UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE
INGENIEROS INDUSTRIALES

Desarrollo de Métodos para el Análisis y
Caracterización Predictiva de Procesos de Temple
con Láser de Componentes de Acero Forjado en el
Sector de Automoción

Francisco Cordovilla Baró

Ingeniero Industrial por la Universidad Politécnica de Madrid

TESIS DOCTORAL

Para la obtención del Grado de Doctor

Director:

José Luis Ocaña Moreno

Doctor Ingeniero Industrial por la E.T.S.I.I.
Universidad Politécnica de Madrid

Codirector:

Ángel García Beltrán

Doctor Ingeniero Industrial por la E.T.S.I.I.
Universidad Politécnica de Madrid

2017

Tribunal Calificador

Presidente:

D. Ángel María Sánchez Pérez

Vocales:

D. Miguel Ángel Sebastián Pérez

D. Armando José Yáñez Casal

D^a. Ana María Camacho López

Secretario:

D. Jesús de Vicente y Oliva

Suplentes:

D. Antonio Giménez Fernández

D^a. María José Tobar Vidal

Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimiento al director de esta tesis, José Luis Ocaña Moreno. Sus conocimientos, capacidad de trabajo y de liderazgo, no solo han sido esenciales para la consecución de este trabajo, sino que suponen para mi una referencia de primer orden en mis proyecciones como ingeniero, profesor e investigador.

Así mismo, quiero agradecer a Ángel García Beltrán, codirector de esta tesis, su acertado y constate apoyo, su total disponibilidad para todos los aspectos, de distinta índole, que han ido surgiendo durante el desarrollo de las investigaciones y publicaciones que tenido lugar en el contexto de la presente Tesis Doctoral.

Deseo también hacer patente mi agradecimiento a la empresa ETXE-TAR S.A., promotora del proyecto de I+D+i "LEIA" que ha servido de base a la presente Tesis Doctoral. De forma singular quiero mostrar mi agradecimiento a Patxi Samaniego, director de I+D de ETXE-TAR, Paula Sancho y Jesús Domínguez, ingenieros de I+D, ambos, parte esencial de la aplicación industrial de todos los avances conseguidos en el marco del proyecto.

Por último, aunque no menos importante, también quiero dar las gracias a todos mis compañeros del Centro Láser UPM y del departamento de Física Aplicada e Ingeniería de Materiales de la ETSII UPM.

Francisco Cordovilla Baró

Junio 2017

Planteamiento y resumen de la tesis

La presente Tesis Doctoral surge en el contexto del desarrollo de un proyecto de innovación industrial. Mientras que la tecnología de temple por inducción se encuentra como un proceso consolidado para el tratamiento de muy diversos componentes en distintas industrias, la tecnología láser surge como alternativa técnica asociada a la consecución de grandes ventajas, como el control preciso del calor aportado a los componentes tratados, potencial para unas elevadas tasas de productividad, así como, la consecución de procesos más versátiles y flexibles. Desde una perspectiva científico-técnica, el proceso de Temple Superficial con Láser conlleva la superación de una serie de desafíos multi-físicos y fuertemente acoplados, dónde la modelización del proceso supone una tarea fundamental.

La aplicación de una distribución de irradiancia de valor relativamente alto (entre 10^3 y 10^5 W/cm^2), asociada al haz láser, sobre la superficie del material tratado da lugar a un problema de transferencia de calor, caracterizado por velocidades de calentamiento y enfriamiento notablemente elevadas (entre 10^3 K/s y 10^6 K/s). La determinación de ciertas propiedades termo-físicas del material de trabajo, conductividad térmica, densidad, calor específico y densidad, así como, su dependencia con la temperatura constituye una parte imprescindible, aunque no suficiente por sí misma, para la obtención de la evolución espacio-temporal de las temperaturas experimentada por el material.

La información de entrada para los cálculos térmicos, es, por lo tanto, la energía efectivamente absorbida por parte de la superficie del material, del total de energía suministrado. Este planteamiento permite introducir el concepto de coeficiente de absorción, como otro de los aspectos clave en la precisión de los cálculos relativos al proceso de Temple Superficial con Láser. Este coeficiente puede considerarse como la contribución tanto de fenómenos electromagnéticos, como de fenómenos superficiales. El fenómeno electromagnético de la absorción está caracterizado por el paso de las ondas electromagnéticas a través de la interfaz entre el aire y un medio buen conductor. Se trata de un fenómeno determinista y resoluble analíticamente mediante las conocidas como ecuaciones de Fresnel. Por su parte, la oxidación superficial inherente al tratamiento lleva asociada una problemática específica. El desarrollo de una película de óxido, como consecuencia del calentamiento a gran velocidad de la superficie tratada en una atmósfera no protectora, supone la aparición de un medio absorbente que aumenta espectacularmente la fracción de energía absorbida por parte de la superficie tratada. Este incremento de absorción debe ser caracterizado para conseguir un seguimiento preciso del coeficiente de absorción a lo largo del desarrollo de la mencionada película de óxido superficial.

La presente Tesis Doctoral propone, en primer lugar, el desarrollo novedoso de un modelo acoplado temperaturas/oxidación mediante el uso de relaciones cinético-químicas para la caracterización del desarrollo de la película de óxido. Éstas relaciones han sido relacionadas con las condiciones alejadas del equilibrio en las que transcurre la reacción química, como consecuencia de la severidad del calentamiento asociada al tratamiento con láser de elevada potencia. La combinación de un modelo acoplado temperaturas/oxidación junto con las hipótesis de reacción química alejada de las condiciones de equilibrio han permitido relacionar funcional y explícitamente los parámetros del proceso asociados con la velocidad de calentamiento y la severidad del mismo, con los términos cinéticos que caracterizan el desarrollo de la reacción química: factor de frecuencia y energía de activación. Dicha asociación funcional explícita entre las condiciones del proceso y los parámetros cinéticos ha sido llevada a cabo enredosamente mediante el ajuste de mediciones experimentales de procesos llevados a cabo mediante distintas condiciones de calentamiento.

Una vez caracterizado el desarrollo de la película de óxido, el siguiente paso es relacionar su espesor, de forma analítica, con el incremento experimentado por parte del coeficiente de absorción. La presente Tesis Doctoral proporciona una relación matemática original, basada en la naturaleza de la propia película de óxido y en el comportamiento de la radiación láser en el seno de la misma. Dicha relación matemática, dado su carácter analítico, ha podido ser integrada sencillamente el modelo acoplado, suponiendo el nexo de realimentación entre los cálculos cinéticos y los cálculos térmicos.

En el terreno de las transformaciones metalúrgicas, nuevamente, las elevadas velocidades de calentamiento asociadas al proceso de Temple Superficial con Láser dan lugar a unas condiciones alejadas del equilibrio termodinámico para el proceso de austenización del material base. El uso de la Ley de Avrami, sobre la base de ciclos térmicos puntuales realistas es propuesto como una solución que permite la consecución de resultados con un elevado grado de precisión, sin un compromiso excesivo de los recursos computacionales necesarios, como ocurre en el caso de los modelos basado en las leyes de difusión de masa a nivel microscópico. Tanto las consideraciones llevadas a cabo en el terreno de la absorción, como el cálculo de las transformaciones martensíticas en base a relaciones cinéticas con parámetro dependientes de la temperatura, ha dado lugar a la simulación de proceso realistas con un elevado grado de coincidencia con los resultados experimentales. Este hecho ha permitido su utilización como herramienta predictiva para la selección de los parámetros de máquina en procesos reales de Temple Superficial con Láser.

A partir de todo lo anterior, la presente Tesis Doctoral se estructura a lo largo de 5 capítulos.

El capítulo 1 supone una introducción general al proceso de Temple Superficial con Láser y a problemática científico-técnica asociada.

El capítulo 2 constituye una revisión de todos los modelos del proceso de Temple Superficial con Láser tomados como base para la realización de la presente Tesis Doctoral. De cada uno de ellos se analizan sus logros, así como, sus factores limitativos.

El capítulo 3 introduce todas las novedades aportadas por la presente Tesis Doctoral, tanto en el terreno del cálculo de las transformaciones metalúrgicas, como de el aumento del coeficiente de absorción asociado a la oxidación superficial del material.

El capítulo 4 aporta todos los resultados obtenidos por las simulaciones numéricas llevadas a cabo, así como la comparación con trabajos experimentales llevados a cabo.

Finalmente, se presentan la conclusiones generales de todo el trabajo, así como las posible líneas de investigación futuras a partir de los trabajos realizados.

Índice general

1. Introducción: el Temple Superficial con Láser de aceros forjados en el sector de la automoción	1
2. Revisión del estado de conocimiento de los modelos de Temple Superficial con Láser	9
2.1. Estudio de las características y el alcance de Modelos Semi-Analíticos	10
2.2. Revisión de los Modelos Numéricos del proceso de Temple Superficial con Láser	16
2.2.1. Cálculo de temperaturas y diagrama de equilibrio $Fe - Fe_3C$	17
2.2.2. Análisis de modelos de Transformación Austenítica	27
2.2.3. Análisis de modelos de Transformación Martensítica	44
2.2.4. Métodos disponibles para el cálculo de dureza y tensiones residuales	58
2.3. Estudio del modelado de la Absorción	68
2.3.1. Reflexión y Refracción de Ondas Electromagnéticas	69
2.3.2. Ecuaciones de Fresnel	73
2.3.3. Reflexión y Refracción entre dos medios no conductores	74
2.3.4. Reflexión, Refracción y Absorción en conductores	76
2.3.5. Ángulo de Brewster	77
2.3.6. Influencia del estado superficial en la Absorción	78
2.3.7. Influencia de una capa de óxido superficial en la Absorción	81
2.3.8. Cinética de la oxidación en condiciones alejadas del Equilibrio	87
2.4. Modelos específicos de interacción láser materia en procesos de Temple Superficial	92
2.5. Tratamiento de grandes superficies: Pasadas Sucesivas	96

3. Desarrollo y síntesis de una metodología original para la modelización del proceso de Temple Superficial con Láser de aceros Cr-Mo101	
3.1. Aplicación de modelos semi-analíticos a la obtención de ventanas de trabajo	104
3.2. Piezas para un modelo realista por elementos finitos	109
3.3. Modelo Térmico del proceso	114
3.3.1. Desarrollo de un modelo en Comsol ®	115
3.3.2. Consideraciones sobre el calor latente	117
3.3.3. Observaciones sobre el enfoque del haz	118
3.3.4. Discretización	119
3.3.5. Análisis de un coeficiente representativo de absorción en geometrías curvas	121
3.3.6. Material y propiedades termo-físicas	132
3.3.7. Modelo del haz láser: Fuente Equivalente de Potencia	135
3.4. Transformaciones Metalúrgicas durante el calentamiento	137
3.5. Cálculo de la fracción de martensita	144
3.6. Cinética de la oxidación en calentamientos rápidos	151
3.7. Incremento de absorción debido a la oxidación	157
3.8. Análisis del proceso de temple con pasadas solapadas	159
4. Resultados de la aplicación de la metodología propuesta al tratamiento de componentes reales	171
4.1. Batería de pruebas basadas en una F.E.P con frente caliente y frente frío	172
4.2. Batería de pruebas basadas en una F.E.P con dos frentes cualesquiera	179
4.3. Pruebas con pasadas sucesivas	182
5. Conclusiones y líneas de futuro desarrollo	189
5.1. Conclusiones	189
5.2. Líneas de futuro desarrollo	192
Referencias	193
Anexos:	204
A. Revisión de los fenómenos de Transferencia de Calor	205
A.1. Ecuación general de transmisión de calor y conducción térmica	206
A.2. Radiación térmica	210
A.3. Convección térmica	212

B. Revisión sobre los fenómenos de Propagación de Ondas Electromagnéticas	215
B.1. Interacción de la Radiación Láser con la Materia	215
B.1.1. Ondas Electromagnéticas planas en el espacio libre	215
B.1.2. Propagación de Ondas en medios homogéneos, isótropos, lineales y estacionarios	216
B.1.3. Propagación en medios no conductores	218
B.1.4. Propagación en medios conductores	218
B.1.5. Propagación en medios buenos conductores	220
C. Caracterización de las propiedades térmicas del material	223
C.1. La técnica Laser-Flash	223
C.2. Obtención de diagramas de transformación	226
D. Propiedades micro-estructurales de los aceros considerados en el trabajo	231
D.1. Diagrama $Fe - Fe_3C$	231
D.1.1. Puntos críticos de los aceros	234
D.1.2. Simplificaciones del diagrama	235
D.2. Constituyentes microscópicos de los aceros	235
D.2.1. Ferrita	236
D.2.2. Cementita	236
D.2.3. Perlita	237
D.3. Consideraciones sobre la templabilidad	238
D.4. Propiedades del acero <i>AISI</i> 4140	241
E. Application of simplified models for the determination of working windows for laser hardening of steels	243
F. Caracterización de la reacción de oxidación superficial y su influencia sobre la absorción de radiación durante el proceso de temple superficial con láser para el acero 42CrMo4	261
G. Numerical-experimental analysis of the effect of surface oxidation on the laser transformation hardening of Cr Mo steels	275
H. Numerical/experimental analysis of the laser surface hardening with overlapped tracks to design the configuration of the process for Cr-Mo steels	285

Lista de símbolos principales

Símbolo	Descripción	Unidades típicas
A	Coefficiente de absorción de radiación láser	$()$
A_{c1}	Temperatura crítica de equilibrio inicial	K
A_{c3}	Temperatura crítica de equilibrio final	K
C_p	Calor específico	$J/kg \cdot K$
D_i	Coefficiente de difusión másica de la especie i	m^2/s
D_0	Distancia de descentre	mm
E	Módulo de Young	MPa
E_a	Energía de activación	J/kg
$\mathbf{E}$	Vector Campo Eléctrico	V/m
F_f	Factor de frecuencia	$kg^2/m^4 \cdot s$
f_A	Fracción volumétrica de Austenita	$()$
f_M	Fracción volumétrica de Martensita	$()$
G	Energía libre de Gibbs	J/mol
H	Entalpía	J/kg
h_{Ox}	Espesor de la película de óxido	mm
M_f	Temperatura de finalización de formación de Martensita	K
M_s	Temperatura de comienzo de formación de Martensita	K
r_b	Radio característico del haz gaussiano	mm
Q	Calor generado por unidad de volumen y de tiempo	W/m^3
R	Constante universal de los gases ideales	$J/mol \cdot K$
S	Entropía	J/K
T	Temperatura	K
T_M	Temperatura de fusión del material	K
t	tiempo	s
x	Coordenada espacial x	m
y	Coordenada espacial y	m
w	Función de test del método de Galerkin	$()$
z	Coordenada espacial z	m

*	Símbolo que denota superíndice de variable adimensionalizada	()
α	Fase metalúrgica Ferrita	()
ϵ	Constante de Stefan-Boltzmann	$W/m^2 \cdot K^4$
ϵ_x	Microdeformación en la dirección x	μm
ϵ_y	Microdeformación en la dirección y	μm
ϵ_z	Microdeformación en la dirección z	μm
σ_x	Tensión residual en la dirección x	μm
σ_y	Tensión residual en la dirección y	μm
σ_z	Tensión residual en la dirección z	μm
κ	Conductividad térmica	$W/m \cdot K$
γ	Fase metalúrgica Austenita	()
ρ	Densidad	kg/m^3
ν	Coefficiente de Poisson	()
θ_i	Ángulo de incidencia	rad
θ_p	Ángulo de polarización	rad
χ	Difusividad térmica	m^2/s

Capítulo 1

Introducción: el Temple Superficial con Láser de aceros forjados en el sector de la automoción

El término Temple es utilizado en el mundo de la metalurgia para referirse al conjunto de técnicas y tratamientos térmicos destinados a aumentar la dureza de las aleaciones de hierro, especialmente el Acero. Se trata de una técnica milenaria, cuyas primeras evidencias se remontan a la Edad Antigua [Apraiz64].

En el contexto de los tratamientos térmicos con láser, el Temple Superficial con Láser es una técnica en la que un haz láser con las características adecuadas es utilizado como fuente térmica recorriendo la superficie de una pieza de acero con el objetivo de que bajo las zonas irradiadas, a lo largo de cierto espesor, se produzcan unas condiciones de calentamiento seguido de un auto-enfriamiento rápido del material que favorezcan la obtención de martensita [Ion05]. El alcance típico del tratamiento es de entre 1 *mm* y 3 *mm*, y está limitado por la posibilidad de generar ciclos térmicos adecuados a partir de cierta profundidad sin superar la temperatura de fusión del material en la superficie [Miokovik04, Miokovik07].

La figura 1.1 muestra una representación esquemática del proceso de Temple Superficial con Láser. Este esquema permite introducir la noción de zona transformada y de zona afectada térmicamente.

La aparición y accesibilidad a sistemas láser de potencia ha revolucionado un buen número de procesos, al aplicarse a los más variados campos de la ciencia, la tecnología y la industria. En campos tan dispares como la química, la cirugía, las comunicaciones, la metrología, la electrónica, el medio ambiente, la industria automovilística, la reprografía, el entretenimiento o la industria nuclear, esta herra-

Figura 1.1: Esquema del proceso de Temple Superficial con Láser

mienta, con apenas cinco décadas de vida y evolución, ha sustituido a otros tipos de dispositivos o incluso ha permitido desarrollar procesos totalmente innovadores [Garcia-Beltran96].

Poco después de su aparición en 1960 surgieron las primeras aplicaciones industriales de los láseres, como el taladrado de rubíes para la fabricación de relojes.

Actualmente en la industria pueden encontrarse miles de equipos láser. Dichos sistemas realizan entre otras tareas: corte [Olsen93], soldadura [Cantello93], mecanizado [Weck94], marcado, taladrado [Bachs88] y tratamiento superficial [Stenn86, Bergmann93] en los más variados materiales [Varga93].

Analizando los parámetros de proceso, las diversas tareas realizadas con láser se distinguen fundamentalmente por la densidad de potencia y el tiempo de interacción empleados, según queda reflejado de forma gráfica en la figura 1.2.

Los efectos y consecuencias que la radiación láser produce en un material están directamente relacionados con la evolución espacial y temporal de la temperatura en el interior del material. Ésta dependerá, entre otros factores, de la intensidad o densidad de potencia por unidad de superficie, del tiempo de interacción y del régimen de funcionamiento del láser.

Por ejemplo, en referencia a este último punto, la utilización de un láser en modo continuo o en modo pulsado influirá sensiblemente en los resultados obtenidos. Así, pulsos cortos y energéticos muy focalizados tienden a perforar el material, mientras que la misma energía repartida durante un tiempo más largo sería adecuado para un proceso de corte. En cambio, para procesos de tratamientos térmicos superficiales se ha de emplear menos intensidad de energía durante un intervalo de tiempo de interacción más prolongado.

Figura 1.2: Clasificación de los procesos industriales con láser en función de la densidad de potencia. Fuente: [Bauerle13]

Centrándose en los procesos de interés de este trabajo, la técnica habitual para modificar las propiedades físicas, químicas y mecánicas de los materiales se basa en un conjunto de operaciones que tienen por objeto alcanzar determinadas temperaturas en procesos de calentamiento y enfriamiento a diversas velocidades. Estas operaciones reciben el nombre de procesos de tratamiento superficial.

Así por ejemplo, las modificaciones de las propiedades en los materiales metálicos amplían espectacularmente las posibilidades de aplicación de los metales que

ven mejoradas sus características de dureza, tenacidad, resistencia mecánica y a la corrosión, adherencia, etc. Probablemente, dentro de este campo, los procesos de tratamiento superficial más extendidos actualmente en la industria sean los del temple superficial de aceros al carbono o débilmente aleados [Kennedy04, Bass12].

Las aplicaciones del proceso de Temple Superficial con Láser se encuentran en aquellos componentes cuyas sollicitaciones en servicio requieren alguna de las propiedades mecánicas de la martensita, como dureza y resistencia al desgaste, en las zonas externas de los mismos, sin perder la elasticidad del material sin tratar. Este tipo de especificaciones se encuentran, por ejemplo, en los apoyos y muñequillas del cigüeñal de un motor alternativo donde la capa externa debe resistir la fricción asociada al movimiento relativo, mientras que el conjunto de la pieza debe ser capaz de soportar las cargas cíclicas correspondientes al funcionamiento del motor.

La figura 1.3 muestra un ejemplo típico de componente perteneciente al sector de la automoción en donde el proceso de temple superficial con láser pone de manifiesto todas sus ventajas tecnológicas. El apoyo del cigüeñal mostrado puede ser tratado satisfactoriamente, permitiendo incluso, la gestión de singularidades geométricas, como los agujeros de engrase, gracias a la precisión y capacidad de control asociada a los tratamientos con láser (ver [Sancho16]).

Figura 1.3: Componente del sector de la automoción tratado con láser]

El éxito en la implantación del proceso de Temple Superficial con Láser radica no sólo en sus ventajas tecnológicas, sino también en una comprensión profunda de los complejos fenómenos físicos que surgen de los cambios metalúrgicos en condiciones alejadas del equilibrio inducidos por el ciclo térmico y la modificación de las propiedades superficiales durante el proceso realizado en una atmósfera no protectora, permitiendo a los diseñadores y usuarios del proceso predecir las temperaturas y el perfil de transformación a partir de una cierta combinación de parámetros del proceso.

Una de las consecuencias colaterales del proceso es la oxidación de las superficies tratadas. La alta temperatura alcanzada durante el proceso, (entre 900 °C y 1400 °C), acelera la cinética de la reacción química entre el acero y el aire circundante, llevando a la formación de una capa compuesta principalmente por Fe_3O_4 . Esta capa incrementa la absorción de la radiación láser hasta un 40 % de las condiciones originales [Panstar04, Panstar08]. Dado este incremento significativo, es esencial introducir un enfoque realista de los fenómenos en el desarrollo de cualquier modelo térmico y metalúrgico del proceso.

Otra característica importante del Temple Superficial con Láser es la austenización rápida [Miokovic07]. La velocidad de calentamiento producida por una fuente láser móvil es comparable en orden de magnitud con el tiempo que toman los átomos de carbono para difundir dentro del material base para formar austenita y, por lo tanto, la temperatura crítica de equilibrio, A_{c3} , sólo mantiene el significado umbral energético desde el cual la reacción es termodinámicamente posible, pero no una referencia fiable para asegurar el cambio de fase completo desde el material base hasta la austenita.

Existen diferentes enfoques para modelar el proceso, cuya hipótesis iniciales y requerimientos computacionales determinan la exactitud de los resultados y su flexibilidad para hacer frente a las condiciones cambiantes del proceso. En [Cordovilla-Baro14] se utiliza una metodología simplificada, suponiendo geometría plana, material con propiedades térmicas constantes, coeficiente de absorción constante y temperaturas de equilibrio críticas para considerar cambios metalúrgicos, con el objeto de obtener ventanas de trabajo a partir de las especificaciones de los usuarios. Mientras que la simplicidad de la hipótesis evita elevadas necesidades computacionales, al mismo tiempo, los resultados son intervalos de aceptación en lugar de valores particulares.

Cuando se tiene que reducir la incertidumbre de los resultados, se necesitan modelos 3D mediante el método de los elementos finitos. En algunos trabajos [Bailey09, Garcia-Beltran08, Skavarenina06], se proponen modelos 3D térmicos que representan la absorción debido a la oxidación mediante un valor constante, y usando temperaturas críticas para estimar la formación de austenita. El uso de dominios 3D amplía la flexibilidad del modelo, permitiendo estudiar diferentes disposiciones o singularidades geométricas, pero la consideración de un solo coeficiente de absorción restringe el estudio a un conjunto de condiciones de proceso cercano a las utilizadas para determinar empíricamente ese coeficiente. Si se utiliza cualquier otra combinación de parámetros, tanto el espesor final de la capa de óxido como la cinética de la reacción química de oxidación será diferente [Nanai97], y por lo tanto, un coeficiente global constante puede no ofrecer resultados fiables.

Las referencias [Skavarenina06, Soriano11, Tani08] desarrollan estudios donde la transformación del material base en austenita se analiza localmente considerando la difusión de carbono en la interfase de los diferentes granos de material base usando la ley de Fick. La reacción global muestra un comportamiento sigmoide para la transformación general, como predice la ley de Avrami para el cambio de fase. Esta metodología implica un enfoque muy preciso de la transformación metalúrgica, a expensas de altos requerimientos computacionales, ya que es necesaria una discretización que represente el tamaño del grano y la distribución del material base. Estos requisitos computacionales limitan el tamaño y la complejidad geométrica de los dominios a estudiar, evitando que los modelos se ocupen de situaciones realistas en términos de tiempo del proceso, tamaño de la pieza y singularidades geométricas.

El presente trabajo trata, en primer lugar, de la cinética de la reacción de oxidación cuando un láser irradia la superficie [Antonov02, Antonov08, Iordanova08]. En [Panstar04, Panstar08] se realizan varios experimentos para estudiar la influencia sobre la absorción de algunos parámetros como la velocidad del proceso (tiempo de interacción) o la potencia del haz. Los diferentes coeficientes de absorción se interpretan como consecuencia de la influencia de los parámetros del proceso sobre el crecimiento de la capa de óxido.

En [Nanai97], las características particulares de un calentamiento láser se destacan. Los gradientes térmicos elevados y la naturaleza electromagnética de la fuente térmica ejercen influencia sobre los parámetros cinéticos, la energía de activación y el factor de frecuencia, que caracterizan la reacción de oxidación que ocurre en condiciones alejadas del equilibrio. Se analizan diferentes materiales de trabajo, pero no se particulariza para el caso del endurecimiento superficial por láser.

Siguiendo las ideas anteriores, este trabajo propone la determinación de la capa de óxido acoplada a los cálculos térmicos, utilizando una ley cinética, cuyos parámetros han sido funcionalmente relacionados con algunos parámetros de proceso característicos del Temple Superficial con Láser, permitiendo que un modelo flexible afronte una amplia gama de condiciones de proceso. Una vez que se puede calcular el espesor instantáneo, el siguiente paso es asociarlo con otro incremento instantáneo de absorción. Se presentará una fórmula innovadora deducida de la trayectoria seguida por la radiación en el material base de óxido de la interfase.

En segundo lugar, se analizarán los cursos térmicos precisos calculados a través del acoplamiento térmico-oxidante con ley Avrami para calcular la fracción de austenita resultante del proceso. Este procedimiento se realizará de forma similar a lo que [Miokovic04, Miokovic06] propone, aunque, utilizando ciclos térmicos reales, con tasas de calentamiento y enfriamiento no constantes. A pesar de implicar un cierto

esfuerzo computacional, debido a que los cursos térmicos tienen que ser discretizados en pasos casi isotérmicos, el esfuerzo es significativamente menor que tener que diseñar y resolver una red que represente la microestructura del material base y la disponibilidad del modelo para calcular geometrías realistas y procesos de larga duración.

Las distintas condiciones de proceso simuladas han sido reproducidas experimentalmente, permitiendo comparar la temperatura máxima superficial con la calculada por el modelo, así como, la comparación de los espesores de óxido teóricos y experimentales. La coincidencia de ambos resultados ha servido para constatar la utilidad del modelo frente a condiciones de proceso variables.

Por otra parte, cuando las dimensiones de la región a tratar son mayores que el área transversal del haz láser, se necesitan pasadas consecutivas superpuestas [Garcia-Beltran07, Lakhkar08, Orazi10]. En este contexto, los fenómenos ya complejos del proceso de temple superficial por láser aumentan con el revenido provocado por la zona afectada por la zona térmicamente afectada de la pasada consecutiva, disolviendo la martensita generada por la anterior. En este contexto, los modelos físicos del proceso constituyen una herramienta fundamental para analizar la mejor configuración para evitar regiones con valores de dureza bajo la exigencia nominal, o cuando es inevitable, reducir al máximo la extensión de esas regiones.

En primer lugar, el presente trabajo aplica el modelo de endurecimiento superficial láser desarrollado previamente, de manera innovadora al estudio del proceso con pasadas sucesivas. Ese modelo utiliza la ley Avrami para calcular la austenización, según el procedimiento propuesto en [Miokovik04], pero, con ciclos térmicos completamente realistas [Cordovilla15, Cordovilla16].

Además, supera modelos en los que el incremento de absorción debido a la oxidación se describe por un coeficiente global obtenido empíricamente para un conjunto fijo de condiciones de proceso [Bataille91, Dinesh11, Kechemair87], que puede no representar adecuadamente ninguna otra, limitando enormemente la flexibilidad de los estudios. La reacción de oxidación se relaciona con las condiciones del proceso [Panstar04, Panstar06] y considera que sucede lejos del equilibrio [Alvin07].

Las ventajas intrínsecas del modelo se amplían en el caso del proceso de superposición. Los cálculos para obtener el espesor de la capa de óxido en todo el área cubierta por una primera pasada permiten conocer con anticipación las condiciones superficiales y de absorción de la siguiente, en la región de superposición, y evaluar por lo tanto si las condiciones del proceso tienen que ser reajustadas para tener un efecto térmico similar.

En el campo de las transformaciones metalúrgicas, la ley de Avrami [Avrami39, Avrami40, Avrami41] se utiliza no sólo para analizar la austenización, sino también para estudiar el fenómeno de templado, cuando la zona afectada por el calor de una pista dada transforma la martensita de la anterior en material base [Cordovilla16]. Una vez que un modelo ha sido introducido y adaptado como una herramienta adecuada para estudiar los fenómenos que ocurren en dos pistas consecutivas (o más), este trabajo propone un procedimiento sistemático para el diseño del proceso a partir de requerimientos realistas, atendiendo a diferentes criterios para su aplicación práctica.

El diseño necesita inicialmente de una caracterización topológica de las regiones bajo una única pasada con el láser, considerando la extensión tanto de la zona templada como de la zona térmicamente afectada. Esta caracterización es suficiente por sí misma para demostrar que la distancia entre pasadas consecutivas para alcanzar un valor de dureza a una cierta profundidad tiene que ser estrictamente más corta que el ancho en el que una sola pasada se cumple el requisito de dureza y no exactamente igual a ese ancho, como dicta la intuición.

Después de conocer las limitaciones iniciales del proceso, se muestra un ejercicio de diseño práctico en la sección de resultados. Se parte de las condiciones del proceso y un conjunto de requisitos en términos de dureza mínima y la profundidad que debe alcanzar. A partir de este marco, se desarrolla un procedimiento sistemático para encontrar la distancia de superposición más adecuada que cumpla con los requisitos y maximice la productividad del proceso. Tiene en cuenta diferentes criterios de mejora según el post-procesado de la superficie tratada. Estos análisis revelan la alta complejidad de los fenómenos, donde la búsqueda de un alto valor de dureza en la parte más baja de la región endurecida es opuesta al mismo objetivo en la parte superior. Finalmente, se aclara que la agresividad del temple asociado con la pista, es decir su capacidad de destruir la martensita, constituye un factor limitante importante, forzando, en la mayoría de las veces, a tomar una solución de compromiso ya aceptar bandas de transición con dureza Valores bajo requisito nominal.

Los cálculos desarrollados para llevar a cabo el ejercicio de diseño, sobre todo en forma de fases metalúrgicas y mapas de dureza, fueron validados empíricamente, con experimentos que reprodujeron las simulaciones y con la prueba de Vickers para medir la dureza [Hermann11], mostrando un excelente grado de coincidencia.

Capítulo 2

Revisión del estado de conocimiento de los modelos de Temple Superficial con Láser

En general, el modelado físico de cualquier proceso persigue una diversidad de objetivos, orientados a conseguir una cierta capacidad de predicción de los resultados o consecuencias del mismo, a partir de sus características concretas y las condiciones en las que el proceso tiene lugar. Resulta necesario un conocimiento, más o menos profundo, de las leyes físicas que rigen el proceso [Bertolotti13]. La precisión de los resultados o predicciones proporcionadas por el modelo está relacionada con la profundidad en el análisis de los fenómenos físicos presentes durante el mismo; mayor precisión requiere, inevitablemente, conocimientos más profundos y diversos.

En el caso del proceso de Temple Superficial con Láser, como fenómeno físico a modelar en el contexto de los procesos industriales, se pretende predecir la evolución espacio-temporal de las temperaturas originadas en el material tratado y su influencia, a su vez, sobre las transformaciones físico-químicas experimentadas por el material de trabajo, a partir de una serie de parámetros de proceso, que a su vez caracterizan las condiciones de irradiación de una determinada zona del material de trabajo por un haz láser [Ion05]. De este modo, desde la emisión de un haz de fotones coherente y monocromático en un resonador láser, hasta la transformación de la microestructura inicial del material tratado, una serie de leyes físicas determinan la transformaciones experimentadas por la energía y el material.

El presente capítulo supone la revisión y explicación de los modelos disponibles en la literatura que tratan alguno o varios de los fenómenos físicos que tienen lugar durante el proceso de Temple Superficial con Láser, desde el propio haz, pasando por los efectos térmicos generados sobre el material, hasta llegar a las transforma-

ciones metalúrgicas y la oxidación de la superficie tratada. Se escudriñarán tanto sus ventajas como sus limitaciones, teniendo en cuenta las aportaciones novedosas planteadas en la presente Tesis Doctoral.

2.1. Estudio de las características y el alcance de Modelos Semi-Analíticos

Los diagramas de proceso son una representación gráfica de la relación entre distintas variables del proceso de Temple Superficial con Láser. La importancia de su elaboración radica en su aplicabilidad práctica para la estimación de parámetros del proceso de forma sencilla. Se entiende, por lo tanto, que el concepto de diagramas de proceso implica la obtención de relaciones explícitas y manejables entre variables, dado su enfoque eminentemente operativo y gráfico, asociado del mismo modo, a la identificación de las principales variables y mecanismos del proceso [Ion05].

Los diagramas adimensionales (en los que se relacionan variables adimensionalizadas) permiten efectuar un análisis independiente de las características del material tratado, mostrando de forma clara la influencia de las distintas variables del proceso entre sí. En [Scherif91] se considera el caso de un haz gaussiano móvil en régimen estacionario, con radio característico r_B , calentando sin fundir la superficie de un gran bloque de material. Tras un transitorio inicial, el régimen de temperaturas alrededor del haz alcanza un valor constante. Esta disposición básica de un proceso de Temple Superficial con Láser, permite introducir las principales variables adimensionales del proceso.

a) Incremento de temperatura adimensional:

$$T^* = \frac{(T - T_0)}{A_1 - T_0} \quad (2.1)$$

b) Potencia del haz adimensional:

$$Q^* = \frac{AQ}{r_B \kappa (A_1 - T_0)} \quad (2.2)$$

c) Velocidad del haz adimensional:

$$V^* = \frac{r_B v}{\chi} \quad (2.3)$$

d) Tiempo adimensional:

$$t^* = \frac{t}{t_0} \quad (2.4)$$

e) Coordenadas x^* , y^* , z^* adimensionales:

$$(x^*, y^*, z^*) = (x/r_B, y/r_B, z/r_B) \quad (2.5)$$

La figura 2.1 representa, a modo de ejemplo, la relación entre la potencia, Q^* y la velocidad, V^* adimensionales, asociadas a cualquier proceso consistente en un haz láser gaussiano recorriendo la superficie de un material. Dicha figura dispone contornos para delimitar la fusión y la vaporización del material (líneas continuas), así como una agrupación de distintos procesos típicos con láser (líneas de trazos).

Figura 2.1: Diagrama Q^* vs. V^* que permite la clasificación de distintos procesos láser (Adaptado de [Ion05])

Una forma para obtener relaciones entre las variables dadas por las ecuaciones (2.1)-(2.5) son lo que se conoce como modelos simplificados. Éstos, conciben el proceso de Temple Superficial con Láser haciendo uso de las suficientes hipótesis simplificadoras como para encontrar una solución analítica para la ecuación de transferencia del calor (ver anexo A). Este enfoque permite, no solo la obtención de expresiones matemáticas explícitas para calcular de forma sencilla resultados predictivos de un determinado proceso, sino también, desde un punto de vista físico, una primera aproximación a los principales fenómenos constitutivos del Temple Superficial con Láser.

El presente trabajo estudia por un lado el modelo simplificado de Ashby and Easterling [Asby84], y por otro el de Miyamoto y Maruo [Miyamoto95], obteniendo a partir de los mismos una metodología orientada a la estimación de los parámetros del proceso en función de una serie de requisitos de diseño.

Las hipótesis simplificativas en las que están basados ambos modelos ponen de manifiesto los factores para un desarrollo más complejo y realista del análisis del proceso. Estas hipótesis son:

- a) La geometría irradiada es plana.
- b) Propiedades termo-físicas del material, conductividad térmica, κ , densidad, ρ , calor específico, C_p y difusividad térmica, χ , no varían con la temperatura.
- c) La absorción de radiación es un valor constante, independiente de la evolución del estado superficial del material durante la evolución del tratamiento.
- d) Las transformaciones metalúrgicas vienen dadas por las temperaturas críticas del diagrama de equilibrio.
- e) La distribución espacial de la energía en el haz láser se corresponde con una función simple, diferenciable, y consecuentemente sin optimización posible para un control preciso de la zona afectada térmicamente por el tratamiento.

El modelo de Ashby y Esterling asume que la profundidad alcanzada por el tratamiento de los aceros depende de dos conjuntos de variables. Por un lado las propiedades del acero: temperaturas críticas de re-cristalización, propiedades termo-físicas, absorción superficial, etc. Por otro lado, las propiedades asociadas al rendimiento del láser: potencia, dimensiones del haz, velocidad y distribución de energía. Teniendo en cuenta todas ellas, el modelo es capaz de obtener la conocida como ecuación del campo de temperaturas. La figura 2.2 representa de forma esquemática el proceso idealizado así como la distribución de energía gaussiana.

Conforme a la figura 2.2, el sistema de coordenadas tiene su origen en el centro del haz, de radio característico r_B . Dicho haz láser, de potencia total Q se mueve en la dirección x con velocidad V , siendo el eje y transversal y el eje z perpendicular a la superficie tratada. El tiempo de interacción se define como, $t_{int} = 2r_B/V$. Bajo estas condiciones la solución general para el campo de temperaturas viene dada por la ecuación (2.6).

$$T(0, y, z, t) = T_0 + \frac{AQ}{2V\pi\kappa [t(t+1)]^{1/2}} \exp \left\{ \frac{-1}{4\chi} \left[\frac{(z+z_0)^2}{t} + \frac{y^2}{t+t_0} \right] \right\} \quad (2.6)$$

Figura 2.2: Idealización del proceso en el modelo de Ashby y Esterling (izqda.), y distribución gaussiana (dcha.)

La ecuación 2.6 introduce algunos parámetros importantes. El primero, t_0 , es un tiempo de transferencia de calor característico, definido como, $t_0 = r_B^2/4\chi$. El segundo, z_0 es una longitud característica cuya función es limitar la temperatura en superficie a un valor finito. De este modo, la superficie real se considera una distancia Z_0 bajo la superficie del modelo (ver Ashby85).

La distancia z_0 puede ser también adimensionalizada, $z_0^* = z_0/r_B$. Utilizando variables adimensionales la ecuación (2.6) se transforma en la ecuación 2.7.

$$T^*(0, x, y, z, t) = T_0 + \frac{(2/\pi)(Q^*/V^*)}{[t^*(t^* + 1)]^{1/2}} \exp \left\{ - \left[\frac{(z^* + z_0^*)^2}{t^*} + \frac{(y^*)^2}{t^* + 1} \right] \right\} \quad (2.7)$$

El tiempo necesario para alcanzar la temperatura de pico, t_p^* , entendida como la temperatura máxima transmitida por el haz láser en una posición dada, se obtiene diferenciando la ecuación del campo de temperaturas con respecto al tiempo. La profundidad máxima templada así como el posible origen de la fusión ocurren en la posición central, esto es, $y^* = 0$. De este modo, t_p^* viene dado por la ecuación (2.8).

$$t_p^* = \frac{1}{4} \left[2(z^* + z_0^*)^2 - 1 + [4(z^* + z_0^*)^4 + 12(z^* + z_0^*)^2 + 1]^{1/2} \right] \quad (2.8)$$

Utilizando variables dimensionales (ver ecuaciones (2.1)-(2.5)), la expresión para el tiempo que tarda en alcanzarse la temperatura de pico viene dada por la ecuación (2.9).

$$t_p = \frac{1}{4} t_0 \left[\frac{2(z + z_0)^2}{r_B^2} - 1 + \left[\frac{4(z + z_0)^4}{r_B^2} + \frac{12(z + z_0)^2}{r_B^2} + 1 \right]^{1/2} \right] \quad (2.9)$$

La importancia de usar la temperatura de pico radica en que ésta determina la profundidad máxima templada, así como, la posibilidad de fusión superficial. Ha-

ciendo $t^* = t_p^*$ en la ecuación (2.7), se obtiene la ecuación (2.10) para la temperatura de pico.

$$T_p^*(0, 0, z, t) = \frac{(2\pi)(Q^*/V^*)}{[t_p^*(t_p^* + 1)]^{1/2}} \exp \left\{ - \left[\frac{z^* + z_0^*}{t_p^*} \right] \right\} \quad (2.10)$$

Despejando la potencia adimensional se obtiene la ecuación (2.11).

$$Q^* = T_p^*[t_p^*(t_p^* + 1)]^{1/2} \frac{\pi}{2} \cdot V^* \exp \left\{ \frac{(z^* + z_0^*)}{t_p^*} \right\} \quad (2.11)$$

La ecuación (2.11) permite obtener diagramas para relacionar Q^* con V^* . En dicha ecuación el valor de t_p^* viene dado por la ecuación (2.8), z^* y v^* son variables intrínsecas del proceso y por lo tanto datos conocidos. Las únicas variables que permanecen como incógnitas son T_p y z_0 .

