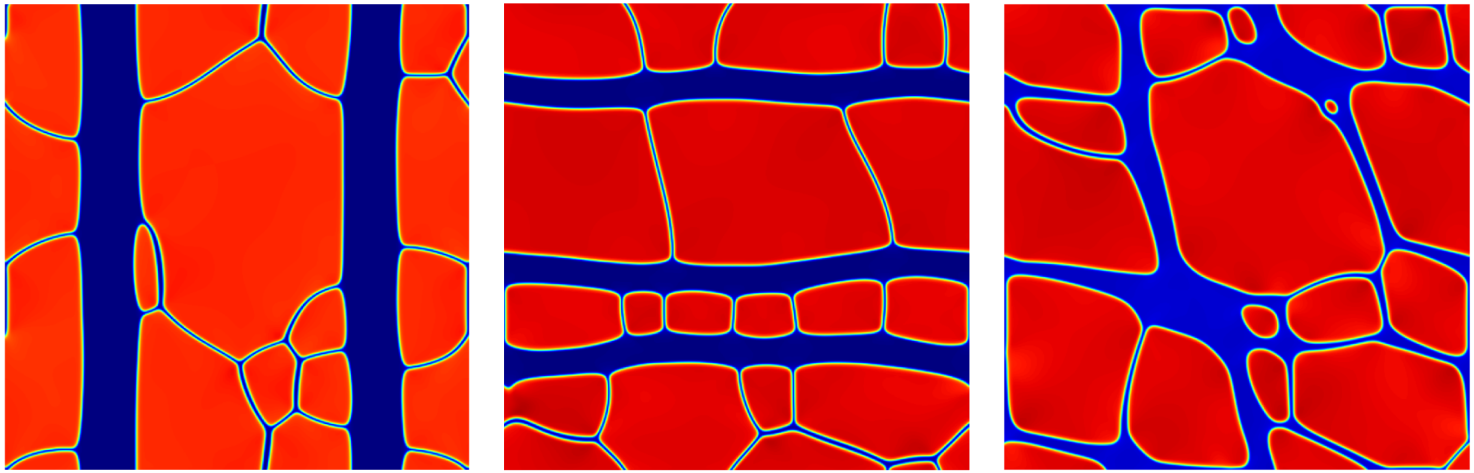
Concentration C_{Al}

- Effet de la viscoplasticité sur l'évolution de la morphologie des phases, (Fluage: 240 MPa)

