

ÉPREUVE COMMUNE DE TIPE 2011 - PARTIE D

TITRE : Mobilité atomique dans les alliages métalliques – Application à la carburation des aciers

Temps de préparation :2 h 15 minutes

Temps de présentation devant le jury :10 minutes

Entretien avec le jury :10 minutes

GUIDE POUR LE CANDIDAT :

Le dossier ci-joint comporte au total : 14 pages

Guide candidat : 1 page

Document principal (9 pages) : article scientifique avec 4 figures

Documents complémentaires (4 pages) : 1 annexe (A) et 1 glossaire

Travail **suggéré** au candidat :

Présenter les points forts de la modélisation unidirectionnelle de la diffusion chimique. Le candidat prendra soin d'associer des phénomènes physiques aux équations, plutôt que de présenter le détail de leur résolution. Il pourra également montrer qu'il est capable de retrouver les valeurs numériques fournies en fin de dossier

CONSEILS GENERAUX POUR LA PREPARATION DE L'EPREUVE :

- * Lisez le dossier en entier dans un temps raisonnable.
- * Réservez du temps pour préparer l'exposé devant le jury.
 - Vous pouvez écrire sur le présent dossier, le surligner, le découper ... mais tout sera à remettre au jury en fin d'oral.
 - En fin de préparation, rassemblez et ordonnez soigneusement TOUS les documents (transparents, *etc.*) dont vous comptez vous servir pendant l'oral, ainsi que le dossier, les transparents et les brouillons utilisés pendant la préparation. En entrant dans la salle d'oral, vous devez être prêt à débiter votre exposé, après avoir présenté votre pièce d'identité.
 - A la fin de l'oral, vous devez remettre au jury le présent dossier, les transparents et les brouillons utilisés pour cette partie de l'oral, ainsi que TOUS les transparents et autres documents présentés pendant votre prestation.

EPREUVE COMMUNE DE TIPE 2011

5 MOBILITÉ ATOMIQUE DANS LES ALLIAGES MÉTALLIQUES – APPLICATION À LA CARBURATION DES ACIERS

1 Traitements thermochimiques des aciers

Les procédés de traitements thermochimiques de surface par réaction hétérogène gaz-solide ont fait l'objet au cours de ces vingt dernières années d'études approfondies rendues possibles par les progrès des techniques d'analyse et d'observation des microstructures des aciers, par le développement des connaissances thermodynamiques et des phénomènes de transfert de matière et par la mise en œuvre d'outils de simulation. Ces traitements consistent à exposer, à une température inférieure à la température de fusion de l'acier que constitue la pièce métallique à un environnement gazeux contenant l'espèce chimique à introduire.

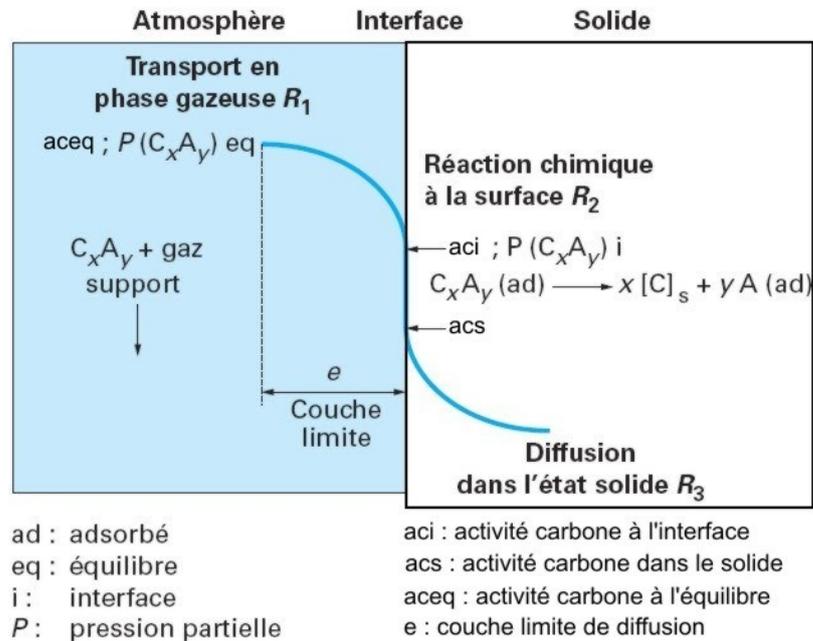
Une réaction hétérogène gaz-solide est une réaction qui met en jeu un transfert de matière entre ces deux phases. D'une manière générale, le mécanisme global se décompose toujours en trois étapes principales :

- le transport des espèces réactives en phase gazeuse vers la surface de l'acier ;
- la réaction physico-chimique à la surface de l'acier ;
- le transport dans l'état solide par diffusion des atomes produits par la réaction chimique