Para la temperatura de pico en superficie inducida por un haz gaussiano actuando durante un tiempo igual al tiempo de interacción, el trabajo de Bass[83], proporciona una solución general. Los resultados son válidos para radios del haz mucho mayores que la distancia sobre la que se difunde el calor durante el tiempo de interacción. La expresión viene dada por la ecuación (2.12)

$$(T_p^*)_{z^*=0} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \cdot Q^* \cdot \tan^{-1} \left(\frac{8}{V^*} \right)^{1/2} \quad (2.12)$$

La ecuación (2.12) puede igualarse con la ecuación (2.10), ya que para $z = 0$ ambas representan la temperatura de pico en la superficie, ecuación (2.13).

$$\frac{(2\pi)(Q^*/v^*)}{[t_p^*(t_p^* + 1)]^{1/2}} \exp \left\{ - \left[\frac{(z_0^*)^2}{t_p^*} \right] \right\} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \cdot Q^* \tan^{-1} \left(\frac{8}{V^*} \right)^{1/2} \quad (2.13)$$

Usando la ecuación (2.13) junto con la ecuación (2.8) en $z = 0$ puede despejarse el valor de z_0 , ecuación (2.14).

$$\left\{ \begin{array}{l} t_p^* = \frac{1}{4} \left[2(z^* + z_0^*)^2 - 1 + [4(z^* + z_0^*)^4 + 12(z^* + z_0^*)^2 + 1]^{1/2} \right] \\ \frac{(2\pi)(Q^*/v^*)}{[t_p^*(t_p^* + 1)]^{1/2}} \exp \left\{ - \left[\frac{(z_0^*)^2}{t_p^*} \right] \right\} = \frac{1}{\pi^{3/2}} \cdot Q^* \tan^{-1} \left(\frac{8}{V^*} \right)^{1/2} \end{array} \right\} \Rightarrow z_0^* \quad (2.14)$$

Conocido el valor del parámetro z_0 junto con las características intrínsecas del proceso, el modelo puede utilizarse para caracterizar los parámetros del proceso de temple.

Mientras que el modelo de Ashby y Easterling resuelve analíticamente la ecuación de transferencia de calor, considerando que la fuente térmica superficial sobre el material se corresponde con un haz gaussiano, existen otras distribuciones espaciales de

irradiancia cuyas características resultan adecuadas para el proceso de Temple Superficial con Láser. Bajo las mismas hipótesis simplificadoras que el modelo de Ashby y Easterling, los trabajos de Miyamoto y Maruo proporcionan ecuaciones explícitas tanto para la temperatura bajo el centro del haz láser como para la profundidad templada, para distribuciones de irradiancia uniformes y uniformes gaussianas.

Considérese un perfil de irradiancia rectangular o rectangular gaussiano como los mostrados en la figura 2.3.

Figura 2.3: Distribuciones transversales de intensidad, rectangular (izqda.) y rectangular-gaussiana (dcha.)

El valor de la irradiancia para un rectángulo viene dado por la ecuación (2.15)

$$I_r = \frac{P_{las}}{4ab} \quad (2.15)$$

y, en el caso de un perfil rectangular-gaussiano el valor de su irradiancia viene dado por la ecuación (2.16).

$$I(x)_{r-g} = \frac{P_{las}}{2ab\sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{-x^2}{a^2}\right) \quad (2.16)$$

El parámetro β se define a partir de las dimensiones a y b de cada distribución particular, según la ecuación (2.17).

$$\beta = \frac{a}{b} \quad (2.17)$$

El valor de la temperatura bajo el centro de haz puede aproximarse según la ecuación (2.18).

$$T_{max}(z) = \frac{\gamma \cdot A \cdot Q}{16\sqrt{\pi} \cdot \kappa \cdot b} \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot \chi}{\beta \cdot V \cdot b + 2 \cdot \delta \cdot \chi}} \cdot \exp\left(-\left(\frac{z}{\sqrt{\beta \cdot b}}\right)\right) \cdot \left(1 + \frac{p \cdot V \cdot b}{2 \cdot \chi}\right)^{0.5} \quad (2.18)$$

La profundidad máxima a la cual llega el endurecimiento viene dada por la ecuación (2.19).

$$Z_h = \frac{\sqrt{\beta} \cdot b}{\left(1 + \frac{p \cdot V \cdot b}{2 \cdot \chi}\right)^{0,5}} \cdot \ln \left\{ \frac{\gamma \cdot A \cdot Q}{16\sqrt{\pi} \cdot \kappa \cdot b \cdot T_h} \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot \chi}{\beta \cdot V \cdot b + 2 \cdot \delta \cdot \chi}} \right\} \quad (2.19)$$

El valor de la constante δ para una distribución rectangular se obtiene mediante la ecuación (2.20).

$$\begin{aligned} \beta \leq 0,25 &\Rightarrow \delta = 0,25 \\ \beta > 0,25 &\Rightarrow \delta = 3,5 \left(\sqrt{\beta} - 0,5\right)^2 + 0,28 \end{aligned} \quad (2.20)$$

El valor de δ en el caso de una distribución rectangular-gaussiana viene dado por la ecuación (2.21).

$$\begin{aligned} \beta \leq 0,25 &\Rightarrow \delta = 0,1 \\ \beta > 0,25 &\Rightarrow \delta = 2,7 \left(\sqrt{\beta} - 0,5\right)^2 + 0,12 \end{aligned} \quad (2.21)$$

Los valores de las constante γ y p en las ecuaciones (2.18) y (2.19) son: $\gamma = 8,1$; $p = 0,7$ para una fuente rectangular y, $\gamma = 7,1$; $p = 0,65$ para una rectangular-gaussiana.

2.2. Revisión de los Modelos Numéricos del proceso de Temple Superficial con Láser

Se denominará modelo numérico, en el contexto de la simulación del proceso de Temple Superficial con Láser, a todo aquel que proporcione una solución numérica para la ecuación de transferencia del calor asociada a la irradiación de la pieza analizada por el haz láser, independientemente del análisis simultaneo de fenómenos derivados del proceso por cualesquiera otros métodos matemáticos. De este modo, dentro de los modelos numéricos quedan englobados todos los estudios que partiendo de una evaluación numérica de la evolución espacio-temporal de las temperaturas, analizan, mediante diversas herramientas matemáticas, los fenómenos derivados de dicha evolución. Dentro de esta clasificación se hayan los modelos que estudian los cambios metalúrgicos del material, la oxidación superficial de las piezas y sus implicaciones sobre la absorción, así como, el incremento de dureza y tensiones compresivas en la superficie.

La presente sección analizará los modelos disponibles en la bibliografía mostrando el estado de las cosas que se ha tomado como base en la elaboración de la presente Tesis Doctoral.

2.2.1. Cálculo de temperaturas y diagrama de equilibrio $Fe - Fe_3C$

Una primera aproximación para la obtención de resultados predictivos del proceso de Temple Superficial con Láser, se lleva a cabo, típicamente, mediante la resolución de la ecuación de transferencia del calor con el método de los elementos finitos. Los cursos térmicos así obtenidos se utilizan para llevar a cabo distintos análisis del proceso, en torno, principalmente, a las temperaturas críticas proporcionadas por el diagrama de equilibrio Hierro-Carbono, como referencia para estimar el alcance de las transformaciones metalúrgicas o el tiempo de interacción [Atienza15].

El modelo TEMPLUM [García-Beltran08] obtiene una solución numérica por el método de los elementos finitos de la ecuación de transferencia de calor, haciendo una consideración específica de los fenómenos físicos que tienen lugar durante el proceso. Como punto principal, las condiciones de irradiación, atendiendo especialmente a la distribución energética espacial del haz láser, la absorción del material en función de la radiación incidente, así como la dependencia funcional de las propiedades termo-físicas del material respecto a la temperatura, son introducidas en el código de cálculo en aras de una consideración realista del proceso.

Uno de los aspectos destacados en [García-Beltran08] es la importancia de una correcta consideración de la distribución espacial del haz láser para la reducción de la incertidumbre de los resultados, planteando la reconstrucción analítica realista del haz láser mediante la superposición de funciones gaussianas.

La ecuación (2.22) representa la ecuación no lineal de transferencia de calor con dependencia espacial y temporal de las fuentes de calor:

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + Q(\mathbf{r}, t, T) \quad (2.22)$$

Las condiciones de contorno para la solución realista del problema son:

- Temperatura inicial

$$T(x, y, z, t_0) = T_0 \quad (2.23)$$

- Convección desde la superficie

$$q_C = h \cdot (T - T_E) \quad (2.24)$$

- Radiación superficial

$$q_R = \epsilon \cdot (T^4 - T_E^4) \quad (2.25)$$

- Flujo de calor superficial por unidad de área

$$q_F = q_F(r, T) \quad (2.26)$$

Siguiendo el procedimiento de resolución del método de los elementos finitos, la ecuación (2.22) es ponderada siguiendo un enfoque standard de Galerkin, llegando a la ecuación (2.27).

$$\int_V w \rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} = \int_V w \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + \int_S Q(\mathbf{r}, t, T) \quad (2.27)$$

El término w representa un campo variacional arbitrario que satisface las condiciones de contorno. El dominio, siguiendo el método, es aproximado geoméricamente mediante un número finito de elementos tridimensionales, de tal forma que la temperatura en el interior de cada uno se calcula a partir de las temperaturas nodales, o vértices de los elementos, mediante funciones de interpolación, ecuación (2.28).

$$T = \sum_{i=1}^{i=n} N^i(r) T^i = N\Theta ; i = 1, 2 \dots \quad (2.28)$$

En la ecuación (2.28) los términos T^i representan las temperaturas nodales mientras que N^i son polinomios de primer y segundo orden en una, dos y tres direcciones. El término w es el campo variacional interpolado por las mismas funciones, ecuación (2.29).

$$w = \sum_{i=1}^{i=n} N^i(r) w^i ; i = 1, 2 \dots \quad (2.29)$$

De este modo, la ecuación (2.27) se transforma en la ecuación (2.30).

$$\begin{aligned} \left(\int_V N^i \rho C_P N dv \right) \frac{\partial \Theta}{\partial t} = & - \int_S N^i q_f dS + \int_S N^i h T_E dS - \\ & \left(\int_S N^i h_c N dS \right) \{\Theta\} - \left(\int_V \nabla^T N^i \kappa \nabla N dv \right) \{\Theta\} + \int_V N^i q dv \end{aligned} \quad (2.30)$$

Que, en forma matricial se corresponde con una expresión del tipo de las ecuaciones (2.31) y (2.32).

$$[C]\{\dot{\Theta}\} + [H]\{\Theta\} = \{F\} \quad (2.31)$$

$$C(\Theta_{n+1}, t_{n+1})\dot{\Theta}_{n+1} + K(\Theta_{n+1}, t_{n+1})\Theta_{n+1} = F_{n+1} \quad (2.32)$$

Siendo Θ_{n+1} como proporciona la ecuación (2.33).

$$\Theta_{n+1} = \Theta_n + \Delta t \dot{\Theta}_{n+1} \quad (2.33)$$

La discretización temporal es llevada a cabo por el método de Crank-Nicholson ($\alpha = 1/2$), ecuación (2.34).

$$C(\Theta_{n+\alpha}, t_{n+\alpha})\dot{\Theta} + K(\Theta_{n+\alpha}, t_{n+\alpha})\Theta_{n+\alpha} = F_{n+\alpha} \quad (2.34)$$

donde:

$$\Theta_{n+\alpha} = (1 - \alpha)\Theta_n + \alpha\Theta_{n-1} \quad (2.35)$$

$$\dot{\Theta}_{n+\alpha} = \frac{\Theta_{n+\alpha} - \Theta_n}{\Delta t} \quad (2.36)$$

$$\Theta_{n+\alpha} = \Theta_n + \alpha\Delta t \quad (2.37)$$

Tras el desarrollo matemático de las ecuaciones que rigen el fenómeno, (2.22)-(2.37), la misma referencia [Garcia-Beltran08] especifica el procedimiento de discretización espacial del dominio sobre el que se estudia el problema. Dicha discretización requiere de la introducción de elementos de volumen y elementos de superficie. El estudio pone de manifiesto la especial importancia de la discretización sobre la precisión de los resultados así como sobre el esfuerzo computacional asociado.

El enfoque proporcionado en las ecuaciones (2.22)-(2.37) supone, a su vez, una introducción general al Método de los Elementos Finitos para la resolución del problema térmico en el proceso de Temple Superficial con Láser.

Uno de los resultados más representativos de la resolución de la ecuación de transferencia de calor (2.22) mediante el método de los elementos finitos son los ciclos térmicos experimentados por puntos representativos del material tratado. De forma sucinta, el ciclo térmico de un punto puede definirse como la evolución de su temperatura en función del tiempo teniendo en cuenta el paso del haz láser por las proximidades del mismo, desde que éste comienza a acercarse elevando su temperatura por encima de la temperatura ambiente hasta que se aleja lo suficiente como para que queden terminadas todas las transformaciones metalúrgicas relevantes asociadas al proceso de enfriamiento.

Figura 2.4: Ciclos térmicos de puntos separados 0,5 mm bajo la superficie de la zona irradiada por un haz láser

La figura 2.4 muestra, a modo de ejemplo, los ciclos térmicos de puntos espaciados bajo el centro de la pasada de un haz láser.

Este tipo de diagramas proporciona por sí mismo información relevante sobre los efectos causados por el proceso en el material.

1. Temperatura máxima superficial: parámetro de interés para una evaluación global del proceso que, a su vez, supone una de las referencias más interesantes para efectuar la comparación teórico-experimental, junto con las dimensiones de las transformaciones metalúrgicas inducidas por el proceso.
2. Tiempo de interacción: tiempo durante el cual el punto tiene una temperatura superior a la temperatura ambiente como consecuencia del paso del haz láser. De forma práctica, el tiempo de interacción, puede considerarse como el tiempo durante el cual el punto se encuentra a una temperatura superior a las temperaturas críticas dadas por el diagrama de equilibrio $Fe - Fe_3C$.
3. Estimación sobre la profundidad máxima transformada: mediante la localización del último punto bajo la superficie irradiada que ha alcanzado la temperatura crítica dada por el diagrama de equilibrio $Fe - Fe_3C$.

4. Influencia de las propiedades termo-físicas del material sobre la profundización de tratamiento en función del salto térmico entre puntos equi-espaciados, que permiten tener una noción rápida de la velocidad con la que el calor ha difundido.

La referencia [Garcia-Beltran09] lleva a cabo la predicción de la transformación austenítica producida por el tratamiento mediante la combinación de los ciclos térmicos con las temperaturas críticas del material de trabajo, que en el artículo citado se trata de acero F1140. La figura 2.5 representa esquemáticamente este proceso.

Figura 2.5: Combinación de ciclos térmicos calculados y temperaturas críticas de austenización. Adoptado de [García-Beltran09]

La obtención de los ciclos térmicos de todos los puntos en una sección transversal al recorrido del haz láser permite la obtención de un perfil transversal de transformación. Utilizando nuevamente las temperaturas críticas de equilibrio proporcionadas por el diagrama binario es posible obtener un perfil de austenización. La figura 2.6 muestra un perfil transversal de transformación basado en temperaturas críticas.

Un diagrama como el de la figura 2.6 permite estimar la profundidad y el ancho de la zona transformada. Del mismo modo, el diagrama de la figura 2.6 ofrece una primera aproximación a la magnitud de la transformación distinguiendo entre los puntos que han superado la temperatura crítica Ac_1 experimentado, bajo este criterio, austenización total, de aquellos que solamente han superado la temperatura crítica Ac_3 experimentando austenización parcial, ver [Gaude-Fugarolas03].

Figura 2.6: Perfil de transformación transversal basado en los ciclos térmicos puntuales y las temperaturas críticas del diagrama de equilibrio $Fe - Fe_3C$

El uso de ciclos térmicos, temperaturas críticas, propiedades termo-físicas, conductividad κ , calor específico C_P , densidad, ρ y difusividad χ , junto con el valor del coeficiente de absorción dependientes de la temperatura son las características principales del código TEMPLUM, presentado en la referencia [Garcia-Beltran08]. Estas características permiten lograr una buena sensibilidad de las predicciones numéricas a los resultados experimentales, como sugiere la comparación teórico-experimental introducida en la propia referencia, ver figura 2.7.

Figura 2.7: Comparación teórico-experimental planteada en la referencia [Beltran09]

Sin embargo, las elevadas velocidades de calentamiento impuestas por el proceso de Temple Superficial con Láser, de entre 1000 K/s y 10000 K/s [Miocovick06] hacen que el proceso de transformación del material de base, formado por ferrita y perlita, en austenita, transcurra en condiciones alejadas del equilibrio termodinámico, haciendo que las temperaturas críticas proporcionadas por un diagrama de equilibrio puedan considerarse solo como una primera aproximación para el cálculo de las transformaciones, justificando la búsqueda de consideraciones cinéticas en aras de un tratamiento adecuado de las condiciones de calentamiento. Del mismo modo, el desarrollo de una capa de óxido superficial como consecuencia de la realización del

proceso en atmósfera no protectora conlleva una variación de las condiciones superficiales para la absorción de radiación láser, que si bien, en una primera aproximación, puede representarse mediante un coeficiente global de absorción, puede asociarse con el propio desarrollo de la capa de óxido, teniendo en cuenta, a su vez, el efecto del curso térmico superficial sobre la propia cinética de la reacción de oxidación.

La referencia [Yañez02] presenta nuevamente un modelo de Temple Superficial con Láser que, mediante el uso del método de los elementos finitos y de modelos analíticos simplificados, calcula los ciclos térmicos de dominios con geometría no trivial, para el caso del acero inoxidable AISI 420. La figura 2.8 muestra las geometrías de placa plana y toroidal analizadas en [Yañez02].

Figura 2.8: Geometrías analizadas en la referencia [Yañez02]

A partir de la ecuación de transferencia de calor, (2.38), y tras re-formularla convenientemente (2.39), en torno a la noción de difusividad térmica, χ , es posible aplicar algunos teoremas integrales.

$$\rho C_P \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla(-\kappa \nabla T) = f(r, t) \quad (2.38)$$

Teniendo en cuenta que $\chi = \kappa / \rho c$ se llega a la ecuación (2.39).

$$\frac{1}{\chi} \frac{\partial T}{\partial t} - \nabla^2 T = f(r, t) \quad (2.39)$$

Se asume que se trata de una pieza semi-infinita que se encuentra inicialmente a temperatura ambiente y que el origen de coordenadas está en la superficie irradiada.

Bajo estas condiciones el campo de temperaturas se ajusta a una expresión del tipo de la ecuación (2.40).

$$T(r, t) = \frac{2\chi}{\kappa} \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x', y', t') * G(|r - r'|, t - t') dx' dy' dt' \quad (2.40)$$

Donde el símbolo G denota a la función de Green derivada de la transformación de Fourier, ecuación (2.41).

$$G(|r - r'|, t - t') = e^{-|r - r'|/4\chi(t - t')} (4\pi\chi(t - t'))^{-3/2} \quad (2.41)$$

La cual factorizada queda como la ecuación (2.42).

$$G(|r - r'|, t - t') = e^{-|r - r'|/4\chi(t - t')} (4\pi\chi(t - t'))^{-1/2} \quad (2.42)$$

En la ecuación (2.40) el término $f(x', y', t')$ representa la distribución de irradiancia del haz láser. En el caso de un haz gaussiano la forma explícita de dicho término viene dada por la ecuación (2.43).

$$f(x', y', t') = g(t') \frac{4[(x' - vt')^2 + y'^2]}{\pi\omega^4} \cdot e^{-2[(x' - vt')^2 + y'^2]/\omega^2} \quad (2.43)$$

El problema matemático es resuelto mediante el método de las imágenes especulares. Las ecuaciones planteadas pueden generalizarse para el caso de una geometría circular, la expresión general para el campo de temperaturas queda como se muestra en la ecuación (2.44).

$$f(x', y', t') = g(t') \frac{4[(x' - vt')^2 + y'^2]}{\pi\omega^4} \cdot e^{-2[(x' - vt')^2 + y'^2]/\omega^2} \quad (2.44)$$

El modelo analítico proporciona, al mismo tiempo, una referencia con la que comparar los valores obtenidos mediante la simulación numérica, así como, un marco conceptual para definir las condiciones de contorno introducidas en el modelo numérico. Particularmente, el modelo teórico permite la determinación del tamaño de elemento adecuado en la simulación numérica. La diferencia entre la temperatura teórica y calculada, ΔT (K) se relaciona con las dimensiones de los elementos cúbicos en el mallado, Δx (mm), mediante la ecuación $\Delta T = 5,22\Delta x^{1,57}$, de la que se desprende que el error en el cálculo numérico de la temperatura tiende a 0 para cuanto más pequeño es el tamaño de los elementos. De forma práctica se observa que las discrepancias teórico/numéricas son irrelevantes cuando $\Delta x < 0,8$ (mm). El mismo procedimiento es utilizado para el ajuste del paso temporal, estableciéndose en 0,01 s

El modelo numérico así ajustado permite obtener los ciclos térmicos asociados al tratamiento, y a partir de ellos, estimar la cantidad de material transformado en

Figura 2.9: Ciclos térmicos obtenidos en la referencia [Yañez02]

base a las temperaturas críticas dadas por el diagrama de equilibrio. La figura 2.9 muestra dichos ciclos térmicos.

Del mismo modo, la figura 2.10 ilustra el uso de las temperaturas críticas proporcionadas por el diagrama de equilibrio para la estimación de las dimensiones transformadas por la acción del láser.

Figura 2.10: Estimación de la zona transformada mediante temperaturas críticas en la referencia [Yañez02]

En el contexto del modelado numérico de los cursos térmicos durante el proceso de Temple Superficial con Láser existen, además de las obras mencionadas y desarrolladas, una sucesión de trabajos elaborados con anterioridad que permiten poner de manifiesto la evolución del modelado del proceso. Aunque los trabajos de [Beltran09] y [Yañez02] suponen, de por sí, una introducción completa a las ecua-

ciones que caracterizan el fenómeno de la transferencia de calor, a su formulación variacional enfocada a su resolución mediante el método de los elementos finitos, a la obtención de la evolución espacio-temporal de temperaturas, y a la determinación de las transformaciones metalúrgicas mediante el uso de temperaturas críticas de equilibrio, las referencias históricamente anteriores proporcionan una introducción exhaustiva a la formulación del problema, desde enfoques bidimensionales y tridimensionales, y a la asociación matemática de unas condiciones de contorno realistas. Dichos trabajos son mencionados de forma sucinta, en aras de proporcionar una información completa en la presente Tesis Doctoral.

El libro de Carslaw y Jaeger [Carslaw59] describe las soluciones exactas de problemas de transferencia de calor en casos representativos, con una discusión detallada de todas las condiciones de contorno más importantes. Su principal aplicación práctica en el contexto del modelado de los ciclos térmicos para el proceso de Temple Superficial con Láser es que sus resultados suponen una referencia con la que comparar los resultados numéricos, y al mismo tiempo, sirven de valores de guía para el ajuste de los parámetros de resolución numérica del problema, como el ajuste del tamaño de los elementos en la discretización y el salto temporal.

Los códigos *TOPAZ2D* Y *TOPAZ3D* desarrollados en la referencia [Shapiro85] proporcionan una primera aproximación exhaustiva a la resolución de la ecuación de transferencia de calor. Mediante la formulación adecuada del problema, junto con las condiciones de contorno necesarias para la representación realista de las condiciones de proceso, así como, haciendo uso de las propiedades termo-físicas del material el código, de propósito general, puede ser adecuado a la condiciones del proceso de Temple Superficial con Láser, a forma de lo propuesto en la referencia [García-Beltran09].

El código *THERM 2D* de la referencia [Kechemair87] presenta otro modelo para el cálculo de las temperaturas en el proceso de Temple Superficial con Láser. Mediante la definición de unos parámetros críticos, a partir de la temperatura crítica de equilibrio, Ac_3 , el tiempo de interacción τ y la velocidad de enfriamiento v_{Ms}^{Tm} , establece predicciones sobre el espesor de material transformado. Asimismo, se plantea una descripción matemática rigurosa del acoplamiento termo-óptimo, planteando la absorción de radiación láser como una variable más del proceso, estableciendo su dependencia con la evolución térmica del material. Otro aspecto interesante de la mencionada referencia constituye el planteamiento de la determinación de las propiedades termo-físicas del material en función de la temperatura. La utilización de unas propiedades termo-físicas dependientes del curso térmico supone la primera aproximación a una modelización realista del comportamiento del material.

La Tesis Doctoral [Bataille91] presenta un sistema de control en bucle cerrado a partir de los ciclos térmicos de un proceso de Temple Superficial con Láser. Nuevamente se plantea la resolución numérica de la ecuación de transferencia de calor, junto con condiciones de contorno adecuadas y realistas, para una estimación de los ciclos térmicos del proceso. Los resultados permiten poner de manifiesto el efecto de tratamientos térmicos llevados a cabo en condiciones de temperatura constante. La inter-conexión entre los cursos térmicos y el sistema de control automático permite poner de manifiesto aspectos dinámicos de los ciclos térmicos, y el cálculo de las velocidades de calentamiento y enfriamiento.

Trabajos similares a los anteriormente mostrados pueden encontrarse en [Kormanduri01, Lo03, Giorleo13, Grum96, Grum98, Fortunato13].

2.2.2. Análisis de modelos de Transformación Austenítica

En términos genéricos, la transformación austenítica es la designación que se le da al cambio de micro-estructura cristalina experimentada por el acero cuando este es calentado por encima de las temperaturas críticas proporcionadas por el diagrama de equilibrio $Fe - Fe_3C$.

En el caso de los aceros, a temperatura ambiente y en estado normalizado, los átomos de hierro o ferrita presentan una estructura microscópica correspondiente con el sistema cúbico centrado en el cuerpo. Esto es así tanto en el caso de los aceros hipoeutectoides donde existen granos de ferrita, como en el caso de la perlita hipoeutectoide y los aceros hipereutectoides donde todos los átomos de hierro se hayan dentro del micro-constituyente perlita. La figura 2.11, que muestra el diagrama de equilibrio $Fe - Fe_3C$ permite observar las distintas fases que tienen lugar en función de la temperatura y el porcentaje de Fe_3C .

El material de trabajo empleado en todos los estudios teóricos y experimentales de la presente Tesis Doctoral es el acero AISI 4140. Se trata de un acero hipoeutectoide con un contenido en carbono del 0,4 %. La tabla 2.1 contiene los elementos de aleación y su porcentaje en peso para el acero AISI 4140.

Tabla 2.1: Porcentaje en peso de los elementos de aleación del acero AISI 4140

Element	Fe	C	Mn	Cr	Mo	Si	P	S
Concentration (wt.%)	97.29	0.40	0.87	0.9	0.2	0.25	0.04	0.05

Figura 2.11: Diagrama de equilibrio $Fe - Fe_3C$. Fuente: Calphad

Durante la fase de calentamiento del material, en el proceso de Temple Superficial con Láser, la temperatura del material es elevada por encima de las temperaturas críticas dadas por el diagrama de equilibrio $Fe - Fe_3C$, produciéndose la re-cristalización de los átomos de hierro, evolucionando de ferrita a austenita, es decir, de sistema cúbico centrado en el cuerpo a sistema cúbico centrado en las caras. La nueva estructura cristalina producida tras la fase de calentamiento está caracterizada por un aumento de la solubilidad del carbono en la misma, dando lugar a la difusión del carbono contenido inicialmente tanto en la perlita como en la ferrita. La transformación austenítica es por lo tanto una transformación por difusión.

Mientras que en el caso de velocidades de calentamiento lentas, el proceso de difusión del carbono transcurre mucho más rápidamente que el proceso de aumento de temperatura, en el caso de las condiciones de calentamiento que tienen lugar bajo las condiciones del proceso de Temple Superficial con Láser, tanto el incremento de temperatura como la difusión del carbono en la red austenita tienen tiempos característicos comprobables. Esta situación hace que las temperaturas críticas proporcionadas por el diagrama de equilibrio no puedan considerarse, por sí mismas,

un criterio para determinar la cantidad de material austenizado, manteniendo, no obstante, su valor como barrera termodinámica a partir de la cual la transformación austenítica es posible. Este hecho obliga a la realización de cálculos cinéticos, que relacionen el proceso de difusión con la evolución espacio-temporal de las temperaturas, para una cuantificación precisa de la cantidad de material transformado.

El proceso de difusión del carbono en la austenita es un fenómeno de difusión intersticial. En este caso los átomos del soluto, B ocupan los huecos intersticiales presentes en la red cristalina del disolvente. Esta situación puede modelarse, en una primera aproximación, como una solución sólida donde los átomos del disolvente están ordenados en una red cúbica simple donde los átomos del soluto encajan perfectamente en los intersticios del disolvente sin causar ninguna distorsión [PORTER08]. Asimismo, se considera que la solución se encuentra tan diluida que cada átomo intersticial se encuentra rodeado de seis intersticios. Asumiendo que la concentración de B varía a lo largo de la dirección x (ver figura 2.12), los átomos de B se extenderán por todo el material hasta que su concentración sea homogénea.

Figura 2.12: Gradiente de concentración de los átomos de B . Adaptado de [Porter06]

Se considerará el salto de átomos entre los planos 1 y 2 de la figura 2.12. Sea Γ_B el número de saltos por unidad de tiempo que cada átomo intersticial puede dar a cualquiera de sus seis intersticios adyacentes. Si n_1 es el número de átomos por unidad de superficie contenidos en el plano 1 el número de átomos que saltará del dicho plano al plano 2 por unidad de tiempo, viene dado por la ecuación (2.45).

$$\vec{j}_B = \frac{1}{6} \Gamma_B n_1 [\text{atomos} \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}] \quad (2.45)$$

Del mismo modo, el número de átomos que saltan del plano 2 al plano 1 viene dado por la ecuación (2.46).

$$\overleftarrow{j}_B = \frac{1}{6} \Gamma_B n_2 [\text{atomos} \cdot m^{-2} \cdot s^{-1}] \quad (2.46)$$

Puesto que $n_1 > n_2$ habrá un flujo neto de átomos de izquierda a derecha, tal y como se representa la ecuación (2.47).

$$j_B = \vec{j}_B - \overleftarrow{j}_B = \frac{1}{6} \Gamma_B (n_1 - n_2) \quad (2.47)$$

El número de átomos en los planos 1 y 2, n_1 y n_2 está relacionado con la concentración de la especie B en la red. Si la separación entre los planos 1 y 2 es α la concentración de B en la posición del plano 1 será $C_B(1) = n_1 / \alpha \text{ atomos } m^{-3}$. Del mismo modo $C_B(2) = n_2 / \alpha \text{ atomos } m^{-3}$. Por consiguiente $(n_1 - n_2) = \alpha (C_B(1) - C_B(2))$. Observando la figura 2.12 se tiene que $C_B(1) - C_B(2) = -\alpha (\partial C_B / \partial x)$. Sustituyendo en la ecuación (2.47), se llega a la ecuación (2.48).

$$j_B = \left(\frac{1}{6} \Gamma_B \alpha^2 \right) \frac{\partial C_B}{\partial x} \quad (2.48)$$

La derivada parcial $\partial C_B / \partial x$ se utiliza para indicar que el gradiente de concentración puede cambiar con el tiempo. Por lo tanto, la presencia de un un gradiente de concentración el salto entre posiciones intersticiales de cada átomo produce un flujo neto de átomos, desde las posiciones de mayor concentración hacia las de menor, D_B , tal y como se muestra en la ecuación (2.49).

$$D_B = \frac{1}{6} \Gamma_B \alpha^2 \quad (2.49)$$

Sustituyendo la ecuación (2.49) en la ecuación (2.48), se llega a la ecuación (2.50):

$$j_B = -D_B \frac{\partial C_B}{\partial x} \quad (2.50)$$

La ecuación (2.50) fue propuesta por Fick en 1855 y es conocida como Primera ley de Fick para la difusión. El término D_B es conocido como coeficiente de difusión y sus unidades son $[m^2 \cdot s^{-1}]$.

Cuando el salto de los átomos en la red cristalina es verdaderamente aleatorio, el coeficiente D_B viene dado por la ecuación (2.49) y es una constante que no depende de la concentración. La ecuación mediante la que fue obtenido, aún partiendo de una red cúbica simple, es aplicable a cualquier átomo difundiendo aleatoriamente

en cualquier red cúbica. En caso de redes no cúbicas, la probabilidad de salto en cada una de las redes cristalográficas no es la misma, y D varía con la dirección.

La condición de que los saltos atómicos sean completamente aleatorios e independientes no es completamente cierta en el caso de las aleaciones reales. La ley de Fick continua siendo aplicable haciendo que el coeficiente D varíe con la composición. Por ejemplo, el coeficiente de difusión del carbono en el hierro a $1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ para una concentración de $0,15\text{ wt}\%$ es de $2,5 \cdot 10^{-11}\text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, cuando la concentración de carbono se eleva hasta $1,14\text{ wt}\%$ el coeficiente se eleva hasta $7,7 \cdot 10^{-11}\text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. La razón para este incremento es que los átomos de carbono generan tensiones en la red de hierro facilitando la difusión a medida que la cantidad de tensión aumenta.

La energía térmica del material sólido hace que sus átomos se encuentren en estado de vibración respecto de sus respectivas posiciones de equilibrio. Ocasionalmente, una oscilación particularmente violenta puede dar lugar al salto de un átomo desde su posición intersticial a otra. Puesto que el estado vibracional depende de la temperatura, la frecuencia de saltos Γ se verá afectada por cambios en la misma.

Las posiciones de equilibrio de los átomos intersticiales son posiciones con energía potencial mínima. Para mover un átomo intersticial a su intersticio adyacente, éste debe ser forzado en primer lugar a pasar por una posición de mayor energía, tal y como se muestra en la figura 2.13.

Figura 2.13: Salto de un átomo entre intersticios adyacentes. Adaptado de [Porter06]

El trabajo que debe emplearse para llevar a cabo este proceso causa un incremento de la energía libre del sistema, ΔG_m se conoce como energía de activación para la migración del átomo intersticial. En promedio, los átomos con una energía ΔG o mayor que la media viene dado por $\exp(\Delta G/RT)$. Por lo tanto si el átomo

intersticial está vibrando con una frecuencia v en la dirección x éste hace v intentos por segundo para saltar a la posición intersticial adyacente. La fracción de intentos exitosos viene dada por $\exp(\Delta G_m/RT)$. Si el átomo está vibrando en un espacio tridimensional, rodeado de z posiciones a las cuales puede saltar, la frecuencia de saltos viene dada por la ecuación (2.51).

$$\Gamma_B = zv \exp \frac{-\Delta G_m}{RT} \quad (2.51)$$

En la ecuación (2.51) el término ΔG_m puede ser considerada como la suma de la entalpía de activación ΔH_m y la entropía de activación $-T\Delta s_m$. Combinando la ecuación (2.51) con la ecuación (2.49), se llega a la ecuación para el coeficiente de difusión dada por (2.52).

$$D_B = \left[\frac{1}{6} \alpha^2 zv \exp \frac{\Delta S_m}{R} \right] \exp \frac{-\Delta H_m}{RT} \quad (2.52)$$

La ecuación (2.52) puede expresarse en términos de una ecuación tipo Arrhenius, como la ecuación (2.53).

$$D_B = D_{B0} \exp \frac{-Q_{ID}}{RT} \quad (2.53)$$

El término D_{B0} viene dado por la ecuación (2.54).

$$D_{B0} = \frac{1}{6} \alpha^2 zv \exp \frac{\Delta S_m}{R} \quad (2.54)$$

El término Q_{ID} por la ecuación (2.55).

$$Q_{ID} = \Delta H_m \quad (2.55)$$

Los términos agrupados en torno a D_0 son virtualmente independientes de la temperatura. Los términos D o Γ aumentan exponencialmente con la temperatura con un ritmo determinado por la entalpía de activación Q_{ID} (ID hace referencia a la difusión intersticial).

Tomando logaritmos en la ecuación (2.53) se llega a la ecuación (2.56).

$$\log D = \log D_0 - \frac{Q}{2,3} \left(\frac{1}{T} \right) \quad (2.56)$$

La ecuación (2.56) queda representada en la figura (2.14).

La pendiente de la función representada en la figura 2.14 es $-(Q/2,3R)$ cortando al eje vertical en D_0 .

Figura 2.14: Relación entre el coeficiente de difusión y la temperatura. Adaptado de [Porter06]

En la mayoría de situaciones prácticas la concentración de soluto varía con el espacio y con el tiempo y la primera ley de Fick no es de aplicación. Tal y como se puede ver en la figura 2.15 el flujo a lo largo de cualquier punto del eje x depende del valor local de D_B y de $\partial C_B / \partial x$. Para calcular el cambio de la concentración de B en cualquier punto en función del tiempo se considera una lamina de material de área A y espesor ∂x .

Sea $j_{1A\partial t}$ el número de átomos que difunden hacia la lámina A en el intervalo de tiempo ∂t . Sea $j_{2A\partial t}$ el número de átomos que abandonan la lámina A . Puesto que $j_2 < j_1$ la concentración de B dentro de la lámina A ha aumentado según la ecuación (2.57).

$$\partial C_B = \frac{(j_2 - j_1)A\partial t}{A\partial x} \quad (2.57)$$

Teniendo en cuenta que δx es pequeño, se llega a la ecuación (2.58).

$$j_2 = j_1 + \frac{\partial j}{\partial x} \partial x \quad (2.58)$$

En el límite $\partial t \rightarrow 0$ y queda la ecuación (2.59).

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = -\frac{\partial j_B}{\partial x} \quad (2.59)$$

Sustituyendo la primera ley de Fick en la ecuación (2.59), se llega a la ecuación (2.60).

Figura 2.15: Situación en la que la concentración varía con la distancia y con el tiempo. Adaptado de [Porter06]

$$\frac{\partial C_B}{\partial t} = D_B \frac{\partial^2 C_B}{\partial x^2} \quad (2.60)$$

La ecuación (2.60) relaciona la tasa temporal de cambio de composición con el perfil de concentración $C_B(x)$.

El modelo propuesto por [Skaverina06] utiliza las leyes de Fick para calcular la fracción de Austenita obtenida en el contexto de un modelo del proceso de Temple Superficial con Láser. Los cálculos proporcionados por un modelo térmico son acoplados con un modelo cinético bidimensional, el cual partiendo de una discretización de la micro-estructura del material original, elaborada mediante técnicas fotográficas, calcula la evolución de la micro-estructura en base a las transformaciones cristalinas experimentadas por la red, así como, la difusión del carbono en el seno de la misma. La figura 2.16 representa la discretización de la micro-estructura mediante celdas cuadradas planas.

P	γ	γ	γ	γ	γ	γ	γ
P	γ	γ	γ	γ	γ	γ	γ
P	P	P	γ	γ	γ	γ	γ
P	P	P	γ	γ	γ	α/γ	α/γ
P	P	P	α/P	α/γ	α/γ	α/γ	α
P	P	P	α/P	α	α	α	α
P	P	P	α/P	α	α	α	α
P	P	P	α/P	α	α	α	α

Figura 2.16: Discretización de la micro-estructura del material de base en estado normalizado. Adaptado de [Skaverina06]

El tiempo característico de disolución del carbono en la austenita, una vez que el cambio de fase ha tenido lugar, viene dado por la ecuación (2.61).

$$L\lambda = 2Dt \quad (2.61)$$

En la ecuación (2.61), el término L representa el radio característico de las colonias de perlita, λ es la distancia característica entre placas y t representa el tiempo. La figura 2.17 pone de manifiesto el significado geométrico de cada uno de estos conceptos.

El radio de las colonias de perlita λ , viene dado por la ecuación (2.62).

$$L = \frac{g}{2f_i^{1/3}} \quad (2.62)$$

En la ecuación (2.62) el término f_i representa la fracción de perlita en el material, mientras que g es el tamaño medio de grano medido experimentalmente.