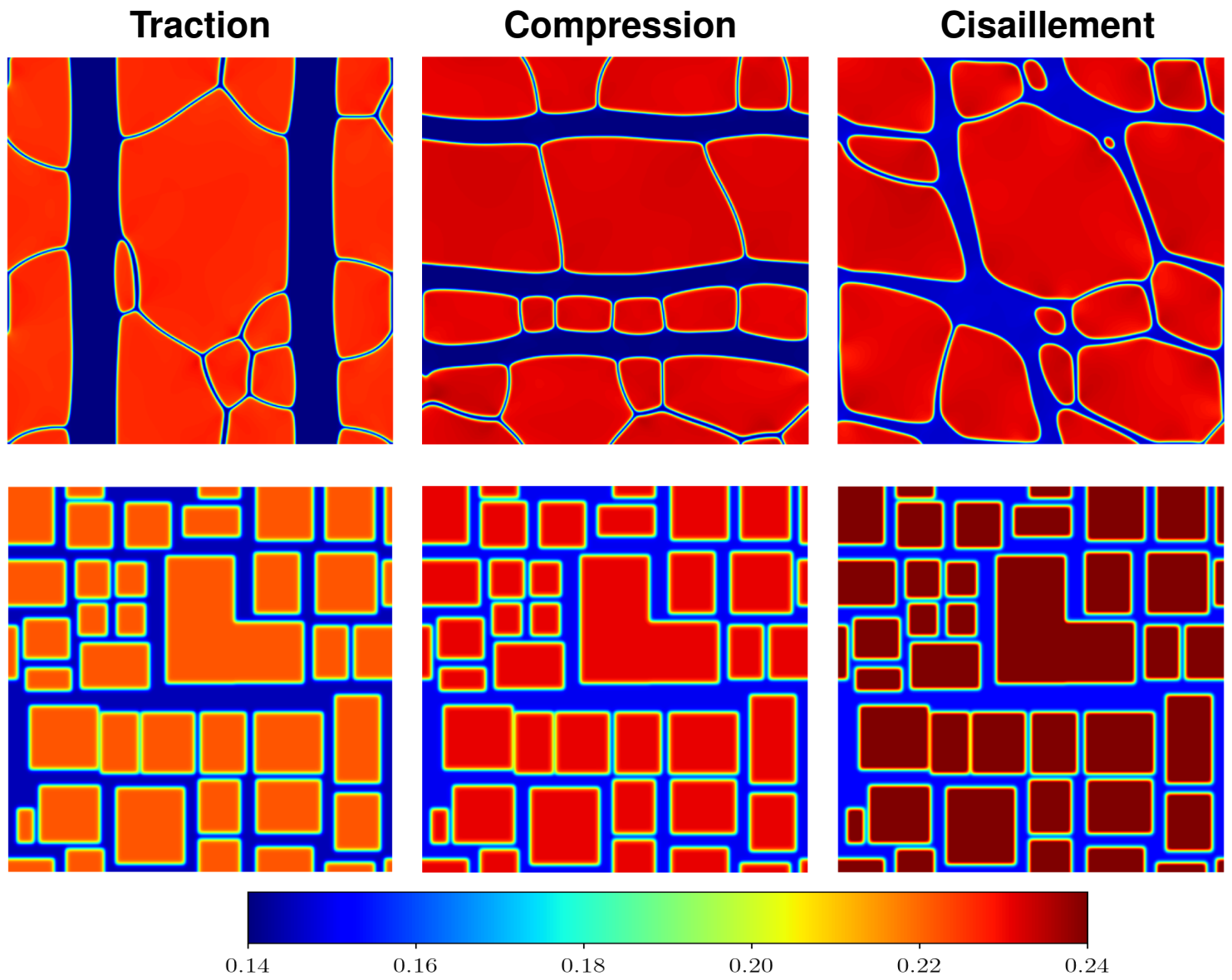
Concentration C_{Al}

cas élastique

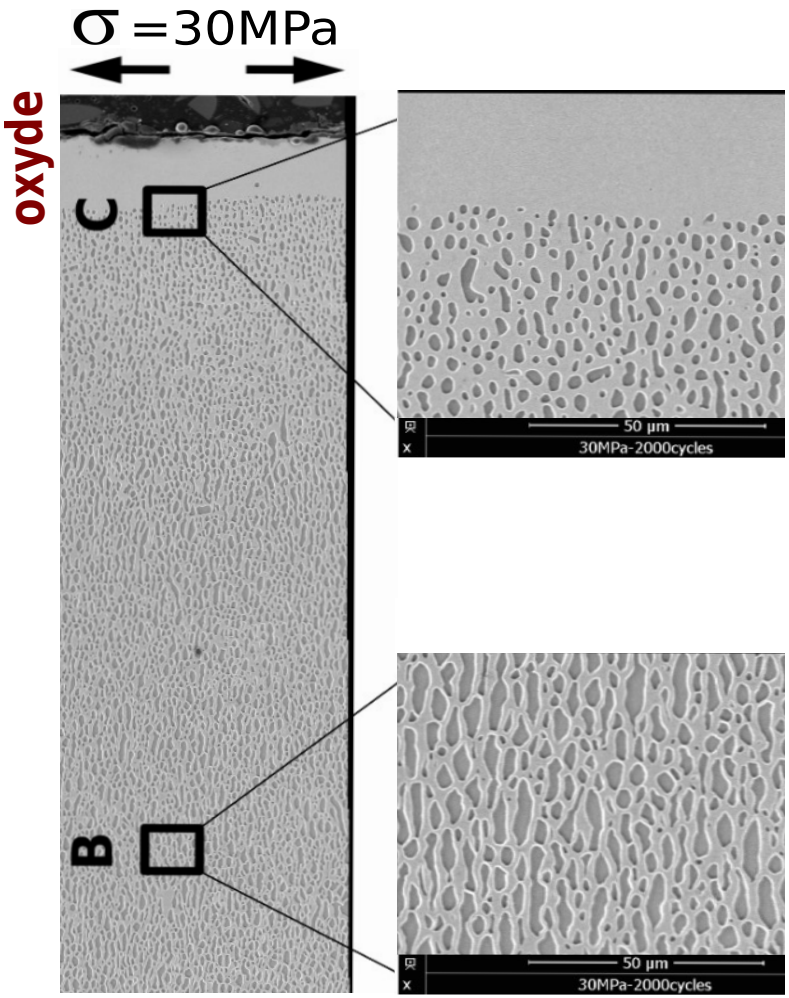
Traction **Compression** **Cisaillement**