Pour illustrer notre propos, l'espèce réactive sera une molécule gazeuse contenant des atomes de carbone, véhiculée dans un mélange gazeux, soit une molécule du type C_xA_y , A pouvant être de l'oxygène ou bien de l'hydrogène. La figure 1 schématise les trois principales étapes élémentaires intervenant lors du transfert de carbone à l'interface gaz-solide. Transport de la molécule active vers la surface de l'acier, réaction physico-chimique à la surface de l'acier de cette molécule conduisant à une couche limite de diffusion « e » dans le gaz, diffusion du carbone en phase solide¹. Chaque étape est caractérisée par sa propre cinétique. L'expression

¹ Il s'agit de la phase gamma austénitique (voir Annexe A)

simple, sous forme analytique, des vitesses de chaque processus partiel, peut être obtenue en considérant que le transfert de matière a lieu par une succession d'états quasi stationnaires.



35 **Figure 1 : schéma de principe d'une réaction gaz-solide²**

Avec ce formalisme, chaque processus partiel peut être caractérisé par une résistance de transfert et une force motrice. La force motrice représente une différence d'activité³ et la résistance de transfert R quantifie les effets qui limitent un bon transfert de l'espèce active considérée.

40

La présence d'une couche limite « e » devant la surface du matériau résulte d'un gradient de vitesse des molécules gazeuses, la vitesse du gaz étant nulle à la surface du matériau et du fait que les molécules sont consommées à la surface de l'acier. Ce gradient de vitesse crée un gradient de fraction massique de l'espèce réactive et engendre une résistance au transfert de matière R₁. La résistance R₁ liée au transfert des espèces chimiques au travers la couche limite dépend principalement du comportement hydrodynamique du milieu gazeux. L'influence du brassage conditionne l'épaisseur de la couche limite et par conséquent le gradient de fraction massique en espèces réactives.

45

² J. Dulcy et M. Gantois, « théorie des traitements thermo-chimiques », les techniques de l'ingénieur M1 222 (2007)

³ Voir glossaire

50 La résistance R_2 est liée à la réaction chimique à la surface du matériau. Elle dépend principalement de la composition chimique de la phase gazeuse. La molécule gazeuse C_xA_y s'adsorbe à la surface du matériau et se dissocie pour libérer des atomes de carbone qui vont se dissoudre dans le matériau suivant le mécanisme physico-chimique évoqué figure 1. Les atomes A adsorbés peuvent soit se désorber et libérer des sites réactionnels, soit rester adsorbés et
55 occuper des sites réactionnels, voire réagir avec le matériau en créant des réactions parasites (par exemple, oxydation de surface) ; la présence de ces atomes adsorbés forme une résistance au transfert pour les nouvelles molécules de C_xA_y d'où la nécessité d'éliminer au maximum les atomes A adsorbés par réaction chimique. La résistance R_3 est associée à la diffusion du carbone dans l'état solide et dépend principalement de la température ainsi que de la composition
60 chimique du matériau. Dans la suite de ce dossier, nous nous intéresserons exclusivement à cette diffusion en phase solide du carbone C_S .

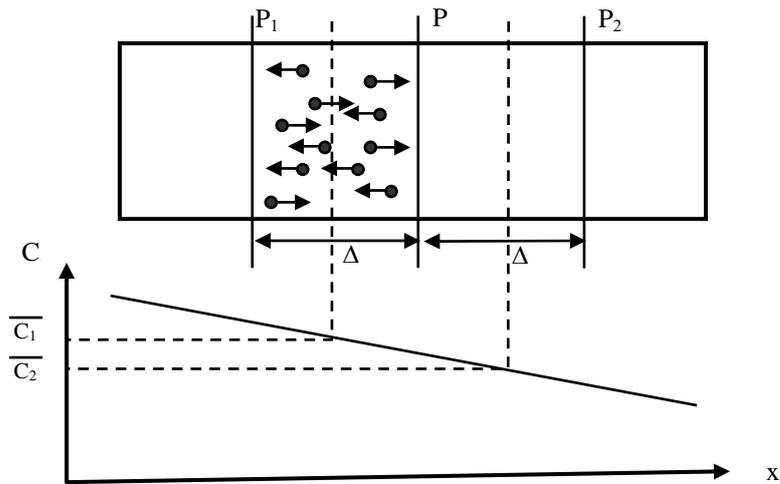
2 Les lois de Fick

Avant d'aborder la diffusion en phase solide d'atomes de carbone, il est nécessaire de redéfinir les lois gouvernant ce transfert dans des cas simples (modèle unidirectionnel) et en partant des
65 expériences réalisées sur le mouvement brownien.