El coeficiente de difusión D_t es calculado como una función de la temperatura debido a las condiciones no isotérmicas de calentamiento durante el proceso de Temple Superficial con Láser. La ecuación (2.63) proporciona este coeficiente.

$$D_t = \int_{t_1}^{t_2} D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT(t)}\right) dt \quad (2.63)$$

En la ecuación (2.63) el término Q denota la energía de activación del carbon en la ferrita, R es la constante universal de los gases ideales, D_0 es el coeficiente

Figura 2.17: Distancias características en la micro-estructura. Adaptado de [Skaverina06]

pre-exponencial de difusión, t_1 es el instante en el que se alcanza la temperatura crítica A_{c1} dada por el diagrama de equilibrio, mientras que t_2 es instante actual.

Combinando las ecuaciones (2.63) y (2.61) se llega a la ecuación (2.64).

$$L\lambda \geq 2 \int_{t_1}^{t_2} D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT(t)}\right) dt \quad (2.64)$$

Asumiendo que la homogeneización de la austenita viene gobernada por la concentración del soluto, es de aplicación la segunda ley de Fick, en la forma dada por la ecuación (2.65).

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_v \frac{\partial C_v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_v \frac{\partial C_v}{\partial y} \right) \quad (2.65)$$

Como condiciones de contorno se utiliza que se trata de un dominio cerrado, con lo que no hay inclusiones ni pérdidas de carbono en la red cristalina. Las condiciones iniciales vienen dadas por la ecuación (2.66).

$$C_v(x, t = 0) = C_v(T_{init}) \quad (2.66)$$

En la ecuación (2.66), T_{init} representa la temperatura inicial del material, y establece que la concentración total de carbono inicial es aquella dada por el diagrama de equilibrio.

La geometría de la interfaz entre los dominios de las distintas fases metalúrgicas debe ser resuelta conjuntamente con la ecuación de difusión. Una red de celdas rectangulares de parámetro h es propuesta (ver figura 2.18).

Cada punto de la red se corresponde con el centro de un elemento de volumen. A cada celda i se le hace corresponder un valor de concentración c_i .

Figura 2.18: Red de celdas rectangulares para la modelización bidimensional de la micro-estructura. Adaptado de [Skaverina06]

La interfaz de entre los granos de ferrita y de austenita α/γ , tiene tres descriptores adicionales, C_i^α , C_i^γ y f_i^α . C_i^α y C_i^γ representan la concentración de soluto en la interfaz y vienen dados por el diagrama de equilibrio. f_i^α es la fracción volumétrica de α obtenida mediante la conocida como regla de la palanca. Cuando f_i^α es menor que 0 la celda adyacente se transforma en austenita y las celdas que están alrededor pasan a ser celdas de interfaz. f_i^α viene dada por la ecuación (2.67).

$$f_i^\alpha = \frac{C_i^{\gamma*} - C_i}{C_i^{\gamma*} - C_i^\alpha} \quad (2.67)$$

La difusión del soluto es modelada mediante un método de volúmenes finitos, el balance de masa en cada celda viene dado por la ecuación (2.68).

$$V \frac{\Delta C_i}{\Delta t} = \sum_{k=1}^4 S J_{ki} \quad (2.68)$$

El volumen de la celda viene dado por la ecuación (2.69) en función del parámetro de la red de volúmenes finitos, h .

$$V = h^2 \quad (2.69)$$

La superficie de la celda viene dada por la ecuación (2.70).

$$S = h \quad (2.70)$$

En la ecuación (2.68) el término Δt representa el paso temporal, mientras que C_i es la variación en la concentración de carbón en la celda i . El término J_{ki} representa el flujo de átomos de la celda k -ésima hacia la celda i y es calculado en función de la fase de cada una de las celdas.

Si las celdas k e i pertenecen a la misma fase v el flujo de átomos entre ambas viene dado por la ecuación (2.71).

$$J_{ki} = D_v \left(\frac{C_k + C_i}{2}, T \right) \frac{C_k - C_i}{h} \quad (2.71)$$

En el caso que la celda i pertenezca a la fase v mientras que la celda k se encuentre formando parte de la interfaz, el flujo J_{ki} viene dado por la ecuación (2.72).

$$J_{ki} = D_v \left(\frac{C_k^{v*} + C_i}{2}, T \right) \frac{C_k^{v*} - C_i}{h} \quad (2.72)$$

El término C_k^{v*} en la ecuación (2.72) representa la concentración de carbon en la fase k .

Si ambas celdas colindantes pertenecen a una interfaz, la ecuación (2.73) representa el flujo de átomos entre ambas.

$$J_{ki} = f_\alpha^* D_\alpha \left(\frac{C_k^{\alpha*} + C_i^{\alpha*}}{2}, T \right) \frac{C_k^{\alpha*} - C_i^{\alpha*}}{h} + (1 - f_\alpha^*) D_\gamma \left(\frac{C_k^{\gamma*} + C_i^{\gamma*}}{2}, T \right) \frac{C_k^{\gamma*} - C_i^{\gamma*}}{h} \quad (2.73)$$

El término f_α^* viene dado por la ecuación (2.74).

$$f_\alpha^* = \frac{f_i^* + f_k^*}{2} \quad (2.74)$$

De esta forma, el modelo propuesto por [Skvarenina06] es capaz de obtener el mapa transversal de la transformación de fase experimentada por el material, tal y como se muestra en la figura 2.19.

El uso de ecuaciones de difusión por transferencia de masa a nivel micro-estructural, como las leyes de Fick, permite la consecución de resultados con un elevado nivel de precisión a cambio de un elevado coste computacional asociado al modelado de la micro-estructura, condicionando fuertemente el tamaño de los elementos de la discretización para la resolución del problema numérico. Esta característica limita el realismo de los problemas a representar, al requerirse un gran numero de elementos

Figura 2.19: Predicción de la sección transversal del material transformado obtenido en [Skaverina06]

para calcular, a nivel micro-estructural, las transformaciones producidas durante el tratamiento de una pieza de gran tamaño.

La conocida como teoría de Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami (en adelante ley de Avrami) [Avrami39] enfoca los fenómenos de cambio de fase isotérmicos como procesos de nucleación y crecimiento. Bajo estas hipótesis el cambio de fase presenta un comportamiento sigmoideal cuya velocidad será función de la temperatura a la que tenga lugar dicho cambio de fase. Puesto que la función para el cálculo de la fracción volumétrica de la fase creada es una expresión algebraica la resolución del problema de la austenización pasa de dos ecuaciones diferenciales en el caso de la ley de Fick junto con la ecuación de transmisión de calor, a la resolución numérica de esta última cuyo resultado será utilizado en la ecuación de la función sigmoideal. En tanto que la ecuación sigmoideal está enfocada a un cambio de fase isotérmico, cada uno de los incrementos térmicos proporcionados por la resolución numérica del problema térmico, serán considerados como un pequeño proceso isotérmico, que, mediante el tratamiento numérico adecuado, se utilizará para el cálculo de su contribución al volumen total austenizado.

La ley de Avrami considera una distribución aleatoria de partículas puntuales sobre una superficie infinita, como representación de los núcleos puntuales de la nueva fase que se forma durante la transformación. Se trata pues, de un modelo geométrico, que no implica ningún término energético o descriptivo del proceso, salvo la tasa de crecimiento, que depende de las características particulares de cada sistema.

Sea una distribución de partículas cuya densidad de número es n_0 sobre un sistema de extensión infinita. Se toma $p(r)dr$ la probabilidad de que la partícula más próxima a un origen ubicado de forma aleatoria, se encuentre a una distancia del mismo entre r y $r + dr$. Dicha probabilidad equivale a la probabilidad de que no

haya partícula alguna en una esfera de radio r centrada en el origen, multiplicada por la probabilidad de que la partícula se haya en un casquete esférico de grosor dr y radio interior r , tal y como se muestra en la ecuación (2.75).

$$p(r)dr = \left[1 - \int_0^r p(r')dr'\right] 4\pi r^2 n_0 dr \quad (2.75)$$

Dividiendo por dr^2 ambos términos de la ecuación (2.75) y desarrollando, se llega a la ecuación (2.76).

$$\frac{dp}{dr} = -4\pi r^2 n_0 p + \left[1 - \int_0^r p(r')dr'\right] 8\pi r n_0 = -4\pi r^2 n_0 p + \frac{2p}{r} \quad (2.76)$$

Integrando la ecuación (2.76) se llega a la ecuación (2.77).

$$p(r) = 4\pi r^2 n_0 e^{-\frac{4\pi r^3}{3}} \quad (2.77)$$

Teniendo en cuenta la aleatoriedad de la distribución de partículas, la probabilidad de que en el instante t el origen esté contenido por una partícula de radio $R(t)$ será la propia fracción de material transformado, dado por la ecuación (2.78).

$$f(t) = \int_0^{R(t)} p(r)dr \quad (2.78)$$

Por consiguiente, la fracción de volumen no transformada viene dada por la ecuación (2.79).

$$1 - f(t) = \int_{R(t)}^{\infty} p(r)dr = e^{-\frac{4\pi R(t)^3 n_0}{3}} \quad (2.79)$$

Si se supone que la nucleación puede producirse en eventos consecutivos t_1 y t_2 dando lugar a las densidades de núcleos n_1 y n_2 , la fracción de volumen no transformada viene dada por la ecuación (2.80).

$$1 - f_{tot}(t) = [1 - f(t - t_1)][1 - f(t - t_2)] = e^{-\frac{4\pi R(t - t_1)^3 n_1}{3}} e^{-\frac{4\pi R(t - t_2)^3 n_2}{3}} \quad (2.80)$$

En el caso de que sucedan n eventos de nucleación, la fracción no transformada vendrá dada por la ecuación (2.81).

$$1 - f_{tot}(t) = \prod_{i=1}^N [1 - f_i(t - t_i)] = \prod_{i=1}^N e^{-\frac{4\pi R_i(t - t_i)^3 n_i}{3}} = e^{-\frac{4\pi \prod_{i=1}^N R_i(t - t_i)^3 n_i}{3}} \quad (2.81)$$

Asumiendo que los eventos de nucleación ocurren de forma cada vez más próxima entre sí, siendo Δt el intervalo temporal entre dos eventos consecutivos, se llega a la ecuación (2.82).

$$\sum_{i=1}^N \frac{\Delta t}{\Delta t} R_i(t - t_i)^3 n_i = \sum_{i=1}^N R_i(t - i\Delta t)^3 \frac{n_i}{\Delta t} \Delta t \quad (2.82)$$

En el límite los eventos se encuentran tan próximos entre sí que el sumatorio se convierte en una integral, tal y como se muestra en la ecuación (2.83).

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \sum_{i=1}^N R_i(t - i\Delta t)^3 \frac{n_i}{\Delta t} \Delta t = \int_0^t R_i(t - \tau)^3 n(\tau) d\tau \quad (2.83)$$

De este modo se llega a una expresión general para la ecuación de Avrami, ecuación (2.84).

$$f(t) = 1 - e^{\left[-\frac{4\pi}{3} \int_0^t R_i(t-\tau)^3 n(\tau) d\tau \right]} \quad (2.84)$$

Respecto al proceso de nucleación cabe asumir las siguientes hipótesis:

- La nucleación tiene lugar de forma aleatoria y homogénea en toda la masa del material de base.
- La tasa de crecimiento no se ve afectada por la extensión de la transformación.
- La tasa de crecimiento es la misma en todas direcciones.

Bajo dichas hipótesis la ecuación de Avrami toma la forma general dada por (2.85).

$$f = 1 - e^{Bt^n} \quad (2.85)$$

En la ecuación (2.85) los términos B y n hacen referencia a las tasas de nucleación y crecimiento respectivamente, dependientes de la cinética de cada proceso en particular. Para el término B es posible establecer una ecuación tipo Arrhenius, como la que se muestra en la ecuación (2.86).

$$B = C e^{\frac{\Delta E}{k_B T}} \quad (2.86)$$

En la ecuación (2.86) el término ΔE representa la barrera energética característica de la reacción de cambio de fase, C es un factor de frecuencia, k_B es la constante de Boltzman y T representa la temperatura absoluta.

La ecuación de Avrami es utilizada en [Miokovic06, [Miokovic07, Katsamas07] mostrando la aplicación de la ecuación original, pensada para cambios de fase isotérmicos, a los ciclos térmicos originados durante el proceso de Temple Superficial con Láser. Así mismo, dichos trabajos ponen de manifiesto la fuerte dependencia del volumen austenizado con las condiciones de calentamiento de cada proceso en particular.

Mediante experimentos basados en dilatometría la referencia [Miokovic04] permite estimar la evolución temporal y térmica del proceso de austenización para el caso del acero AISI 4140, tal y como se muestra en la figura 2.20.

Figura 2.20: Evolución de la transformación austenítica obtenida experimentalmente por [Miokovic04]

La ecuación (2.87) establece la correspondencia entre las mediciones experimentales y la fracción de austenita.

$$f_A(T, t) = \frac{\epsilon_{Term} - \alpha_{Term, F} T(t)}{(\alpha_{Term, F} - \alpha_{Term, \gamma}) T(t) + \epsilon_{Trans \alpha \rightarrow \gamma}} \quad (2.87)$$

En la ecuación (2.87) los términos $\epsilon_{\alpha, F}$ y $\epsilon_{\alpha, \gamma}$ hacen referencia a las deformaciones experimentadas por el material durante el proceso de calentamiento, mientras que, α representa el coeficiente de dilatación térmica de la distintas fases involucradas en el proceso, ferrita y austenita. Las mediciones dilatométricas experimentales obtenidas por [Miokovic04] se muestran en la figura 2.21.

Figura 2.21: Mediciones dilatométricas durante el proceso de austenización obtenidas experimentalmente por [Miokovic04]

Una de las lecciones importantes a partir del trabajo de [Miokovic06] está relacionada con la continuación de la reacción de austenización durante los primeros instantes de la fase de enfriamiento de los ciclos térmicos, mientras la temperatura permanece por encima de las temperaturas críticas proporcionadas por el diagrama de equilibrio. Éstas mantienen su significado como barrera termodinámica a partir de las cuales, el proceso puede tener lugar. La figura 2.22 representa la máxima fracción de austenita obtenida, en función de la velocidad de enfriamiento, partiendo de una misma fracción de austenita al final del semi-ciclo de calentamiento.

Figura 2.22: Máxima fracción de Austenita en función de la velocidad de enfriamiento obtenida por [Miokovic06]

Partiendo de la ecuaciones (2.85) y (2.86), éstas pueden adaptarse a una discretización del ciclo térmico, en pequeños incrementos quasi isotérmicos, siguiendo la secuencia dada por la ecuacion (2.88).

$$f_{A,i+1} = f_{A,i} + \Delta f_A = f_{A,i} + \left. \frac{\partial f_{A,i}}{\partial t} \right|_{t_i^*} \Delta t \quad (2.88)$$

La derivada que aparece en la ecuación (2.88) puede calcularse como se muestra en la ecuación (2.89).

$$\left. \frac{\partial f_{A,i}}{\partial t} \right|_{t_i^*} = nb(T_i)^n (t_i^*)^{n-1} \exp [-b(T_i)^n (t_i^*)^n] \quad (2.89)$$

El término t_i^* hace referencia a un tiempo ficticio equivalente al tiempo necesario para conseguir la fracción de austenita acumulada en los incrementos previos, si toda ella hubiese sido obtenida con la temperatura del incremento en curso. Despejando en la ecuación (2.85) se llega a la expresión, (2.90), para obtener t_i^* .

$$t_i^* = \frac{1}{b(T_i)} \left[\ln \frac{1}{1 - f_{A,i}} \right]^{\frac{1}{n}} \quad (2.90)$$

Introduciendo la ecuación (2.90) en la ecuación (2.89), se llega a la expresión explícita para la derivada, ecuación (2.91).

$$\left. \frac{\partial f_{A,i}}{\partial t} \right|_{t_i^*} = nb(T_i) \ln \left(\frac{1}{1 - f_{A,i}} \right)^{\frac{n-1}{n}} (1 - f_{A,i}) \quad (2.91)$$

El ajuste teórico-experimental llevado a cabo, haciendo uso de estas ecuaciones, permite proporcionar valores concretos para las constantes cinéticas.

- Energía de activación de la reacción de austenización, $\Delta H = 4,185 \text{ eV}$
- $n = 1,525$
- $C = 2,84 \cdot 10^{20} \text{ 1/s}$

La figura 2.23 pone de manifiesto la capacidad de las ecuaciones utilizadas.

2.2.3. Análisis de modelos de Transformación Martensítica

Mientras que la mayoría de los trabajos disponibles en la bibliografía sobre el Temple Superficial con Láser centran sus esfuerzos en el análisis y los cálculos de la transformación austenítica, asumiendo que toda la austenita formada se transformará íntegramente en martensita, el estudio de las transformaciones durante la fase de enfriamiento ha sido objeto total o parcial de diversas publicaciones, así como, de diferentes teorías físicas.

Figura 2.23: Comparación teórico-experimental de los resultados obtenidos por [Miockovic04] haciendo uso de la ecuación de Avrami

La transformación martensítica tiene lugar cuando un acero, que ha sido calentado previamente hasta conseguir la formación de austenita, es enfriado lo suficientemente rápido para evitar el proceso de difusión eutectoide. El término martensita, en el contexto de la metalurgia física, puede utilizarse para hacer referencia a cualquier producto de una transformación sin difusión, es decir, aquel tipo de transformaciones en las que el movimiento de un átomo cualquiera desde el comienzo hasta la finalización de la misma no supera un único espaciado interatómico. No obstante, el término martensita, en el contexto de la presente Tesis Doctoral, hace referencia, de forma exclusiva, al producto obtenido en la transformación sin difusión del acero. Este tipo de transformación, debido a las restricciones en el movimiento de los átomos también recibe el nombre de transformación militar, en contraste con las transformaciones difusionales, las cuales reciben el nombre de transformaciones civiles.

En el caso de la martensita formada en los aceros, la velocidad de enfriamiento es tan elevada que la mayoría de los átomos de carbono presentes en el campo austenítico permanecen en la fase de hierro α . Podría decirse, por lo tanto, que la martensita en el caso del acero es una solución super-saturada de carbono en hierro α . El proceso por el que se llega a este producto es complejo y actualmente existen diversas teorías al respecto.

La transformación martensítica ha sido estudiada por un gran número de autores como [Christian65] y [Nishiyama78]. La figura 2.24 elaborada por [Porter08] representa, ilustrativamente las etapas de formación, en su parte superior, de forma esquemática, y mediante análisis metalográfico, en su parte inferior.

La fase martensítica, designada mediante α' aparece siempre con forma lenticular y se extiende, al principio, a lo largo de toda la longitud del grano. La densidad de

Figura 2.24: Desarrollo de la martensita a partir de la austenita. Adaptado de [Porter08]

placas formadas no es una función del tamaño de grano austenítico inicial. Cuando éstas se intersectan con regiones de austenita se produce una pequeña deformación elástica. Microscópicamente, las regiones transformadas guardan coherencia con la austenita que las rodea.

El tiempo de formación de un grano entero de martensita está en torno a los 10^{-7} s lo que implica que la interfaz α'/γ alcanza, prácticamente, la velocidad del sonido en el sólido. La martensita es capaz, por lo tanto, de crecer independientemente de ninguna activación térmica.

A partir de la figura 2.24 se puede ver como la transformación martensítica aumenta progresivamente la fracción de material transformado mediante la conversión de la austenita rodeada entre los granos martensíticos ya formados. Los primeros granos martensíticos se forman a la conocida como temperatura de la martensita

superior, M_S . Esta temperatura se especifica a partir del diagrama de la energía libre de Gibbs de la transformación $\gamma \rightarrow \alpha$. Para aceros de bajo contenido en carbono la temperatura M_S tiene un valor aproximado de 500°C , y en general dicha temperatura es una función decreciente del contenido de carbono C . La figura 2.25 elaborada por [Porter06] muestra la transformación martensítica desde distintas perspectivas energéticas.

Figura 2.25: Distintos diagramas energéticos de la transformación martensítica.

Adaptado de [Porter08]

La temperatura de finalización de la transformación martensítica, M_f (del inglés *martensite finish*) se corresponde con la temperatura por debajo de la cual el enfriamiento adicional no aumenta la concentración de martensita. Esta situación no tiene por qué corresponderse con una concentración del 100% de martensita. Es

posible la presencia de cierta austenita retenida por debajo de M_f . Esta retención está asociada a las elevadas tensiones elásticas entre los últimos granos de martensita que pueden formarse, que tienden a limitar el crecimiento de los granos previamente existentes. El contenido máximo de austenita retenida puede encontrarse entre el 10 % y el 15 % especialmente en el caso de aleaciones con un alto contenido en carbono.

La fuerza motriz de la reacción de nucleación de la martensita, desde el punto de vista de la energía libre de Gibbs, se relaciona con la temperatura de comienzo de la reacción martensítica, M_S , mediante la ecuación (2.92).

$$\Delta G^{\gamma \rightarrow \alpha'} = \Delta H^{\gamma \rightarrow \alpha'} \frac{T_0 - M_S}{T_0} \quad (2.92)$$

Donde T_0 y M_S vienen dados por la energía libre de Gibbs en función de la temperatura de las fases γ y α' (ver figura 2.25).

En el caso del carbono contenido en la austenita, con un sistema cristalino cúbico centrado en las caras, existen dos posibles localizaciones intersticiales donde puede quedar alojado, intersticios tetraédricos o intersticios octaédricos. En el caso de los primeros existen 4 átomos rodeando cada átomo intersticial, mientras que en el caso de los segundos es 8 el número de átomos que rodea cada intersticio. Ambas posibilidades son representadas esquemáticamente en la figura 2.26.

Figura 2.26: Intersticios tetraédricos y octaédricos . Adaptado de [Porter08]

El tamaño de los átomos intersticiales en función del tamaño de los átomos de hierro, $D = 2,52 \text{ \AA}$ viene dado por las ecuaciones (2.93) y (2.94).

$$d_4 = 0,225D = 0,225 \cdot 2,52 = 0,568 \text{ \AA} \quad (2.93)$$

$$d_6 = 0,414D = 0,414 \cdot 2,25 = 1,044 \text{ \AA} \quad (2.94)$$

El diámetro de un átomo de carbono es $1,54 \text{ \AA}$, lo que permite formar una idea sobre la distorsión intersticial que tiene lugar en la red de austenita. En el caso del sistema cristalino cubico centrado en el cuerpo, la dimension de sus intersticios es todavía mucho menor, como muestran las ecuaciones (2.95) y (2.96).

$$d_4 = 0,291D \quad (2.95)$$

$$d_6 = 0,4155D \quad (2.96)$$

A pesar de que el tamaño de los intersticios sea en uno de los casos ligeramente mayor que en el caso de la estructura cristalina cubica centrada en las caras, el mayor número de posiciones intersticiales significa que el numero de espacio disponible por cada intersticio es menor. Aunque $d_6 < d_4$ experimentalmente se observa que los átomos de carbono ocupan los intersticios de menor tamaño dando lugar a una gran distorsión de la red cristalina, representado esquemáticamente en la figura 2.27.

Figura 2.27: Distorsión causada por los átomos intersticiales en la red de martensita.
Adaptado de [Porter08]

Los conocidos como diagramas CCT (del inglés *Continuous Cooling Transformation*) suponen una interesante herramienta para el cálculo teórico de la transformación martensítica a partir de la caracterización experimental del enfriamiento de cada tipo de acero.

La idea de los diagramas CCT es la representación de los cambios de fase de un material como una función de la velocidad de enfriamiento. Su principal utilidad radica en su utilización para la predicción de la micro-estructura de unas determinadas condiciones de enfriamiento, y por ende, permiten la selección de las condiciones

de enfriamiento adecuadas para la obtención de una micro-estructura determinada, mediante un proceso de tratamiento térmico, o inclusive, de los ciclos térmicos derivados del propio proceso de fabricación y conformado, como en el caso especialmente relevante de la soldadura.

La técnica experimental utilizada para la elaboración de los diagramas CCT es la dilatometría, midiendo los pequeños cambios de volumen asociados a las transformaciones de fase. En una primera parte del procedimiento experimental, las muestras son calentadas por encima de la temperatura de austenización, hasta conseguir que todo el material se encuentre a una temperatura homogénea y estable. Esta condición queda garantizada por un tiempo de permanencia en dichas condiciones relativamente largo, como por ejemplo unos 15 *min*. Tras este tiempo de homogeneización se procede al enfriamiento.

La ley del enfriamiento Newtoniano establece que la tasa de enfriamiento de un cuerpo es proporcional a la diferencia de temperatura entre dicho cuerpo y los alrededores. En el caso de enfriamiento por convección esta ley puede considerarse suficientemente aproximada en el caso de que el conocido como coeficiente de transferencia de calor, h , presente un valor independiente de la temperatura. En estas condiciones se cumple la ecuación (2.97).

$$\frac{dQ}{dt} = h \cdot A \cdot [T(t) - T_{env}] = h \cdot A \cdot \Delta T(t) \quad (2.97)$$

En la ecuación (2.97) el significado de los términos es:

- Q representa la energía térmica del material.
- h es el coeficiente de transmisión de calor.
- A es el área de transferencia de calor.
- T representa la temperatura del objeto, supuesta homogénea en cada instante.
- T_{env} es la temperatura alrededor del material.
- $\Delta T(t)$ representa el gradiente térmico entre el material y los alrededores.

El coeficiente de transferencia de calor h depende de las propiedades físicas del fluido y de la situación física en la que se produce la convección. Por lo tanto, un coeficiente de transferencia de calor que sea utilizable individualmente (es decir, que no varíe significativamente durante el enfriamiento y el calentamiento) debe derivarse experimentalmente para cada sistema que pueda analizarse usando la hipótesis de que la ley de Newton se mantiene.

Para la elaboración completa de un diagrama CCT se necesita repetir el enfriamiento entre $800\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $500\text{ }^{\circ}\text{C}$ unas cincuenta veces, con duraciones que varían incrementalmente entre $1,1\text{ s}$ y unos 3000 s . Naturalmente, un tiempo de enfriamiento menor implica una velocidad o tasa de enfriamiento mayor.

Los experimentos dilatométricos son capaces de detectar las variaciones de volumen asociadas a los cambios de fase desde el estado austenítico, por pequeños que sean, los cuales, conocido el coeficiente de expansión térmica de cada una de las fases esperadas permiten calcular la fracción de austenita transformada en cada instante.

La información ofrecida por los diagramas tiene implicaciones prácticas a lo largo de todo el rango de mediciones utilizado. En primer lugar, dichos diagramas permiten poner de manifiesto la temperatura a la que comienza la descomposición de la martensita para cada material en particular. En el caso de enfriamientos ultra-rápidos dicha temperatura de disolución ocurre en el entorno de los $400\text{ }^{\circ}\text{C}$, coincidiendo con la temperatura de comienzo de formación de la martensita M_s . La figura 2.28 muestra, a modo de ejemplo, las distintas curvas de enfriamiento experimentales utilizadas para la elaboración de un diagrama completo CCT, así como la evolución de la fracción de austenita transformada en función de la temperatura.

Figura 2.28: Fracción de martensita en función de la temperatura. Adaptado de [Fonda98]

La figura 2.29 representa las curvas de enfriamiento en función del tiempo.

Figura 2.29: Evolución de la temperatura en función del tiempo para distintas curvas de enfriamiento orientadas a la elaboración de un diagrama CCT.

Adaptado de [Fonda98]

Las temperaturas de comienzo y finalización de la descomposición de la austenita pueden determinarse, cosecuentemente, mediante las figuras 2.28 y 2.29. Estas transformaciones detectadas mediante dilatometría permiten, en primer lugar, la elaboración de un diagrama CCT sin etiquetar las fases producidas tras la disolución total de la martensita, las cuales, serán analizadas en una fase posterior.

El tamaño de grano austenítico inicial juega un papel clave en algunas de las transformaciones reveladas por el diagrama CCT y debe ser convenientemente caracterizado. Del mismo modo, es necesario comprobar su estabilidad, especialmente en el caso de enfriamientos de larga duración, donde podría llegar a experimentar un ligero crecimiento durante los primeros instantes.

De forma adicional a las mediciones dilatométricas, la medida de la dureza del material obtenido tras las distintas condiciones de enfriamiento puede proporcionar información suplementaria sobre las micro-estructuras originadas. La figura 2.30 muestra, a modo de ejemplo, las durezas obtenidas en función de la duración del enfriamiento hasta la disolución completa de la austenita.

Los elevados valores de micro-dureza, en torno a $355 H_V$, para los casos caracterizados por una velocidad de enfriamiento elevada son indicativos de una estructura predominantemente martensítica. Del mismo modo, los ciclos de enfriamiento aso-

Figura 2.30: Evolución de la dureza en función del tiempo para distintas curvas de enfriamiento orientadas a la elaboración de un diagrama CCT. Adaptado de [Fonda98]

ciados a una menor velocidad están asociados a bajos valores de dureza, en torno a $265 H_V$, correspondiente con la micro-dureza de la ferrita. En el caso de velocidades de enfriamiento intermedias, la dureza decae progresivamente desde las pruebas con enfriamientos más rápidos hasta las pruebas con enfriamientos más lentos.

Tras obtener todas las mediciones dilatómetricas, indicativas de un cambio de fase, las fase metalúrgicas asociadas a cada valor representativo de las mediciones dilatómetricas es analizado mediante microscopía óptica. La figura 2.31 muestra las micrografías de las distintas fases obtenidas en el diagrama CCT. Los resultados del análisis mediante el microscopio óptico revelan importantes diferencias en la microestructura obtenida en función de la duración del enfriamiento. Los enfriamientos de menor duración están asociados a una estructura predominantemente martensítica. Las pruebas con velocidades de enfriamiento intermedias o lentas arrojan estructuras predominantemente ferríticas, tal.

Para una caracterización precisa de las fases metalúrgicas producidas durante las distintas condiciones de enfriamiento también puede recurrirse a la microscopía electrónica asociada a un mayor número de aumentos. De este modo, es posible verificar la formación de martensita asociada a las condiciones de enfriamientos más rápidos. La figura. 2.32 muestra las imágenes de la martensita resultante.

Figura 2.31: Micro-estructuras obtenidas con enfriamientos de distinta duración. a) 2,2 s b) 8,5 s c) 28 s d) 100 s e) 301 s f) 301 s. Adaptado de [Fonda98]

Las pruebas de caracterización dilatométrica, medida de dureza y análisis microscópico permiten la elaboración de lo que se conoce como diagrama CCT etiquetado, en el que se muestran las distintas fases metalúrgicas producto de la descomposición de la austenita en enfriamientos continuos a distinta velocidad.

Mediante una caracterización similar a la mostrada en la figura 2.32 es posible la consecución de un diagrama CCT completo y etiquetado como el mostrado en la figura 2.33.

Alguna de las características más importantes del diagrama, desde el punto de vista del proceso de Temple Superficial con Láser, son la temperatura de comienzo de la transformación martensítica, en torno a los $400\text{ }^{\circ}\text{C}$, así como, la duración máxima del enfriamiento para la formación de los primeros granos de ferrita, alrededor de 28 s.

Figura 2.32: Estructura martensítica ampliada mediante microscopía electrónica.
Adaptado de [Fonda98]

Existen trabajos que afrontan la predicción de la fracción martensítica obtenida durante el proceso de Temple Superficial con Láser desde una perspectiva termodinámica.

El trabajo de [Huyan15] considera la variación en la energía libre de Gibbs como fuerza motriz de la transformación, observando, así mismo, un comportamiento sigmoidal global de la transformación, describiendo la transformación durante el enfriamiento para aceros de bajo y medio contenido de carbono, considerando con entrada para el cálculo la temperatura inicial de formación de la martensita M_S .

La fuerza química motriz que caracteriza el cambio de fase entre austenita y martensita viene dada por la ecuación (2.98).

$$\Delta_m^{\gamma \rightarrow \alpha'} = G_m^\gamma - G_m^{\alpha'} - \Delta G_Z \quad (2.98)$$

En la ecuación (2.98) los términos G_m^γ y $G_m^{\alpha'}$ representan las energías libres molares de la austenita y la ferrita, respectivamente, mientras que el término ΔG_Z representa la variación energética debida al conocido como ordenamiento Zener.

Figura 2.33: Diagrama CCT que contiene todas las fases metalúrgicas obtenidas mediante la descomposición de la austenita a distintas velocidades de enfriamiento. Adaptado de [Fonda98]

La ordenación Zener está relacionada con el efecto de una dispersión de partículas finas en el movimiento de los límites de grano de ángulo bajo y alto a través de un material poli-cristalino. Las partículas pequeñas actúan limitando el movimiento de los límites de grano ejerciendo una presión que contrarresta la fuerza motriz que empuja los límites. La ordenación de Zener es muy importante en el procesamiento de materiales, ya que tiene importantes consecuencias en la recuperación, re-cristalización y crecimiento de grano.

Los bordes de grano pueden verse como una imperfección en la estructura cristalina, asociados, como tal, con una cantidad definida de energía. Cuando una frontera pasa por una partícula incoherente entonces la porción de borde de grano que atraviesa dicha partícula, deja de existir. Con el fin de avanzar más allá de la partícula una nueva frontera debe ser creada, lo cual lleva asociado un consumo energético. Mientras se fija el ámbito de la frontera cerca de la partícula, el resto de la frontera continua su movimiento merced a su propia fuerza motriz. Este fenómeno da lugar a un límite de grano curvado.

Asumiendo que la fracción de martensita creada, f es proporcional al cambio en la energía libre de Gibbs, se cumple la ecuación (2.99).

$$df = b \cdot f \cdot 1 - f \frac{d\Delta G_m^{\gamma \rightarrow \alpha'}}{\Delta G_m^{\gamma \rightarrow \alpha'}} \quad (2.99)$$

En la ecuación (2.99) el término b representa una constante de proporcionalidad.

Integrando la ecuación (2.99) entre la temperatura de comienzo de la transformación martensítica, M_s , y una temperatura dada, T , se obtiene la ecuación de la fracción de martensita formada (2.100).

$$f = \frac{1}{1 + a \cdot \Delta G^b} \quad (2.100)$$

En la ecuación (2.100) el término a es una constante que surge de la integración, mientras que ΔG es la fuerza de reacción normalizada, dada por la ecuación (2.101).

$$\Delta G = G_m^{\gamma - \alpha' T} - G_m^{\gamma - \alpha' M_s} \quad (2.101)$$

La expresión para la energía libre de Gibbs es como se muestra en la ecuación (2.102).

$$\Delta G_m^{\gamma - \alpha'} = \Delta H_m^{\gamma - \alpha'} + \Delta S_m^{\gamma - \alpha'} \cdot T \quad (2.102)$$

En la ecuación (2.102) los términos $\Delta H_m^{\gamma - \alpha'}$ y $\Delta S_m^{\gamma - \alpha'}$ representan la entalpía y la entropía respectivamente de la transformación martensítica. Considerando que ambas magnitudes permanecen constantes durante el intervalo de temperaturas correspondiente al cambio de fase, se llega a la ecuación (2.103).

$$f = \frac{1}{1 + a' \cdot \Delta G^b} \quad (2.103)$$

Donde a' viene dado por la ecuación (2.104).

$$a' = a \cdot \left(-\Delta S^{\gamma - \alpha'} \right) \quad (2.104)$$

El desarrollo teórico presentado a lo largo de la referencia permite obtener un elevado grado de ajuste teórico-experimental, a partir de una correcta caracterización de las propiedades termodinámicas del material de trabajo.

La figura 2.34 muestra el grado de aproximación de la predicciones teóricas elaboradas en [Huyan15].

Finalmente, existen otras referencias, como [Miokovic06] que utilizan las conocidas como ecuaciones de Koistinen-Marburger [Koistiene59].

Figura 2.34: Ajuste teórico experimental realizado en [Huyan15] a partir de los cálculos termodinámicos de la transformación martensítica

La ecuación de Koistinen-Marburger [Koistinen59] proporciona una relación explícita entre la fracción de martensita transformada y el grado de sub-enfriamiento, ajustada a partir de datos experimentales. Su expresión viene dada por la ecuación (2.105).

$$f = 1 - e^{K(M_s - T)} \quad (2.105)$$

En la ecuación (2.105) el término K es una constante que depende de las características de cada material particular.

La ecuación 2.105 tiene como única referencia termodinámica para los cálculos el valor de la temperatura a la que comienza la transformación martensítica, M_s , lo que hace que las predicciones de los primeros porcentajes transformados no tengan un elevado grado de precisión.

2.2.4. Métodos disponibles para el cálculo de dureza y tensiones residuales

El incremento de dureza de las piezas tratadas, en las capas superficiales, dejando el resto del material inafectado, es el principal objetivo del proceso de Temple Superficial con Láser. Los cálculos numéricos para la evolución espacio-temporal de temperaturas, así como, la predicción de los cambios de fase experimentados por el material orientados al cálculo de la fracción de martensita obtenida, constituyen la base para la determinación del perfil de durezas inducido por el proceso, [Ericsson85, Yang89, Cerny16].

Los elementos de aleación que componen un acero concreto juegan, del mismo modo, un papel crucial en el perfil de durezas obtenido al final del tratamiento. En este sentido el trabajo de [Yanzón13], recopilando la información disponible en un amplio elenco de trabajos experimentales, proporciona ajustes matemáticos para la predicción de la dureza del acero templado y revenido en función de sus elementos de aleación, así como, de las temperaturas predichas en cualquier modelo del proceso de Temple Superficial con Láser.

La metodología propuesta por [Yanzón13] sigue las siguientes etapas:

- Desarrollo de ecuaciones que supongan un ajuste matemático a las curvas empíricas disponibles en las referencias bibliográficas ([Grange77]), de la dureza del acero en función de los principales elementos de aleación, a saber: silicio, manganeso, cromo, molibdeno y níquel.
- Desarrollo de ecuaciones para representar la influencia del contenido de carbono y la temperatura de revenido, en el caso de aceros templados y revenidos.
- Desarrollo de ecuaciones conjuntas para tener en cuenta tanto la influencia de los elementos de aleación como de las temperaturas del proceso al que sea sometido el material.
- Comparación estadística de los resultados del proceso de ajuste matemático con las curvas empíricas disponibles en las referencias bibliográficas.

La figura 2.35 muestra el tipo de curvas disponibles en las referencias bibliográficas que relacionan el contenido de los elementos de aleación con el incremento de dureza.

En el trabajo de [Grange77] del cual se obtiene la figura 2.35, se analiza la influencia de los elementos cromo, manganeso, molibdeno, níquel, silicio, fósforo y vanadio en la dureza de la martensita templada y revenida, en rangos de $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ a $700\text{ }^{\circ}\text{C}$ con incrementos de $55\text{ }^{\circ}\text{C}$ y una hora de duración.

A partir de las curvas empíricas, proporcionadas por la figura 2.35 se pueden extraer los porcentajes de elementos de aleación mas significativos, desde el punto de vista de la aplicabilidad industrial, y ajustar su comportamiento a curvas polinómicas.

La figura 2.36 muestra el proceso de ajuste llevado a cabo por [Yanzon13] para obtener expresiones polinómicas explícitas orientadas al calculo de la influencia de los elementos de aleación en la dureza.

Figura 2.35: Influencia de los elementos de aleación en la dureza final del material tratado. Fuente: [Yanzon13]

El proceso de ajuste da lugar a la disposición de unas tablas con expresiones para estimar la influencia de cada elemento de aleación sobre la dureza final. Dichas tablas se muestran en la figura 2.37.

El análisis de la influencia del carbono se efectúa de forma separada al ser el principal aleante de los aceros y el de mayor influencia en sus propiedades. Nuevamente, el trabajo de [Granje77] es la fuente tomada para evaluar la influencia del porcentaje de carbono en la dureza de la martensita revenida. Dicho estudio fue obtenido ensayando distintas muestras de acero al carbono con cantidades despreciables de otros elementos de aleación. De este modo, este estudio puede ser considerado como el que proporciona los valores de dureza base, a los cuales, deben ser sumados los valores de dureza obtenidos mediante los elementos aleantes.

La figura 2.38 muestra las curvas empíricas obtenidas en [Grange77] para distintas temperaturas de revenido posterior al tratamiento de temple. La dureza es expresada tanto en unidades de dureza Vickers como de dureza Rockwell C.

De este modo, se consigue un ajuste en función del contenido de carbono y de la temperatura de revenido, como el que se muestra en la figura 2.39.

De esta forma, el incremento total de dureza, puede computarse como la contribución de la dureza aportada por el carbono y por cada uno de los elementos de aleación, ecuación (2.106).