- Effet de la viscoplasticité sur l'évolution de la morphologie des phases, (Fluage: 240 MPa)

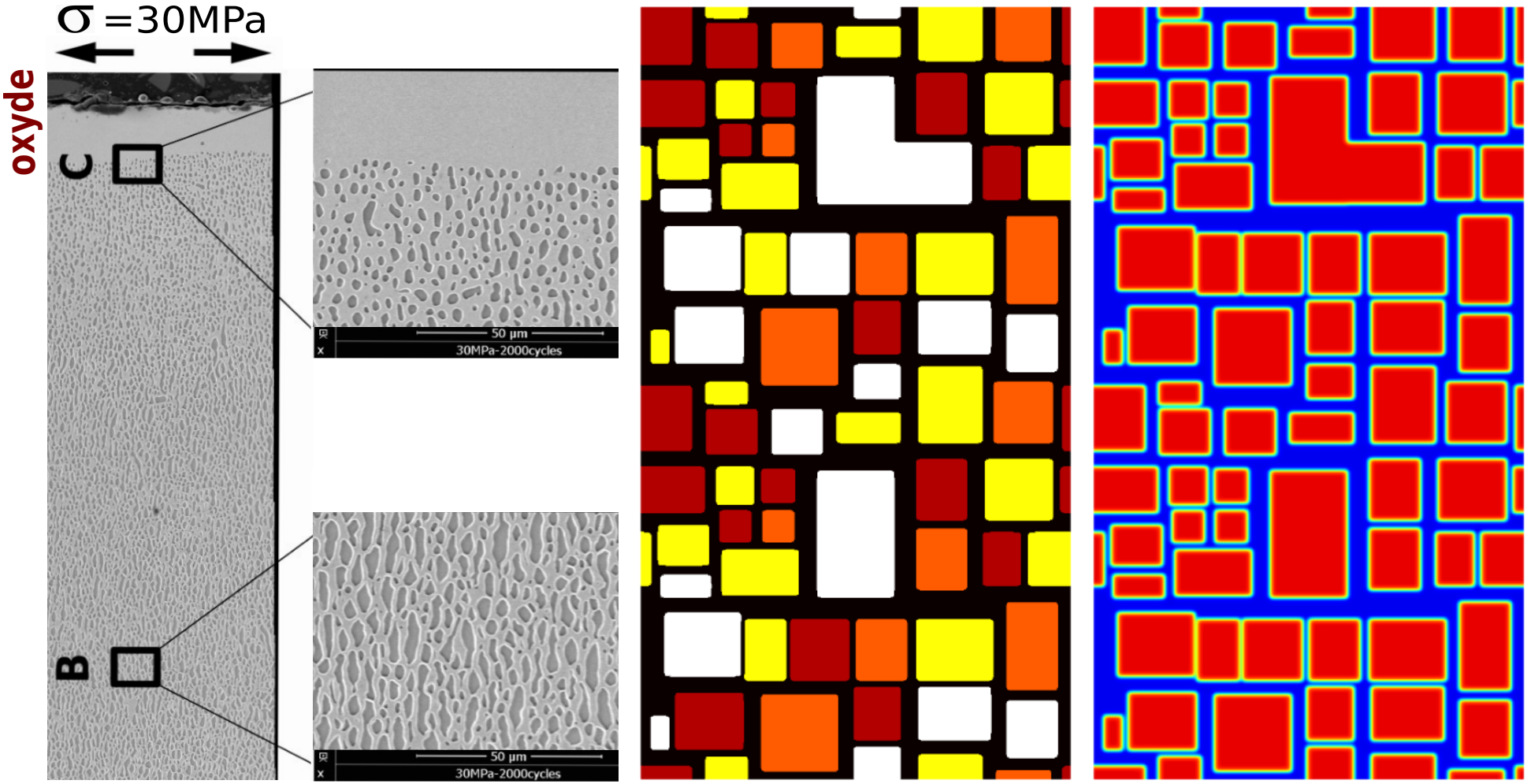


- Effet de l'oxydation sur la microstructure et l'évolution de la morphologie des phases
  - A proximité de la surface libre, on peut observer des précipités γ' dissous en raison du flux sortant d'Al pour former l'oxyde.
  - Les précipités γ' prennent une forme sphérique proche de l'oxyde