De façon tout à fait générale, la trajectoire d'un atome au sein d'un matériau solide est formée d'une succession aléatoire de vecteurs sauts $\vec{\delta x}$, tous de même longueur mais orientés de manière aléatoire l'un par rapport à l'autre. Ce mouvement est souvent qualifié de **marche au**
70 **hasard ou mouvement Brownien**. On peut facilement montrer que le parcours moyen projeté selon x noté $\langle X(t) \rangle = \sum \delta x$ est nul pour un grand nombre d'atomes se déplaçant pendant un temps t lorsque ces déplacements sont effectivement une marche au hasard. A. Einstein a démontré en 1905 que c'était la moyenne des carrés des projections $\langle X^2(t) \rangle$ ou **parcours**
quadratique moyen qui était une caractéristique du mouvement Brownien.

75

L'expression du parcours quadratique moyen $\langle X^2(t) \rangle$ permet de développer un modèle de diffusion unidirectionnel basé sur la migration d'atomes B dans une matrice d'atomes A sous l'effet d'un gradient de concentration (dC_B/dx) le long d'un axe x d'un bloc d'atomes A de section unitaire :



80

Figure 2 : modèle unidirectionnel schématique de la diffusion atomique d'atomes B dans une matrice d'atomes A

On remplace par la pensée les atomes réels B par une population de particules « moyennes » qui effectuent durant un temps donné t un parcours $\pm\Delta$ tel que $\Delta^2 = \langle X^2(t) \rangle$. On définit le nombre de particules N_1 qui appartiennent au volume de matière limité par les plans $PP_1 = \Delta$ par la relation $N_1 = C_1 \cdot \Delta$ ou C_1 est la concentration molaire volumique en atomes A situés entre les deux plans PP_1 . La densité de flux d'atomes J_1 passant de gauche à droite au travers du plan P pendant le temps t est donnée par :

90
$$J_1 \cdot t = \frac{1}{2} C_1 \Delta \quad (2.1)$$

On prend uniquement la moitié des particules puisque chacune d'elle a la même probabilité d'effectuer les parcours $-\Delta$ et $+\Delta$. Par le même raisonnement, le nombre de particules qui franchissent le plan P de droite à gauche durant le temps t s'exprime par $J_2 \cdot t$:

$$J_2 \cdot t = \frac{1}{2} C_2 \Delta \quad (2.2)$$

95 La densité de flux net J d'atomes passant de gauche à droite s'exprime donc par :

$$J = J_1 - J_2 = \frac{1}{2t} (C_1 - C_2) \Delta \quad (2.3)$$

Comme le gradient de concentration est supposé faible pour des distances de l'ordre de Δ , on peut l'exprimer en fonction de \bar{C}_1 et \bar{C}_2 définies au milieu des deux blocs (plans P_1 et P_2) et de la distance Δ :

100
$$\bar{C}_2 - \bar{C}_1 = \Delta \cdot \frac{dC}{dx} \quad (2.4)$$

Soit en substituant (2.4) dans (2.3) :

$$J = -\frac{1}{2t} \left(\frac{dC}{dx} \right) \Delta^2 \quad (2.5)$$

L'expression finale de la densité de flux de diffusion J_B des atomes B dans A s'exprime donc par :

105
$$J_B = -\frac{1}{2t} \left(\frac{dC_B}{dx} \right) \langle X^2(t) \rangle \quad (2.6)$$

On trouve que la densité de flux de diffusion des atomes B dans la matrice A est proportionnelle au gradient de concentration comme l'a défini A. Fick en 1855 selon la loi phénoménologique suivante :

$$J_B = -D_B \left(\frac{dC_B}{dx} \right) \quad (2.7)$$

110 Il s'agit ici de la **première loi de Fick**. Elle fait apparaître le coefficient de diffusion D_B qui s'exprime en $m^2.s^{-1}$ et qui s'applique à un type d'atomes B diffusant dans une matrice d'atomes A . Le signe négatif exprime le fait que le flux d'atomes B diffuse en sens inverse du gradient de concentration. Si l'on compare (2.6) et (2.7), on note que le coefficient de diffusion a une expression formulée par A. Einstein en 1905 :

115
$$D_B = \frac{\langle X^2(t) \rangle}{2t} \quad (2.8)$$

L'expression (2.7) n'est utilisable qu'en régime permanent, c'est-à-dire lorsque la densité de flux ne dépend pas du temps. En régime non permanent, c'est-à-dire lorsque la densité de flux varie en chaque point en fonction du temps, il faut compléter la 1^{ère} loi de Fick par une équation bilan appelée **équation de continuité** qui exprime le fait que la quantité totale de particules est
120 conservée :