Incremento de dureza (ΔHV) - Temperatura: 595 °C						
%	Mn	Ni	%	Si	Cr	Mo
0,20	16,41	1,22	0,10	7,27		21,95
0,30	23,88	2,05	0,12	8,43		26,03
0,40	30,24	2,73	0,14	9,65		29,6
0,50	35,89	3,64	0,16	10,7		33,74
0,60	40,71	4,4	0,18	11,73		38,17
0,70	45,71	5,09	0,20	12,66	19,51	43,01
0,80	49,35	5,58	0,30	16,83	26,9	64,45
0,90	53,18	6,26	0,40	20,11	34,21	75,46
1,00	56,79	6,94	0,50	23,25	40,61	79,55
1,10	60,19	7,64	0,60	26,01	44,21	
1,20	63,14	8,28	0,70		45,54	
1,30	66,26	9	0,80		46,23	
1,40	68,95	9,57	0,90		46,97	
1,50	71,43	10,14	1,00		47,37	
1,60	73,74	10,84				
1,70	75,83	11,57				
1,80	77,93	12,34				
1,90	79,91	13,22				
2,00	81,48	14,12

Figura 2.36: Ajuste de la influencia de los elementos de aleación. Fuente: [Yanzon13]

$$H = H_0 + \Delta H_{Si} + \Delta H_{Mn} + \Delta H_{Cr} + \Delta H_{Mo} + \Delta H_{Ni} \quad (2.106)$$

En la ecuación (2.106) el término H_0 representa la dureza del acero cuyo único elemento de aleación es el carbono, mientras que los restantes términos representan la contribución de cada uno de los elementos de aleación. Durante el proceso de Temple Superficial con Láser los cambios micro-estructurales que acompañan al incremento de dureza dan lugar a la aparición de tensiones residuales. Estas tensiones residuales generadas son normalmente de compresión contribuyendo a la mejora de las propiedades de fatiga del material.

TEMP °C	SILICIO 0,15 - 0,35 %	MANGANESO 0 - 1,00 %	
205	$\Delta HV = 50 * Si + 2,3$		
260	$\Delta HV = 45 * Si + 0,8$		
315	$\Delta HV = 141,32 * Si^2 + 53,19 * Si + 2,49$	$\Delta HV = -9,32 * Mn^3 + 17,29 * Mn^2 + 28,14 * Mn + 1,24$	
370	$\Delta HV = 20,4 * Si^2 + 36,25 * Si + 1,1$	$\Delta HV = 1,52 * Mn^3 + 51,78 * Mn^2 + 1,92$	
425	$\Delta HV = -84,91 * Si^2 + 98,13 * Si + 3,01$	$\Delta HV = 17,73 * Mn^3 - 42,82 * Mn^2 + 66,92 * Mn + 8,84$	
480	$\Delta HV = 47,6 * Si^2 + 40,19 * Si + 0,26$	$\Delta HV = 9,39 * Mn^3 - 36,35 * Mn^2 + 64,35 * Mn + 21,25$	
540	$\Delta HV = -34,66 * Si^2 + 63,28 * Si + 0,95$	$\Delta HV = 10,64 * Mn^3 - 48,36 * Mn^2 + 98,95 * Mn - 9,73$	
595	$\Delta HV = -61,26 * Si^2 + 72,23 * Si + 0,7$	$\Delta HV = -11,04 * Mn^3 + 56,92 * Mn^2 + 10,9$	
650	$\Delta HV = -86,67 * Si^2 + 87,05 * Si - 1,1$	$\Delta HV = -8,49 * Mn^3 + 54,09 * Mn^2 + 4,19$	
705	$\Delta HV = 40,31 * Si + 2,36$	$\Delta HV = -11,428 * Mn^3 + 63,84 * Mn^2 - 133,79 * Mn + 124,73$	

TEMP °C	CROMO 0,2 - 1,2 %	MOLIBDENO 0,15 - 0,35 %	NÍQUEL 0,6 - 2,00 %
205	$\Delta HV = 68,1 * Cr^3 - 200,19 * Cr^2 + 193,32 * Cr - 33,06$		$\Delta HV = 7,48 * Ni - 3,04$
260	$\Delta HV = -22,67 * Cr^2 + 54,9 * Cr - 8,04$	$\Delta HV = 41,93 * Mo - 2,68$	$\Delta HV = 6,84 * Ni - 0,23$
315	$\Delta HV = 36,77 * Cr^3 - 115,19 * Cr^2 + 121,37 * Cr - 5,5$	$\Delta HV = -230,6 * Mo^2 + 187,4 * Mo - 5,8$	$\Delta HV = 6,53 * Ni + 0,05$
370	$\Delta HV = 68,1 * Cr^3 - 200,19 * Cr^2 + 193,32 * Cr - 33,06$	$\Delta HV = -536,5 * Mo^2 + 389,1 * Mo - 26,96$	$\Delta HV = 6,7 * Ni + 0,1$
425	$\Delta HV = 1606,54 * Cr^5 - 6447,54 * Cr^4 + 10055,12 * Cr^3 - 7605,27 * Cr^2 + 2808,35 * Cr - 352,6$	$\Delta HV = -299,6 * Mo^2 + 280,3 * Mo - 14,33$	$\Delta HV = 7,28 * Ni - 1$
480	$\Delta HV = 45,73 * Cr^3 - 117,8 * Cr^2 + 128,2 * Cr + 0,2$	$\Delta HV = -554,6 * Mo^2 + 423,4 * Mo - 28,24$	$\Delta HV = 6,75 * Ni - 0,06$
540	$\Delta HV = 60,8 * Cr^3 - 179,68 * Cr^2 + 179,5 * Cr - 17,37$	$\Delta HV = -172,6 * Mo^2 + 261 * Mo - 3,88$	$\Delta HV = 6,97 * Ni - 1$
595	$\Delta HV = 56,33 * Cr^3 - 169,77 * Cr^2 + 170,5 * Cr - 9,84$	$\Delta HV = -315,6 * Mo^2 + 360,6 * Mo - 15,93$	$\Delta HV = 6,76 * Ni + 0,2$
650	$\Delta HV = 154,22 * Cr^4 - 276,55 * Cr^3 + 56,9 * Cr^2 + 119,87 * Cr - 13,23$	$\Delta HV = -416,7 * Mo^2 + 363,6 * Mo - 17,7$	$\Delta HV = 2,27 * Ni^3 - 7,02 * Ni^2 + 12,86 * Ni - 1,87$
705	$\Delta HV = 28,3 * Cr^3 - 96,07 * Cr^2 + 114,74 * Cr - 7,7$	$\Delta HV = -408,3 * Mo^2 + 365,8 * Mo - 35,35$	$\Delta HV = 6,35 * Ni + 0,52$

Figura 2.37: Tablas para el cálculo de la dureza a partir de los elementos de aleación.

Fuente: [Yanzon13]

El control de las tensiones residuales generadas durante el proceso de Temple Superficial con Láser juega un papel crítico de cara a posteriores procesos de mecanizado, en los cuales, pueden producirse distorsiones dimensionales de las piezas en caso de niveles de tensión superiores a determinados valores. Del mismo modo, las distorsiones, asociadas a tensiones residuales, en el caso del material que forma parte de maquinaria, puede dar lugar a la distorsión de las piezas, e incorrecto funcionamiento del conjunto en el caso de tensiones mal calculadas [Solina84, Slatter09, Smoljan10, Smoljan13, Smoljan15].

De forma sucinta, las tensiones residuales pueden definirse como aquellas tensiones presentes en un material o una máquina en ausencia de cargas externas. A medida que ha ido aumentando la precisión de los equipos de mecanizado, el estudio de las tensiones residuales ha tenido un interés creciente, por el efecto que sobre la precisión final de los mecanizados pueden tener las distorsiones.

Temp Rev (°C)	PORCENTAJE DE CARBONO										
	0,30	0,35	0,40	0,45	0,50	0,55	0,60	0,65	0,70	0,75	0,80
205	498	540	558	585	612	640	662	683	702	720	731
260	442	465	485	510	533	555	574	588	612	626	640
315	380	400	418	435	450	466	481	494	508	520	532
370	337	355	375	390	410	428	445	460	471	483	491
425	266	280	295	310	323	338	353	368	380	392	404
480	220	228	236	245	253	263	270	282	293	306	314
540	200	210	220	228	232	238	246	251	260	265	270
595	175	180	186	192	197	205	212	220	225	230	235
650	148	154	160	168	176	183	190	197	203	210	215
705	132	138	142	148	153	159	164	170	175	181	187

Figura 2.38: Dureza del acero sometido a temple y revenido con distintas temperaturas en los trabajos experimentales de [Grange77]

En el caso de un material sometido al tratamiento de Temple Superficial con Láser, asumiendo que tiene un comportamiento mecánico isotrópico, elasto-plástico y una relación tensión-deformación continua, una componente de la deformación total viene dado por la ecuación (2.107).

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^e + \epsilon_{ij}^p + \epsilon_{ij}^{th} \quad (2.107)$$

En la ecuación (2.107) el término, ϵ_{ij}^e representa la componente elástica de la deformación, el término ϵ_{ij}^p representa la componente plástica de la deformación, y, finalmente, el término ϵ_{ij}^{th} representa las deformación térmicas.

% Carbono	Ecuación (T= Temperatura en °C)
0,30	$0,001043 T^2 - 1,69 T + 807,47$
0,35	$0,001226 T^2 - 1,92 T + 882,95$
0,40	$0,001199 T^2 - 1,93 T + 906,48$
0,45	$0,001292 T^2 - 2,06 T + 956,30$
0,50	$0,001388 T^2 - 2,19 T + 1.006,56$
0,55	$0,001469 T^2 - 2,30 T + 1.053,86$
0,60	$0,001505 T^2 - 2,37 T + 1.087,97$
0,65	$0,001523 T^2 - 2,41 T + 1.114,90$
0,70	$0,001563 T^2 - 2,48 T + 1.148,91$
0,75	$0,001586 T^2 - 2,53 T + 1.173,82$
0,80	$0,001591 T^2 - 2,55 T + 1.191,04$

Figura 2.39: Expresiones de ajuste para la dureza en función de la temperatura de revenido y del contenido en carbono

La ecuación indica que el efecto de la temperatura se considera mediante un término adicional en la conocida como ecuación de Prandtl-Reuss (2.108) entre la tasa de deformación y la tensión.

$$\epsilon_{ij}^e = \frac{1 + \nu}{E} \sigma_{ij} - \frac{\nu}{E} \sigma_{kk} \delta_{ij} \quad (2.108)$$

En la ecuación (2.108) el símbolo δ_{ij} es el símbolo de Kronecker, ν es el coeficiente de Poisson y E es el módulo de Young.

La deformación térmica puede expresarse como la ecuación (2.109).

$$\epsilon_{ij}^{th} = \alpha(T - T_r) \quad (2.109)$$

En la ecuación (2.109) el término α representa el coeficiente de expansión térmica mientras que T_r es una temperatura de referencia.

El modelo de [Ericcson90] ofrece un esquema bidimensional para el cálculo de tensiones residuales. La distribución total de deformaciones $\epsilon_x(y, z)$ es utilizada como condición de contorno que satisface la condición de equilibrio.

Para la determinación de $\epsilon_x(y, z)$ las ecuaciones de compatibilidad que satisfacen las hipótesis del modelo vienen dadas por las ecuaciones (2.110), (2.111), (2.112) y (2.113).

$$\frac{\partial^2 \epsilon_x}{\partial y^2} = 0 \quad (2.110)$$

$$\frac{\partial^2 \epsilon_x}{\partial z^2} = 0 \quad (2.111)$$

$$\frac{\partial^2 \epsilon_x}{\partial y \partial z} = 0 \quad (2.112)$$

$$\sum M_z = 0 \quad (2.113)$$

Partiendo de las hipótesis reseñadas establecidas el término de la deformación puede obtenerse con una ecuación de la forma de (2.114).

$$\epsilon_x(Z) = a + bz \quad (2.114)$$

Donde los coeficientes a y b vienen dados por las ecuaciones (2.115) y (2.116).

$$a = \frac{8AD - 12B}{WD^2} \quad (2.115)$$

$$b = \frac{24B - 12AD}{WD^3} \quad (2.116)$$

Los términos A y B dependen de las deformaciones y alguna de las propiedades mecánicas del material según las ecuaciones (2.117) y (2.118).

$$A = \int_0^D \int_0^{W/2} \epsilon_x^p + \epsilon_x^{th} - \frac{\nu}{1-\nu} (\epsilon_y^e + \epsilon_z^e) dydz \quad (2.117)$$

$$B = \int_0^D \int_0^{W/2} \epsilon_x^p + \epsilon_x^{th} - \frac{\nu}{1-\nu} (\epsilon_y^e + \epsilon_z^e) z dydz \quad (2.118)$$

En las ecuaciones (2.117) y (2.118) el término W hace referencia al ancho de la pieza mientras que D es su espesor.

Puesto que la tensión térmica se debe a una distribución desigual de las temperaturas la deformación longitudinal total, $\epsilon_x(y, z)$ esta relacionada con la distribución de temperaturas en la pieza.

Por lo tanto, el gradiente de tensión longitudinal total $\epsilon_x(y, z)$ a lo largo de la dirección y se asume que es el mismo que a lo largo de la dirección z . Puesto que $\epsilon_x(y, z)$ debe ser simétrico alrededor del eje z , éste puede ser formulado como se indica en la ecuación 2.119.

$$\epsilon_x(y, z) = a + b|y| + bz \quad (2.119)$$

A partir de la ecuación (2.119) los valores exactos de las ecuaciones de contorno que satisfacen la condición $\epsilon_x(y, z)$ que satisfacen las condiciones de equilibrio a lo largo de la dirección longitudinal pueden ser calculados.

La figura 2.40 muestra el perfil longitudinal de tensiones residuales obtenido por [Yang90] para el caso del proceso de Temple Superficial con Láser de un acero con contenido medio de carbono.

Figura 2.40: Perfil longitudinal de tensiones residuales tras el proceso de Temple Superficial con Láser. Fuente: [Yang90]

Los ciclos térmicos que han dado lugar al perfil de tensiones residuales mostrado en la figura 2.40 son los que se muestran en la figura 2.41 en un punto bajo el centro del haz láser asociado a una distribución gaussiana, y a distintas profundidades, 0 mm, 0,45 mm, 0,90 mm, 1,52 mm y 2,73 mm.

Figura 2.41: Ciclos térmicos en [Yang90] durante el proceso de Temple Superficial con Láser

El trabajo de [Li86] desarrolla un modelo analítico simple para el cálculo de tensiones residuales durante el proceso de temple superficial con láser. Como consecuencia del ciclo térmico un cierto volumen de material afectado se expande como consecuencia de la transformación martensítica. La estructura martensítica con un mayor volumen específico que la micro-estructura original es la causante de tensiones residuales. Se consideran tres grupos de variables con influencia en el cálculo de las tensiones residuales, estos son:

- Dimensiones de los especímenes.
- Propiedades del material y composición.
- Variables del proceso con el láser.

En estas condiciones la tensión residual σ_{xx} viene dada por la ecuación (2.120).

$$\sigma_{xx} = -\frac{\beta f E}{1 - \nu} + \frac{1}{bc} \int_0^c dz \int_p^{b/2} \frac{\beta f E}{1 - \nu} dy + \frac{12(0,5c - z)}{bc^3} \int_0^c dz \int_{-b/2}^{+b/2} \frac{\beta f E}{1 - \nu} (0,5c + z) dy \quad (2.120)$$

La ecuación (2.120) es una descripción completa de las tensiones residuales en la dirección x , donde el primer término es negativo y decrece en función de la profundidad mientras que los términos segundo y tercero son ambos positivos. Esto significa la presencia de tensión residual de compresión en la superficie que tiene a tener un comportamiento de tracción a medida que se profundiza bajo la superficie tratada a cierta profundidad.

La componente σ_{yy} de la tensión residual puede expresarse según la ecuación (2.121).

$$\sigma_{yy} = -\frac{\beta f E}{1 - \nu} \quad (2.121)$$

Asumiendo que la expansión en la dirección del eje z tiene lugar sin restricción alguna, la componente σ_{zz} , será la ecuación (2.122):

$$\sigma_{zz} = 0 \quad (2.122)$$

El tratamiento de Temple Superficial con Láser no produce cambios en el volumen total de la pieza, por lo que las tensiones cortantes son igual a cero (ecuaciones 2.123, 2.124 y 2.125).

$$\sigma_{xy} = 0 \quad (2.123)$$

$$\sigma_{yz} = 0 \quad (2.124)$$

$$\sigma_{zx} = 0 \quad (2.125)$$

2.3. Estudio del modelado de la Absorción

El cálculo de la fracción de energía efectivamente absorbida por parte del material sometido al tratamiento de Temple Superficial con Láser es de crucial importancia para el éxito de las predicciones efectuadas por el modelo. Sirva de ejemplo el hecho de que el incremento de tan solo un 5 % en la fracción de energía absorbida, pasando de un 15 % a un 20 % puede permitir una reducción teórica de un 25 % de la potencia que es necesario que sea suministrada por el haz láser.

Durante el proceso de Temple Superficial con Láser son varios los factores que afectan al fenómeno de la absorción de radiación láser por parte del material. En primer lugar la naturaleza y propiedades ópticas del material tratado, en el contexto de lo que se conoce como interacción de la radiación láser con la materia [Alonso86, Betoltti13]. De esta forma, a partir de la propagación de las componentes de los campos eléctrico y magnético en la interfaz del aire y un material conductor puede deducirse la fracción de energía efectivamente absorbida en función del índice de refracción y coeficiente de extinción del material (este último en caso de tratarse de un medio conductor), así como, de la polarización de la radiación incidente respecto al plano de incidencia y el propio ángulo de incidencia del haz láser respecto al vector normal a la superficie tratada [Prokhorov90, Pedrotti93].

La rugosidad superficial en la zona de incidencia entre el haz láser y el material es otro de los factores de gran importancia a la hora de calcular la fracción de

energía absorbida por el material. Cuanto mayor sea la rugosidad superficial, mayor es la fracción de energía absorbida debido a la capacidad que las irregularidades superficiales tienen para retener la radiación en el seno de la superficie. Parte de la radiación que puede haber sido inicialmente reflejada es nuevamente reflejada en alguna irregularidad y, en un proceso aleatorio a través de múltiples reflexiones, nuevamente reconducida al material.

Cuando el proceso de Temple Superficial con Láser es llevado a cabo en una atmósfera no protectora, por ejemplo al aire, las elevadas temperaturas que tienen lugar durante el proceso dan lugar a la aceleración de la cinética de la reacción de oxidación superficial, favoreciendo el desarrollo de una capa de óxido de hierro que actúa como medio absorbente. La caracterización del desarrollo de dicha capa, en función de los ciclos térmicos puntuales, junto con el cálculo del incremento de absorción asociado en función de su espesor, da lugar al acoplamiento termo-cinético para determinar el desarrollo de la capa de óxido simultáneo al proceso de Temple Superficial con Láser.

Mientras que en condiciones próximas al equilibrio la cinética de la reacción de oxidación viene dada por una ecuación tipo Arrhenius, con coeficientes cinéticos, energía de activación y factor de frecuencia, constantes, en el caso de las condiciones de calentamiento que tienen lugar durante el proceso de Temple Superficial con Láser, caracterizadas por una elevada velocidad de calentamiento, los parámetros cinéticos, son, como se verá, una función de las características del propio proceso.

2.3.1. Reflexión y Refracción de Ondas Electromagnéticas

En el presente apartado se estudian las características y los efectos de una discontinuidad en el medio de propagación de las ondas electromagnéticas. Se considerarán dos tipos de medios: dieléctricos y buenos conductores [Retiz08].

Se asumirá una separación (interfaz) idealmente delgada, infinita y plana entre dos medios lineales, homogéneos e isotropos. Una onda que incide en la dirección $\mathbf{n}_i$ da lugar a una onda reflejada en la dirección $\mathbf{n}_r$ y a otra transmitida en la dirección $\mathbf{n}_t$ (véase la figura 2.42). En la separación, las tres ondas satisfacen las condiciones de continuidad de las componentes tangenciales de $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$.

Las Leyes de la Reflexión y la Ley de Snell

Si la onda electromagnética incidente de la figura 2.42 es plana y polarizada linealmente a la vez, entonces una expresión para su campo eléctrico es de la forma:

Figura 2.42: Onda electromagnética incidiendo sobre la interfaz entre Medio 1 y Medio 2. Fuente: [Reitz08]

$$\mathbf{E}_i = \mathbf{E}_{0i} e^{j\omega_i \left(t - \frac{\mathbf{n}_i \mathbf{r}}{u_1} \right)} \quad (2.126)$$

donde u_1 es la velocidad de fase de la onda en el medio 1.

Tanto la onda reflejada como la refractada por la superficie de separación son también planas y polarizadas planas, ya que las leyes de la reflexión y refracción para cualquier rayo incidente deben ser las mismas en todos los puntos de la separación. Por consiguiente, las ondas reflejada y transmitida son de la forma:

$$\mathbf{E}_r = \mathbf{E}_{0r} e^{j\omega_r \left(t - \frac{\mathbf{n}_r \mathbf{r}}{u_1} \right)} \quad (2.127)$$

$$\mathbf{E}_t = \mathbf{E}_{0t} e^{j\omega_t \left(t - \frac{\mathbf{n}_t \mathbf{t}}{u_2} \right)} \quad (2.128)$$

donde u_2 es la velocidad de fase de la onda en el medio 2.

Para conseguir la continuidad en la superficie de las componentes tangenciales de $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$, tiene que existir alguna relación entre $\mathbf{E}_i$, $\mathbf{E}_r$ y $\mathbf{E}_t$ válida para todos los instantes t y para todos los puntos sobre la superficie. Tal relación será posible: a) si los tres vectores $\mathbf{E}_i$, $\mathbf{E}_r$, y $\mathbf{E}_t$ son funciones idénticas del tiempo t ; b) si los tres vectores son funciones idénticas de la posición $\mathbf{r}_i$ sobre la superficie, y c) si existen ciertas relaciones entre $\mathbf{E}_{0i}$, $\mathbf{E}_{0r}$ y $\mathbf{E}_{0t}$.

Según la condición a):

$$\omega_i = \omega_r = \omega_t \quad (2.129)$$

Por consiguiente, las tres ondas deben tener la misma frecuencia.

Según la condición b), se debe cumplir, en cualquier punto de la interfase:

$$\frac{\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{r}_I}{u_1} = \frac{\mathbf{n}_r \cdot \mathbf{r}_I}{u_1} = \frac{\mathbf{n}_t \cdot \mathbf{r}_I}{u_2} \quad (2.130)$$

$$\frac{\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{r}_I}{u_1} = \frac{\mathbf{n}_r \cdot \mathbf{r}_I}{u_1} = \frac{\mathbf{n}_t \cdot \mathbf{r}_I}{u_2} \quad (2.131)$$

De la primera ecuación deducimos:

$$(\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_r) \cdot \mathbf{r}_I = 0 \quad (2.132)$$

Como el vector $\mathbf{r}_I$ está en la superficie, el vector $\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_r$ debe ser normal a la misma y las componentes tangenciales de estos dos vectores necesitan ser iguales y del mismo signo (véase la figura 2.43).

$$\theta_i = \theta_r \quad (2.133)$$

El ángulo de reflexión es igual al ángulo de incidencia. Dado que $(\mathbf{n}_i - \mathbf{n}_r)$, es paralelo a la normal $\mathbf{n}$, los tres vectores $\mathbf{n}_i$, $\mathbf{n}_r$ y $\mathbf{n}$ están contenidos en el mismo plano.

Figura 2.43: Caracterización de los vectores de las ondas incidente y reflejada. Fuente: [Reitz08]

El plano que forman estos tres vectores es normal a la separación y se llama plano de incidencia.

Partiendo ahora de la ecuación (2.131), se tiene:

$$\left(\frac{n_i}{u_1} - n_t u_2 \right) \cdot r_1 = 0 \quad (2.134)$$

Según el producto escalar de la ecuación (2.134), el vector entre paréntesis debe ser también normal a la separación, de este modo, $\mathbf{n}_i$, $\mathbf{n}_t$, $\mathbf{n}$ son coplanarios, y los cuatro vectores $\mathbf{n}_i$, $\mathbf{n}_t$, $\mathbf{n}_r$, y $\mathbf{n}$, están en el plano de incidencia. Además las componentes tangenciales de $\mathbf{n}_i/u_1$ y $\mathbf{n}_t/u_2$ deben ser iguales:

$$\frac{\text{sen}\theta_i}{u_1} = \frac{\text{sen}\theta_t}{u_2} \quad (2.135)$$

Dado que el número de onda k , es igual a ω/u :

$$k_1 \text{sen}\theta_i = k_2 \text{sen}\theta_t \quad (2.136)$$

Al atravesar la interfase se conserva la cantidad $k \text{sen}\theta$. También se puede escribir:

$$\frac{\text{sen}\theta_t}{\text{sen}\theta_i} = \frac{k_1}{k_2} = \frac{n_1}{n_2} \quad (2.137)$$

Esta es la se conoce como *Ley de Snell*.

Figura 2.44: Direcciones de incidencia refracción y reflexión. Fuente: [Reitz08]

2.3.2. Ecuaciones de Fresnel

Los vectores $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ en una onda plana electromagnética son siempre normales a la dirección de propagación y normales entre sí. El vector $\mathbf{E}$ de la onda incidente puede tener cualquier dirección normal al vector n_i .

Se considerará sucesivamente ondas incidentes polarizadas con su vector $\mathbf{E}$ normal y paralelo al plano de incidencia. Cualquier onda incidente se puede descomponer en estas dos componentes.

i) Onda incidente polarizada con su vector normal al plano de incidencia

Si se consideran conocidas las intensidades del campo eléctrico y magnético de la onda incidente, hay cuatro incógnitas: $\mathbf{E}_{0r}$, $\mathbf{E}_{0t}$, $\mathbf{H}_{0r}$ y $\mathbf{H}_{0t}$. También, existen cuatro ecuaciones, dadas: a) Por la continuidad de las componentes tangenciales de $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ en la superficie de separación y b) por las relaciones entre las ondas planas $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ en el medio 1 y el medio 2. Es suficiente calcular solo los vectores correspondientes a $\mathbf{E}$.

La continuidad en la superficie de la componente tangencial de $\mathbf{E}$ exige que, en cualquier instante y en todo punto sobre la separación sea:

$$E_{0i} + E_{0r} = E_{0t} \quad (2.138)$$

La continuidad de la componente tangencial de $\mathbf{H}$ exige que:

$$H_{0i}\cos\theta_i - H_{0r}\cos\theta_i = H_{0t}\cos\theta_t \quad (2.139)$$

Dado que:

$$\frac{E}{H} = \frac{k}{\omega\mu} \quad (2.140)$$

entonces:

$$\frac{k_1}{\omega\mu_1}(E_{0i} - E_{0r})\cos\theta_i = \frac{k_2}{\omega\mu_2}E_{0t}\cos\theta_t \quad (2.141)$$

Por lo tanto, introduciendo el coeficiente de refracción n queda:

$$\left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}}\right)_N = \frac{\frac{n_1}{\mu_{r1}}\cos\theta_i - \frac{n_2}{\mu_{r2}}\cos\theta_t}{\frac{n_1}{\mu_{r1}}\cos\theta_i + \frac{n_2}{\mu_{r2}}\cos\theta_t} \quad (2.142)$$

$$\left(\frac{E_{0t}}{E_{0i}}\right)_N = \frac{2\frac{n_1}{\mu_{r1}}\cos\theta_i}{\frac{n_1}{\mu_{r1}}\cos\theta_i + \frac{n_2}{\mu_{r2}}\cos\theta_t} \quad (2.143)$$

Donde el subíndice N indica que E_{0i} es normal al plano de incidencia.

ii) Onda incidente polarizada con su vector paralelo al plano de incidencia

En este caso, los vectores $\mathbf{E}$ de las tres ondas deben estar en el plano de incidencia. Ahora se cumple que:

$$H_{0i} - H_{0r} = H_{0t} \quad (2.144)$$

o lo que es lo mismo:

$$\frac{k_1}{\omega\mu_1}(E_{0i} - E_{0r}) = \frac{k_2}{\omega\mu_2}E_{0t} \quad (2.145)$$

Y además:

$$(E_{0i} + E_{0r})\cos\theta_i = E_{0t}\cos\theta_t \quad (2.146)$$

Entonces, resolviendo para E_{0r} y E_{0t} , se tiene que:

$$\left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}}\right)_P = -\frac{\frac{n_2}{\mu_{r2}}\cos\theta_i + \frac{n_1}{\mu_{r1}}\cos\theta_t}{\frac{n_2}{\mu_{r2}}\cos\theta_i + \frac{n_1}{\mu_{r1}}\cos\theta_t} \quad (2.147)$$

$$\left(\frac{E_{0t}}{E_{0i}}\right)_N = \frac{2\frac{n_1}{\mu_{r1}}\cos\theta_i}{\frac{n_2}{\mu_{r2}}\cos\theta_i + \frac{n_1}{\mu_{r1}}\cos\theta_t} \quad (2.148)$$

Las ecuaciones (2.142), (2.143), (2.147) y (2.148) son las *Ecuaciones de Fresnel*.

En incidencia normal, $\theta_i = \theta_t = 0$, el plano de incidencia está indeterminado, y el par de ecuaciones (2.142) y (2.143), es idéntico al par (2.147) y (2.148).

2.3.3. Reflexión y Refracción entre dos medios no conductores

Establecidas las leyes de la reflexión, la ley de Snell y las ecuaciones de Fresnel, se considera el caso sencillo de la separación entre dos no conductores no magnéticos. Los índices de refracción n_1 y n_2 son numeros reales, iguales o mayores que la unidad.

$$\frac{\sin\theta_t}{\sin\theta_i} = \frac{n_1}{n_2} \quad (2.149)$$

Utilizando las ecuaciones de Fresnel, para una onda polarizada con el vector $\mathbf{E}$ normal al plano de incidencia, se tiene:

$$\left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}}\right)_N = \frac{\left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_i - \cos\theta_t}{\left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_i + \cos\theta_t} \quad (2.150)$$

$$\left(\frac{E_{0t}}{E_{0i}}\right)_N = \frac{2\left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_i}{\left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_i + \cos\theta_t} \quad (2.151)$$

Se observa que la relación $(E_{0t}/E_{0i})_N$ es siempre real y positiva. Esto significa que en la separación, la onda transmitida está siempre en fase con la onda incidente. La razón $(E_{0r}/E_{0i})_N$ puede, no obstante, ser positiva o negativa, dependiendo del valor n_1/n_2 , ya que para $n_1/n_2 > 1$, es $\theta_t > \theta_i$ u $\cos\theta_i > \cos\theta_t$, mientras que si $n_1/n_2 < 1$, es $\theta_t < \theta_i$ y $\cos\theta_t < \cos\theta_i$. La onda reflejada está, por tanto, en fase con la onda incidente si $n_1 > n_2$, o está desfasada π radianes si $n_1 < n_2$.

Para una onda incidente polarizada con su vector $\mathbf{E}$ paralelo al plano de incidencia:

$$\left(\frac{E_{0r}}{E_{0i}}\right)_P = \frac{\left(-\cos\theta_i + \frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_t}{\cos\theta_i + \left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_t} \quad (2.152)$$

$$\left(\frac{E_{0t}}{E_{0i}}\right)_P = \frac{2\left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_i}{\cos\theta_i + \left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_t} \quad (2.153)$$

La relación en la ecuación (2.153) es siempre positiva. Las intensidades del campo eléctrico de la onda incidente y transmitida están en fase en la superficie de separación. Por otra parte, la razón para $\mathbf{E}_{0r}$ puede ser positiva o negativa, lo cual indica que $\mathbf{E}_{0r}$ puede estar en fase, o desfasado π radianes, respecto a $\mathbf{E}_i$.

Resulta útil definir los coeficientes de reflexión y de transmisión que están relacionados con el flujo de energía a través de la separación. *Los coeficientes de reflexión* R y *transmisión* T se definen como el cociente de los flujos medios de energía por unidad de tiempo y de área en la separación:

$$R = \frac{E_{0r}^2}{E_{0i}^2} \quad (2.154)$$

$$T = \frac{n^2 E_{0t}^2 \cos\theta_t}{n_1 E_{0i}^2 \cos\theta_i} \quad (2.155)$$

Por consiguiente, utilizando las ecuaciones de Fresnel para no conductores:

$$R_N = \left[\frac{\left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_i - \cos\theta_t}{\left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_i + \cos\theta_t} \right]^2 \quad (2.156)$$

$$T_N = \frac{4 \left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_i \cos\theta_t}{\left[\left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_i + \cos\theta_t \right]^2} \quad (2.157)$$

$$R_P = \left[\frac{-\cos\theta_i + \left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_t}{\cos\theta_i + \left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_t} \right]^2 \quad (2.158)$$

$$T_P = \frac{4 \left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_i \cos\theta_t}{\left[\cos\theta_i + \left(\frac{n_1}{n_2}\right) \cos\theta_t \right]^2} \quad (2.159)$$

En ambos casos, $R + T = 1$, al cumplirse la conservación de la energía.

2.3.4. Reflexión, Refracción y Absorción en conductores

En la sección B.1.5 se presentó el número de ondas para el caso de un buen conductor:

$$k_2 = \sqrt{\frac{\sigma_2 \mu_2 \omega}{2}} (1 - j) = \frac{1}{\delta} (1 - j) \quad (2.160)$$

donde δ es la profundidad pelicular.

Las leyes de la reflexión, la ley de Snell y las ecuaciones de Fresnel son también válidas aun cuando se tiene n_2 complejo, entonces:

$$\text{sen}\theta_t = \frac{n_1}{n_2} \text{sen}\theta_i \quad (2.161)$$

$$\cos\theta_t = +\sqrt{1 - \left(\frac{n_1}{n_2}\right)^2 \text{sen}^2\theta_i} \quad (2.162)$$

La función exponencial para E_t es:

$$E_t = e^{\left[j \left(\omega t - \frac{n_1}{\lambda/2\pi} x \sin\theta_i + \frac{z}{\delta} \right) + \frac{z}{\delta} \right]} \quad (2.163)$$

La onda se propaga en una dirección casi normal a la separación y su amplitud se atenúa por un factor e al recorrer una distancia δ .

En la ecuación (2.162), el segundo término dentro de la raíz es complejo, debido a n_2 , pero despreciable por ser $n_2 \gg n_1$, lo cual indica que la energía transmitida a través del conductor ha de ser necesariamente muy pequeña.

$$\cos\theta_t \approx 1, \quad \theta_t \cong 0, \quad \sin\theta_t \approx 0 \quad (2.164)$$

La onda penetra en el conductor prácticamente según la normal al conductor, cualquiera que sea el ángulo de incidencia.

Para los medios conductores en general se cumple:

$$A = 1 - R \quad (2.165)$$

Donde, A , representa el coeficiente de absorción. El valor de este coeficiente depende del ángulo de incidencia y del tipo de polarización incidente:

$$A_P = \frac{4(\lambda_0/\lambda)\cos\theta_i}{[(\lambda_0/\lambda)^2 + (\lambda_0/\delta 2\pi)^2]\cos^2\theta_i + 2(\lambda_0/\lambda)\cos\theta_i + 1} \quad (2.166)$$

$$A_N = \frac{4(\lambda_0/\lambda)\cos\theta_i}{[(\lambda_0/\lambda)^2 + (\lambda_0/\delta 2\pi)^2] + 2(\lambda_0/\lambda)\cos\theta_i + \cos^2\theta_i} \quad (2.167)$$

2.3.5. Ángulo de Brewster

A partir de las ecuaciones de Fresnel se puede estudiar la dependencia del coeficiente de reflexión R con respecto al ángulo de incidencia. En primer lugar se presentará el caso de medios no conductores y posteriormente se montarán en el caso de materiales conductores, analizando las diferencias aparecidas.

Para una incidencia rasante, $R_s = 1 = R_p$. Cerca de la incidencia rasante, la reflectancia es grande. Esta alta reflectancia es la causa de que un lago tranquilo se asemeje a un espejo. Para ángulos intermedios de incidencia, existen situaciones particularmente interesantes.

¿Podría darse un caso con reflectancia cero?. Si se tiene, $\theta_1 + \theta_2 = \pi/2$, entonces $\tan(\theta_1 + \theta_2)$ es infinito y la amplitud de la onda reflejada de polarización p es cero. Puesto que la polarización s , con el campo eléctrico perpendicular al plano

de incidencia, es parcialmente reflejada, la luz no polarizada incidente en un ángulo que satisfaga $\theta_1 + \theta_2 = \pi/2$, será polarizada por la reflexión. Según muestra la figura 2.45.

Figura 2.45: Curvas de reflexión R_s y R_p en un material no conductor. Fuente: [Reitz08]

La cantidad θ_B se conoce como Ángulo de Brewster, la relación de éste con los índices de refracción se conoce como ley de Brewster. A partir de la ley de Snell, se deduce que:

$$\tan \theta_B = \frac{n_1}{n_2} \quad (2.168)$$

En el caso de materiales conductores, el índice de refracción es un número complejo. En la gráfica de la figura se muestran los valores correspondientes para la plata y el níquel en función del ángulo de incidencia.

No hay ángulo de brewster en el cual R_p se anule, pero aún así R_p presenta un mínimo que siempre será menos que R_s . Se mantiene algo de polarización por reflexión.

2.3.6. Influencia del estado superficial en la Absorción

El acabado superficial es un factor clave en la propagación de la radiación electromagnética en la interfaz entre el vacío (o el aire) y las superficies metálicas tratadas.

En el caso del tratamiento de superficies metálicas obtenidas mediante las técnicas de conformado convencionales, mecanizado, laminación, forja, etc., la absorción

Figura 2.46: Curvas de reflexión R_s y R_p para la plata y el níquel. Fuente: [Reitz08]

por parte de la superfine libre de óxido se asume como la absorción propia de una superficie plana, cuyo valor viene dado por los coeficientes de absorción obtenidos mediante las ecuaciones de Fresnel.

Si bien la hipótesis de superficie completamente plana aporta resultados satisfactorios en una primera aproximación para la mayoría de los tratamientos superficiales con láser, existen diversos trabajos que analizan, pormenorizadamente, la problemática de las múltiples reflexiones experimentadas por la radiación láser en el seno de las rugosidades superficiales.

El trabajo de [Bergström08] es un tratado sobre la propagación de la radiación láser en el seno de las rugosidades superficiales de los metales. Los esquemas dados por las figuras 2.47, muestran la caracterización de la rugosidad superficial de un metal.

La caracterización geométrica de los caminos seguidos por la radiación permiten efectuar un balance energético. La figura 2.48 representa las distintas posibilidades de re-direccionamiento del haz láser al incidir sobre la superficie rugosa.

Figura 2.47: Caracterización de la rugosidad superficial propuesta por [Bergström08]

Figura 2.48: Caminos seguidos por la luz conforme a [Bergström08]

El scattering es considerado como el fenómeno principal en el comportamiento de la dispersión de la radiación incidente.

Los análisis efectuados permiten estimar la relación entre el coeficiente de abos-

roci3n superficial y la rugosidad del material tratado, tal y como se muestra en la figura 2.49.

Figura 2.49: Relaci3n entre la rugosidad superficial y la absorci3n establecida por [Bergstr3m08]

2.3.7. Influencia de una capa de 3xido superficial en la Absorci3n

El desarrollo de una capa de 3xido durante el proceso de Temple Superficial con L3aser, como consecuencia de una cin3tica de la reacci3n de oxidaci3n acelerada a raz3 de las elevadas temperaturas alcanzadas por el proceso, cuando este es llevado a cabo bajo una atm3sfera no protectora, da lugar al desarrollo de una capa de 3xido durante la interacci3n entre el haz l3aser y el material [Panstar04, Panstar06].

La capa de 3xido formada entre el haz l3aser y el material act3a como recubrimiento absorbente [Antonov08], incrementando el valor de la absorci3n con respecto al material base hasta en un 40 %. Este incremento tan significativo de la absorci3n se traduce en un efecto no lineal muy significativo que afecta a la evoluci3n espacio-temporal de las temperaturas y que consecuentemente debe ser tenido en cuenta ante cualquier calculo de los par3metros del proceso.

En el trabajo de [Panstar04] se lleva a cabo un estudio de la influencia de las variables del proceso sobre el incremento de absorci3n asociado al desarrollo de una capa de 3xido superficial, utilizando un l3aser de diodo. Como par3metros m3s significativos con influencia en el desarrollo de la capa de 3xido se tienen en cuenta la irradiancia del haz l3aser, el tiempo de interacci3n directamente relacionado con las dimensiones del haz y la velocidad del proceso, as3 como, el 3ngulo de incidencia entre el haz l3aser y la superficie tratada.