Evolution microstructurale dans les superalliages à base de Nickel

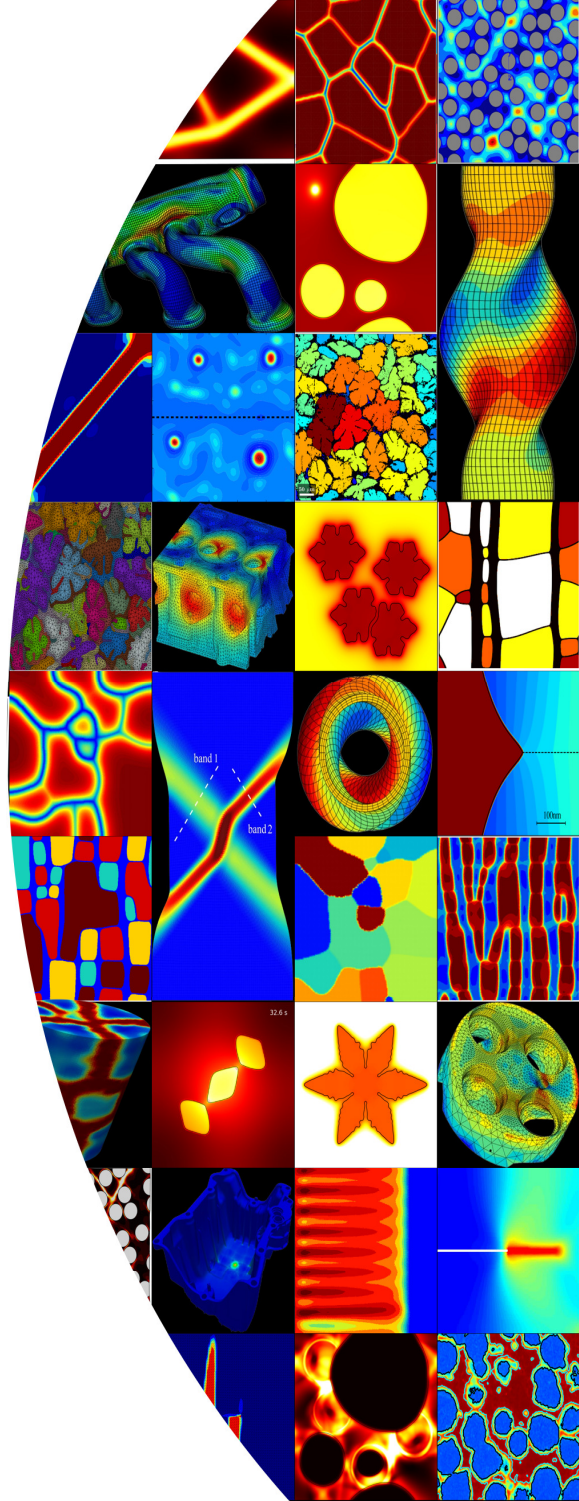
- Effet de l'oxydation sur la microstructure et l'évolution de la morphologie des phases
  - A proximité de la surface libre, on peut observer des précipités γ' dissous en raison du flux sortant d'Al pour former l'oxyde.
  - Les précipités γ' prennent une forme sphérique proche de l'oxyde