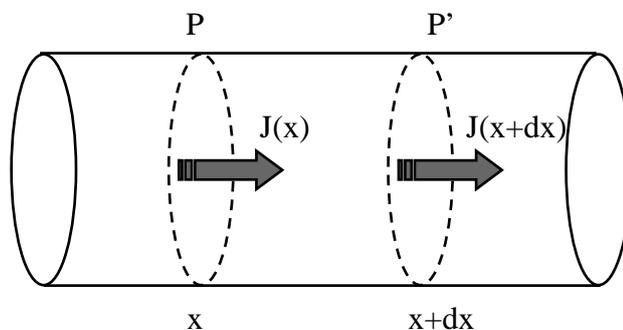


Figure 3 : modèle unidirectionnel de diffusion en régime non permanent

On considère un cylindre parallèle à la direction de diffusion et de section unité. Soit un petit volume limité par les plans P et P' d'abscisses x , $x+dx$ à travers lequel les flux de particules dirigés de gauche à droite valent respectivement $J(x)$ et $J(x+dx)$. Par application de la formule des accroissements finis, la quantité de matière accumulée pendant le temps dt dans le cylindre limité par P et P' vaut :

$$[J(x) - J(x+dx)]dt = -\frac{\partial J}{\partial x} dx \cdot dt \quad (2.9)$$

Cette quantité est égale à la variation du nombre de particules dans le volume $I \cdot dx$, soit $[c(t+dt) - c(t)]dx = (\delta c / dt)dt \cdot dx$. On obtient (2.10) en égalisant les deux expressions et en considérant la diffusion de B dans A :

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = -\frac{\partial J_B}{\partial x} \quad (2.10)$$

En combinant (2.7) et (2.10), on obtient la **seconde loi de Fick** :

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_B \frac{\partial C_B}{\partial x} \right) \quad (2.11)$$

L'équation générale de la diffusion est donc une équation aux dérivées partielles du second ordre. Elle ne peut être résolue analytiquement tant que D_B dépend de la concentration, et donc de x et t . Mais elle se simplifie notablement si D_B est indépendant de la concentration ; cas réalisé notamment avec des systèmes qui restent chimiquement homogènes et lorsque la concentration C_B reste faible. L'équation (2.11) s'écrit alors :

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 C_B}{\partial x^2} \quad (2.12)$$

C'est cette dernière relation qu'il convient de résoudre lorsqu'on s'intéresse à la carburation des aciers. Si la résistance R_3 est très supérieure aux résistances R_1 et R_2 , le transport de matière dans l'état solide est l'étape limitante. La cinétique globale de la réaction gaz-solide est donc gouvernée par la diffusion du carbone dans l'état solide. Le transfert de carbone peut être réalisé à la vitesse maximale si pour la température choisie, la concentration superficielle en carbone C_S est maintenue constante et à la valeur maximale que peut accepter l'acier en surface, c'est-à-dire à la concentration à saturation du carbone dans l'austénite, soit un pourcentage massique en carbone d'environ 1,2% (soit $C_S \approx 0,0936 \text{ g.cm}^{-3}$ de carbone) pour une température de 900°C par exemple (voir annexe A).

3 Carburation des aciers

Si on appelle C_0 la concentration initiale en carbone présent dans l'acier, C_s sa concentration superficielle et C la concentration relevée dans l'acier pour le temps t à une distance x de la surface, on peut écrire les conditions limites suivantes :

$$\text{Pour } t = 0 \text{ et } x > 0 \quad : \quad C(x,t) = C_0 \quad (3.1)$$

$$\text{Pour } t > 0 \text{ et } x = 0 \quad : \quad C(x,t) = C_s \quad (3.2)$$

$$\text{Pour } t > 0 \text{ et } x \rightarrow \infty \quad : \quad C(x,t) = C_0 \quad (3.3)$$

160

La première condition sous-entend que l'acier contient déjà une concentration initiale⁴ en carbone C_0 . La seconde condition exprime le fait que l'apport de carbone à la surface de l'acier est constant au cours du traitement (ceci implique $R_3 \gg R_1$ et R_2). La dernière condition exprime le fait que loin de l'interface gaz/solide, l'acier n'est pas affecté par le processus de diffusion (modèle de diffusion semi-infini). Il s'agit ici de résoudre la relation (2.12) en considérant C_B comme la concentration massique en carbone dans l'acier (noté simplement C par la suite) et D_B le coefficient de diffusion du carbone dans l'austénite (noté simplement D par la suite).

170 On pose $u = \frac{x}{2\sqrt{Dt}}$. Ce changement de variable permet de réécrire de façon simple l'équation différentielle (2.12) selon :

$$\frac{d^2C}{du^2} + 2u \frac{dC}{du} = 0 \quad (3.4)$$

On pose $K = \left(\frac{dC}{du} \right)$ soit :

$$\frac{dK}{du} + 2uK = 0 \quad (3.5)$$

175 Soit en intégrant :

$$K = A \cdot \exp[-u^2] \quad (3.6)$$

où A est une constante. En substituant K par sa définition, on obtient finalement :

$$dC = A \cdot \exp[-u^2] du \quad (3.7)$$

⁴ Typiquement, un acier peut contenir jusqu'à 2% en masse de carbone (voir annexe A)

On détermine la constante A en intégrant (3.7) depuis la surface de l'acier ($C=C_s$) jusqu'à $x = +\infty$ où l'on retrouve la concentration massique initiale C_0 . On fait ainsi apparaître l'intégrale de Gauss⁵ qui est égale à $\frac{\sqrt{\pi}}{2}$ dans ce cas :

$$C_0 - C_s = A \cdot \int_{u=0}^{\infty} \exp[-u^2] du = A \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{2} \quad (3.8)$$