El material de trabajo considerado en el trabajo de [Panstar04] es el acero $42CrMo4$, coincidente con el material de trabajo utilizado en la presente Tesis Doctoral, cuyas principales propiedades de cara al proceso de Temple Superficial con Láser se muestran en la figura 2.50.

42CrMo4			Reference
Specific heat capacity, 100 °C	477	[J(kg °C) ⁻¹]	6
Specific heat capacity, 800 °C	883	[J(kg °C) ⁻¹]	6
M_s temperature	360	(°C)	7
A_{c1} temperature	730	(°C)	7
A_{c3} temperature (equilibrium)	789	(°C)	7

Figura 2.50: Propiedades del acero $42CrMo4$

La composición química del material de trabajo viene dada por la figura 2.51.

C	Si	Mn	P	S	Cr	Ni	Mo	W	V	Cu	Al
0.44	0.34	0.70	0.008	0.031	1.11	0.16	0.18	0.003	0.008	0.16	0.013

Figura 2.51: Composición del acero $42CrMo4$

La distribución transversal de energía se corresponde con un haz láser de 5,3 mm en la dirección transversal y 12,3 mm en la dirección perpendicular. La figura 2.52 representa esquemáticamente el haz láser utilizado.

Figura 2.52: Representación esquemática de la distribución transversal de potencia utilizada en [Panstar04]

El proceso para la caracterización del incremento de absorción asociado al desarrollo de una capa de óxido ha sido llevado a cabo mediante un proceso calorimétrico.

Se dispone de una cámara diseñada a tal efecto, aislada térmicamente del exterior, que recibe el calor absorbido por la pieza en función de las condiciones del proceso en un líquido formado por glycol. La figura 2.53 representa esquemáticamente el montaje experimental utilizado para la medición de la energía absorbida por el material durante el proceso de Temple Superficial con Láser.

Figura 2.53: Montaje experimental utilizado en [Panstar04]

La forma de operar con el montaje calorimétrico mostrado en la figura 2.53 se basa en los tiempo de proceso y los tiempos de transferencia de calor al medio que rodea la pieza de trabajo. Una vez que la pieza ha alcanzado su máxima temperatura, esta es introducida en el calorímetro. La transferencia de energía es completa cuando la temperatura del liquido y del material tratado se igualan.

Los resultados del trabajo llevado a cabo en [Panstar04] ponen de manifiesto la relación entre la densidad de energía del haz láser y la absorción, así como, entre el tiempo de interacción y el valor final del porcentaje de energía absorbida, con incrementos que varían entre el 46,0 % y el 71,8 %. La figura 2.54 muestra la evolución de la absorción en función de las propiedades del proceso.

El ángulo de incidencia entre el haz láser y la superficie del material no se ha visto como una variable con influencia significativa en el incremento de absorción asociado al desarrollo de una capa de óxido.

El efecto de distintos recubrimientos también ha sido estudiado en el trabajo de [Panstar04].

Figura 2.54: Resultados de la variación de la absorción en función de las propiedades del proceso obtenidos en [Panstar04]

La figura 2.55 muestra la influencia de cada uno de los recubrimientos, en función de la velocidad del proceso.

Figura 2.55: Variación del incremento de absorción en función de la velocidad del proceso obtenido en [Panstar04]

El trabajo de [Iordanova08] acomete un estudio sobre el desarrollo de la película de óxido superficial en el caso de irradiación del acero con láser, considerando la influencia de la micro-estructura original del material, así como, el efecto de la película de óxido sobre la absorción de radiación láser.

En un primer lugar, se tiene en cuenta el proceso de conformado del material, considerando los casos de "laminado en frío", "laminado en caliente" "laminados en frío y recocidos". La microestructura resultante en ambos casos, correspondiente a un acero de bajo contenido en carbono es principalmente ferrítica, con algunos granos de perlita. Mientras que en el caso de las muestras preparadas por laminación en frío la estructura granular presenta una textura alargada, en los otros dos casos los granos ofrecen una disposición equi-axial, con un tamaño entre $14 \mu m$ y $20 \mu m$.

La ley utilizada para el cálculo del desarrollo de la película de óxido viene dada por la ecuación (2.169).

$$\frac{h_{ox}}{dt} = \frac{f/h_{ox}e^{-T_d/T}}{1 + \mu f/h_{ox}e^{-T_d/T}} \quad (2.169)$$

Donde el coeficiente μ viene dado por la ecuación (2.170).

$$\mu = \frac{r_{ef}}{D_{O_2}} \frac{\rho'_{O_2}}{\rho_{O_2}} \quad (2.170)$$

El término h_{ox} representa el espesor instantáneo de la capa de óxido. f representa la constante cinética de la reacción de oxidación, T es la temperatura instantánea durante el transcurso de la reacción. El término T_d representa la temperatura de activación del proceso de difusión, r_{ef} representa el radio de interacción del lugar en el que la reacción está teniendo lugar. Por su parte D_{O_2} representa el coeficiente de difusión de las moléculas de oxígeno en el aire. ρ_{O_2} y ρ'_{O_2} representan las densidades del oxígeno en el aire y en el óxido formado, respectivamente.

A partir de la ecuación (2.170) se puede ver que durante las primeras etapas del proceso de oxidación, se cumple la inoculación $\mu f/h_{ox}e^{-T_d/T} \gg 1$ y por lo tanto el crecimiento de la capa de óxido puede describirse por la ecuación (2.171).

$$\frac{dx}{dt} = \frac{1}{\mu} \quad (2.171)$$

A partir de la ecuación (2.171) puede verse que, durante las etapas iniciales, el crecimiento de la capa de óxido no depende de la micro-estructura inicial, sino de la tasa de suministro de oxígeno a la reacción. Sin embargo, en etapas más avanzadas de la oxidación la influencia de la micro-estructura es obvia. Este comportamiento

está asociado a que durante las etapas iniciales del proceso la influencia de las condiciones superficiales es mucho más significativa que la de la micro-estructura.

La influencia de la película de oxido en la absorción viene dada por la ecuación (2.172).

$$A(x) = 1 - (1 - A_M) \exp \left(-2 \frac{4n_o'' h_{ox}}{\lambda} \right) \quad (2.172)$$

En la ecuación (2.172) A_M es el coeficiente de absorción del sustrato, λ representa la longitud de onda de la radiación incidente, mientras que n_o'' es la parte imaginaria del índice de refracción ($\hat{n}_o = n_o' + n_o''$).

Los resultados experimentales, de la medición por difracción de rayos x de las muestras tratadas, ponen de manifiesto la composición superficial obtenida, tal y como se muestra en la figura 2.56.

Figura 2.56: Caracterización, por difracción de rayos x, de la composición superficial de las piezas tratadas en [Iordanova08]

Los diferentes análisis difractométricos permiten establecer la composición de la capa de óxido formada, a lo largo de su evolución, revelando la presencia de diferentes óxidos de hierro. Particularmente, se encuentra una capa de FeO , durante las etapas iniciales de formación del óxido, seguida de una capa de Fe_3O_4 una vez que ésta ha alcanzado un determinado espesor. La figura 2.57 representa esquemáticamente la estructura del óxido desarrollado durante el tratamiento con láser.

Finalmente, a partir de la caracterización experimental del óxido, y mediante la utilización de los modelos de absorción presentados en el artículo, se obtiene la curva que asocia la absorción con el espesor de la película de óxido, tal y como se muestra en la figura (2.58).

Figura 2.57: Estructura de la capa de óxido formada en [Iordanova08]

Figura 2.58: Resultados de la absorción frente a el espesor de capa de óxido obtenido en [Iordanova08]

2.3.8. Cinética de la oxidación en condiciones alejadas del Equilibrio

El libro de [Huerta97] contiene un compendio de las propiedades que caracterizan el proceso de oxidación bajo condiciones de elevada temperatura como las que tienen lugar en el proceso de Temple Superficial con Láser.

Desde un punto de vista termodinámico las reacciones de oxidación térmica de metales están favorecidas termodinámicamente puesto que transcurren con variaciones de energía libre de Gibbs ΔG^0 negativos prácticamente a cualquier temperatura. La figura 2.59 muestra esta variación de energía libre en función de la temperatura para los principales óxidos metálicos.

Figura 2.59: Diagrama de Hellinghan con la variación de energía libre de Gibbs en función de la temperatura para los principales óxidos metálicos. Fuente [Huerta97]

Las funciones mostradas en la figura 2.59 son el resultado de la aplicación de la función termodinámica dada por la ecuación (2.173).

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0 \quad (2.173)$$

Donde los términos ΔH^0 y ΔS^0 representan respectivamente, los cambios de entalpía y entropía estándar originadas como consecuencia de la formación de óxido, por reacción del metal con un mol de oxígeno.

Como el intervalo de temperaturas comprendido entre la ambiente y la correspondiente al punto de fusión del metal, ΔG^0 es negativo para la mayor parte de los materiales metálicos, la reacción de corrosión a alta temperatura tendrá siempre tendencia termodinámica a producirse, y su cinética será tanto más acelerada cuanto mayor sea la temperatura del proceso.

Tras la formación de una primera película de óxido sobre la superficie metálica, ésta ejerce un efecto protector que protege el metal base del oxígeno atmosférico corrosivo. La continuación de la reacción de oxidación requiere algunas etapas adicionales, conforme a [Huerta97].

1: En la interfase metal-óxido:

- Salida de catión metálico e incorporación a la capa incipiente de óxido.
- Tránsito de electrones a través de la película de óxido desde la interfase metal/óxido a la interfase metal/atmósfera como consecuencia de la diferencia de potencial entre ambas interfases

2: En la interfase óxido-atmósfera:

- Ionización de la molécula de oxígeno

3: A través de la capa de óxido:

- Tránsito por difusión como consecuencia del gradiente de concentración del catión, desde la interfase metal-óxido hacia la interfase óxido-atmósfera, y/o tránsito del anión (O^{2-}) desde la interfase óxido-atmósfera a la interfase metal-óxido, como consecuencia de los correspondientes gradientes de concentración, para que entren en contacto y pueda tener lugar la formación de una nueva molécula de óxido.

A partir de las consideraciones anteriores, la formación del óxido será más difícil cuantas más dificultades tenga la conducción de electrones a través de la película, y cuanto más difícil sea la conductividad de iones a través de la misma. Consecuentemente, las aleaciones con resistencia a corrosión a elevada temperatura serán aquellas capaces de generar, en las condiciones de operación, películas protectoras, es decir, de baja conductividad iónica o electrónica.

Uno de los aspectos fundamentales a la hora de caracterizar el desarrollo de la película de óxido durante el proceso de Temple Superficial con Láser es la cinética de la propia reacción de oxidación. La cinética química se centra en el estudio de la evolución temporal de las reacciones químicas, y permite, por lo tanto, conocer la evolución temporal de las mismas.

Conforme a [Otero08] existen varias funciones matemáticas existen, fundamentalmente, cuatro tipos de leyes matemáticas para relacionar la cantidad de material oxidado, y , con el tiempo durante el cual la ecuación esta transcurriendo.

La conocida como ley lineal viene dada por la ecuación (2.174):

$$h_{Ox} = K_1 t \tag{2.174}$$

La conocida como ley parabólica viene dada por la ecuación (2.175):

$$h_{Ox}^2 = K_2 t \quad (2.175)$$

La conocida como ley logarítmica viene dada por la ecuación (2.176):

$$h_{Ox} = K_3 \ln t \quad (2.176)$$

La conocida como ley parabólica viene dada por la ecuación (2.177):

$$h_{Ox} = K_4(1 - e^{K_5 t}) \quad (2.177)$$

La cuestión que se plantea es cuál de estas leyes es la que mejor se ajusta a los fenómenos que tienen lugar durante el proceso de Temple Superficial con Láser.

La figura 2.60, muestra una representación esquemática de cada una de estas funciones.

Figura 2.60: Representación esquemática de las leyes de oxidación. Adaptado de [Huerta97]

La modelización lineal, ecuación (2.174) implicaría que la velocidad de crecimiento de la película de óxido se mantiene constante sea cual sea el espesor alcanzado,

$$(dy/dt = Kl)$$

Esto conllevaría a su vez, que el material oxidado no supone impedimento alguno a la progresión del proceso de oxidación. Estas condiciones son solo posibles si la capa de material oxidado desaparece inmediatamente después de su formación, permitiendo constantemente el contacto entre el oxígeno y la superficie tratada. Este comportamiento es característico de las aleaciones con base Mo, V, o Nb, pero no en el caso del acero.

La utilización de una ley de oxidación de tipo asintótico llevaría a situaciones en las que el crecimiento de la película estaría limitado a un valor máximo, de modo que la película formada permaneciese íntegra, aislando completamente el acero del oxígeno. En la práctica se comprueba que esta situación tampoco es característica del óxido formado en el Temple Superficial con Láser, pues la película de óxido tiende a agrietarse, permitiendo el contacto del material sin oxidar con el oxígeno ambiental.

El comportamiento logarítmico, el cual tiene lugar en un intervalo de temperaturas en torno a 200 °C también conforme a [Otero12] está asociado a una velocidad de oxidación lenta debido a la baja difusividad iónica a esas temperaturas. Sin embargo las elevadas velocidades de calentamiento características de los procesos con láser hacen pensar que la contribución del comportamiento logarítmico a la capa de óxido formada pueda considerarse despreciable.

Por consiguiente, en la práctica solo cabe la posibilidad de observar un comportamiento logarítmico o parabólico. Debido a todas las consideraciones anteriores la ley cinética adoptada para modelizar la oxidación que tiene lugar durante el Temple Superficial con Láser debe ser una ley tipo parabólico, ecuación (2.175).

La variable que más influencia tiene sobre la cinética de la reacción de oxidación es la temperatura. La expresión para la constante cinética de la ley parabólica viene dada por la ecuación (2.178).

$$K_P = \frac{F_f \cdot e^{\frac{E_a}{RT}}}{\rho} \quad (2.178)$$

En la ecuación (2.178) F_f , representa lo que se conoce como factor de frecuencia, E_a , es lo que se conoce como energía de activación de la reacción, R es la constante universal de los gases ideales y ρ la densidad del óxido. Esta definición de la constante cinética permite expresar directamente en resultado de la ecuación (2.175) directamente en unidades de longitud.

La energía de activación de una reacción química puede definirse como la energía mínima por unidad de materia para que pueda iniciarse dicha reacción [Avery,02].

El factor de frecuencia determina la tasa de crecimiento de la película de óxido una vez que la reacción ha superado la fase de iniciación. Introduciendo la ecuación (2.178) en la (2.175), y haciendo la derivada del espesor de película respecto al tiempo se llega a la ecuación (2.179).

$$\frac{dy}{dt} = \frac{1}{2\sqrt{\frac{F_f e^{E_a/RT(t)}}{\rho^2}}} \frac{F_f e^{E_a/RT(t)}}{\rho^2} \frac{dT}{dt} \quad (2.179)$$

Analizando la ecuación (2.179) se advierte que dy/dt aumenta cuanto mayor es el valor de F_f , y por lo tanto, una vez fijado el valor de la energía de activación, asumiendo que el valor de dT/dt es una consecuencia del proceso y que la densidad del óxido es constante, queda el factor de frecuencia como único factor que condiciona el crecimiento de la capa de óxido. En la ecuación de Arrhenius el factor de frecuencia representa la frecuencia de colisiones entre átomos durante el transcurso de la reacción química [Avery82].

2.4. Modelos específicos de interacción láser materia en procesos de Temple Superficial

Uno de los aspectos fundamentales en el modelado del proceso de Temple Superficial con Láser radica en la descripción matemática del haz láser, a la hora de introducirlo como fuente térmica en los modelos del proceso.

Una de las características más importantes en la definición de la distribución energética espacial del haz láser es su capacidad para crear un perfil de transformación uniforme a lo largo de toda la superficie tratada y de la anchura necesaria para evitar la necesidad de pasadas adyacentes sucesivas, asociadas a una problemática específica, relacionada con el revenido de las micro-estructuras originadas en las pasadas previas, como se verá en el capítulo correspondiente.

El trabajo de [Hagino10] utiliza la técnica de holograma generado por ordenador (*Computer generated hologram, CGH*), como medio para la definición de un haz láser capaz de generar un perfil de transformación uniforme a lo largo de un espesor de dimensiones relativamente grandes (hasta 4 mm), tras una optimización geométrica previa por el método de los elementos finitos.

La figura 2.61 representa esquemáticamente el montaje experimental que permite la consecución de un haz láser de distribución energética espacial controlada.

Figura 2.61: Esquema experimental para la obtención de un holograma generado por ordenador utilizado en [Hagino10]

Las ecuaciones que permiten configurar la geometría del haz láser customizado, comienzan con la convolución dada por la integral de la ecuación (2.180).

$$I(x, y) = \int \int D(X, Y) C(x - X, y - Y) dX dY \quad (2.180)$$

En la ecuación (2.180) el término $C(X, Y)$ el perfil del haz láser al final de la fibra óptica, dado por la ecuación (2.181).

$$C(X, Y) = \begin{cases} I_0 & \text{si } \sqrt{x^2 + y^2} \leq 0,5mm \\ 0 & \text{si } \sqrt{x^2 + y^2} > 0,5mm \end{cases} \quad (2.181)$$

En la ecuación (2.180) el término $D(X, Y)$ representa un patrón plano asociado a un holograma generado por computador, dado por la ecuación (2.182).

$$D(X, Y) = \begin{cases} \delta(x) \left(\frac{a}{2}y + b \right) & \text{si } |y| < 2mm \\ 0 & \text{si } |y| > 2mm \end{cases} \quad (2.182)$$

Mediante el proceso asociado a las ecuaciones (2.180)-(2.182) se obtiene el perfil con forma de M, como se muestra en la figura 2.62.

Figura 2.62: Descripción del proceso para la generación de un haz láser customizado obtenido en [Hagino10]

Figura 2.63: Perfil de transformación calculado en [Hagino10] en función de los parámetros del haz láser

Controlando los parámetros geométricos del patrón es posible la definición de una zona transformada uniforme, tal y como se muestra en la figura 2.63.

El trabajo de [Leung05] realiza un estudio analítico de la transferencia de calor para un haz láser uniforme móvil sobre la superficie del material tratado, comparando los resultados teóricos con experimentos llevados a cabo con un montaje destinado a la obtención de un haz láser customizado.

La figura 2.64 muestra, esquemáticamente, el proceso estudiado en [Leung05].

Figura 2.64: Proceso de Temple Superficial con Láser simulado en [Leung10]

La situación representada en la figura 2.64 se corresponde con una distribución uniforme calentando una plancha de material estacionaria. Debido a las dimensiones predominantemente transversales del haz láser pueden despreciarse las dimensiones longitudinales con lo que el problema puede estudiarse sobre un dominio bidimensional.

Bajo las condiciones de haz uniforme y dominio bidimensional, el balance energético para el problema estudiado, viene dado por la ecuación (2.183).

$$\nabla^2 T + \sum_{j=a,b} \frac{\rho L_k}{k} v_{n,j} \delta(n'' - n_j'') = \frac{1}{\alpha} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.183)$$

En la ecuación (2.183) el término v hace referencia a la velocidad de translation del haz láser, los términos n se corresponden con la posición del mismo en cada instante. El haz gaussiano original es customizado a su distribución plana mediante la técnica conocida como *Diffractive Optical Kinoform* (DOK), mediante el patrón generado que se muestra en la figura 2.65.

Pattern dimensions: 35mm x 35mm

Figura 2.65: Diffractive Optical Kinoform generado en [Leung10]

2.5. Tratamiento de grandes superficies: Pasadas Sucesivas

El tratamiento de temple superficial con láser en el que la superficie de la región templada es mayor que las dimensiones del haz láser ha sido objeto de análisis por parte de distintos autores.

El trabajo de [Lakhar08] analiza el proceso de Temple Superficial con Láser mediante pasadas sucesivas para el acero AISI 4140, mediante el uso de relaciones cinéticas para calcular la fracción de martensita creada en una primera pasada que es disuelta por la pasada zona de afectación térmica de la pasada adyacente mediante el uso de relaciones cinéticas.

En dicho trabajo se resuelven los ciclos térmicos de un proceso de Temple Superficial con Láser como dados de entrada para el cálculo de la difusión del carbono en la red de austenita. La figura 2.66 muestra una representación esquemática del proceso considerado.

Figura 2.66: Representación esquemática del proceso considerado en [Lakhar08]

El proceso de austenización es calculado a partir de la distancia recorrida por los átomos de carbono, según la ecuación (2.184).

$$L\lambda = 2 \int_{t_1}^{t_2} D_0 \exp\left(\frac{-Q}{RT(t)}\right) dt \quad (2.184)$$

En la ecuación 2.184 el término D es el coeficiente de difusión, L representa el radio de la colonia de perlita, mientras que λ es la distancia media entre placas en la colonia de perlita.

El cálculo del coeficiente de difusión viene dado por la ecuación (2.185).

$$D_v(T) = D_{0v} \exp\left(\frac{Q_v}{RT}\right) \quad (2.185)$$

En la ecuación (2.185) el término D_{0v} representa el coeficiente pre-exponencial de difusión, Q_v es la energía de activación de la fase v correspondiente, mientras que R es la constante universal de los gases ideales.

Mediante la utilización de la ley de Fick, en combinación con las consideraciones micro-estructurales dadas por las ecuaciones (2.184)-(2.185), permite obtener mapas de transformación para procesos sencillos sobre geometrías regulares.

La figura 2.67 muestra el perfil de durezas calculado por [Lakhar08] para distintas distancias de solapamiento.

La figura 2.68 da cuenta del efecto significativo de la zona afectada térmicamente asociada a una segunda pasada sobre la dureza generada en la pasada adyacente anterior.

También la metodología propuesta en [Lakhar08] permite la obtención de mapas de transformación como el mostrado en la figura 2.68.

Conforme a los resultados mostrados en la figura 2.68, la mayor parte de la martensita generada en la primera pasada sufre un recocido de baja temperatura, aunque, existe una parte considerable, en los contornos de la zona inicialmente templada, que se ha disuelto completamente dando lugar a la obtención de material base ferrítico/perlítico.

Las comprobaciones experimentales avalan la validez de la metodología propuesta por [Lakhar08] para el caso de geometrías sencillas y condiciones de proceso simples. La figura 2.69 muestra el proceso experimental con las condiciones simuladas para la simulación de las pruebas mostrada en la figura 2.68.

Figura 2.67: Perfil de durezas calculado por [Lakhar08]

Figura 2.68: Mapa de transformación obtenido en [Lakhar08]

Las distintas zonas destacadas en la figura 2.69 se corresponden con a): ferrita y perlita, b): martensita, c): zona de transición, d) martensita recocida y e): martensita pura mezclada con martensita recocida en la zona de transición.

El trabajo de [Tani08] nuevamente estudia el proceso de Temple Superficial con Láser mediante pasadas sucesivas utilizando nuevamente ecuaciones de difusión para el cálculo de la fracción volumétrica de material transformado, así como, relaciones semi-empíricas considerando las distintas fases micro-estructurales, para el cálculo del perfil de durezas resultante.

Figura 2.69: Resultados experimentales obtenidos por [Lakhar08]

La figura 2.70 muestra la variación de dureza predicha en el trabajo de [Tani08] como función de la temperatura de recocido.

Figura 2.70: Variación de dureza en función de la temperatura de recocido propuesta por [Tani08]

La figura 2.71 muestra la comparación entre los resultados predichos por el modelo de [Tani08] con las mediciones de dureza experimentales.

La comparación también se ha efectuado en la dirección de la profundidad, tal y como se ilustra en la figura 2.72.

Figura 2.71: Comparación teórico/expeimental efectuada en el trabajo de [Tani08]

Figura 2.72: Comparación teórico/expeimental efectuada en el trabajo de [Tani08] en la dirección de la profundidad

Tanto los trabajos de [Lakhar08] como de [Tani08] han mostrado el interés del proceso de temple superficial con pasadas sucesivas. Mientras que el uso de la ley de Fick para calcular la fracción de asutenita transformada y la fracción de martensita disuelta, la necesidad de elevados recursos computacionales limita su aplicabilidad realista, al igual que la falta de un enfoque hacia el diseño del proceso, imprescindible en cualquier aplicación industrial del mismo.

Capítulo 3

Desarrollo y síntesis de una metodología original para la modelización del proceso de Temple Superficial con Láser de aceros Cr-Mo

El presente capítulo realiza un recorrido exhaustivo por las diferentes etapas en la elaboración de un modelo completo del proceso de Temple Superficial por Láser. En primer lugar, se abordarán las características constitutivas de los componentes cuyo proceso de temple se pretende analizar. Dichos componentes serán componentes provenientes del ámbito industrial, donde el proceso de Temple Superficial con Láser estará orientado al cumplimiento de unos determinados requisitos de diseño intrínsecos al funcionamiento del mismo, como, por ejemplo, un determinado perfil de durezas bajo la superficie, un determinado ciclo de vida o, incluso, condiciones específicas de acabado y recubrimiento superficial.

Los distintos montajes experimentales para la realización práctica del proceso, llevados a cabo tanto en las instalaciones de la empresa Etxe-Tar como en el Centro Láser de la Universidad Politécnica de Madrid, se presentarán como justificación a las características del proceso, tales como, potencias y velocidades, y, especialmente, como introducción a diseño del haz láser orientado a la consecución de un perfil de transformación martensítica adecuado, conocido como fuente equivalente de potencia.

Las ecuaciones constitutivas de los fenómenos físicos relevantes en el proceso de Temple Superficial con Láser, serán presentadas, indicando todos los aspectos nece-

sarios para la definición del modelo. La geometría real de los componentes tratados se traducirá en un diseño CAD que a su vez constituirá el dominio geométrico sobre el que se integrarán las mencionadas ecuaciones constitutivas. El compromiso entre diseño del dominio de integración y su realismo se presentará como un problema central del modelado, en el que las decisiones al respecto serán función de la especificaciones propias del modelo. Del mismo modo, e intrínsecamente asociado al diseño de los dominios de integración, se haya la discretización de los mismos para su posterior resolución numérica por el método de los elementos finitos. Nuevamente, en este contexto, surge un ejercicio de compromiso entre el realismo de la representación de los contornos y los recursos computacionales necesarios para la resolución numérica del problema.

La ecuación general de transferencia de calor controlará el fenómeno por el cual la irradiancia del haz láser, aplicada sobre la superficie del material, da lugar a unos determinados ciclos térmicos, los cuales, a su vez, serán analizados como la fuerza motora de las transformaciones metalúrgicas perseguidas por el proceso. Las propiedades termo-físicas del material, conductividad térmica, calor específico, densidad, y difusividad térmica, se revelarán como aspectos clave para la sensibilidad en la predicción de la evaluación espacio temporal de las temperaturas. Esta circunstancia pondrá de manifiesto la necesidad de una correcta estimación de las mismas en todo el rango de temperaturas a lo largo del cual tendrá lugar la operación del proceso. Se presentarán las distintas tecnologías y técnicas disponibles para la estimación de dichas propiedades térmicas, así como, los valores adoptados para el material de trabajo en la realización de los cálculos.

Junto con las ecuaciones constitutivas, es necesario especificar condiciones de contorno, relativas a la variable calculada que es la temperatura, o a los flujos de la misma, en los contornos del volumen tridimensional que hace las veces de dominio de integración.

Uno de los aspectos clave para la precisión en el cálculo de la evolución espacio-temporal de la temperaturas experimentado por el material es la absorción efectiva de energía por parte del mismo del total de energía suministrada por el haz láser, en forma de irradiancia. Dicha absorción viene determinada tanto por la naturaleza electromagnética que caracteriza la interacción entre el haz láser y la superficie del material, asumida como perfectamente plana, como por, el estado real de la superficie, en términos de rugosidad y de oxidación.

La reacción de oxidación que tiene lugar en la superficie de las piezas tratadas en una atmósfera no protectora, ha sido caracterizada, bajo la hipótesis de que dicha reacción transcurre en condiciones alejadas del equilibrio debido a la elevada velocidad de calentamiento asociada al proceso de Temple Superficial con Láser. De este modo, los parámetros cinéticos de la reacción de oxidación, energía de activación y factor de frecuencia, han sido ajustados mediante un proceso teórico-experimental, con pruebas asociadas a distintas velocidades de calentamiento.

La asociación entre un determinado espesor de recubrimiento de óxido y el correspondiente incremento de absorción ha sido planteado mediante el análisis de la propagación de la luz en el seno del material poroso. De esta forma se ha desarrollado una relación matemática, que permite su integración de forma sencilla en el modelo térmico, dando lugar a un enfoque acoplado temperaturas-oxidación del proceso de Temple Superficial con Láser.

La precisión perseguida en el cálculo de la evolución espacio-temporal de las temperaturas tiene como principal objetivo el uso de dichos ciclos térmicos en el cálculo de las transformaciones metalúrgicas que tienen lugar durante el proceso.

El cálculo de las transformaciones metalúrgicas se centra en la determinación de la fracción de austenita obtenida como consecuencia del calentamiento del material de trabajo, y en la posterior transformación del material austenizado en martensita. La combinación de ciclos térmicos realistas asociados a un alto nivel de precisión, en conjunción con una ley cinética asociada al cambio de fase del material base, ferrita/perlita, en austenita, permiten superar a los modelos basados en los diagramas de equilibrio hierro-carbono para la predicción de las transformaciones durante el calentamiento. La ley cinética utilizada es la conocida como ley de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov, con parámetros cinéticos ajustados para el material de trabajo, utilizando, de forma novedosa, ciclos térmicos realistas, discretizados adecuadamente mediante el propio ajuste de la simulación numérica.

Finalmente, para el cálculo de las transformaciones durante el enfriamiento y particularmente para el cálculo de la fracción obtenida de martensita se han utilizado los diagramas conocidos como *Continuous Cooling Time* (diagramas de enfriamiento continuo), obtenidos experimentalmente para el material de trabajo, teniendo en cuenta la temperatura máxima alcanzada en el tamaño de grano austenítico, y consecuentemente, en los tiempos característicos de aparición de los productos de la transformación no isoterma de austenita.

3.1. Aplicación de modelos semi-analíticos a la obtención de ventanas de trabajo

Las ecuaciones proporcionadas tanto por el modelo de Ashby y Easterling como por el modelo de Miyamoto y Maruo, ecuaciones (2.6)-(2.19), pueden particularizarse para unas condiciones de proceso o un material concreto, obteniendo diagramas característicos para una determinada aplicación. A modo de ejemplo, seleccionando como material de trabajo el acero AISI 4140 (42CrMo4 acorde con la designación europea), la representación gráfica de la relación entre algunas variables del proceso puede ser representada. Sin pérdida de generalidad de la metodología y a modo de ejemplo se ha seleccionado un material cuyas propiedades termo-físicas son las siguientes:

- Conductividad térmica, $\kappa = 30 \text{ W/mK}$
- Calor específico, $C_p = 665 \text{ J/kgK}$
- Densidad, $\rho = 7550 \text{ kg/m}^3$
- Difusividad térmica, $\chi = 5,98 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$

Como temperatura de temple se ha considerado $A_{c3} = 900 \text{ }^\circ\text{C}$, según el diagrama de equilibrio, así como, para la temperatura de fusión, $T_F = 1415 \text{ }^\circ\text{C}$.

La figura 3.1 representa un diagrama adimensional Q^* frente a V^* , con la condición de que la superficie alcance la temperatura de temple, $T(z=0) = A_{c3}$, para diferentes radios de haz, $r_B = 1, 2, 5, 7$ y 10 mm ; valores típicos para el tamaño del haz láser en este tipo de procesos.

El diagrama de la figura 3.1 muestra la dependencia entre Q^* y V^* , independientemente del material. Para cualquier tamaño de haz, cuanto más rápido es el proceso, mayor debe ser la potencia para mantener constante la temperatura superficial. De la misma manera, cuanto mayor sea el radio de haz, mayor debe ser la potencia.

Si la 3.1 se particulariza para un material determinado, se convierte en un diagrama dimensional con gran interés práctico. La 3.2 contiene un diagrama V frente a Q para el acero 42CrMo4 con un radio del haz, $r_B = 5 \text{ mm}$. Muestra las funciones correspondientes para alcanzar la temperatura de temple en $z = 0$ (la superficie), $z = 0,5$ y $z = 1 \text{ mm}$, respectivamente.

Figura 3.1: Potencia adimensional, Q^* vs. velocidad adimensional, V^* para diferentes radios de haz, condicionado a alcanzar temperatura de temple en la superficie

Figura 3.2: Potencia vs. velocidad con, $r_B = 5$ mm, para alcanzar temperatura de temple en $z = 0, 0,5$ y 1 mm

Nuevamente es fácil advertir la dependencia entre V y Q . Cuando la profundidad objetivo se incrementa, la potencia necesaria para una misma velocidad aumenta

también. En los casos de $z = 0$ y $0,5 \text{ mm}$ la relación entre potencia y velocidad se mantiene casi lineal, sin embargo, a medida que la profundidad aumenta esta relación tiende a un comportamiento exponencial, como puede comprenderse fácilmente observando la ecuación (2.11), donde la profundidad, z , aparece en el término exponencial.

Relacionando otras variables del proceso se pueden obtener diagramas más completos. La figura 3.3 muestra la intensidad del haz en función del tiempo de interacción, t_{int} , con diferentes condiciones de temperatura y radios de haz, $r_B = 5$ y 7 mm , para dos profundidades típicas de tratamiento, $0,5$ y 1 mm .

Figura 3.3: Intensidad vs. tiempo de interacción para varias profundidades $z = 0; 0,5$ y 1 mm con $r_B = 5$ y 7 mm

El diagrama puede emplearse como una herramienta de diseño por sí mismo. Para una profundidad deseada (en este caso $0,5$ ó 1 mm), las combinaciones adecuadas de I y t_{int} serán aquellas que, estando contenidas en la curva correspondiente a la profundidad deseada, permanezcan por debajo de la curva asociada a la fusión superficial para el radio de haz utilizado.

Las figuras 3.4 y 3.5 muestran dos diagramas contruidos usando el modelo de Miyamoto y Maruo para una fuente rectangular, según las ecuaciones (2.19) y (2.18). La figura 3.4 muestra la profundidad templada en función de la velocidad de proceso para diferentes tamaños de haz, $a = 1; 2; 5; 7; 8 \text{ mm}$, $b = 5 \text{ mm}$ en todos los casos. La figura 3.5 muestra la temperatura superficial en función de la velocidad de proceso, también para diferentes tamaños de haz. En ambos casos, la potencia del láser es, $Q = 3 \text{ kW}$.

Figura 3.4: Espesor templado, z_h vs. velocidad, V , para diferentes tamaños de haz con una potencia de $Q = 3 \text{ kW}$

Figura 3.5: Temperatura superficial, $T(z = 0)$ vs. velocidad, V , para diferentes tamaños de haz con una potencia de $Q = 3 \text{ kW}$

Para unas características determinadas del proceso y una profundidad deseada, las figuras informan sobre la posibilidad de llevar a cabo el proceso, y si éste es posible, proporcionan el intervalo de velocidad en la que el proceso cumple las especificaciones.

Una vez establecidas la potencia, el tamaño de haz y la profundidad de tratamiento deseada (en este caso $Q = 3 \text{ kW}$, $r_B = 5 \text{ mm}$ y $z_h = 1 \text{ mm}$ respectivamente), partiendo de z_h en el eje de abscisas, el valor correspondiente sobre la curva se determina fácilmente como en la figura 3.4. Ahora, este valor, se proyecta nuevamente sobre el eje de ordenadas obteniéndose el valor de la velocidad. Esta es la velocidad

de proceso que conduce a la profundidad deseada. Se trata de la velocidad máxima, V_{Max} , si el proceso transcurriese más rápido la profundidad sería menor. Sin embargo, puede que la velocidad obtenida llegue a producir fusión superficial.

La figura 3.5 permite comprobar si un valor de velocidad produce fusión superficial. Procediendo de una manera similar, la temperatura de fusión del material debe ser proyectada desde el eje de abscisas hasta la curva correspondiente, y desde allí, al eje de ordenadas. El valor obtenido, V_{Min} , puede considerarse como la velocidad mínima. Si el proceso fuese más lento, daría lugar a la fusión de la superficie. Ahora, los valores de V_{Max} y V_{Min} deben compararse. Hay dos posibilidades:

1. Si $V_{Min} > V_{Max}$ el proceso no es factible. La velocidad V_{Max} daría lugar a la fusión de la superficie material.
2. Si $V_{Min} < V_{Max}$ el proceso es factible. La ventana de trabajo quedaría determinada entre V_{Min} y V_{Max} .

A modo de ejemplo para desarrollar las figuras 3.4 y 3.5, considérese un proceso que utiliza un haz rectangular y tiene las siguientes características:

- Potencia absorbida, $Q = 3 \text{ kW}$
- Objetivo de profundidad templada, $z_h = 1 \text{ mm}$
- Haz rectangular, con parámetro geométrico, $a = 5 \text{ mm}$
- Temperatura de temple, $Ac_3 = 900 \text{ }^\circ\text{C}$
- Temperatura de fusión, $T_M = 1415 \text{ }^\circ\text{C}$

En la 3.4, desde el eje de ordenadas, el punto correspondiente a 1 mm debe proyectarse sobre la curva para $a = 5 \text{ mm}$ (marcada con triángulos), y entonces, proyectar nuevamente sobre el eje de abscisas (siguiendo las flechas). El punto marcado sobre el eje es, $V_{Max} = 600 \text{ mm/min}$. Si la velocidad fuese mayor, la profundidad de 1 mm templado nunca podría ser alcanzada.

Considérese ahora la 3.5, empezando desde el eje de ordenadas con la temperatura de fusión, y proyectando de nuevo sobre la curva, y desde ella sobre el eje de ordenadas, el punto obtenido ahora es, $V_{Min} = 500 \text{ mm/min}$. Si el proceso fuese más lento la superficie se fundiría.

Puesto que $V_{Max} = 600 > V_{Min} = 500$ (mm/min), el proceso es factible y la ventana de trabajo queda:

$$500 < V < 600 \text{ (mm/min)}$$

Sin embargo, para la mayoría de situaciones una ventana de trabajo no aporta la precisión requerida por la aplicación particular. Tanto la predicción de los cursos espacio-temporales de las temperaturas, como el cálculo del espesor alcanzado por las transformaciones metalúrgicas, con niveles de precisión aceptables, en muchas de las aplicaciones industriales del proceso, necesita de una consideración más realista del mismo.

Una geometría realista, así como, propiedades termo-físicas del material dependientes de la temperatura, implican la utilización de métodos numéricos para resolver la conducción del calor en el material. La sección 2.2 ofrece una introducción a los trabajos proponen soluciones basadas en el método de los elementos finitos.

3.2. Piezas para un modelo realista por elementos finitos

La pieza sobre la que se va a aplicar el proceso de Temple Superficial con Láser son los apoyos y las muñequillas del cigüeñal de un motor alternativo de automoción. La figura 3.6 muestra un ejemplo del tipo de pieza que ha sido objeto de modelado.

Figura 3.6: Ejemplo ilustrativo del cigüeñal de un motor alternativo de automoción de 4 cilindros

Los apoyos y muñequillas de este tipo de pieza al desgaste por rozamiento con el bloque del motor sobre el que se sustenta el cigüeñal, así como, las cargas cíclicas derivadas de las explosiones de combustible en la cámara de combustión transmitidas

a través de las bielas. La figura 3.7 da cuenta de el tipo de esfuerzos soportados por el cigüeñal.

Figura 3.7: Diagrama de desplazamientos, velocidades y aceleraciones transmitidas al cigüeñal a través de las bielas. Fuente[Ujía12]

Del análisis de cargas aplicadas sobre la pieza de trabajo se deduce la necesidad de un tratamiento que mejore la resistencia superficial y la dureza de apoyos y muñequillas, al mismo tiempo que mantiene la tenacidad original del material de base para soportar cargas de impacto.

La figura 3.8 representa esquemáticamente el cigüeñal de un motor alternativo indicando las partes correspondientes con las muñequillas y los apoyos.

Figura 3.8: Representación esquemática de un cigüeñal, indicando apoyos y muñequillas. Fuente [Ujía12]

Una característica importante tanto de apoyos como de muñequillas, y que tendrá influencia durante el tratamiento de Temple Superficial con Láser, es la presencia necesaria de un agujero para la circulación del aceite interior de lubricación, que a efectos del tratamiento dará lugar a una región de concentración térmica. La figura 3.9 muestra una vista de detalle del agujero de engrase de muñequillas y apoyos.

Figura 3.9: Detalle de los agujeros de engrase en apoyos (*Mains*) y muñequillas *Journals* de un cigüeñal. Fuente: [Ujia12]

La propia geometría de las partes a tratar, muñequillas y apoyos, permiten dar cuenta de la estrategia de proceso a seguir, basada, en la irradiación de una pieza cilíndrica.