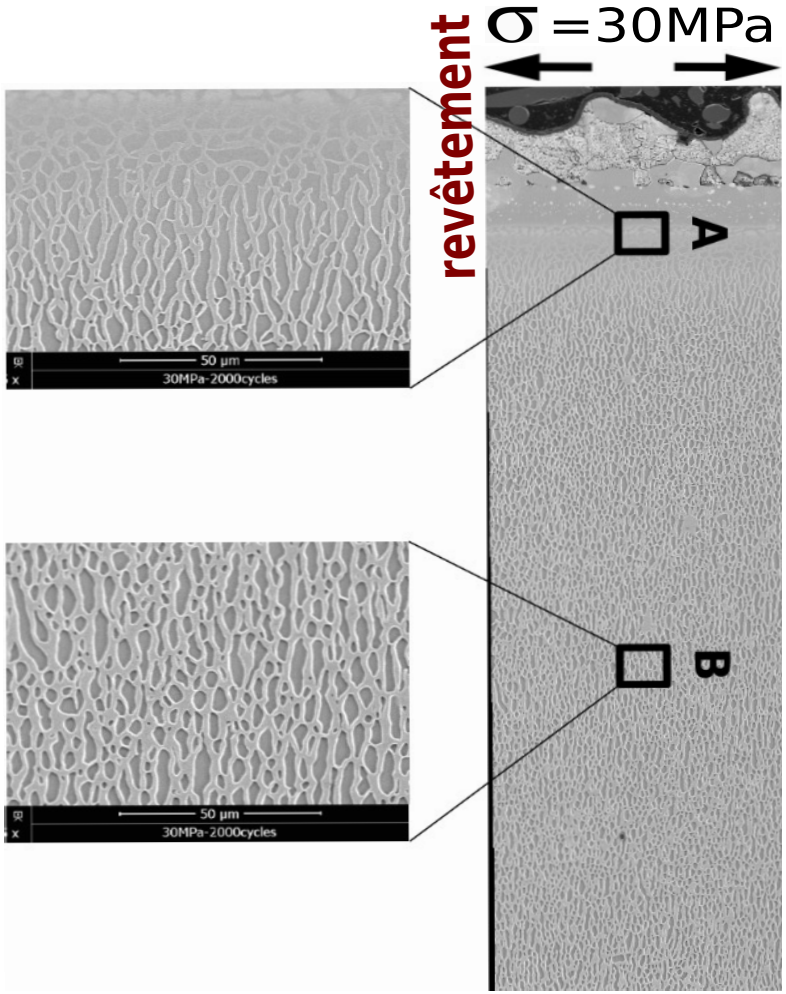
W. Jbara, V. Maurel, K. Ammar and S. Forest, Effect of Free Surface, Oxide, and Coating Layers on Rafting in γ-γ' Superalloys, *Superalloys 2024*, pp. 694-704, 2024