On en déduit donc A :

$$A = \frac{2(C_0 - C_s)}{\sqrt{\pi}} \quad (3.9)$$

On reprend l'expression générale (3.7) que l'on intègre en considérant pour un temps t , l'interface ($x=0$) et une distance x quelconque dans l'acier :

$$\int_{C_s}^C dC = \frac{2(C_0 - C_s)}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_{u=0}^u \exp[-u^2] du \quad (3.10)$$

Soit finalement en faisant apparaître la fonction erreur : $erf\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right)$:

$$\frac{C - C_s}{C_0 - C_s} = erf\left[\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right] \quad (3.11)$$

Où C correspond à la concentration massique en carbone à la distance x de l'interface gaz/acier pour un temps de diffusion t .

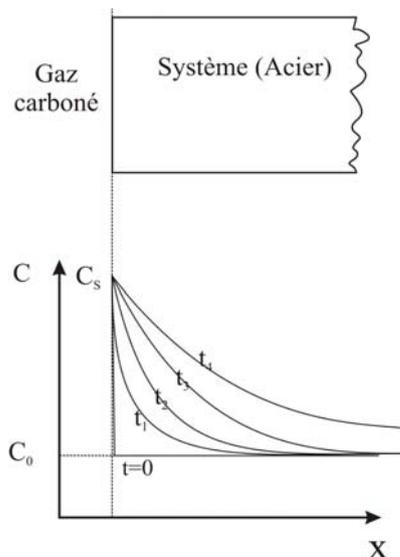


Figure 4 : Evolution de C en fonction de la distance x et du temps t dans l'acier lors de l'étape de carburation

⁵ Voir à ce propos le glossaire rubrique « fonction d'erreur »

195 La figure 4 représente l'évolution de C en fonction de x et t dans l'acier. À titre d'exemple, si l'on souhaite connaître le temps de traitement nécessaire à une diffusion du carbone dans l'austénite à 900°C d'un acier initialement à un pourcentage massique en carbone⁶ $Y=0,5\%$ de telle façon que ce pourcentage atteigne après traitement 1% en masse de carbone à 1 mm de la surface, on doit résoudre la relation (3.11) et introduisant le coefficient de diffusion du carbone
200 dans l'austénite à cette température. Le coefficient de diffusion dépend exponentiellement de T selon une loi de type Arrhénius :

$$D = D_0 \cdot \exp\left[\frac{-Q}{RT}\right] \quad (3.12)$$

Avec $R=8,314\text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$, D_0 le facteur pré-exponentiel qui correspond au coefficient de diffusion pour une température infinie et Q l'énergie d'activation. Dans le cas de la diffusion du
205 carbone dans l'austénite, on a $D_0=1,5 \cdot 10^{-6}\text{ cm}^2.\text{s}^{-1}$ et $Q=113\text{ kJ.mol}^{-1}$. Si on admet que la masse volumique de l'acier ρ ne dépend pas du pourcentage massique en carbone, l'équation (3.11) se réduit à :

$$\text{erf}\left[\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right] = 0,286 \quad (3.13)$$

Soit en consultant la table des valeurs de la fonction d'erreur et en remplaçant D et x par leur
210 valeur respective, un temps de diffusion d'environ 74 heures est nécessaire ! Cet exemple montre que les conditions de diffusion en phase solide conduisent à des temps de traitement très longs, difficilement compatibles avec la production industrielle. Ces durées peuvent être cependant considérablement réduites si l'on augmente la température de traitement puisque le coefficient de diffusion dépend exponentiellement de T et que la concentration massique en carbone Y à la surface augmente avec T . Ainsi si on élève de 50°C la température de traitement par rapport au
215 calcul précédent, le temps de diffusion se réduit à 14 heures.

4 Conclusions

Ce traitement en phase solide, largement usité en milieu industriel, est un processus lent et thermiquement activé qui permet d'introduire un élément en surface d'une pièce métallique
220 comme les aciers sans passer par la phase liquide ; opération qui serait très coûteuse compte tenu des températures de fusion élevées des aciers. Il permet d'améliorer notablement les propriétés mécaniques des pièces mais nécessite des temps de traitement relativement longs qu'il convient d'optimiser.