La figura 3.10 representa esquemáticamente la irradiación por parte de un haz láser de todo el ancho correspondiente a una geometría cilíndrica como un apoyo o una muñequilla.

A partir de las figuras 3.8-3.10, se puede ver que las geometrías a modelar, de cara a un análisis físico y numérico del proceso pueden ser, tanto las geometrías cilíndricas correspondientes con los apoyos y las muñequillas, así como, el cigüeñal completo de un motor alternativo de automoción.

La pieza concreta a analizar viene dada por las especificaciones definidas para el proceso llevado a cabo en las instalaciones de la empresa Etxe-Tar, donde se ha efectuado el proceso de Temple Superficial con Láser de los cigüeñales. Las dimensiones de los apoyos, que es la pieza sobre la que han sido efectuados todos los análisis del proceso, son un diámetro de 60 mm con un ancho de 20 mm.

Figura 3.10: Representación esquemática del proceso de Temple Superficial con Láser de los apoyos o las muñequillas de un cigüeñal

En una primera fase de desarrollo del modelo el dominio analizado se centro exclusivamente en el apoyo tratado, simulando la difusión de calor en el resto de la pieza mediante condiciones de contorno de convección y radiación electromagnética adecuadas. La figura 3.11 muestra una representación del dominio utilizado para analizar el proceso en la primera fase de desarrollo del modelo.

Figura 3.11: Modelado de la muñequilla del cigüeñal de un motor alternativo sobre la que se aplica el tratamiento de Temple Superficial con Láser

La figura 3.11 muestra lo que ya es un modelo realista, que incluye tanto los agujeros de engrase, como los achaflanamientos laterales. Es importante notar los distintos tamaños de la discretización en función de la naturaleza de la zona representada. Mientras que las paredes cilíndricas, donde actuará el haz láser, gozan de

una discretización muy pequeña, para poder representar con realismo los elevados gradientes térmicos asociados al tratamiento con el láser, las caras planas laterales han sido representadas con elementos de mayor tamaño porque se esperan gradientes térmicos menos severos.

La figura 3.12 muestra la simulación numérica del proceso de temple superficial con láser sobre la superficie cilíndrica de los apoyos representados.

Figura 3.12: Instante durante la simulación del tratamiento sobre la superficie cilíndrica del apoyo

La figura 3.13 muestra el modelo de la distribución de irradiancia utilizada para llevar a cabo el tratamiento. Esta distribución ha sido obtenida mediante la técnica de la distribución equivalente de potencia (ver capítulo sobre el concepto de fuente equivalente de potencia) y tiene por objetivo cubrir de un sola pasada toda la cara cilíndrica del apoyo para evitar la necesidad de pasadas sucesivas y su problemática asociada (ver capítulo de temple con pasadas sucesivas).

Figura 3.13: Fuente equivalente de potencia arquetípica utilizada en alguna de las simulaciones numéricas

3.3. Modelo Térmico del proceso

Esta sección desarrolla las características del modelo de transferencia de calor utilizado, especificando las ecuaciones constitutivas, las condiciones de contorno, así como, su interdependencia con los cálculos metalúrgicos, considerando el calor latente de los procesos de recristalización, y el desarrollo de una película de óxido como consecuencia del aumento de temperatura en superficie, que, a su vez, contribuye a un incremento de la absorción de la energía suministrada por el haz láser. La figura 3.14 ofrece una visión de diagrama de bloques del modelo térmico utilizado.

Figura 3.14: Diagrama de bloques del modelo térmico considerando el incremento de absorción asociado a la oxidación y los calores latentes de cambio de fase metalúrgica

De forma específica, el modelo térmico tiene en cuenta los siguientes fenómenos físicos.

1. Se debe determinar la evolución temporal y distribución espacial de temperaturas como consecuencia de la aplicación del haz láser sobre el apoyo de un cigüeñal sometido a movimiento circular uniforme.
2. Se tiene en cuenta la oxidación que se produce en superficie por el contacto entre el aire circundante y las elevadas temperaturas a las que da lugar el proceso.

3. La capa de óxido formada influye de forma importante en la absorción de radiación en la pieza. La función que relaciona el espesor de óxido con dicha absorción debe utilizarse para realimentar el cálculo de temperaturas.
4. Del mismo modo las transformaciones metalúrgicas que se producen a lo largo del tratamiento llevan asociadas unas entalpías de transformación, que pueden suponer un calor liberado o absorbido, y que en cualquier caso influyen sobre el valor final de la temperatura, como también se ilustra en el esquema de la figura 3.14.
5. En tanto que la evolución temporal de las temperaturas a lo largo del tratamiento ha sido obtenida considerando el balance energético de las transformaciones metalúrgicas, ésta puede ser utilizada para calcular las transformaciones obtenidas en un determinado punto o conjunto de ellos.

Para realizar los cálculos relativos al modelo térmico se utilizará Comsol Multiphysics ®, que es un programa basado en el método de los elementos finitos. En lo sucesivo se introducen algunas características generales del mismo.

3.3.1. Desarrollo de un modelo en Comsol ®

En este apartado se introducen los conceptos básicos para la generación de un modelo en el programa para cálculo por el método de los elementos finitos Comsol Multiphys ®. Se abordarán los pasos básicos llevados a cabo para la generación del modelo, comenzando por la selección de la física implicada en el proceso, la naturaleza del mismo en relación a su evolución temporal, la geometría estudiada, así como las propiedades termo-físicas del material, para finalmente explicar la introducción de la fuente externa de calor y las funciones auxiliares definidas por el usuario.

El programa requiere que se indique el tipo de problema físico que se va a resolver. En el caso de la simulación del proceso de Temple Superficial con Láser, para estudiar la evolución y distribución de temperaturas en un sólido, se selecciona el módulo de transferencia de calor, como se muestra en la figura 3.15.

La ecuación (3.1) representa la ecuación general de transferencia de calor (ver anexo A para una demostración de la misma así como una descripción exhaustiva del fenómeno de transferencia de calor).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \dot{Q} + \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (3.1)$$

En la ecuación de transmisión de calor (3.1) aparecen algunas de las propiedades termo-físicas del material, como el calor específico, C_p , la densidad, ρ , y la conduc-

Figura 3.15: Selección de la naturaleza física del problema a estudiar en el software

tividad térmica, κ . Estas propiedades son a su vez dependientes de la temperatura, lo cual, además de hacer más fuerte la no linealidad del problema, lleva a una gran sensibilidad de los resultados respecto a la correcta determinación de dichas propiedades termo-físicas, y la interpretación de las mismas en función del método de medida utilizado.

El término Q hace referencia a las posibles generaciones o consumos de energía térmica en el seno del propio material como consecuencia de reacciones químicas promovidas durante los procesos de enfriamiento y calentamiento.

En lo que se refiere a la condiciones de contorno para el problema térmico se consideran tanto las pérdidas de calor por convección de la pieza en movimiento con el aire que la rodea, así como, las pérdidas de calor en forma de radiación.

La ecuación (3.2) muestra el cálculo de las pérdidas por radiación.

$$\kappa \nabla T = \epsilon \sigma (T_{amb}^4 - T^4) \quad (3.2)$$

En la ecuación (3.2) el término ϵ representa la emisividad del material. El término σ representa la constante de Stefan-Boltzmann para la radiación, con un valor de $5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}$.

La emisividad ha sido determinada experimentalmente para el material considerado (acero tipo AISI 4140), y se considera constante a lo largo de todo el proceso, con un valor $\epsilon = 0,8$.

La convección determina el intercambio de calor entre la pieza tratada con el láser y el aire con menor temperatura que la rodea. Este intercambio viene determinado por la diferencia de temperaturas y el coeficiente de película, denotado como h , tal y como se muestra en la ecuación (3.3).

$$\kappa \nabla T = h(T_{amb} - T) \quad (3.3)$$

El valor de este coeficiente depende en gran medida de la velocidad relativa entre el fluido y la pieza. Para las condiciones del proceso estudiado se asume que $h = 12 \text{ W/(m}^2\text{K)}$.

3.3.2. Consideraciones sobre el calor latente

Se considera la energía total disipada por unidad de masa durante el transcurso de la transformación de recristalización. Como el proceso no puede ser considerado instantáneo, es necesario tener en cuenta cómo es absorbida esta energía a lo largo de la transformación, en otras palabras, es necesario considerar cuál es la función de variación de entalpía de la reacción de recristalización.

Se asume, que la evolución de la energía absorbida por la recristalización sigue una función como la que se muestra en la figura 3.16, característica de este tipo de procesos.

Figura 3.16: Evolución del calor latente de recristalización como una función de la temperatura

Puesto que la formulación general del problema térmico viene planteada en términos de irradiancias, la energía disipada durante la transformación será imputada en las ecuaciones como una potencia negativa.

Esta potencia se descuenta de la consumida por aquellas regiones del material que están en condiciones de experimentar el proceso de re-cristalización, tal y como se muestra en la ecuación (3.4).

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \rightarrow \rho \left(C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \right) \quad (3.4)$$

En la ecuación (3.4) como la temperatura es a su vez una función del tiempo es necesario considerar la derivada de ésta con respecto al tiempo.

Durante la fase de enfriamiento también tienen lugar transformaciones metalúrgicas debido a las transformaciones de la masa austenizada en diferentes productos, siendo la martensita el que se pretende conseguir. En una primera aproximación se considerará que las transformaciones del enfriamiento consumen una energía exactamente igual a las transformaciones durante el calentamiento, a efectos de una caracterización de las temperaturas durante dicha fase.

3.3.3. Observaciones sobre el enfoque del haz

Algunos de los parámetros que caracterizan la propagación del haz láser son la distancia focal y la divergencia. El primero de ellos se refiere a la distancia, medida desde la máquina, a la cual la sección transversal del haz es menor. La divergencia es la medida del crecimiento de dicha sección transversal respecto a la sección de cintura; matemáticamente se ajusta a una hipérbole.

Aunque algunas aplicaciones se ven favorecidas por la utilización de un haz enfocado sobre la superficie a tratar, no tiene por qué ser siempre así. En cualquiera de los casos los trabajos de simulación requieren una caracterización precisa de la posición del foco respecto a la zona de interacción, lo cual, para la interacción entre un haz láser y una geometría cilíndrica requiere algunas consideraciones adicionales debido a que el contacto se verifica a lo largo de distintas posiciones longitudinales del haz. La figura 3.17 muestra las diferentes posiciones de los puntos inicial, central y final en la interacción entre el haz láser y el cilindro. Como se puede ver en la figura tienen distinta altura, con lo cual, considerando la divergencia del haz, la irradiancia de cada zona no puede ser la misma.

Para abordar esta situación se procede mediante la discretización del haz a lo largo de su trayectoria, considerando capas de espesor despreciable equi-espaciadas entre sí, correspondiéndole a cada una de ellas una sección transversal dependiente de su distancia respecto a la capa de foco. Trabajando con Fuentes Equivalentes de Potencia, cada capa se corresponde con una distribución de irradiancia calculada teniendo en cuenta la divergencia del haz que la genera. De este modo, en el caso de

Figura 3.17: Diagrama sobre las diferentes alturas de enfoque del haz láser

la interacción sobre una geometría cilíndrica, la sección transversal del haz se calcula para los puntos afectados, mediante una interpolación entre las Fuentes Equivalentes de Potencia, correspondiente a las capas entre las que se encuentren.

3.3.4. Discretización

La discretización de una geometría tan compleja como la de un cigüeñal de automoción, donde, además, tan solo una de sus superficies va a ser objeto de estudio del tratamiento de Temple Superficial con Láser, conlleva el uso de estrategias de discretización particularidades para cada una de las regiones, así como, la definición de los elementos que dan lugar a la transición entre distintas zonas.

La figura 3.18 muestra el detalle del crecimiento de tamaño de los elementos entre la superficie del apoyo irradiado y los contrapesos adyacentes, que son la primera región a través de la cual tiene lugar la difusión del calor introducido en la pieza.

En aras del un compromiso adecuado entre la necesidad de unos recursos computacionales elevados, velocidad de cálculo adecuada y precisión de los resultados el tamaño de los elementos en la superficie tratada es de $0,5\text{ mm}$ hasta una profundidad de 3 mm bajo la superficie, teniendo en cuenta la profundidad hasta la cual es esperable la consecución de cierta transformación austenítica.

La morfología de los elementos seleccionada ha sido la conocida como Tetraedros Libres. Esta morfología es una de las más sencillas disponibles en el programa de

Figura 3.18: Detalle de la discretización en el apoyo irradiado y en los contrapesos adyacentes

elementos finitos utilizado, Comsol Multiphysics ®, y, a la vez, esta dotada de una gran versatilidad para adaptarse a la distintas regiones y complejidades geométricas de la pieza, debido a su capacidad para generar discretizaciones des-estructuradas, es decir, sin un patrón geométrico regular [Comsol05]. La figura 3.19 muestra el número total de elementos, así como la distribución de los mismos en las distintas regiones de la pieza representada, superficie, línea de contorno o vértice.

Figura 3.19: Detalle de las características y distribución geométrica

Uno de los parámetros importantes en la discretización de cualquier volumen tridimensional es la conocida como "calidad de los elementos" que mide la regularidad tridimensional de los mismos, es decir, en que medida su ancho se parece a su largo y estos, al mismo tiempo, al alto de la pieza. La calidad máxima de un elemento puede alcanzar un valor de 1, y calidades excesivamente bajas ($< 0,20$), pueden estar asociadas a un cálculo incorrecto de la propagación de los campos que se pretenden resolver mediante el método de los elementos finitos. La figura 3.19 muestra la distribución estadística de la calidad de los elementos en la discretización del cigüeñal. La figura 3.20 muestra la representación gráfica, sobre la superficie, de la calidad de los elementos del cigüeñal en las distintas zonas.

Figura 3.20: Calidad en la superficie de los elementos que componen la discretización del cigüeñal

A partir de la figura 3.20 se puede ver como las inmediaciones de la zona tratada se caracterizan por unos valores de calidad de los elementos muy elevados, mientras que, en las zonas más alejadas se disponen valores de calidad inferiores.

3.3.5. Análisis de un coeficiente representativo de absorción en geometrías curvas

Una de las características diferenciales de la geometría analizada es su curvatura, la cual, da lugar a un ángulo de incidencia variable entre el haz láser utilizado para efectuar el tratamiento y la superficie tratada, así como, a la proyección de la zona de interacción sobre una superficie que puede llegar a ser muy superior a la sección transversal del haz láser, contribuyendo a una disminución de la irradiancia efectiva promedio introducida en el material.

La figura 3.21 representa de forma esquemática la interacción entre un haz láser supuesto gaussiano y la generatriz de un cilindro.

Figura 3.21: Representación esquemática de la interacción entre un haz láser y la generatriz de un cilindro

Se obtiene el coeficiente medio de absorción como cociente de la energía por unidad de tiempo absorbida en el área de interacción, entre toda la energía por unidad de tiempo aplicada. Se considera una distribución Gaussiana para la irradiancia del haz, tal y como la mostrada en la figura 3.22.

Figura 3.22: Distribución transversal de energía utilizada para el análisis de la interacción cilindro/haz láser

Los parámetros que caracterizan a la función gaussiana son su distribución de irradiancia $I(r)$ y el valor $2w$ donde la energía ha descendido cierto nivel.

La energía por unidad de tiempo $d\epsilon$ absorbida en un elemento $dS(\theta)$ viene dada por la ecuación (3.5).

$$d\epsilon\theta = A(\theta)2 \int_{X=0}^{X^*(\theta)} I[r(x, y(\theta))]dS(\theta) \quad (3.5)$$

En la ecuación (3.5) el término radial se puede expresar como $r(x, y(\theta)) = \sqrt{x^2 + y(\theta)^2}$, el término $dS(\theta) = R d\theta dx$ y $A(\theta)$ es el coeficiente de absorción.

La energía por unidad de tiempo absorbida en todo el área de interacción se obtiene integrando la ecuación (3.5) sobre todo el área S , dando, de ese modo, lugar a la ecuación (3.6).

$$\epsilon = \int_{\theta=\theta_{min}}^{\theta=\theta_{Max}} d\epsilon(\theta) = \int_{\theta=\theta_{min}}^{\theta=\theta_{Max}} 2RA(\theta) \left[\int_{X=0}^{X=X^*} I[r(x, y(\theta))]dx \right] d\theta \quad (3.6)$$

Considerando la absorción promedio en el área de interacción, la energía por unidad de tiempo absorbida puede expresarse mediante la ecuación (3.7).

$$\epsilon = \langle A \rangle \int_{\theta=\theta_{min}}^{\theta=\theta_{Max}} 2R \left[\int_{X=0}^{X=X^*} I[r(x, y(\theta))]dx \right] d\theta \quad (3.7)$$

Dónde $\langle A \rangle$ representa el coeficiente promedio de absorción en el área de interacción entre el cilindro y el haz láser. A partir de esta expresión se obtiene el valor de dicho coeficiente promedio, mediante la ecuación (3.8).

$$\langle A \rangle = \frac{\int_{\theta=\theta_{min}}^{\theta=\theta_{Max}} 2RA(\theta) \left[\int_{X=0}^{X=X^*} I[r(x, y(\theta))]dx \right] d\theta}{\int_{\theta=\theta_{min}}^{\theta=\theta_{Max}} 2R \left[\int_{X=0}^{X=X^*} I[r(x, y(\theta))]dx \right] d\theta} \quad (3.8)$$

Para obtener el parámetro característico de la Distribución Gaussiana de irradiancia correspondiente a las condiciones de aplicación, se puede tener en cuenta la equivalencia entre la potencia aplicada y la potencia correspondiente a una irradiancia con distribución uniforme, según las ecuaciones (3.9) y (3.10).

$$I(r) = I_{Max} e^{\frac{-2r^2}{w^2}} \quad (3.9)$$

$$P = \int_0^\infty 2\pi I(r) r dr \quad (3.10)$$

Dónde I_{Max} , representa el valor de la irradiancia correspondiente a una distribución gaussiana.

La integral se resuelve mediante el cambio de variable dado por la ecuación (3.11).

$$u = \frac{2r^2}{w^2} \implies du = 2\frac{2r}{w^2}dr \implies r dr = \frac{w^2}{4}du \quad (3.11)$$

La figura 3.23 muestra la equivalencia entre una distribución transversal de potencia gaussiana y una uniforme cilíndrica.

Figura 3.23: Equivalencia entre una distribución uniforme gaussiana y otra uniforme cilíndrica

En la figura 3.23 a la izquierda se puede ver una distribución Gaussiana en 3D y a la derecha una distribución uniforme de irradiancia, con una potencia total, equivalente a la de la distribución Gaussiana. La ecuación (3.12) resuelve la integral con el cambio de variable introducido en la ecuación (3.11).

$$P = \int_{u=0}^{u=\infty} 2\pi I_{Max} \frac{w^2}{4} e^{-u} du = \frac{2\pi}{4} I_{Max} w^2 [-e^{-u}]_0^{\infty} \implies P = \frac{1}{2} I_{Max} \pi w^2 \quad (3.12)$$

Igualando las dos expresiones obtenidas para la potencia se llega a la ecuación (3.13).

$$\frac{1}{2} I_{Max} \pi w^2 = I_0 \pi w \implies I_{Max} = 2I_0 \quad (3.13)$$

Los cálculos realizados utilizando el coeficiente promedio de absorción muestran la influencia de la forma de la zona de interacción sobre la energía realmente percibida por la pieza. Mientras que en el caso del haz incidiendo cercano al centro del cilindro se obtienen resultados muy próximos a los teóricos, según el haz se aleja de esta posición, su proyección sobre la curvatura del cilindro da lugar a áreas de

interacción mayores, en las que la magnitud de la irradiancia varía de forma apreciable entre un extremo y otro, obteniéndose resultados ligeramente distintos a los que se pueden observar en la curva de absorción característica del material. Por todo lo anterior, para tener una noción más clara sobre la interacción del haz con la pieza, se ha utilizado el coeficiente $\langle A \cdot I \rangle$, que es la absorción promedio por la irradiancia en la zona de interacción, mediante el cual se considera el factor de pérdida de intensidad por superficie, tal y como muestra la ecuación (3.14).

$$\langle A \cdot I \rangle = \frac{\int_{\theta=\theta_{min}}^{\theta=\theta_{Max}} 2RA(\theta) \cos(\theta) \left[\int_{X=0}^{X=X^*} I[r(x, y(\theta))] dx \right] d\theta}{\int_{\theta=\theta_{min}}^{\theta=\theta_{Max}} 2R \left[\int_{X=0}^{X=X^*} I[r(x, y(\theta))] dx \right] d\theta} \quad (3.14)$$

En la ecuación (3.14), tan solo, mediante la introducción del coseno del ángulo de incidencia en la integral del numerador se tiene en cuenta dicho efecto de pérdida de intensidad.

A continuación se muestran los resultados del cálculo de $\langle A \cdot I \rangle$ para un cilindro de hierro considerando, en primer lugar un láser de Diodo y en segundo lugar de Nd:YAG. En ambos casos, la superficie abarcada por la zona de interacción, S , crece significativamente respecto el área transversal del haz, S_0 , en función del ángulo de incidencia, tal y como se muestra en la figura 3.24.

Figura 3.24: Incremento del área proyectada respecto al área transversal del haz láser, al descentrar la proyección del mismo respecto del eje longitudinal del cilindro

Esta teoría desarrollada se utiliza para comparar la absorción puntual, la absorción promedio y la absorción por irradiancia promedio, para tres longitudes de onda típica de lastres industriales de potencia: Nd:YAG, Diodo y CO_2 .

La tabla 3.1 muestra las propiedades ópticas del material analizado, a efectos de ser tratado con un láser de diodo.

Tabla 3.1: Propiedades ópticas del hierro para un láser de Diodo

Material	Hierro
Radio del cilindro	0.03m
Diámetro de haz laser	0.007m
Tipo de laser	DIODO ($\lambda=800\text{nm}$)
Índice de refracción, n	3,0243
Coefficiente de extinción, k	3.6826

La curva de absorción en función del ángulo de incidencia para un láser de diodo sobre el hierro como material tratado viene dada por la figura 3.25.

Figura 3.25: Absorción en función del ángulo de incidencia para un láser de Diodo

El coeficiente promedio de absorción, obtenido mediante la ecuación (3.8), puede verse en la figura 3.26.

Esta curva permite observar la influencia de la forma de la zona de interacción sobre la absorción efectiva del material. Los mayores valores de absorción promedio con respecto a la absorción característica del material, según aumenta la longitud Δ , son debidos a que la intersección del haz sobre la curvatura del cilindro da lugar a una zona de interacción asimétrica en las que hay una gran parte de la superficie que está en condiciones de mayor absorción, que la que correspondería al valor medio de absorción entre los ángulos mínimo y máximo abarcados por el área de interacción según la curva característica del materia. Este hecho sí tiene lugar cuando se trabaja con valores pequeños del parámetro Δ en las que el área de interacción apenas se ve deformada por la curvatura del cilindro.

El coeficiente de absorción por la irradiancia promedio en el área de interacción $\langle A \cdot I \rangle$ viene reflejado en la figura 3.27.

Figura 3.26: Coeficiente promedio de absorción en la zona de interacción para un láser de Diodo

Figura 3.27: Coeficiente promedio de absorción por la irradiancia en la zona de interacción para un láser de Diodo

En azul, la curva correspondiente al coeficiente $\langle A \cdot I \rangle$, frente a Δ . Punteado en rojo el límite inferior de dicha magnitud, correspondiente al extremo más cercano del área de interacción al centro del cilindro. En verde el límite superior, correspondiente al extremo más alejado del área de interacción. Esta curva muestra, como, a pesar de que la absorción promedio aumenta con el aumento de la longitud Δ , la influencia del crecimiento del área, hace que efecto percibido por el material sea cada vez menor.

La figura tabla 3.2 muestra las propiedades ópticas del hierro a efecto de su interacción con un láser de Nd:YAG [Bass3].

Tabla 3.2: Propiedades ópticas del hierro para un láser de Nd:YAG

Material	Hierro
Radio del cilindro	0.03m
Diámetro de haz laser	0.007m
Tipo de laser	Nd:YAG ($\lambda=1064\text{nm}$)
Índice de refracción, n	3.2695
Coefficiente de extinción, k	4.3453

La curva de absorción para el hierro tratado por un láser de Nd:YAG viene representada en la figura 3.28.

Figura 3.28: Absorción en función del ángulo de incidencia para un láser de Nd:YAG

La figura 3.29 representa el coeficiente promedio de absorción para un láser de Nd:YAG sobre una superficie de hierro.

Figura 3.29: Coeficiente promedio de absorción en la zona de interacción para un láser de Nd:YAG

Esta curva permite observar la influencia de la forma de la zona de interacción sobre la absorción efectiva del material. Los mayores valores de absorción promedio

con respecto a la absorción característica del material, según aumenta la longitud Δ , son debidos a que la intersección del haz sobre la curvatura del cilindro da lugar a una zona de interacción asimétrica en las que hay una gran parte de la superficie que está en condiciones de mayor absorción, que la que correspondería al valor medio de absorción entre los ángulos mínimo y máximo abarcados por el área de interacción según la curva característica del materia. Este hecho sí tiene lugar cuando se trabaja con valores pequeños del parámetro Δ en las que el área de interacción apenas se ve deformada por la curvatura del cilindro.

La figura 3.30 muestra el coeficiente de absorción por la irradiancia promedio para un láser un láser de Nd:YAG sobre una superficie de hierro.

Figura 3.30: Coeficiente promedio de absorción por la irradiancia en la zona de interacción para un láser de Nd:YAG

En azul, la curva correspondiente al coeficiente $\langle A \cdot I \rangle$, frente a Δ . Punteado en rojo el límite inferior de dicha magnitud, correspondiente al extremo más cercano del área de interacción al centro del cilindro. En verde el límite superior, correspondiente al extremo más alejado del área de interacción. Esta curva muestra, como, a pesar de que la absorción promedio aumenta con el aumento de la longitud Δ , la influencia del crecimiento del área, hace que efecto percibido por el material sea cada vez menor.

De cara a mostrar la influencia del diámetro del haz láser se muestran las curvas de absorción por intensidad promedio para diámetros de 1 mm y de 5 mm .

La figura 3.31 muestra el valor de $\langle A \cdot I \rangle$ en función de Δ para un láser de Diodo y un diámetro de 1 mm .

La figura 3.32 muestra el valor de $\langle A \cdot I \rangle$ en función de Δ para un láser de Diodo y un diámetro de 5 mm .

Figura 3.31: Coeficiente promedio de absorción por la irradiancia en la zona de interacción para un láser de Diodo y 1 *mm* de diámetro

Figura 3.32: Coeficiente promedio de absorción por la irradiancia en la zona de interacción para un láser de Diodo y 5 *mm* de diámetro

En ambos casos, tanto para el láser de Diodo como para el de Nd:YAG, se observa cómo el efecto de crecimiento del área con el aumento de Δ , es más significativo que el aumento del coeficiente de absorción, por lo que la energía percibida por el material es menor que la que cabría esperar de la curva teórica de absorción característica del material.

A lo largo de todos los ejemplos mostrados en las figuras anteriores se ha supuesto que las propiedades ópticas del material, índice de refracción, n y coeficiente de película k toman valores constantes para cada longitud de onda. Sin embargo, es

posible encontrar cierta dependencia con la temperatura de ambos valores.

Se ha establecido que el valor del índice de refracción en las inmediaciones del punto de fusión del material se corresponde con el 95 % del valor del índice de refracción a temperatura ambiente, interpolando linealmente entre ambos puntos, tal y como se muestra en la figura 3.33.

Del mismo modo, el valor del coeficiente de película k se obtiene de una recta en la que su valor en las proximidades del punto de fusión se corresponde con el 95 % del valor del coeficiente de película a temperatura ambiente. La figura 3.34 muestra k como una función de la temperatura.

Figura 3.33: Valores del índice de refracción entre la temperatura ambiente y el punto de fusión

A pesar de la pequeña magnitud de la variación de las propiedades ópticas con la temperatura, su efecto puede tener consecuencias aplicables sobre los cursos térmicos espacio-temporales aplicados sobre el material.

Figura 3.34: Valores del coeficiente de película entre la temperatura ambiente y el punto de fusión

3.3.6. Material y propiedades termo-físicas

En el caso del estudio realizado, como material de trabajo se tiene un acero tipo *AISI* 4140. Es un acero tipo Cr-Mo representativo de los aceros de componentes específicos de alta fiabilidad en el sector de la automoción. Sus principales elementos de aleación pueden verse en la tabla 3.3.

Tabla 3.3: Elementos de aleación presentes en el material de trabajo

Elemento de aleación	C	Mn	Cr	Mo	Si	P	S
Porcentaje en peso (%)	0,38-0,43	0,75-1,00	0,80-1,10	0,15-0,25	0,15-0,35	0,04 MAX	0,05 MAX

Las propiedades termofísicas importantes relativas a un estudio de la difusión del calor en el material son la conductividad térmica, κ , el calor específico, C_p , la densidad, ρ y la difusividad térmica χ . Todas las magnitudes se hayan relacionadas mediante la ecuación (A.1).

La correcta caracterización del valor de cada una de las propiedades del material en todas las temperaturas dentro del rango de trabajo resulta crítica para la

obtención de resultados realistas.

En el caso del material de trabajo, la dependencia de la conductividad térmica con la temperatura se refleja en la figura 3.35

Figura 3.35: Conductividad térmica del material de trabajo en función de la temperatura

El calor específico como función de la temperatura viene dado por la figura 3.36.

Figura 3.36: Conductividad térmica del material de trabajo en función de la temperatura

La densidad en función de la temperatura está representada en la figura 3.37.

La difusividad térmica en función de la temperatura está representada en la figura 3.38.

Figura 3.37: Densidad del material de trabajo en función de la temperatura

Figura 3.38: Difusividad térmica del material de trabajo en función de la temperatura

Las propiedades termo-físicas no pueden considerarse de forma aislada, es necesario tener en cuenta el material que representan así como la técnica utilizada para su determinación. Así pues, en el caso del acero, tienen lugar distintas transformaciones metalúrgicas en el intervalo de temperaturas considerado tanto durante el calentamiento como durante el enfriamiento. Estas transformaciones metalúrgicas se corresponden con procesos de cambio de fase (recristalización) que pueden ser exotérmicos o endotérmicos. Concretamente, durante el calentamiento tiene lugar la transformación de la ferrita presente en el estado inicial en austenita, y durante la fase de enfriamiento, según la velocidad del mismo, la austenita se transforma en alguno de los productos indicados en el correspondiente diagrama CCT.

3.3.7. Modelo del haz láser: Fuente Equivalente de Potencia

El concepto teórico de Fuente Equivalente de Potencia es la modelización de estrategias de irradiación basadas en un haz de pequeño diámetro ($2\text{ mm} - 8\text{ mm}$) realizando trayectorias cerradas divididas en distintos tramos, diferenciados entre sí por la velocidad lineal del haz en cada uno de ellos. De este modo, si la velocidad del haz láser es suficientemente elevada, (frecuencia de recorrido de la trayectoria cerrada mayor de 100 Hz), a efectos de cálculo puede considerarse como una fuente estática, basada en la energía promedio suministrada por el haz láser en cada uno de los tramos.

La figura 3.39 muestra un ejemplo de definición de una fuente equivalente de potencia [Sancho13].

Figura 3.39: Programa LSDS para el diseño de fuentes equivalentes de potencia

Mediante una estrategia de irradiación modelizable como Fuente Equivalente de Potencia es posible mejorar algunas características importantes del proceso de Temple Superficial con Láser, como por ejemplo el tiempo de interacción, manteniendo la temperatura máxima alejada del punto de fusión del material.

El resultado del cálculo de la Fuente Equivalente de Potencia es una matriz con coordenadas planas, en la que a cada punto, dado por dos coordenadas, le corresponde un valor de irradiancia. Esta matriz es introducida directamente en el programa de cálculo por elementos finitos como distribución de irradiancia.

La determinación de la Fuente Equivalente de Potencia óptima para la obtención de unas especificaciones determinadas en el proceso de Temple Superficial con Láser, no es un cuestión inmediata. La amplia variedad de tramos en la que puede ser dividido el haz generador de la fuente, así como las distintas combinaciones de velocidad de barrido y potencia disponibles, llevan a un conjunto infinito de posibilidades. Para facilitar la elección de las variables, en el contexto de desarrollo del presente modelo, se ha desarrollado un software específico para el diseño de las Fuentes Equivalentes de Potencia denominado Laser Spot Dynamic Shaper. Este programa divide la trayectoria cerrada del haz generador en unos pocos tramos, en los cuales el usuario determina la velocidad de barrido. A lo largo del desarrollo del proyecto se ha evolucionado de figuras divididas en cuatro tramos (ver figura 3.39) , basadas en ciclos con forma topológicamente similar a un rectángulo a trayectorias con forma de ocho, en las que es posible conseguir un aumento progresivo de la temperatura, favorable para el tratamiento (ver figura 3.40).

Figura 3.40: Fuente equivalente de potencia con tres frentes

Una de las grandes ventajas del programa, es la visualización inmediata de la figura obtenida, la cual proporciona al usuario información durante la propia labor de diseño de la fuente generada.

En este sentido el programa proporciona distintos formatos para la visualización de la figura, que son de gran ayuda para estimar su efecto. La figura 3.41 muestra un ejemplo de visualización.

Figura 3.41: Fuente equivalente de potencia proyectada sobre un cilindro

La figura 3.41 muestra la figura directamente sobre la geometría de la pieza en la que va a ser aplicada, incluyendo el efecto del descentre (en el caso mostrado 18 mm), lo que permite apreciar la zona de influencia del área proyectada, y la configuración final del proceso.

Una vez generada la figura, se introduce en Comsol @importando el archivo generado como una función de interpolación.

3.4. Transformaciones Metalúrgicas durante el calentamiento

En el proceso de Temple Superficial con Láser la martensita se obtiene cuando el haz láser, con densidad de energía relativamente alta, atraviesa la superficie de una pieza de acero causando un calentamiento muy rápido (entre 1000 K/s y 6000 K/s), seguido de otro rápido auto-enfriamiento del material. El alcance típico del tratamiento está comprendido entre 1 mm y 3 mm y está limitado por la posibilidad de tener ciclos térmicos adecuados más allá de estas posiciones sin fundir la superficie.

El éxito del proceso de Temple Superficial con Láser radica no sólo en sus ventajas tecnológicas, sino también en una comprensión profunda de los complejos fenómenos físicos que a través de los que surgen los cambios en condiciones alejadas del equilibrio inducidos por la severidad de los ciclos térmicos aplicados y la modificación de las propiedades superficiales durante cuando el proceso realizado en una atmósfera no protectora, permitiendo a los diseñadores y usuarios del proceso predecir las

temperaturas y el perfil de transformación a partir de una cierta combinación de parámetros del proceso. La característica más importante del endurecimiento superficial asociado al proceso de temple con láser es la austenización rápida. La velocidad de calentamiento producida por una fuente láser móvil es comparable en orden de magnitud con el tiempo que toman los átomos de carbono para difundir dentro del material base para formar austenita. [6], y por lo tanto, la temperatura crítica de equilibrio, A_{c3} , sólo mantiene el significado de umbral energético desde el cual la reacción de austenización es termodinámicamente posible [7], pero no una referencia fiable para asegurar el cambio de fase completo desde el material base, formado por perlita y ferrita, hasta la obtención de austenita.

Los cursos térmicos calculados con un elevado nivel de precisión, gracias al acoplamiento de la oxidación térmica para la obtención del coeficiente de absorción, se analizarán con la ley Avrami para calcular la fracción de austenita resultante del proceso. Este procedimiento se realizará de forma similar a lo que [Miokovi04] propone, aunque, utilizando ciclos térmicos reales, con tasas de calentamiento y enfriamiento no constantes. A pesar de implicar un cierto esfuerzo computacional, debido a que los cursos térmicos tienen que ser discretizados en pasos casi isotérmicos, el esfuerzo es significativamente menor que en el caso de tener que diseñar y resolver una red que represente la microestructura del material base y la disponibilidad del modelo para calcular Geometrías realistas y procesos de larga duración, como en el caso de los modelos descritos en el capítulo 2. La figura 3.42 incluye una representación esquemática de los cálculos llevados a cabo, considerando el incremento de absorción asociado al desarrollo de una película de óxido, que será explicado en el capítulo correspondiente.

Figura 3.42: Esquema de los cálculos realizados en el modelo acoplado

Según los estudios realizados en [6, 17], donde se utiliza la teoría de Johnson-Mel-Avrami-Kolmogorov (en lo sucesivo Ley de Avrami) con ciclos térmicos idealizados mediante la utilización de ciclos térmicos con pendientes de calentamiento y enfriamiento constantes, la presente Tesis Doctoral calcula la fracción de austenita con ciclos térmicos realistas orientados a un proceso de endurecimiento industrial. La figura 3.43 muestra un ejemplo de la idea de ciclo térmico realista, con pendientes de calentamiento y enfriamiento variables, así como con una transición enfriamiento/calentamiento suave.

Figura 3.43: Ejemplo de los ciclos térmicos para los que se ha extendido la utilización de la Ley de Avrami

Aunque las ecuaciones correspondientes a la Ley de Avrami fueron introducidas en el capítulo 2, se vuelven a plantear en la presente sección, enfocadas al cálculo de la transformación austenítica con ciclos térmicos realistas.

La ecuación (3.15) presenta la ecuación de Avrami para transformaciones isotérmicas como una función del tiempo.

$$f = 1 - e^{-Bt^n} \quad (3.15)$$

En la ecuación (3.15) los términos B y n hacen referencia a las tasas de nucleación y crecimiento respectivamente, dependientes de la cinética de cada proceso en particular. Para el término B es posible establecer una ecuación tipo Arrhenius, como la que se muestra en la ecuación (3.16).

$$B = C_e \frac{\Delta E}{k_B T} \quad (3.16)$$

La ecuación (2.86) es el nexo de unión entre el cálculo cinético y el cálculo térmico, al plantear la constante cinética como una función de la temperatura. De tal forma que se trata de una constante para cada temperatura dada. De este modo, el ciclo térmico puede discretizarse mediante una serie de pasos isotérmicos, mediante la secuencia dada por la ecuación (3.17).

$$f_{A,i+1} = f_{A,i} + \Delta f_A = f_{A,i} + \left. \frac{\partial f_{A,i}}{\partial t} \right|_{t_i^*} \Delta t \quad (3.17)$$

La derivada que aparece en la ecuación (3.17) puede calcularse como se muestra en la ecuación (3.18).

$$\left. \frac{\partial f_{A,i}}{\partial t} \right|_{t_i^*} = nb(T_i)^n (t_i^*)^{n-1} \exp [-b(T_i)^n (t_i^*)^n] \quad (3.18)$$

El término t_i^* hace referencia a un tiempo ficticio equivalente al tiempo necesario para conseguir la fracción de austenita acumulada en los incrementos previos, si toda ella hubiese sido obtenida con la temperatura del incremento en curso. Despejando en la ecuación (2.85) se llega a la expresión, (3.19), para obtener t_i^* .

$$t_i^* = \frac{1}{b(T_i)} \left[\ln \frac{1}{1 - f_{A,i}} \right] \frac{1}{n} \quad (3.19)$$

La necesidad de utilizar un paso temporal asociado unas condiciones quasi-isotérmicas supone, a su vez, unos requisitos de precisión en los resultados para los cálculos numéricos relativos a los ciclos térmicos.

El ajuste del paso temporal adecuado depende de las condiciones específicas de cada simulación, especialmente, de aquellas relacionadas con la velocidad de calentamiento. Como regla general puede establecerse un paso temporal mínimo Δt igual a 0,001 s, mucho menor al paso temporal para la representación de resultados necesario cuando lo que se busca es realizar únicamente un análisis térmico, que está establecido en $\Delta t = 0,05s$

La figura 3.44 muestra la configuración del Solver de Comsol Multiphysics ® para la resolución de los cursos térmicos orientada a la obtención de la fracción de austenita transformada.

Figura 3.44: Configuración de la resolución del problema térmico para el cálculo de las transformaciones metalúrgicas

Utilizando las ecuaciones (3.15)-(3.44) se obtienen los ciclos de austenización de puntos equi-espaciados bajo la superficie, tal y como se muestra en la figura 3.45.

Figura 3.45: Ciclos de austenización en puntos equi-espaciados bajo la superficie

Si bien la representación de los ciclos de austenización en puntos equi-espaciados bajo la superficie aporta una información interesante y que permite una comparación directa con los ciclos térmicos correspondientes, el formato más utilizado es conocido como Mapa Transversal de Austenización, que muestra una sección transversal a la dirección de avance del haz láser la magnitud y el alcance la la fracción de austenita conseguida como consecuencia del tratamiento.