MERCI DE

VOTRE ATTENTION

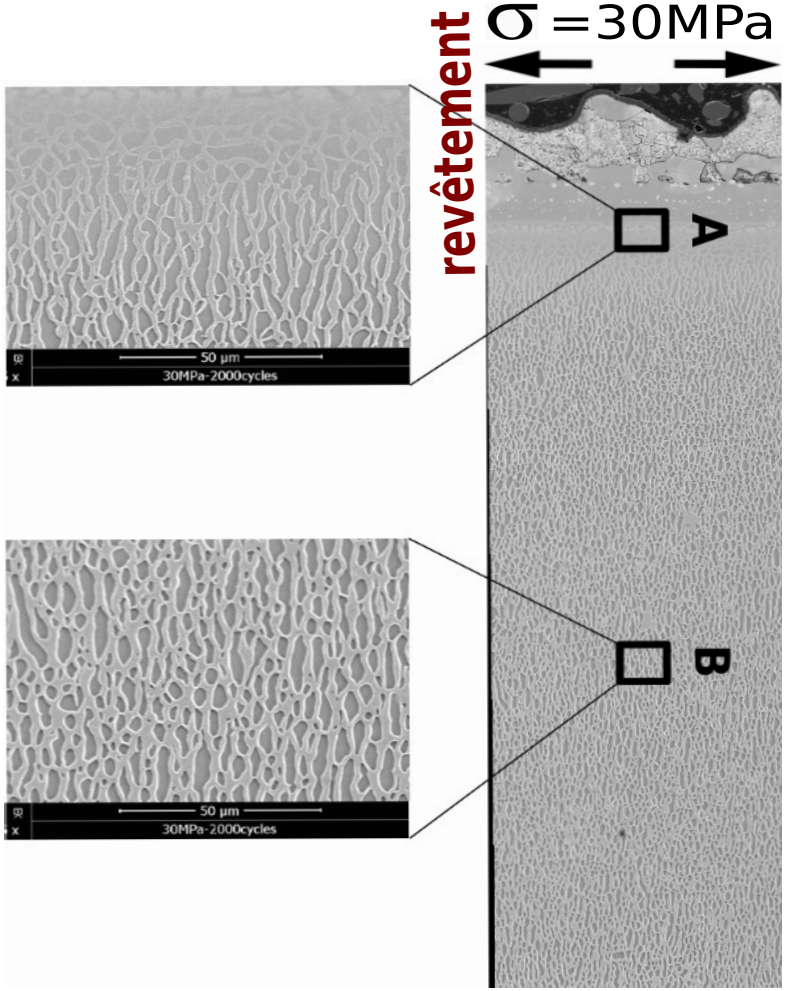


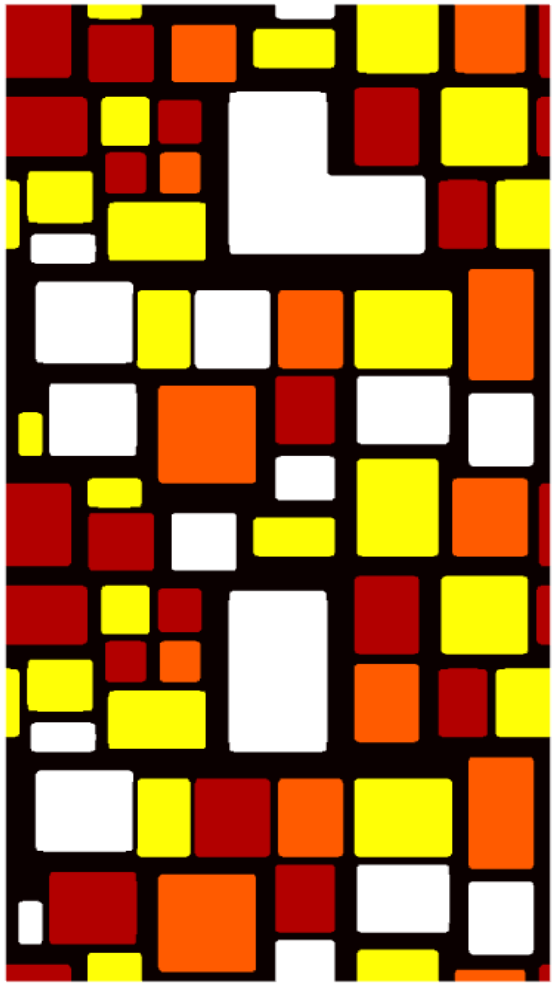
- Effet d'une surface revêtue revetue sur la microstructure et l'évolution de la morphologie des phases
  - A proximité de la surface revêtue, on a un flux entrant de d'Al depuis le revêtement vers le substrat