⁶ Voir glossaire

Annexe A : les aciers

225

Dans la définition la plus simple, les aciers peuvent être considérés comme un mélange de fer et de carbone où la teneur massique en carbone ne dépasse pas 2%, et où celui-ci n'est pas sous sa forme libre mais soit sous la forme d'un carbure de fer stœchiométrique appelé cémentite Fe_3C , soit en insertion dans les structures cubiques à faces centrées (fer γ) ou cubique centré (fer α) du fer, c'est-à-dire sous la forme des solutions solides. Pour préciser le domaine d'existence des aciers d'un point de vue thermodynamique, il est nécessaire de tracer le diagramme de phases binaire Fer/ Fe_3C représenté sur la figure A-1 ci-dessous :

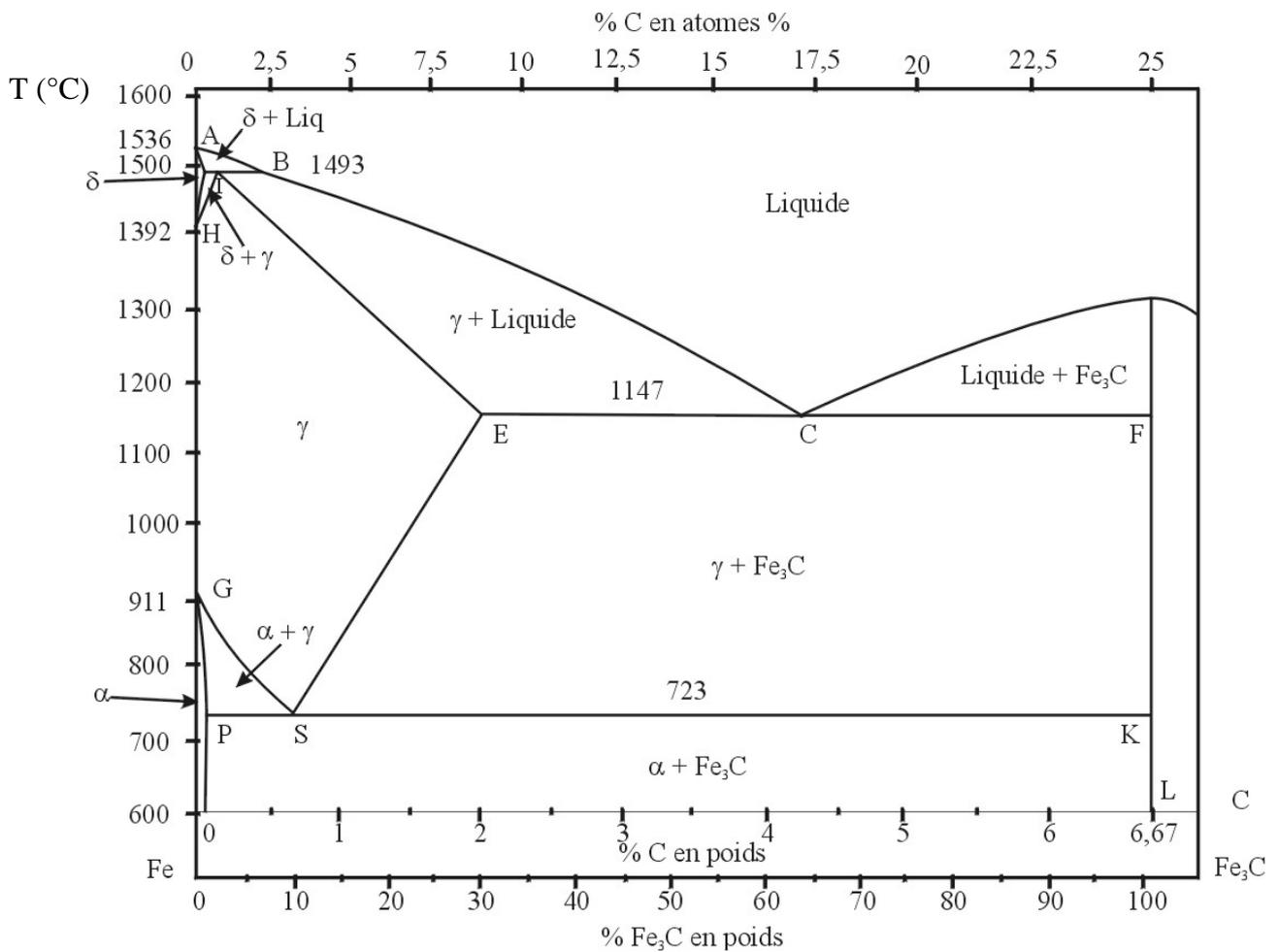


Figure A-1

235

Diagramme binaire (partiel) Fer-Carbone

On peut noter que l'axe des compositions est défini par rapport au pourcentage massique en cémentite (axe noté $%Fe_3C$ en poids) mais peut être également défini par rapport au pourcentage équivalent carbone soit en masse (axe noté $%C$ en poids) soit en atome (axe supérieur noté $%C$ en atomes) bien que celui-ci ne soit pas sous sa forme libre. Les points notés G, H et A sur l'axe