La figura 3.46 muestra el perfil de austenita obtenido mediante una representación tridimensional. Al igual que en el caso de la discretización temporal, la discretización espacial también debe ser la adecuada para la representación de diagramas como el mostrado en la figura 3.46. Puesto que el mayor gradiente de cambio en la fracción de austenita tiene lugar en la dirección de la profundidad, ésta será la dirección donde se requerirá una mayor resolución. La figura 3.47 muestra el ajuste de la resolución espacial de cara a la obtención de los cursos térmicos espacio-temporales de cara al calculo de las transformaciones metalúrgicas. Los valores en el eje x se corresponden con el ancho de los apoyos tratados mientras que los valores en el eje y se corresponden con la resolución en profundidad.

Figura 3.46: Mapa de austenización tridimensional

Figura 3.47: Resolución espacial para los cálculos metalúrgicos

Los mapas de transformación planos permiten una adecuada representación de la fracción de material austenizado. La figura 3.48 muestra un mapa de transformación plano.

Figura 3.48: Mapa plano de transformación austenítica

Una de las principales características de los mapas planos de transformación austenítica es su facilidad para llevar a cabo la comparación con los resultados experimentales. La mitad horizontal de un mapa de transformación plano puede compararse directamente con la mitad de una sección mecanográfica cortada pulida y atacada. La figura 3.49 muestra un ejemplo de este tipo de análisis.

Figura 3.49: Ejemplo de comparación entre la sección austenizada predicha por la simulación y el resultado correspondiente experimental

3.5. Cálculo de la fracción de martensita

La martensita es el producto final del proceso de Temple Superficial con Láser y su correcta determinación supone uno de los objetivos finales del modelado del proceso. Aunque el mayor desafío, desde el punto de vista de la caracterización cinética de la reacción, radica en la recrystalización austenítica a partir del material de base, debido a la necesidad de disponer parámetros cinéticos específicos para cada material en función de sus elementos de aleación, la determinación del volumen final de martensita no es un proceso inmediato.

Los diagramas CCT han sido la herramienta utilizada para el análisis de los productos del enfriamiento de la austenita. Existen numerosos estudios respecto a la descomposición de la austenita para el material de trabajo, el acero *AISI* 4140. La figura 3.50 muestra el diagrama CCT para el material de trabajo, con unas curvas hipotéticas de enfriamiento representadas sobre el mismo.

Figura 3.50: Diagrama CCT para el acero *AISI* 4140 junto con unas curvas de enfriamiento características del Temple Superficial con Láser

A partir de la figura 3.50 se pueden observar algunas características importantes de este tipo de diagramas, como por ejemplo la escala logarítmica para la representación de los tiempos, debido a las distintas condiciones de enfriamiento que pueden tener lugar según el proceso industrial, así como, los distintos productos de la descomposición de la austenita, en función del tiempo de enfriamiento. A continuación se hace un breve repaso de las características y la micro-estructura de cada uno de ellos.

La ferrita es una solución sólida de carbono en hierro α . Tiene muy poca solubilidad, 0,008 % C, y por ello se considera como hierro alfa puro. Es la estructura más blanda, dúctil y ferromagnética. Cristaliza en una estructura centrada en el cuerpo *BCC*.

Existen distintos tipos de ferrita:

- Alotriomórfica: es una fase cristalina y ordenada en su estructura interna pero no en sus bordes exteriores. Por tanto las superficies limitantes del cristal no son regulares y no tienen la simetría presente en su estructura interna. Es típica de la nucleación en los bordes de grano de la austenita, creciendo a lo largo de las paredes de la austenita. [Ujia13].
- Idiomórfica: ópticamente presenta caras con forma cristalina. Tiene una morfología equiaxial y se forma intragranularmente en torno a inclusiones u otros sitios de nucleación heterogéneos.
- Maciza: hereda la composición de la austenita de origen. Tiene capacidad de cruzar el borde de grano de la austenita, por lo que el tamaño de grano puede ser mayor al inicial de la austenita.
- Widmanstätten: se forma a un bajo enfriamiento inferior a A_{c3} , donde la fuerza motriz para la transformación es pequeña. Tiene forma de placas y listones. Puede darse de dos maneras, la secundaria, donde la nucleación ocurre a partir de los bordes de la ferrita alotriomórfica ya formada en el borde del grano de austenita o la primaria, donde se forma directamente en los bordes de grano de austenita y crece en perpendicular a los bordes, hacia el interior de esta.

La figura 3.51 muestra un ejemplo de ferrita alitromórfica mediante microscopio electrónico de barrido. En dicha imagen se pueden apreciar los granos característicos en contraste con el fondo.

Figura 3.51: Micrografía de ferrita Alotriomófica. Fuente: Etxe-Tar

La figura 3.52 muestra un ejemplo de ferrita Widmanstätten.

Figura 3.52: Micrografía de ferrita Widmanstätten. Fuente: Etxe-Tar

La cementita es el más duro de los constituyentes (Fe_3C), con una dureza de 68 *HRC*. Cristaliza formando un paralelepípedo ortorrómbico. Es magnética hasta los 210 °C y frágil, con poca resiliencia y alargamiento nulo. Contiene un 6,67 % de carbono.

La cementita puede aparecer como microconstituyente o junto a la ferrita formando perlita laminar, glóbulos en perlita laminar o como alargada en las uniones de los granos. A la hora de mecanizar una pieza con cierto contenido en cementita, la dureza tan alta hace que las herramientas se desgasten, ya que son más blandas

que la propia cementita. Por ello, hay que evitar la formación de cementita en la estructura.

La perlita está compuesta de 86,5 % ferrita y 13,5 % cementita. Cada grano, está formado por láminas o placas alternadas de cementita y ferrita, siendo por tanto una estructura laminar de dos fases. La perlita contribuye a la dureza del acero. Dependiendo de la compactación de la estructura perlítica, la dureza varía.

La ferrita proeutectoide se nuclea primero y continúa creciendo con la misma orientación cristalográfica durante la formación de perlita en aceros hipoeutéticos. La nucleación de cementita es un paso de ratio limitante. En aceros perfectamente eutectoides, la nucleación de perlita se asume que ocurre en las esquinas, bordes y juntas de grano.

Si el enfriamiento es muy brusco, la estructura es más borrosa, denominada perlita sorbítica. Si la perlita laminar se calienta a una temperatura inferior a la crítica AC_1 , la cementita adopta una forma de glóbulos incrustados en la ferrita, denominándose perlita globular.

En el material base de los cigüeñales, está presente en un 85 %, siendo el restante 15 % ferrita. En la siguiente figura se puede ver la estructura base, en la que las manchas más oscuras son la ferrita y el resto perlita.

La figura 3.53 muestra una micrografía donde aparece la perlita como fase metalúrgica.

La austenita, por su parte, es la forma más densa, formada por la solución sólida de carbono en hierro gamma. Está formada por cristales cúbicos de hierro α con los átomos de carbono intercalados en las aristas y centro (FCC). Es dura y no presenta propiedades magnéticas, es paramagnética por tanto.

Los granos FCC permiten almacenar una alta proporción de carbón en solución. Puede contener más carbono que la ferrita. La proporción de carbono disuelto puede variar dependiendo de la temperatura máxima. A una temperatura de 723 °C puede almacenar un 0,8 % C y a 1148 °C un 2,08 %.

La bainita es una mezcla de ferrita y cementita. Forma agujas o placas, dependiendo de la temperatura de enfriamiento. Se compone de una matriz ferrítica y de partículas alargadas de cementita. Lo que rodea las agujas suele ser martensita. Se forma a temperaturas inferiores a la de formación de perlita (540 °C - 727 °C) y superiores a las de la martensita, siendo por tanto este rango entre 215 °C y 540 °C.

La formación de bainita depende de la temperatura, y no de la aleación. Es el producto de descomposición de austenita que se forma a una temperatura inferior

Figura 3.53: Micrografía donde aparece el material de base del acero tratado: ferrita + perlita. Fuente: Etxe-Tar

a la de transformación de austenita-perlita y superior a la temperatura de transformación de martensita. Se clasifica en superior e inferior, y consiste en placas de ferrita separadas por austenita, cementita o martensita sin transformar.

La bainita superior se forma a temperaturas superiores y consiste en una serie de listones de ferrita paralelos, los cuales están separados por capas de carburos.

La bainita inferior se forma a temperaturas inferiores, la ferrita toma la forma de listones o placas y las partículas de carburos se distribuyen dentro de la ferrita. Es también conocida como bainita en listones.

La difusión del carbono y el ratio de transformación son también controlados por el ratio de difusión de los átomos de carbono. La curva de transformación bainítica es de forma de C, en las curvas de enfriamiento CCT. La temperatura y la concentración de carbono influyen en el proceso.

A temperaturas relativamente altas, la difusión del carbono es alta, y los átomos sobresaturados de carbono en las placas de ferrita se mueven hacia la austenita restante. Los productos de transformación son placas de ferrita y austenita con alta concentración de carbono, conocido como bainita libre de carbono.

Cuando la temperatura de la austenita decrece a unos 350°C - 550°C , la difusión también decrece. Los átomos sobresaturados de carbono en las placas de ferrita se

mueven a las intercaras por difusión, y la concentración de austenita entre las placas de ferrita aumenta. Se forma cementita en estas regiones cuando la concentración de carbono en la austenita crece hasta un valor crítico y se forma bainita superior.

Si la temperatura de la austenita continúa decreciendo, los átomos de carbono no se pueden mover. El ratio de difusión es muy bajo, y los átomos de carbono sólo se pueden mover a las cercanías. Cuando la ferrita crece, trozos pequeños de ferrita se forman dentro de la ferrita y se forma la bainita inferior.

Con velocidades bajas de enfriamiento, los átomos de C se difunden hacia afuera de la estructura austenítica, formándose de esta manera una estructura tipo BCC. Sin embargo si este enfriamiento se realiza rápido, no habrá tiempo de que el carbono se difunda y estos se quedarán atrapados en la solución. Por tanto no hay opción a que la estructura llegue a ser BCC y se queda en una estructura tetragonal centrada en el cuerpo. La estructura es reticular altamente distorsionada.

La martensita por tanto es una solución sólida sobresaturada de carbono atrapado, en forma de agujas. Es una solución muy dura, la segunda más dura después de la cementita y es magnética. Las placas delgadas y lenticulares se extienden en forma recta a lo largo del grano de austenita progenitora. Se forma a una tasa alta de enfriamiento.

La martensita tiene una temperatura de inicio de transformación M_S y otra de final M_F . La temperatura de inicio de transformación no es siempre la misma, ya que depende de muchos factores, destacando entre ellos la composición del acero y la velocidad de calentamiento y enfriamiento.

La figura 3.54 muestra la micro-estructura martensítica.

Al ocurrir la transformación martensítica, la matriz se expande un volumen que varía entre 4 % y 5 %.

En el caso del proceso de Temple Superficial con Láser los diagramas son utilizados para comprobar si el 100 % del material austenizado sufre la transformación martensítica, o si por el contrario, llega a producirse, parcialmente, la transformación bainítica.

La figura 3.55 muestra los ciclos térmicos correspondientes a un proceso llevado a cabo con una potencia, $P = 2500W$ y una velocidad de proceso $v = 600 \text{ mm/min}$.

A partir de los ciclos térmicos es posible realizar la representación de los ciclos de enfriamiento sobre el diagrama CCT, para conocer las fases metalúrgicas finales obtenidas como consecuencia de las condiciones de enfriamiento. El diagrama correspondiente a la figura 3.55 se muestra en la figura 3.56.

Figura 3.54: Estructura martensítica. Fuente: Etxe-Tar

Figura 3.55: Ciclos térmicos de un proceso de Temple Superficial con Láser

Figura 3.56: Ciclos térmicos de enfriamiento calculados mediante simulación numérica sobre un diagrama CCT

3.6. Cinética de la oxidación en calentamientos rápidos

A pesar de que el Temple Superficial con Láser es un proceso en el que se vienen depositando elevadas expectativas por sus innumerables ventajas en términos de calidad y productividad frente al temple por inducción, su implantación efectiva, no obstante, se está viendo lastrada ante la falta de herramientas predictivas fiables y flexibles. Aunque existen diversos modelos para el cálculo de temperaturas, pocos de ellos realizan un tratamiento exhaustivo de la oxidación superficial y sus importantísimas implicaciones sobre la absorción de radiación láser. Esta sección supone la introducción al fenómeno de la oxidación en el contexto del modelo acoplado temperaturas/oxidación desarrollado a lo largo de la presente Tesis Doctoral, utilizándolo para el material de trabajo, el acero $42CrMo4$.

Uno de los fenómenos colaterales que tiene lugar durante la realización del proceso de Temple Superficial con Láser es la oxidación de la superficie tratada (Pantsan et al., 2006; Nánai, 1997). Las elevadas temperaturas que se generan durante el calentamiento, de entre $900\text{ }^{\circ}\text{C}$ y $1400\text{ }^{\circ}\text{C}$, aceleran la cinética de la reacción de oxidación entre el hierro y el oxígeno presente en el aire circundante, dando lugar a la formación de una película compuesta principalmente de Fe_3O_4 (Antonov, 2002; Avery, 2002). El desarrollo de dicha película modifica la absorción de radiación láser,

pudiendo experimentar un incremento de hasta el 40 % respecto a las condiciones originales.

Debido al importante incremento de absorción asociado a la oxidación resulta tremendamente conveniente una consideración realista del fenómeno a la hora de configurar cualquier modelo térmico del proceso y para la determinación de las transformaciones metalúrgicas producidas como consecuencia del mismo.

En los trabajos de [Pantsar04, Pantsar06] se llevan a cabo sendos estudios experimentales relativos a la influencia sobre la absorción de distintas variables del proceso de Temple Superficial con Láser, como la velocidad de proceso (tiempo de interacción) o la potencia del haz láser, dando una interpretación de los resultados basada en la dependencia temporal del crecimiento de la capa de óxido; que, no obstante, no está orientada a su implementación directa en un modelo físico/numérico del proceso.

El trabajo de [Duley78] introduce la noción de coeficiente acoplado para considerar simultáneamente la absorción propia del material base y la asociada a la oxidación.

Por su parte, las investigaciones llevadas a cabo por [Nanai97] ponen de manifiesto la importancia de las características particulares del calentamiento con láser, como los elevados gradientes térmicos, o la naturaleza electromagnética de la fuente térmica sobre los parámetros que caracterizan la cinética de la reacción química de oxidación para distintos metales, transcurriendo en condiciones alejadas del equilibrio; no haciéndose una consideración específica de las condiciones del Temple Superficial con Láser.

Siguiendo las ideas anteriores, esta Tesis Doctoral ha propuesto la determinación de la capa de óxido acoplada a los cursos térmicos, utilizando una ley cinética, cuyos parámetros han sido funcionalmente relacionados con algunos parámetros de proceso característicos del Temple Superficial con Láser, permitiendo el desarrollo de un modelo flexible capaz de afrontar una amplia gama de condiciones del proceso. Una vez que se ha hecho posible el cálculo del espesor instantáneo, el siguiente paso es asociarlo con otro incremento instantáneo de absorción. En la siguiente sección se presentará una fórmula innovadora deducida de la trayectoria seguida por la radiación en el material base de óxido de la interfase.

La alta temperatura alcanzada durante el proceso bajo una atmósfera no protectora conduce de forma inevitable a la oxidación del hierro presente en la superficie de la pieza, desarrollando una capa constituida principalmente por Fe_3O_4 , [Antonov08, Iordanova08]. El crecimiento de la capa de óxido mientras el haz láser irradia cual-

quier región de la superficie aumenta la cantidad de energía absorbida en el material debido al incremento en la rugosidad de la misma. Aunque es un fenómeno ampliamente aceptado y muchos autores lo tratan, pocos estudian la forma en que el láser, como fuente de energía de alta densidad que produce un calentamiento muy rápido hace que la reacción de oxidación transcurra en condiciones alejadas del equilibrio. [Nanai07], sin embargo, muestra la dependencia de los parámetros cinéticos en la ecuación de Arrhenius, la energía de activación, E_a , y el término pre-exponencial conocido como factor de frecuencia, F_f , con la temperatura alcanzada como resultado de un calentamiento con láser, documentando cambios de varios órdenes de magnitud experimentados por ambas variables. Este trabajo propone el cálculo del espesor de la capa de óxido, y , utilizando una ley cinética cuyos parámetros, E_a y F_f , dependen de las características del proceso.

Es necesario determinar la ley cinética que relacione el espesor de la película de óxido formada, y , con el tiempo, t . Según [Huerta12], la mayoría de los fenómenos de oxidación pueden ajustarse a una ley de tipo lineal, parabólica, logarítmica, o asintótica (ver en el capítulo 2.2 el apartado relativo a las leyes de oxidación).

La modelización lineal implicaría un crecimiento constante de la película de óxido, y por lo tanto, un aislamiento nulo, lo cual no se corresponde con la estructura porosa y agrietada observable en la capa.

Por su parte, la modelización asintótica implicaría, a su vez, que la reacción ha de detenerse para un determinado espesor. Este comportamiento se asocia a una capa con propiedades íntegramente aislantes que tampoco se corresponde con la realidad, por su misma naturaleza porosa y agrietada.

El comportamiento logarítmico tiene lugar en un intervalo de temperaturas en torno a 200 °C y está asociado a una velocidad de oxidación lenta debido a la baja difusividad iónica a esas temperaturas, en cualquier caso, alejadas de las temperaturas típicas del proceso de Temple Superficial con Láser.

Debido a todas las consideraciones anteriores la ley cinética adoptada para modelizar la oxidación que tiene lugar durante el Temple Superficial con Láser debe ser una ley tipo parabólico, como la expresión dada por la ecuación (3.20).

$$y^2 = K_p t \quad (3.20)$$

La constante cinética para la ley parabólica de oxidación es una función de la temperatura que viene dada por la conocida como ecuación de Arrhenius (3.21).

$$K_p = \frac{F_f e^{\frac{-E_a}{RT}}}{\rho^2} \quad (3.21)$$

En la ecuación 3.21 F_f , representa lo que se conoce como factor de frecuencia; E_a , es lo que se conoce como energía de activación de la reacción; R es la constante universal de los gases ideales y ρ es la densidad del óxido.

La energía de activación puede plantarse como la barrera energética umbral que tiene que ser superada para iniciar una reacción química cualquiera. Mientras que en las reacciones no catalizadas se considera como un valor constante, el calentamiento continuo muy rápido impuesto por el láser durante el proceso de temple superficial compite con el tiempo necesario entre que el valor de la energía superficial ha sido alcanzado y el comienzo de la reacción propiamente dicho, el cual será llamado como iniciación de la reacción química. Aunque el tiempo consumido por la iniciación normalmente puede ser despreciado, la velocidad de calentamiento muy alta causada por el láser, hace que la temperatura siga aumentando mientras se inicia la reacción, dando lugar a un inicio de la reacción química a una temperatura más alta que si ésta sucediese con una velocidad de calentamiento más lenta. Como consecuencia de este proceso, cuanto más alta sea la velocidad de calentamiento, mayor será la energía de activación aparente, según la temperatura final a la que comience la reacción. Esto permite considerar la energía de activación como una función de la velocidad de calentamiento, tal y como se describe en la ecuación (3.22).

$$E_a = \varphi_1 \left[\frac{dI(t)}{dt} \right] / I(t) \leq I_{max} \quad (3.22)$$

Además, de cara a la integración de estos cálculos en un modelo numérico, cuando el haz láser es tal que garantiza un calentamiento continuo de cualquier punto, la energía de activación puede relacionarse directamente con el curso temporal de la irradiancia del haz mientras alcanza su valor máximo, tal y como se expresa en la ecuación (3.23).

$$E_a = \varphi_2 \left[\frac{dI(r)}{dr} \frac{dr}{dt} \right] / I(t) \leq I_{max} \quad (3.23)$$

El factor de frecuencia determina la tasa de crecimiento de la película de óxido una vez que la reacción ha superado la fase de iniciación.

En la ecuación de Arrhenius el factor de frecuencia representa la frecuencia de colisiones entre átomos durante el transcurso de la reacción química [Avery02]. Parece lógico establecer que cuanto mayor sea el valor de la irradiancia neta del láser aplicada sobre una región, más favorecida se verá la movilidad atómica y por lo tanto más elevado deberá ser el valor del factor de frecuencia.

Sin embargo, si para calcular el factor de frecuencia, una vez que la reacción de oxidación se ha iniciado, se tuviera en cuenta exclusivamente el valor de la irradiancia

local, se estaría ignorando el hecho de que, según la ecuación (3.23), la energía de activación asociada a ambos haces ha tenido que ser necesariamente distinta, y, por lo tanto, que la reacción habrá comenzado a una temperatura diferente.

La figura 3.57 muestra la sección longitudinal de dos vigas hipotéticas en las que su lado frontal es diferente, llevando a un calentamiento más progresivo a la izquierda y otro más abrupto a la derecha, pero cuyas regiones traseras son completamente iguales. La flecha representa la dirección de su movimiento.

Figura 3.57: Dos haces láser hipotéticos que conducen a un calentamiento más progresivo a la izquierda y a uno más abrupto a la derecha

En consecuencia, el factor de frecuencia tiene que estar funcionalmente relacionado no sólo con la irradiancia del haz, sino también con la energía de activación aparente que las condiciones del proceso han impuesto a la reacción, tal y como se expresa en la ecuación (3.24).

$$F_f = \varphi_3 [I(t), E_a] \quad (3.24)$$

La caracterización de los parámetros cinéticos, para obtener expresiones explícitas para las ecuaciones (3.22)-(3.24) se ha llevado a cabo a través de un procedimiento iterativo que, partiendo de parámetros de reacciones cercanos al equilibrio [Abuluwefa12, Pryor86], han sido modificados, de forma coherente con la hipótesis establecida, hasta lograr resultados en el modelo coincidentes con las temperaturas experimentales, y, capas de óxido predichas similares a las mediciones. Como se desprende de este argumento, si se utilizaron los cursos térmicos para el procedimiento de ajuste, se tuvo que tener en cuenta al mismo tiempo el incremento de absorción debido al óxido. Por lo tanto, los parámetros cinéticos fueron necesarios para ser determinado después de una estimación razonable de la eficiencia de absorción del óxido para diferentes espesores de película.

La figura 3.58 izquierda representa el ciclo térmico de una prueba realizada a 200 mm/min y con una potencia de 2070 W . Para caracterizar la oxidación se ha establecido una energía de activación, $E_a = 55000 \text{ J/mol}$ para ajustar la temperatura máxima a los resultados experimentales.

Figura 3.58: Ciclos térmicos de un punto en superficie para $P = 2070 \text{ W}$ y $v = 200 \text{ mm/min}$ izqda. y para $P = 4930 \text{ W}$ y $v = 1000 \text{ mm/s}$ dcha.

La figura 3.58 derecha. representa el ciclo térmico de una prueba realizada a $P = 4390 \text{ W}$ y $v = 1000 \text{ mm/s}$, junto con el espesor de capa de óxido calculado considerando una energía de activación, $E_a = 241000 \text{ J/mol}$, para ajustar la temperatura máxima a los resultados experimentales.

La figura tabla 3.4 muestra los parámetros de proceso de todas las pruebas sobre las que se ha realizado un proceso de ajuste similar al ilustrado en la figura 3.58.

Tabla 3.4: Parámetros de proceso de las pruebas para el ajuste de E_a y de F_f

$V_p \text{ (mm/min)}$	$P \text{ (W)}$	$D_0 \text{ (mm)}$	$T_{Max} \text{ (°C)}$	$E_a \text{ (J/mol)}$	$F_f \text{ (Kg}^2\text{/m}^4\text{s)}$
250	3050	31	1360	210000	1500
400	3400	31	1150	217000	5500
600	4000	26	1375	220000	60000
1000	4930	10	1252	225000	90000

A partir de los resultados experimentales la energía de activación, E_a se expresa explícitamente a través de la ecuación (3.25).

$$E_a = -4,188 \cdot 10^8 \cdot \left(\frac{dI}{dt} \right)^{-1,136} + 230582 \quad (3.25)$$

En la ecuación (3.25), la magnitud dI/dt debe expresarse en $\text{W/cm}^2\text{s}$. Su comportamiento asintótico muestra que el efecto de aumentar la brusquedad del calentamiento tiende a tener un efecto limitado sobre la energía de activación de un cierto

valor. A pesar de que la ecuación propuesta tiene una asíntota cercana a 230600 J/mol , debe interpretarse como una tendencia en el comportamiento de la función, más que como un valor fijo.

De la misma manera, F_f , se ajusta, de acuerdo con la hipótesis establecida en la ecuación (3.24), utilizando una ecuación polinomial, con grado 2 para la irradiancia y 1 para la energía de activación, tal y como se muestra en la ecuación (3.26).

$$F_f = 96170 + 134900E_a - 113500I - 140700E_aI + 4720I^2 \quad (3.26)$$

En la ecuación (3.26) se requiere que I sea introducido en W/cm^2 y E_a en J/mol .

Las ecuaciones (3.25) y (3.26) se han planificado a partir de consideraciones teóricas y se han ajustado empíricamente. Debe realizarse una comprensión completa de la energía de activación bajo velocidades de calentamiento muy elevadas, incluyendo la influencia de la velocidad de calentamiento sobre el inicio de la reacción química y otras no linealidades. Además, la interpretación de las funciones matemáticas resultantes y los coeficientes del proceso de ajuste necesitan ser profundamente comprendidos y adaptado a las situaciones consideradas en trabajos futuros. Sin embargo, las condiciones de proceso utilizadas para preparar las funciones cubren la mayor parte de las posibilidades de calentamiento superficial del láser, y conducen a resultados satisfactorios que se mostrarán en las secciones sucesivas.

3.7. Incremento de absorción debido a la oxidación

El coeficiente de absorción es uno de los parámetros con mayor repercusión en el estudio térmico del proceso de Temple Superficial con Láser. El valor total de dicho parámetro, durante el transcurso del proceso, resulta de la combinación de efectos electromagnéticos de propagación y atenuación de las ondas en un medio conductor, al que se suma la acción de una rugosidad superficial incrementada como consecuencia del desarrollo de una película de óxido.

En el presente trabajo se plantea el análisis de la absorción considerando una pequeña capa inicial de óxido, como corresponde a la mayoría de las aplicaciones industriales, así como un ángulo de incidencia aleatorio en la propagación de la radiación en la interfaz material de base-óxido.

El fenómeno por el cual la presencia de una capa de óxido aumenta la absorción total, A_T , se fundamenta en que la rugosidad de dicha capa tiene capacidad para retener, a través de múltiples rebotes en su seno, una cantidad de radiación muy

superior a la absorbida por el material de base en condiciones libres de óxido. Esta radiación retenida en la capa, se propagará entre ella misma y la superficie del material de base a lo largo de múltiples rebotes con un ángulo de incidencia aleatorio. Cabe, por lo tanto, la definición de dos tipos de eficiencias de retención de radiación por parte de la capa de óxido: a) capacidad para retener la radiación incidente desde el exterior, $\mu_I(y)$, y b) capacidad para mantener en la interfaz la radiación retenida a lo largo de los múltiples rebotes hasta su absorción o liberación total, $\mu_R(y)$. Nótese que ambos tipos de eficiencia se hacen dependientes del espesor de película y . La ecuación 3.27 representa matemáticamente la secuencia.

$$A_T = A_T(\phi) \cdot \mu_I(y) + R_F(\phi) \cdot \mu_I(y) A_F(\phi_0^{90}) + R_F(\phi) \cdot \mu_I(y)^2 A_F(\phi_0^{90}) + R_F(\phi) \cdot \mu_I(y)^3 A_F(\phi_0^{90}) \quad (3.27)$$

En la ecuación (3.27) los términos A_F y R_F representan la absorción y radiación respectivamente dadas por las conocidas como ecuaciones de Fresnel. La variable ϕ hace referencia al ángulo de incidencia, que para la propagación de radiación, que para la propagación en la interfaz material de base-óxido, es una variable aleatoria entre 0° y 90° .

La ecuación (3.27) se corresponde con una serie convergente de razón menor que 1 ($R_F \cdot \mu_I(y) < 1$), cuya expresión general viene dada por la ecuación (3.28).

$$A_T = \frac{A_F}{1 - R_F \mu_I(y)} \quad (3.28)$$

La figura 3.59 representa esquemáticamente la propagación de la radiación láser, a través de múltiples rebotes, en el seno de la capa de óxido desarrollada durante el proceso de Temple Superficial con Láser.

Figura 3.59: Esquema del proceso de absorción asociado a la película de óxido

Las características de la ecuación (3.28) son:

- Comportamiento asintótico en función de $\mu_I y$, coherente con el hecho observable de que la absorción está limitada al 100 % por mucho que crezca la película de óxido.
- Cuando la película de óxido no se ha formado la absorción total coincide con A_F .
- Desde la incidencia de una determinada cantidad de energía hasta completar su absorción máxima posible, se considera constante el espesor de óxido, debido a que la el recorrido de la luz es mucho más rápido que la reacción química.
- En lugar de considerar un valor de absorción directamente dependiente de la película de óxido, se considera una eficiencia de re-dirección que, dependiendo de la radiación reflejada por el material, determinará el valor de A_T final en cada situación.

3.8. Análisis del proceso de temple con pasadas solapadas

El Temple Superficial con Láser permite obtener un material preparado localmente para resistir el desgaste y la fatiga, manteniendo en la totalidad de la pieza sus propiedades originales de elasticidad y resiliencia. Esta forma de trabajar proporciona importantes ventajas en comparación con las técnicas convencionales, en términos de productividad y precisión de la zona térmicamente afectada.

Cuando las dimensiones de la región a tratar son mayores que el área transversal del haz láser, es necesario recurrir a la superposición de pasadas consecutivas adyacentes. En este contexto, los fenómenos ya de por sí complejos complejos en el proceso de temple superficial por láser aumentan con el recocido provocado por la zona afectada por el calor asociado a una segunda pasada adyacente, disolviendo la martensita generada por la anterior. En este contexto, los modelos físicos del proceso constituyen una herramienta fundamental para analizar la mejor configuración para evitar regiones en donde, como consecuencia del recocido, la dureza del material haya bajo el requisito de dureza nominal, o cuando esto es inevitable, reducir al máximo la extensión de las regiones con dureza inferior a las especificaciones [Totten97, Steen91, Charschan79].

Existen diferentes modelos que se ocupan de la superposición de pasadas adyacentes en el contexto del Temple Superficial con Láser. La referencia de [Lakhar08]

desarrolla un interesante estudio de las fases metalúrgicas y la distribución de la dureza cuando se necesita tener varias pasadas sucesivas, usando la ley de Fick para estudiar la difusión de carbono durante la austenización y la ley de Avrami para considerar el recocido de la martensita generada tras una pasada adyacente con el láser. Sin embargo, el uso de una ecuación de transferencia de masa para considerar la austenización, que tiene que ser acoplada con la ecuación de conducción de calor y adaptada a la microestructura del material, requiere un considerable esfuerzo computacional que limita el tamaño y la complejidad geométrica de los problemas a estudiar, evitando, de ese modo, la posible consideración situaciones realistas. La referencia [Tani08] propone otro modelo cinético y detalla un procedimiento para calcular la dureza en función de las fases metalúrgicas, ofreciendo resultados para diferentes factores superpuestos, mostrando un buen acuerdo con los resultados experimentales. En ambos casos, en las referencias [Lakhar08] y [Tani08], el estudio se aborda desde los parámetros del proceso hasta los resultados, en lugar de proponer una metodología para diseñar el proceso y la superposición de un conjunto de requisitos, tal y como el diseño de cualquier proceso de fabricación normalmente requiere. La Referencia [García-Beltran07], por su parte, presenta un estudio en el que se sistematiza el efecto de la distancia superpuesta entre pistas consecutivas, ofreciendo información útil sobre el efecto de diferentes distancias superpuestas sobre el alcance del tratamiento, en relación con otros parámetros del proceso, como la potencia o la velocidad. Por otro lado, las temperaturas críticas de equilibrio se utilizan para hacer predicciones, sin considerar el cambio de fase en condiciones alejadas del equilibrio impuesto por el calentamiento láser, condicionando la exactitud de los resultados. Además, al igual que las referencias [Lakhar08] y [Tani08], el incremento de absorción debido a la oxidación de la superficie se considera por medio de un valor global no relacionado con el crecimiento instantáneo de la capa de óxido.

En primer lugar, la presente Tesis Doctoral aplica el modelo de Temple Superficial con Láser desarrollado en la sección 3.4, de manera innovadora, al estudio del proceso de Temple Superficial con Láser con pasadas consecutivas. Ese modelo utiliza la ley Avrami para calcular la austenización, según el procedimiento propuesto en [Miokovick06], pero, con ciclos térmicos completamente realistas. Además, en este caso se mejora el tratamiento del fenómeno de la oxidación respecto a aquellos modelos en los que el incremento de absorción debido a la oxidación se describe por un coeficiente global obtenido empíricamente para un conjunto fijo de condiciones de proceso, que puede no representar adecuadamente ninguna otra, limitando enormemente la flexibilidad de los estudios. La reacción de oxidación se relaciona con las condiciones del proceso y considera que sucede lejos del equilibrio, según lo indicado en los capítulos 3.6 y 3.7.

Las ventajas intrínsecas del modelo de Temple Superficial con Láser se amplían en el caso del proceso de superposición. Los cálculos para obtener el espesor de la capa de óxido en todo el área cubierta por una primera pista permiten conocer con anticipación las condiciones superficiales y de absorción de la siguiente, en la región de superposición, y evaluar por lo tanto si las condiciones del proceso tienen que ser reajustadas para tener un efecto térmico similar. En el campo de las transformaciones metalúrgicas, la ley de Avrami se utiliza no sólo para analizar la austenización, sino también para estudiar el fenómeno de templado, cuando la zona afectada por el calor de una pasada dada transforma la martensita de la anterior en material base.

Una vez que un modelo ha sido introducido y adaptado como una herramienta adecuada para estudiar los fenómenos que ocurren en en dos pasadas consecutivas (o más), este trabajo propone un procedimiento sistemático para el diseño del proceso a partir de especificaciones realistas, atendiendo a diferentes criterios para su aplicación práctica.

El diseño necesita inicialmente de una caracterización topológica de las regiones bajo una pasada de temple con el láser, considerando la extensión tanto de la transformación martensítica y como de la zona afectada por el calor. Esta caracterización es suficiente por sí misma para demostrar que la distancia entre pasadas consecutivas para alcanzar un valor de dureza dado a una cierta profundidad tiene que ser estrictamente más menor que la anchura en la que una sola pista cumple ese requisito de dureza y no exactamente igual a ella, como dicta la intuición.

Después de conocer las limitaciones iniciales del proceso, se plantea un ejercicio de diseño práctico para ilustrar el cálculo de la distancia entre pasadas consecutivas. Se parte de las condiciones del proceso y un conjunto de requisitos en términos de dureza mínima y la profundidad que debe alcanzar. A partir de este marco, se desarrolla un procedimiento sistemático para encontrar la distancia de superposición más adecuada que cumpla con los requisitos y maximice la productividad del proceso. Se tienen en cuenta diferentes criterios de optimización según el post-procesado de la superficie tratada. Estos análisis revelan la alta complejidad de los fenómenos, donde la búsqueda de un valor alto de dureza en la parte más baja de la región templada se opone al mismo objetivo en la parte superior. Finalmente, se aclara que la agresividad del temple asociado con las características de la pasada con el láser, es decir su capacidad de destruir la martensita, constituye un factor limitante importante, forzando, en la mayoría de las veces, a tomar una solución de compromiso y a aceptar bandas de transición con valores de dureza inferiores al requisito nominal.

Los cálculos desarrollados para llevar a cabo el ejercicio de diseño, sobre todo en forma de fases metalúrgicas y mapas de dureza, fueron validados empíricamente,

con experimentos que reprodujeron las simulaciones y con la prueba de Vickers para medir la dureza, mostrando un excelente grado de coincidencia.

La figura 3.60 muestra una representación esquemática del proceso de Temple Superficial con Láser mediante pasadas consecutivas.

Figura 3.60: Esquema del proceso de Temple Superficial con Láser con pasadas consecutivas

Cuando dos pasadas consecutivas tienen lugar en un proceso de temple solapado, la pieza de material bajo la primera pasada sufre un calentamiento rápido, donde parte de la microestructura inicial se transforma en austenita, otra auto-enfriamiento rápido, donde se asume que la austenita se transforma íntegramente en martensita, Y cuando la segunda pista se desplaza paralelamente a la trayectoria de la primera, se produce un re-calentamiento (que implica una temperatura superior a $250\text{ }^{\circ}\text{C}$) asumiendo que una parte de la martensita se transforma nuevamente en el material de base. Higo. La figura 3.61 muestra esquemáticamente un posible ciclo térmico.

Mientras que la transformación de la austenita en martensita ocurre a través de un mecanismo muy específico debido al enfriamiento [Ashby84], las transformaciones de ambos, el material base (ferrita + perlita) en austenita y la martensita de nuevo en el material base, son fenómenos basados en la difusión del carbono, y por lo tanto, se pueden describir mediante el fenómeno físico.

Figura 3.61: Posible ciclo térmico de un punto de material templado y recocido en un proceso de temple con pasadas consecutivas

La presente Tesis Doctoral propone el uso de la Ley Avrami tanto para las transformaciones de austenización como para las del recocido para obtener el perfil de concentraciones de cada fase metalúrgica tras el temple mediante pasadas adyacentes consecutivas, permitiendo establecer de forma innovadora una discusión sobre la distancia de superposición más adecuada.

Los parámetros cinéticos tanto para la reacción de austenización, como para la disolución de la martensita durante el recocido asociado a una pasada adyacente consecutiva se muestran en la tabla 3.5.

Tabla 3.5: Parámetros cinéticos para las reacciones de austenización y recocido

	ΔH (eV)	C (1/s)	n (Dimensionless)
Austenization	4.185	2.84e20	1.525
Tempering	2.040	51.111e8	0.109

Una forma típica de trabajar en el proceso de temple superficial láser consiste en establecer un objetivo de dureza mínima a cierta profundidad. En el caso de procesos de pasada única, el problema se limita a la selección de los parámetros que mejor cumplen este requisito y la parte del calor que no causa austenización (y por lo tanto endurecimiento) normalmente no se analiza. Sin embargo, cuando se necesitan dos pasadas adyacentes consecutivas, la región no endurecida pero calentada de la segunda pasada es capaz de activar el mecanismo de difusión de carbono en la martensita obtenida por la primera (recocido), y por lo tanto hacer que el valor de

dureza inicialmente obtenido disminuya drásticamente. Este fenómeno introduce la distancia de superposición, OD como variable fundamental del proceso, para evitar valores de dureza bajo las especificaciones o, cuando esto no es posible, mitigar la disminución tanto como sea posible.

La figura 3.62 muestra una representación esquemática de las regiones de una sección transversal bajo una pista de láser en el material.

Figura 3.62: Regiones bajo una única pasada con el haz láser

A la vista de la figura 3.62 el efecto del tratamiento con láser ha conducido a una región endurecida, donde se ha cumplido el requisito de dureza, y otra región que ha superado una temperatura de alrededor de $250\text{ }^{\circ}\text{C}$, pero donde no tuvo lugar un ciclo térmico que haya dado como resultado una cantidad de martensita suficiente Para alcanzar el requisito de dureza. Esta última región se llamará región de recocido. La longitud a lo largo de la cual la región endurecida cumple la exigencia de dureza a la profundidad de objetivo es la anchura efectiva, W_{Ef} , por sus siglas en inglés.

Cuando se tiene que tratar una zona grande con pasadas adyacentes consecutivas, la decisión sobre el valor de la distancia de solape, OD , debe ser establecida. En un primer enfoque, la intuición sugiere que el ancho efectivo, W_{Ef} , es el máximo valor posible que puede adoptar la distancia superpuesta, sin dejar zonas no tratadas, maximizando al mismo tiempo la productividad del proceso e impidiendo que la región endurecida de la primera pasada quede excesivamente expuesta a la región de recocido de la segunda. Sin embargo, esta idea intuitiva es errónea, y si OD se hace igual al W_{Ef} , se garantiza la presencia de una región con un contenido de martensita inferior a la exigencia de dureza. La figura 3.63 muestra un esquema de tal situación. Las regiones bajo las pasadas con el láser no han sido sombreadas para tener una representación clara.