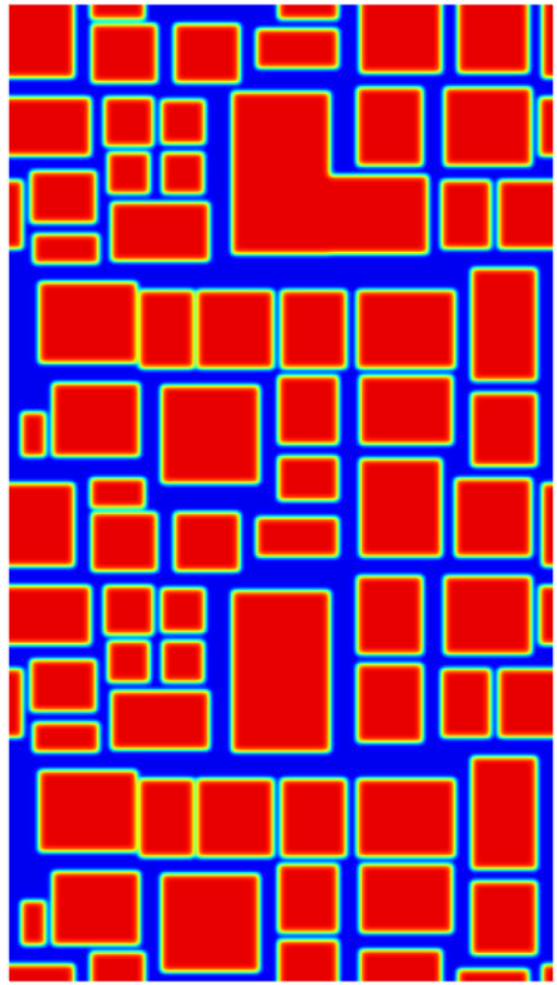


Evolution microstructurale dans les superalliages à base de Nickel

- Effet d'une surface revêtue revetue sur la microstructure et l'évolution de la morphologie des phases
  - A proximité de la surface revêtue, on a un flux entrant de d'Al depuis le revêtement vers le substrat







W. Jbara, V. Maurel, K. Ammar and S. Forest, Effect of Free Surface, Oxide, and Coating Layers on Rafting in γ-γ' Superalloys, *Superalloys 2024*, pp. 694-704, 2024

Équations d'évolution

- Les équations d'évolution pour les 6 champs $(u_1, u_2, c, \phi_1, \phi_2, \phi_3)$:

  - Équation de diffusion :

$$\dot{c} = L\Delta\left(\frac{\partial F_{chem}}{\partial c}(c, \phi_i) + \frac{\partial F_{mech}}{\partial c}(c, \phi_i, \underset{\sim}{\varepsilon}^{el}, \underset{\sim}{\alpha}, p)\right)$$

  - Évolutions des paramètres d'ordres :

$$\dot{\phi}_i = -M\left(\frac{\partial F_{chem}}{\partial c}(c, \phi_i) + \frac{\partial F_{mech}}{\partial c}(c, \phi_i, \underset{\sim}{\varepsilon}^{el}, \underset{\sim}{\alpha}, p) - \beta\Delta\phi_i\right) (i = 1, 2, 3)$$

  - Équilibre mécanique statique :

$$\mathrm{div}(\underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}) + \underline{\boldsymbol{f}} = \mathrm{div}\left(\frac{\partial F_{mech}}{\partial \underset{\sim}{\varepsilon}^{el}}(c, \phi_i, \underset{\sim}{\varepsilon}^{el}, \underset{\sim}{\alpha}, p)\right) + \underline{\boldsymbol{f}} = 0 \text{ in the volume V}$$

$$\underline{\boldsymbol{t}} = \underset{\sim}{\boldsymbol{\sigma}}.\underline{\boldsymbol{n}} \text{ on the surface } \partial\mathrm{V}$$

⇒ Équations de couplages forts entre les phénomènes physiques diffusion, transformation de phase et mécanique.