du fer pur correspondent respectivement aux transformations allotropiques ($\text{Fe}^\alpha \rightarrow \text{Fe}^\gamma$ à $T_G = 911^\circ\text{C}$, $\text{Fe}^\gamma \rightarrow \text{Fe}^\delta$ à $T_H = 1392^\circ\text{C}$) et à la fusion ($\text{Fe}^\delta \rightarrow \text{Liquide}$ à $T_A = 1536^\circ\text{C}$) du fer pur. On peut reconnaître deux paliers faisant intervenir la phase liquide : un palier eutectique correspondant au segment ECF où le liquide de composition C (4,2 % en masse de carbone) se transforme en une solution solide γ de composition E (2% en masse de carbone) appelée austénite, et en cémentite Fe_3C (point F à 6,67% en masse de carbone), et un palier péritectique situé en haut à gauche du diagramme que nous ne décrivons pas ici. L'austénite dont le domaine d'existence est relativement important (domaine γ noté sur le diagramme), est constituée d'atomes de carbone en insertion dans la phase cubique faces centrées du fer. Lorsque cette phase à une teneur en carbone correspondant au point S (0,82% en masse de carbone) et lorsque la température diminue en dessous de 723°C , elle se décompose en cémentite Fe_3C (point K à 6,67% en masse de carbone) et en ferrite α (point P à 0,025% en masse de carbone) selon la réaction eutectoïde correspondant au segment PSK. La ferrite α , dont le domaine d'existence est très restreint (domaine α noté sur le diagramme), est une solution solide d'insertion du carbone dans la structure cubique centrée du fer.

Une définition plus métallurgique des aciers est alors la suivante : un acier est un mélange Fer/Carbone qui peut être homogénéisé en phase solide, c'est-à-dire présenter une seule phase. Compte tenu du diagramme ci-dessus et en écartant la phase α dont le domaine d'existence est très faible, seul le domaine austénitique γ présente cette propriété. En conséquence, le domaine des aciers est limité à des compositions en carbone inférieures au point E (2% en masse de carbone) ; point correspondant au maximum de solubilité du carbone dans du fer cubique à faces centrées. Au-delà de ce point se positionnent les fontes. Dans le domaine des aciers, il est important de noter que la phase liquide est difficile à atteindre en conditions industrielles compte tenu des températures très élevées où elle apparaît. De ce fait, la totalité des traitements thermiques réalisés sur les aciers se feront en phase solide, et en particulier dans les domaines monophasé γ ($T > 723^\circ\text{C}$) et diphasé $\alpha + \text{Fe}_3\text{C}$ ($T < 723^\circ\text{C}$). Au contraire, les fontes sont fusibles puisqu'il est possible de les obtenir en phase liquide dès 1147°C . La métallurgie des fontes sera donc plutôt associée aux techniques de fonderie.

270

Glossaire – Définitions.

275 **activité a** : l'activité chimique d'une espèce chimique i (atome, molécule, ion, etc...) correspond à la concentration « active » de cette espèce i . En effet, au sein d'une solution (solide ou liquide), les interactions d'ordre électrostatique entre les différentes espèces amoindrissent leur potentiel de réactivité. Il faut donc corriger le terme de fraction massique Y_i (ou pression partielle p_i) par un coefficient inférieur à l'unité, appelé coefficient d'activité γ_i . Ce coefficient rend compte du caractère non idéal du mélange ($\gamma_i \leq 1$) :

$$a_i = \gamma_i \cdot Y_i \quad \text{dans le cas d'une espèce dans un liquide ou un solide}$$

(Y_i : fraction massique de i dans le mélange)

$$a_i = \gamma_i \cdot \frac{p_i}{p^0} \quad \text{dans le cas d'une espèce dans une phase gazeuse}$$

285 (p_i : pression partielle de i dans le gaz, p^0 : pression standard)

Fonction d'erreur « erf » : la fonction d'erreur est une intégrale définie souvent utilisée en probabilité, en transfert de chaleur ou en diffusion chimique (comme dans ce dossier). Sa définition est la suivante :

$$\operatorname{erf}[z] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_0^z \exp[-t^2] dt$$

L'intégrale de Gauss est définie comme l'intégrale d'une fonction gaussienne sur l'ensemble des réels :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-\alpha t^2] dt = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

295 $\operatorname{erf}[z]$ ne peut être obtenue à partir d'une formule fermée mais par un développement en série entière intégré terme à terme. Il existe des tables donnant des valeurs des intégrales, comme fonctions de z :

z	erf(z)	z	erf(z)	z	erf(z)	z	erf(z)
0.00	0.000 000	0.50	0.520 500	1.00	0.842 701	1.50	0.966 105
0.01	0.011 283	0.51	0.529 244	1.01	0.846 810	1.51	0.967 277
0.02	0.022 565	0.52	0.537 899	1.02	0.850 838	1.52	0.968 413
0.03	0.033 841	0.53	0.546 464	1.03	0.854 784	1.53	0.969 516
0.04	0.045 111	0.54	0.554 939	1.04	0.858 650	1.54	0.970 586
0.05	0.056 372	0.55	0.563 323	1.05	0.862 436	1.55	0.971 623
0.06	0.067 622	0.56	0.571 616	1.06	0.866 144	1.56	0.972 628
0.07	0.078 858	0.57	0.579 816	1.07	0.869 773	1.57	0.973 603
0.08	0.090 078	0.58	0.587 923	1.08	0.873 326	1.58	0.974 547
0.09	0.101 281	0.59	0.595 936	1.09	0.876 803	1.59	0.975 462
0.10	0.112 463	0.60	0.603 856	1.10	0.880 205	1.60	0.976 348
0.11	0.123 623	0.61	0.611 681	1.11	0.883 533	1.61	0.977 207
0.12	0.134 758	0.62	0.619 411	1.12	0.886 788	1.62	0.978 038
0.13	0.145 867	0.63	0.627 046	1.13	0.889 971	1.63	0.978 843
0.14	0.156 947	0.64	0.634 586	1.14	0.893 082	1.64	0.979 622
0.15	0.167 996	0.65	0.642 029	1.15	0.896 124	1.65	0.980 376
0.16	0.179 012	0.66	0.649 377	1.16	0.899 096	1.66	0.981 105
0.17	0.189 992	0.67	0.656 628	1.17	0.902 000	1.67	0.981 810
0.18	0.200 936	0.68	0.663 782	1.18	0.904 837	1.68	0.982 493
0.19	0.211 840	0.69	0.670 840	1.19	0.907 608	1.69	0.983 153
0.20	0.222 703	0.70	0.677 801	1.20	0.910 314	1.70	0.983 790
0.21	0.233 522	0.71	0.684 666	1.21	0.912 956	1.71	0.984 407
0.22	0.244 296	0.72	0.691 433	1.22	0.915 534	1.72	0.985 003
0.23	0.255 023	0.73	0.698 104	1.23	0.918 050	1.73	0.985 578
0.24	0.265 700	0.74	0.704 678	1.24	0.920 505	1.74	0.986 135
0.25	0.276 326	0.75	0.711 156	1.25	0.922 900	1.75	0.986 672
0.26	0.286 900	0.76	0.717 537	1.26	0.925 236	1.76	0.987 190
0.27	0.297 418	0.77	0.723 822	1.27	0.927 514	1.77	0.987 691
0.28	0.307 880	0.78	0.730 010	1.28	0.929 734	1.78	0.988 174
0.29	0.318 283	0.79	0.736 103	1.29	0.931 899	1.79	0.988 641
0.30	0.328 627	0.80	0.742 101	1.30	0.934 008	1.80	0.989 091
0.31	0.338 908	0.81	0.748 003	1.31	0.936 063	1.81	0.989 525
0.32	0.349 126	0.82	0.753 811	1.32	0.938 065	1.82	0.989 943
0.33	0.359 279	0.83	0.759 524	1.33	0.940 015	1.83	0.990 347
0.34	0.369 365	0.84	0.765 143	1.34	0.941 914	1.84	0.990 736
0.35	0.379 382	0.85	0.770 668	1.35	0.943 762	1.85	0.991 111
0.36	0.389 330	0.86	0.776 100	1.36	0.945 561	1.86	0.991 472
0.37	0.399 206	0.87	0.781 440	1.37	0.947 312	1.87	0.991 821
0.38	0.409 009	0.88	0.786 687	1.38	0.949 016	1.88	0.992 156
0.39	0.418 739	0.89	0.791 843	1.39	0.950 673	1.89	0.992 479
0.40	0.428 392	0.90	0.796 908	1.40	0.952 285	1.90	0.992 790
0.41	0.437 969	0.91	0.801 883	1.41	0.953 852	1.91	0.993 090
0.42	0.447 468	0.92	0.806 768	1.42	0.955 376	1.92	0.993 378
0.43	0.456 887	0.93	0.811 564	1.43	0.956 857	1.93	0.993 656
0.44	0.466 225	0.94	0.816 271	1.44	0.958 297	1.94	0.993 923
0.45	0.475 482	0.95	0.820 891	1.45	0.959 695	1.95	0.994 179
0.46	0.484 655	0.96	0.825 424	1.46	0.961 054	1.96	0.994 426
0.47	0.493 745	0.97	0.829 870	1.47	0.962 373	1.97	0.994 664
0.48	0.502 750	0.98	0.834 232	1.48	0.963 654	1.98	0.994 892
0.49	0.511 668	0.99	0.838 508	1.49	0.964 898	1.99	0.995 111

300

Pourcentage massique (Y) : le pourcentage massique en carbone (ou fraction massique) est défini comme la masse de carbone m_c rapporté à la masse totale de l'acier contenant m_c . Ce pourcentage massique est directement lié à la masse volumique ρ de l'acier via la relation :

$$Y = \frac{C}{\rho}$$

305 Avec C la concentration massique en carbone de l'alliage. Pour les aciers au carbone classique, on admet que $\rho_{\text{acier}} \approx \rho_{\text{Fer}} = 7,8 \text{ g.cm}^{-3}$.