Figura 3.63: Situación en la que la distancia de solape es igual al ancho efectivo

En la figura 3.63 se ha colocado un círculo que indica la región alrededor de la cual se cruzan las barreras entre las regiones templadas de las dos pasadas consecutivas. El área izquierda del círculo (pintado en negro) contiene los puntos que, estando dentro de la región endurecida de la primera pista a la profundidad del objetivo están al lado de la frontera, y por lo tanto, tienen la cantidad mínima de martensita para alcanzar la exigencia de dureza. Si estos puntos experimentan cualquier ciclo de recocido, incluso uno muy ligero, inevitablemente su cantidad de martensita disminuirá, y la dureza caerá bajo la especificación, ya que estaba inicialmente en el límite. De hecho, los ciclos de templado en el entorno local del círculo no son los más ligeros, ya que están al lado de la región templada de la segunda pista, y por lo tanto su efecto tiene que ser necesariamente significativo. A partir de estas consideraciones, la ecuación (3.29) se puede establecer como una condición general para un proceso de superposición exitoso.

$$Ol_D < W_{EF} \quad (3.29)$$

La figura 3.64 muestra una situación en la que la ecuación (3.29).

Figura 3.64: Situación donde se cumple que la distancia de solape es menor que el ancho efectivo de la pasada

En la situación mostrada en la figura 3.64 el punto de cruce entre las regiones endurecidas de las dos pasadas adyacentes consecutivas (círculo negro) está por debajo de la profundidad objetivo y no importa si los ciclos de templeado de la segunda pista conducen a una disminución de la martensita. Al mismo tiempo, el cruce de la barrera de la segunda pasada con la línea que indica la profundidad objetivo encuentra una región en la zona templada de la primera pasada (cuadrado negro) que está relativamente alejada de su propia barrera y por lo tanto el contenido de martensita no está cerca del límite, y puede resistir el ciclo de templeado.

La ecuación (3.29) se revela de manera innovadora como una condición necesaria para hacer frente a un proceso de superposición que, sin embargo, no es suficiente para garantizar la dureza nominal en cada punto. Es teóricamente posible que los ciclos de templeado de la segunda pista sean capaces de hacer descender la concentración de martensita por debajo del valor mínimo para cumplir el requisito de dureza, incluso comenzando con una concentración del 100 % de martensita de la primera pasada, especialmente en la caso de un valor muy alto de dureza perseguido. Cuando esto sucede, se debe admitir una banda de transición con un valor de dureza inferior al especificado y el problema de optimización se convierte en la minimización de esta banda de transición atendiendo a los criterios apropiados. Este análisis requiere el uso de relaciones cinéticas para tener en cuenta la difusión del carbono impuesto por el recocido.

Para dar idea sobre la magnitud del problema asociado al recocido, las figuras 3.65 y 3.66 permiten comparar el tamaño de la zona efectivamente templada con el tamaño de la zona afectada térmicamente.

Figura 3.65: Sección transversal mostrando la transformación martensítica de un proceso de Temple Superficial con Láser

La figura 3.66 muestra la región térmicamente afectada hasta una temperatura de 500 °C.

Figura 3.66: Sección transversal mostrando la zona térmicamente afectada

A la vista de las figuras 3.65 y 3.66 se puede apreciar la importancia de tomar en consideración el calor introducido por una segunda pasada consecutiva a la martensita generada durante la pasada adyacente anterior.

En base a todas las consideraciones anteriores, la presente Tesis Doctoral propone dos criterios para el cálculo de la distancia óptima entre pasadas adyacentes consecutivas, en función de las especificaciones de diseño y las características de post-procesado.

1. Criterio para mantener la dureza objetivo a lo largo de la profundidad marcada como objetivo en los requisitos de diseño: *La segunda pasada debe retroceder con respecto al ancho efectivo de la primera hasta que la posición de su primer ciclo de recocido al lado de la primera pasada en la profundidad objetivo encuentre a la primera región dentro de la zona templada de la primera pasada cuyo contenido de martensita sea capa de resistir el mencionado ciclo de recocido de la segunda pasada, manteniendo, por lo tanto, un porcentaje de martensita que de lugar a una dureza igual o superior al requisito de diseño.*
2. Criterio para mantener un valor de dureza promedio elevado en todo el area templada. *Se mantiene el criterio anterior siempre y cuando el comienzo de la región templada de la segunda pasada no sobre pase el centro de la región templada de la primera pasada, aún dejando algunos valores con un nivel de dureza inferior a la profundidad objetivo.*

El primer criterio no considera los efectos que ocurren en posiciones por encima del objetivo de profundidad, centrando exclusivamente en la profundidad objetivo. De esta manera, el evitar la presencia de valores de dureza inferiores al requisito

mínimo en una posición a cierta profundidad, puede llevar a hacer bajar el nivel de dureza en posiciones más cercanas a la superficie.

El segundo criterio asume que puede no ser posible mantener el requisito de dureza a lo largo de todo el perfil. Se basa en la idea de que los ciclos de templeado más agresivos de la segunda pista pueden hacer que el valor de dureza descienda bajo requerimiento, incluso comenzando con una concentración de martensita de 100 %, y para unas condiciones de proceso determinadas nada, relacionado con la distancia entre pasadas, puede evitar que eso ocurra. Teniendo en cuenta esa limitación física, la estrategia del segundo criterio se basa en distribuir homogéneamente las regiones con dureza bajo especificación, sin causar un perjuicio excesivo de las posiciones próximas a la superficie, cuando ésta va a ser funcional y no se va a mecanizar.

La figura 3.67 representa esquemáticamente el proceso de cálculo que permite la utilización de cualquiera de los criterios propuestos.

Figura 3.67: Esquema de cálculo de la fracción final de martensita

De acuerdo con la figura 3.67, la región endurecida de la primera pasada y la región de templeado de la segunda deben ser discretizadas en pequeños rectángulos. La longitud de estos rectángulos determina la precisión longitudinal mientras que la altura determina la exactitud en profundidad. Siguiendo el primer criterio propuesto, la concentración de martensita de cada elemento en la posición de la profundidad objetivo (línea de elementos sombreados), $M_1, M_2, M_3, M_4 \dots$, es el punto de partida para calcular el problema de difusión con el correspondiente ciclo de recocido $T_1, T_2, T_3 \dots$, en función de la posición relativa de la primera y segunda pistas. Por ejemplo, después de satisfacer la ecuación (3.29), una posición inicial podría hacer coincidir con M_3 con T_1 y por lo tanto M_2 con T_2 y M_1 con T_3 . En

estas circunstancias, la posición más desfavorable es $M1 - T3$, donde los ciclos de templado más agresivos están afectando a una posición relativamente cercana a la barrera de la primera región endurecida. Si esta combinación conduce a una concentración insuficiente de martensita en $M1$, el criterio indica que la segunda pista debe desplazar la longitud de un rectángulo hacia la izquierda (lo que lleva al análisis $M2 - T3$), repitiendo el proceso una y otra vez, hasta la coincidencia $T3$ con tal Mi que permite alcanzar la máxima concentración posible de martensita. Sin embargo, puede suceder que para cumplirlo, la segunda pista tenga que retroceder tanto que el primer punto de la región endurecida en la segunda pista sobrepase el centro de la primera. Cuando esto sucede, el segundo criterio, que se centra en toda el área endurecida en lugar de solamente en la profundidad objetivo, establece que el retroceso de la segunda pista debe detenerse, para equilibrar la diseminación de zonas recocidas entre la profundidad objetivo y las posiciones cerradas a la superficie.

Entre las características más destacadas del análisis de Temple Superficial con Láser mediante pasadas sucesivas, cabe destacar.

- Se ha extendido, mediante consideraciones cinéticos adicionales, el modelo de temple superficial con láser para una única pasada, que considera la austenización rápida y el incremento de la absorción asociado a la oxidación superficial, para predecir, adicionalmente el cambio de fase debido al recocido y aplicarse con éxito al proceso de superposición.
- Se ha demostrado una caracterización rigurosa de las regiones causadas en el material como consecuencia de dos pasadas consecutivas, demostrando que un enfoque intuitivo típico para diseñar el proceso no conduce a un resultado exitoso.
- Se han introducido diferentes criterios de ajuste para optimizar el resultado del diseño, según las condiciones de acabado de la pieza.
- Independientemente del criterio, se ha destacado la enorme complejidad de lograr un resultado de compromiso que cumpla con los requisitos tanto en la parte superior como en la inferior de la región tratada, debido a algunas limitaciones físicas del proceso que pueden obligar a aceptar valores bajo la especificación en algunas ocasiones.

Capítulo 4

Resultados de la aplicación de la metodología propuesta al tratamiento de componentes reales

Cualquier modelo del proceso de Temple Superficial con Láser, tanto en su vertiente como herramienta predictiva, para la obtención del resultado correspondiente a una determinada combinación de parámetros de proceso, como en su vertiente analítica respecto a la fenomenología física que caracteriza el proceso, está orientado a la obtención de una serie de resultados medibles en términos cualitativos o cuantitativos.

En su primera vertiente, el modelo desarrollado en el contexto de la presente Tesis Doctoral, permite la predicción tanto de la evolución espacio-temporal de las temperaturas en cualquier punto de la geometría tratada, así como, las transformaciones metalúrgicas tanto de calentamiento como de enfriamiento a la que dichos ciclos térmicos, obtenidos mediante unas condiciones de tratamiento realistas, han dado lugar, tanto durante la fase de calentamiento del material, como durante el subsecuente enfriamiento.

La vertiente puramente predictiva se complementa los fenómenos físicos implícitos en el modelado, relativos a la cinética de los cambios de fase en condiciones alejadas del equilibrio, al desarrollo de la reacción de oxidación bajo una fuente láser y a sus implicaciones sobre el incremento de absorción asociado al desarrollo de una película de óxido superficial, complementando la naturaleza teórico-práctica que debe caracterizar cualquier modelo integral de un proceso físico.

El presente capítulo desarrollará en primer lugar los resultados relativos a las predicciones térmicas efectuadas por el modelo, enfocados, a la noción de temperatura de austenización, zona térmicamente afectada y velocidades de calentamiento y enfriamiento. Estos resultados serán procesados, en coherencia con las aportacio-

nes teóricas efectuadas en el presente trabajo, para la obtención de la fracción de austenita durante el calentamiento, seguida de la obtención de martensita durante el auto-enfriamiento del material. Junto con este análisis, el desarrollo de la capa de óxido, calculado implícitamente en el modelado, será hecho explícito, para poner de manifiesto claramente su influencia.

4.1. Batería de pruebas basadas en una F.E.P con frente caliente y frente frío

La presente sección se centra en los resultados obtenidos para distintas condiciones de proceso, en térmicos de velocidad, potencia y descentre, sobre la base de una misma topología de la fuente equivalente de potencia. La tabla 4.1 sintetiza las condiciones de proceso utilizadas en las diferentes pruebas.

Tabla 4.1: Pruebas con una fuente equivalente de potencia con forma de ocho

Prueba	Descentre (mm)	Velocidad (mm/s)	Potencia (W)	Temp. Superficial Exp. (C°)
1	21	200	2070	1233
3	10	200	1870	1252
4	10	1000	4930	1234
5	10	600	3500	1253

La figura 4.1 representa el tipo de haz láser utilizado.

Figura 4.1: Haz láser utilizado para las pruebas detalladas en la Tabla 4.1

El movimiento circular de la geometría tratada para el apoyo del cigüeñal se configura de tal forma que sea siempre el frente de mayor irradiancia del haz el primero en encontrarse la superficie sin tratar. La figura 4.2 muestra los ciclos térmicos correspondientes a la Prueba 1. Debido a la relativamente baja velocidad con que ha sido realizado el proceso, se ha obtenido un elevado tiempo de interacción y una considerable penetración del tratamiento. Se puede ver que la curva correspondiente a 1,5 mm ha superado holgadamente la temperatura de re-cristalización en el equilibrio de 727 °C.

Figura 4.2: Ciclos térmicos correspondientes a la Prueba 1

En la figura 4.3 se tiene la capa de óxido el espesor de óxido desarrollado a lo largo de la Prueba 1. Se alcanza un valor final de unos 17 μm , coherente con las observaciones experimentales.

Figura 4.3: Película de óxido correspondientes a la Prueba 1

La figura 4.4 muestra los ciclos térmicos correspondientes a la Prueba 3. A pesar de haber sido realizada a la misma velocidad de que la Prueba 1 (200 mm/min), el

tiempo de interacción resultante es algo menor debido a que el descentre de la prueba ha sido menor, y consecuentemente el área del haz proyectada sobre el cilindro ha sido también menor.

Figura 4.4: Ciclos térmicos correspondientes a la Prueba 2

En la figura 4.5 se puede ver cómo el espesor de óxido desarrollado ha resultado también algo menor como consecuencia del menor tiempo de interacción.

Figura 4.5: Película de óxido correspondientes a la Prueba 2

La figura 4.6 muestra los ciclos térmicos correspondientes a la Prueba 4. Debido a la elevada velocidad de proceso (1000 mm/s), el tiempo de interacción y la profundización del tratamiento son menores.

Figura 4.6: Ciclos térmicos correspondientes a la Prueba 4

En la figura 4.7, se aprecia cómo, debido a la mayor velocidad del proceso la capa de óxido generada es considerablemente menor que en el caso de las Pruebas 1 y 3.

Figura 4.7: Película de óxido correspondientes a la Prueba 4

La figura 4.8 contiene los ciclos térmicos correspondientes a la Prueba 5, realizada a 600 mm/min . Éstos presentan unas características intermedias entre los de las Pruebas 1 y 3, y los de la Prueba 4. El calentamiento tiene lugar de forma abrupta, aunque sin embargo se consigue una penetración del tratamiento intermedia.

En la figura 4.9 se muestra el espesor de óxido desarrollado durante la Prueba 5, se aprecia que es ligeramente superior a la Prueba 4, debido al mayor tiempo de interacción disponible.

Figura 4.8: Ciclos térmicos correspondientes a la Prueba 5

Figura 4.9: Película de óxido correspondientes a la Prueba 5

La Tabla 4.2 muestra el error relativo referido a la temperatura máxima experimental cometido en cada simulación, obtenido mediante pirometría.

Tabla 4.2: Error relativo referido a la temperatura máxima en superficie

Prueba 1	Prueba 3	Prueba 4	Prueba 5
0,48%	2,8%	0,73%	01,%

A tenor de los resultados de las simulaciones pueden realizarse algunas consideraciones:

- Distintas combinaciones de potencia, descentre y velocidad permiten obtener una temperatura máxima similar.

- En las pruebas realizadas a una velocidad de 200 mm/min el tiempo de interacción, (medible como tiempo durante el cual la temperatura es mayor a 727°C) es considerablemente superior a las pruebas en las que la velocidad es de 600 mm/min o 1000 mm/min .
- A pesar de conseguirse una temperatura máxima similar en el conjunto de pruebas, el mayor tiempo de interacción de las pruebas con menor velocidad favorece la formación de capas de óxido de mayor espesor.
- Las pruebas lentas favorecen la obtención de temperaturas más elevadas en un mayor espesor de la pieza.
- En todos los casos el error relativo referido a la temperatura máxima en superficie es pequeño, siendo inferior al 1 % en todas las pruebas excepto en la Prueba 3, donde llega a alcanzar un valor próximo al 3 %.

A continuación se presentan los perfiles de transformación austenita calculados a partir de la distribución y evolución de temperaturas obtenidas previamente. Cada resultado es comparado con la prueba experimental equivalente, en la que se representa la denominada como Zona Afectada Térmicamente (en adelante Z.A.T.).

El contorno azul en todas las figuras representa las regiones en las que la transformación austenítica ha alcanzado al menos el 1 %, el color verde aquellas regiones en las que la transformación ha llegado al 20 %, y el color rojo delimita la zona en la que la transformación ha sido mayor del 40 %.

La figura 4.10 representa el perfil correspondiente con la Prueba 1. La parte izquierda se corresponde con los valores obtenidos mediante simulación mientras que la parte derecha muestra la Z.A.T. obtenida experimentalmente.

Figura 4.10: Comparación teórico-experimental de la fracción de material transformado en la Prueba 1

La figura 4.11 representa el perfil correspondiente con la Prueba 3. La parte izquierda se corresponde con los valores obtenidos mediante simulación mientras que la parte derecha muestra la Z.A.T. obtenida experimentalmente. Debido al menor tiempo de interacción característico de la Prueba 3, la Z.A.T., ha resultado algo

menor, lo cual se ha correspondido con un valor menor de austenización en la simulación, que aún así se mantiene cerca de los 2 *mm*.

Figura 4.11: Comparación teórico-experimental de la fracción de material transformado en la Prueba 3

La figura 4.12 representa el perfil correspondiente con la Prueba 4. La parte izquierda se corresponde con los valores obtenidos mediante simulación mientras que la parte derecha muestra la Z.A.T. obtenida experimentalmente. En este caso se aprecia claramente el efecto de la mayor velocidad del proceso, con unas Z.A.T. experimental, o una zona austenizada apreciablemente menores que en el caso de las Pruebas 1 y 3.

Figura 4.12: Comparación teórico-experimental de la fracción de material transformado en la Prueba 4

Finalmente, la figura 4.13 muestra el perfil de austenización y la Z.A.T. correspondientes a la Prueba 5. Al haber sido realizada dicha prueba con una velocidad de proceso intermedia, el resultado es una profundización intermedia del tratamiento.

Figura 4.13: Comparación teórico-experimental de la fracción de material transformado en la Prueba 5

A partir de la comparación entre Z.A.T. experimental y perfil de austenización teóricos pueden extraerse algunas conclusiones.

- A pesar de que Z.A.T. y perfil de austenización no son magnitudes directamente comparables, se observa en general un buen grado de acuerdo entre los resultados teóricos y experimentales.
- Para poder realizar una comparación precisa sería necesario conocer la fracción de austenita transformada correspondiente a la máxima profundidad de la Z.A.T.
- En cualquiera de los casos planteados queda patente la tremenda influencia de las condiciones del proceso, especialmente de la velocidad del mismo, por la influencia directa que tiene sobre las velocidades de calentamiento y enfriamiento.

4.2. Batería de pruebas basadas en una F.E.P con dos frentes cualesquiera

Mientras que la utilización de fuentes equivalentes de potencia con distintos frentes se utilizó con el objeto de maximizar el tiempo de interacción y, consecuentemente, la magnitud de la transformación asutenítica, la utilización de fuentes equivalentes de potencia con una distribución transversal cualquiera también es adecuada para la metodología propuesta en el presente trabajo.

La figura 4.14 muestra una fuente equivalente de potencia con una distribución en donde no hay una distinción clara entre el frente caliente y el frente frío.

La figura 4.15 muestra los ciclos térmicos y el desarrollo de la película de óxido correspondiente a una velocidad de proceso de 600 mm/min , con una potencia de 3750 W y un descentre de 27 mm .

Como corresponde a un proceso relativamente lento, el tiempo de interacción (tiempo durante el cual la temperatura permanece por encima de la temperatura crítica de equilibrio), es considerable para los puntos alrededor de $1,5\text{ mm}$. La temperatura máxima prevista por los cálculos es de $1239\text{ }^{\circ}\text{C}$, lo que presenta muy ligeras diferencias con el resultado experimental, de $1250\text{ }^{\circ}\text{C}$.

El crecimiento de la capa de óxido muestra cierta correspondencia con los ciclos térmicos. El valor final, alrededor de $20\text{ }\mu\text{m}$, está dentro del orden de magnitud esperado.

La figura 4.16 representa la comparación entre la fracción de austenita predicha por los cálculos y la zona afectada por el calor revelada por el ataque químico de la muestra tratada.

Figura 4.14: Fuente equivalente de potencia con dos frentes similares

Figura 4.15: Ciclos térmicos y desarrollo de película de óxido para 3750 W, 600 mm/min y 21 mm de descentre

Los cálculos numéricos son capaces de predecir la profundidad de la zona afectada y la forma general de la misma, aunque algunas irregularidades pueden apreciarse como consecuencia de la interpolación gráfica de los valores calculados, la forma general es satisfactoria. La figura 4.17 muestra los ciclos térmicos bajo el centro del haz láser y el desarrollo de la película de óxido para una prueba desarrollada con unas condiciones de potencia de 4300 W, a una velocidad de proceso de 500 mm/min y con un descentre del haz láser de 31 mm.

Figura 4.16: Comparación teórico/experimental de la fracción de austenita obtenida para 3750 W, 600 mm/min y 21 mm de descentre

Figura 4.17: Ciclos térmicos y desarrollo de película de óxido para 4300 W, 500 mm/min y 31 mm de descentre

La temperatura máxima de 1160 °C coincide prácticamente con el resultado empírico y la capa de óxido resulta ser la más reducida de las tres como corresponde a un proceso rápido en el que la temperatura máxima es menor que en las otras.

La figura 4.18 muestra el perfil de austenización asociado a la prueba cuyos ciclos térmicos se muestra en la figura 4.17.

Figura 4.18: Comparación teórico/experimental de la fracción de austenita obtenida para 4300 W, 500 mm/min y 31 mm de descentre

La figura 4.18 demuestra nuevamente que el método permite un buen acuerdo entre los cálculos y los resultados experimentales. En este caso, la profundidad máxima es de aproximadamente $1,2 \text{ mm}$, que es coherente con las condiciones del proceso, y la temperatura más baja alcanzada en comparación con las otras.

4.3. Pruebas con pasadas sucesivas

La presente sección muestra las predicciones efectuadas por el modelo desarrollado en el marco de la Tesis Doctoral relativas al cálculo del porcentaje de martensita en el proceso de Temple Superficial con Láser de superficies extensas mediante pasadas adyacentes consecutivas.

Se muestran tanto los ciclos térmicos calculados, como la comparación teórico/experimental de la sección transformada.

La figura tabla 4.3 muestra las condiciones del proceso utilizadas para efectuar el tratamiento de Temple Superficial con Láser mediante pasadas sucesivas.

Tabla 4.3: Parámetros de proceso para el temple con pasadas sucesivas

Potencia (W)	Velocidad (mm/min)	Distribución energética	Diámetro del haz (mm)	Irradiancia de pico (W/cm^2)
1800	250	Gaussiana	16	2980

Los ciclos térmicos de puntos equi-espaciados bajo el centro del haz láser, así como el desarrollo de la capa de óxido en la superficie se muestran en la figura 4.19. Estos ciclos térmicos se corresponde con una pasada única del haz láser, con el material en la condiciones iniciales.

La figura 4.20 representa un diagrama de tiempo de enfriamiento continuo correspondiente al material de trabajo, donde se muestran las curvas de enfriamiento de los puntos sometidos a austenización en el centro de la pasada.

A partir de la figura 4.20 se observa que las condiciones de enfriamiento garantizan la formación de martensita, teniendo en cuenta además que la transformación bainítica para este material tiene lugar a $400 \text{ }^\circ\text{C}$ en alrededor de 7 s de refrigeración, lo cual está lejos de las actuales tasas de enfriamiento.

Como resultado final del análisis del proceso de pasada única, se puede obtener el espesor de óxido en las zonas laterales de la pasada, para tener una información tan valiosa como la condición superficial donde va a pasar el centro de la siguiente pista. Esto permite considerar el efecto sobre la absorción permitiendo ventajosamente

Figura 4.19: Ciclos térmicos asociados a las condiciones de proceso descritas en la tabla 4.3

Figura 4.20: Diagrama de enfriamiento continuo a partir de los ciclos térmicos mostrados en la figura 4.19

reajustar los parámetros del proceso si es necesario. La figura 4.21 representa la temperatura y el espesor de óxido en la superficie a 4 mm desde el centro de la primera pista en la dirección de la superposición.

Las ecuaciones cinéticas introducidas en la modelización de los procesos de cambio de fase se han utilizado para obtener el mapa de transformación correspondiente a dos pasadas paralelas aplicadas secuencialmente con una distancia, entre los centros de las mismas, de 4 mm y 5 mm, utilizando los parámetros de proceso introducidos en la tabla 4.3. Los cálculos comprenden tanto el cálculo de la martensita obtenida por la primera pasada. A continuación se calcula su disolución parcial por los mecanismos de difusión activados por la zona de afectación térmica asociada a la segunda pasada, y, al mismo tiempo, la martensita obtenida por ella misma.

Figura 4.21: Crecimiento de la película de óxido en las zonas laterales de la pasada

La figura 4.22 muestra el mapa de dureza y transformación obtenido para para dos pasadas consecutivas.

Figura 4.22: Mapa de transformación asociado a dos pasadas paralelas consecutivas separadas una distancia de 4 mm

La figura 4.23 muestra la fracción transformada en una sección transversal al tratamiento con una separación de 4 mm, obtenida mediante pulido y ataque químico.

Comparando el perfil de transformación predicho por la simulación y los resultados experimentales reales en las figuras 4.22 y 4.22, se pueden extraer algunas conclusiones. El ancho de las pistas reales en la superficie mide alrededor de 8,1 mm mientras que el ancho calculado da como resultado un valor de 9,2 mm. Estos valores implican un 13,6 % error relativo. Del mismo modo, la profundidad experimental varía entre 1,4 mm y 1,5 mm arrojando un error relativo máximo del 8 %.

Figura 4.23: Perfil transformado experimental para dos pasadas separadas 4 mm

Un análisis cualitativo de ambas imágenes indica un ligero crecimiento de la región endurecida de la segunda pasada en la prueba experimental, que no ha sido completamente reflejada por la pasada teórica. Esto puede relacionarse con una influencia superior del calentamiento residual entre la primera y la segunda pasada, cuya precisión debe mejorarse en el modelo térmico, probablemente ajustando las condiciones de contorno del problema térmico. Sin embargo, valores o errores relativos inferiores al 20 % en todas las mediciones avalan la predicción como una herramienta válida para realizar el estudio del Temple Superficial con Láser mediante pasadas sucesivas.

La figura 4.24 muestra el perfil de transformación asociado a dos pasadas paralelas separadas 5 mm.

Figura 4.24: Mapa de transformación asociado a dos pasadas paralelas consecutivas separadas una distancia de 5 mm

La figura 4.25 muestra la fracción transformada en una sección transversal al tratamiento con una separación de 5 mm, obtenida mediante pulido y ataque químico.

Llevando a cabo nuevamente la comparación entre los perfiles previsto y real, en las figuras 4.24 y 4.25, el ancho en el caso de la pasada experimental es de 8,2 mm,

Figura 4.25: Perfil transformado experimental para dos pasadas separadas 4 mm

ofreciendo un error relativo del 11 % en comparación con el predicho, con un valor de 9,2 mm. La profundidad experimental ofrece un valor de entre 1,5 mm y 1,6 mm, resultando en un 7 % del error relativo máximo. En este caso, el efecto del calor residual entre las pasadas consecutivas no ha sido tan significativo como en el caso de una distancia de solapamiento de 4 mm, probablemente debido a la mayor distancia entre pistas paralelas. Las cifras de error relativamente bajas avalan nuevamente a los mapas de transformación teóricos, que se utilizarán como una herramienta predictiva en el temple mediante pasadas sucesivas.

Observando el mapa de transformación, en contraste con el caso de 4 mm de distancia de separación entre pasadas consecutivas, la figura 4.24 muestra que la región endurecida de la segunda pasada no cubre la mayor parte de la región endurecida de la primera. Al mismo tiempo, la mayor separación entre pistas ha permitido que la región endurecida de la primera pista no esté expuesta a la parte más agresiva de la zona afectada por el calor de la segunda como en el caso de la figura 4.22, manteniendo, en algunas posiciones, valores de dureza cercanos a los valores originales.

Además de la comparación entre secciones transversales reales y experimentales, la prueba de dureza Vickers con una carga de 1 kg se ha utilizado para validar las predicciones de dureza efectuadas por el modelo.

La figura 4.26 representa la comparación entre la dureza esperada y real para el caso de una distancia de superposición de 4 mm a diferentes profundidades, 0,2 mm, 0,4 mm, 0,8 mm y 1 mm. Las barras de error se han calculado a través del método de propagación de incertidumbres, a partir de la fórmula que relaciona la dureza Vickers con la longitud de las diagonales observada tras el proceso de indentación. La figura 4.27 representa la comparación entre la dureza esperada y real para el caso de una distancia de superposición de 4 mm a diferentes profundidades, 0,2 mm, 0,4 mm, 0,8 mm y 1 mm. Las barras de error se han calculado a través del método de propagación de incertidumbres, a partir de la fórmula que relaciona la dureza

Vickers con la longitud de las diagonales observada tras el proceso de indentación.

Figura 4.26: Comparación de dureza para dos pasadas separadas 4 mm

Figura 4.27: Comparación de dureza para dos pasadas separadas 5 mm

Las comparaciones mostradas en las figuras 4.26 y 4.27, asociadas a distintas distancias de avance entre pasadas consecutivas, de 4 mm y 5 mm respectivamente, muestran un buen nivel de concordancia entre las predicciones numéricas y la dureza experimental, no sólo en los valores absolutos, sino también, y más importante, en la tendencia tanto en la dirección longitudinal como en la dirección de la profundidad.

Capítulo 5

Conclusiones y líneas de futuro desarrollo

La presente Tesis Doctoral se ha elaborado en torno al desarrollo de un modelo físico predictivo para el proceso de Temple Superficial con Láser así como a distintas aplicaciones prácticas del proceso, que han servido tanto para la validación de las distintas hipótesis establecidas durante la modelización, como para la consecución de unos resultados concretos a partir de las predicciones efectuadas por el modelo.

5.1. Conclusiones

Desde el punto de vista de las transformaciones metalúrgicas, en el caso del material de trabajo utilizado, acero AISI 4140, se ha considerado el cambio de fase asociado a la reacción de austenización como un proceso en condiciones alejadas del equilibrio termodinámico, debido a las elevadas velocidades de calentamiento impuestas por un haz láser de elevada densidad de potencia. Estas características conducen a un enfoque cinético del estudio del cambio de fase abordable desde distintas perspectivas. Mientras que los modelos basados en el estudio de la difusión atómica permiten una descripción del cambio de fase a nivel de la red cristalina atómica, el presente trabajo a utilizado la conocida como Ley de Avrami, sobre ciclos térmicos realistas, permitiendo el cálculo de la fracción volumétrica de austenita conseguida en cada punto a partir del historial térmico del mismo, permitiendo, novedosamente, una aplicación realista de la metodología, sobre piezas de cualquier geometría, y cualquier tamaño. La precisión para el cálculo de las transformaciones metalúrgicas, calculadas como una función de la temperatura, dependerá, consecuentemente, de la precisión en el cálculo de la evolución espacio-temporal de los ciclos térmicos a los que se ve sometido el material. Dicha precisión depende tanto de la correcta caracterización de las propiedades termo-físicas del material como

de la determinación precisa de la fracción de energía efectivamente absorbida por parte del material. Dicha fracción de energía absorbida, depende, a su vez, tanto de las propias características electromagnéticas de interacción entre el haz láser y el material tratado, como de el estado superficial del material.

La oxidación experimentada por la superficie del material como consecuencia de las elevadas temperaturas asociadas al proceso de Temple Superficial con Láser, ha sido establecida como la principal causa de aumento del coeficiente de absorción durante el tratamiento de la superficie de una pieza. Se ha calculado el espesor de la película de óxido formada, considerando, al igual que en el caso de la austenización, que la reacción de oxidación transcurre en condiciones alejadas del equilibrio. De este modo, partiendo de la base de parámetros cinéticos de la reacción de oxidación en condiciones conocidas, se ha realizado un ajuste teórico-práctico desarrollando funciones que relacionan los parámetros cinéticos, energía de activación y factor de frecuencia, con las condiciones del calentamiento de la superficie, variación de la temperatura e irradiancia del haz láser. Estas consideraciones han permitido obtener estimaciones realistas del espesor de película obtenido, en comparación con las mediciones experimentales, mediante en análisis de impedancia. Una vez calculado el espesor de película de óxido formado como consecuencia del calentamiento, se ha desarrollado una formula para calcular el incremento de absorción asociado a la misma, que tiene en cuenta la propagación de la radiación en el seno de la capa de óxido. Los resultados arrojados por dicha fórmula son coherentes con los valores de absorción documentados en la bibliografía y han permitido un elevado grado de acuerdo con los resultados experimentales.

Tanto los resultados asociados al cálculo de las transformaciones metalúrgicas, como los relativos al desarrollo instantáneo de la película de óxido, han sido aplicados, satisfactoriamente, al proceso de Temple Superficial con Láser mediante pasadas sucesivas, permitiendo la obtención de una distancia de solapamiento óptima, en función de la características del proceso, mediante criterios de optimización cuantitativos y cualitativos.

De forma sintética, las principales características de los trabajos desarrollados son:

1. Se ha desarrollado un modelo acoplado de temperatura-oxidación 3D que plantea la relación de los parámetros cinéticos que caracterizan la oxidación con las características del proceso. Esto mejora la flexibilidad del modelo para hacer frente a condiciones de proceso muy diferentes considerando el fenómeno de oxidación asociado a cada uno.
2. Se han incluido los cálculos del incremento de absorción como consecuencia

del desarrollo de la capa de óxido, para cada etapa del mismo durante su crecimiento.

3. La retroalimentación de los cálculos térmicos con la absorción debida a cada etapa de la capa de óxido ha conducido a resultados muy precisos en la comparación entre la temperatura máxima real y calculada.
4. El modelo es capaz de ofrecer el curso temporal del espesor de óxido, que en todas las pruebas experimentales ha resultado entre los márgenes determinados experimentalmente. Estos resultados se han comprobado mediante la medición de la capa de óxido obtenida experimentalmente.
5. Se ha obtenido el perfil de transformación utilizando la ley de Avrami con pasos discretos casi isotérmicos que muestran un buen grado de coincidencia entre los resultados teóricos y los experimentales.
6. El modelo desarrollado para considerar tanto la austenización rápida como el incremento de la absorción asociado a la oxidación superficial, se ha utilizado para predecir el cambio de fase asociado al recocido de zonas templadas y se ha aplicado con éxito al proceso de Temple Superficial con Láser mediante pasadas consecutivas.
7. Se ha muestra una caracterización rigurosa de las regiones creadas en el material por la superposición de dos pasadas consecutivas, demostrando que un enfoque intuitivo típico para diseñar el proceso no conduce a un resultado satisfactorio.
8. Se ha propuesto un procedimiento de diseño para el proceso de Temple Superficial con Láser mediante pasadas consecutivas, asociado a criterios cuantitativos y cualitativos. Los datos proporcionados por el modelo, principalmente mapas de transformación, han sido probados experimentalmente mostrando un buen acuerdo, han constituido las herramientas para llevar a cabo el diseño del proceso de temple con pasadas consecutivas.
9. Los criterios de optimización de la distancia entre pasadas consecutivas permiten tener en cuenta las condiciones de acabado de la pieza.
10. Independientemente del criterio, se ha destacado la enorme complejidad de lograr un resultado de compromiso que cumpla con los requisitos al mismo tiempo en la parte superior y en la inferior de la región templada, debido a algunas limitaciones físicas del proceso que pueden obligar a aceptar valores la especificación en algunas circunstancias.

El desarrollo de la presente tesis doctoral ha dado lugar a la publicación de los siguientes artículos:

1. Application of simplified models for the determination of working windows for laser hardening of steels, disponible en el anexo E.
2. Caracterización de la reacción de oxidación superficial y su influencia sobre la absorción de radiación durante el proceso de temple superficial con láser para el acero 42CrMo4, disponible en el anexo F.
3. Numerical-experimental analysis of the effect of surface oxidation on the laser transformation hardening of Cr Mo steels, disponible en el anexo G.
4. Numerical/experimental analysis of the laser surface hardening with overlapped tracks to design the configuration of the process for Cr-Mo steels, disponible en el anexo H.

5.2. Líneas de futuro desarrollo

Como posibles mejoras orientadas al perfeccionamiento y a la aplicación práctica del modelo cabe destacar:

1. El desarrollo de una metodología específica y precisa para la determinación del espesor de óxido formado durante el Temple Superficial con Láser, capaz de mejorar las medidas realizadas con el equipo utilizado para el presente trabajo, abundando en la caracterización precisa de todos los componentes presentes en dicha capa de óxido.
2. Aplicación del modelo acoplado temperaturas/oxidación para el cálculo de las fracciones de fases metalúrgicas producidas tanto durante las fases de calentamiento y enfriamiento durante el Temple Superficial con Láser, utilizando parámetros típicos del proceso, como los presentados de forma novedosa en el presente trabajo.
3. Profundizar en la comprensión de los fenómenos subyacentes a las tendencias y funciones asignadas para los parámetros cinéticos, energía de activación y factor de frecuencia, en función de las condiciones del proceso.
4. Utilizar sistemas para la medida de temperaturas bajo superficie (termopares), a fin de validar las predicciones hechas por el modelo sobre evolución espacio-temporal de las temperaturas en puntos no superficiales.

Bibliografía

- [ABULUWEFA] ABULUWEFA, H. T. Kinetics of high temperature oxidation of high carbon steels in multi-component gases approximating industrial steel reheat furnace atmospheres. En Proceedings of the International MultiConference of Engineers and Computer Scientists. 2012.
- [ALONSO] ALONSO, Marcelo; FÍSICA, Edward J. Finn. Fundamentos Cuánticos y Estadísticos Sistemas Técnicos de Edición. 1986.
- [ALVIN] ALVIN, P., et al. Activation energy and non-equilibrium effects in thermal reactions. Int. J. Chem. Kinet, 2007, vol. 9, no 3, p. 371-377.
- [ANTONOV] ANTONOV, V.; IORDANOVA, I. Development and application of analytical and numerical models for characterization of thermal fields during surface láser treatment. En 15th International School on Quantum Electronics: Laser Physics and Applications. International Society for Optics and Photonics, 2008. p. 702705-702705-10.
- [ANTONOV2] ANTONOV, Veronica; IORDANOVA, I.; GURKOVSKY, S. Investigation of surface oxidation of low carbon sheet steel during its treatment with Nd: Glass pulsed láser. Surface and Coatings Technology, 2002, vol. 160, no 1, p. 44-53.
- [APRAIZ] APRAIZ BARREIRO, José. Tratamientos térmicos de los aceros. 1964.
- [ASHBY] ASHBY, M. F.; EASTERLING, Kenneth Edwin. The transformation hardening of steel surfaces by láser beams I. Hypo-eutectoid steels. Acta Metallurgica, 1984, vol. 32, no 11, p. 1935-1948.

- [ATIENZA] ATIENZA, Rafael Gamboa. Diagramas binarios: teoría y aplicaciones. Sección de Publicaciones de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid, 2015.
- [AVERY] AVERY, Harold Eric. Cinética química básica y mecanismos de reacción. Reverté, 1982.
- [AVRAMI] AVRAMI, Melvin. Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change. III. The Journal of chemical physics, 1941, vol. 9, no 2, p. 177-184.
- [AVRAMI2] AVRAMI, Melvin. Kinetics of phase change. I General theory. The Journal of Chemical Physics, 1939, vol. 7, no 12, p. 1103-1112.
- [AVRAMI3] AVRAMI, Melvin. Kinetics of phase change. II transformation-time relations for random distribution of nuclei. The Journal of Chemical Physics, 1940, vol. 8, no 2, p. 212-224.
- [BAILEY] BAILEY, Neil S.; TAN, Wenda; SHIN, Yung C. Predictive modeling and experimental results for residual stresses in láser hardening of AISI 4140 steel by a high power diode láser. Surface and Coatings Technology, 2009, vol. 203, no 14, p. 2003-2012.
- [BACHS] BACHS, L. y otros, "Aplicaciones Industriales de los Láseres", Col. Productiva, Marcombo (1988).
- [BASS] BASS, Michael (ed.). Laser materials processing. Elsevier, 2012.
- [BASS2] BASS, Michael; BENNETT, Jean. Optical Properties of Metals. UNIVERSITY OF SOUTHERN CALIFORNIA LOS ANGELES CENTER FOR LASER STUDIES, 1983.
- [BATAILLE] BATAILLE, François. Contrôle en temps réel de températures au cours de traitements de surface par laser CO 2 multikilowatt. 1991. Tesis Doctoral.
- [BERGMANN] BERGMANN, H. W. "Surface Treatment", Proc. Euro-Laser Academy, Aquisgrán (1993)

- [BERTOLOTTI] BERTOLOTTI, Mario. Physical processes in laser-materials interactions. Springer Science and Business Media, 2013.
- [CAMPBELL] CAMPBELL, Flake C. (ed.). Elements of metallurgy and engineering alloys. ASM International, 2008.
- [CANTELLO] CANTELLO, M. y otros, "Simulation of Laser Transformation Hardening" Workshop on Mathematical Simulation of Laser Treatment of Materials, Lisboa (1989).
- [CARSLAW] CARSLAW, H. S. y JAEGER, J. C. Conduction of Heat in Solids", 2º Ed., Oxford University Press (1959).
- [CERNY] CERNY, Ivo, et al. An Effect of Laser Hardening on Contact and Bending Fatigue of a 42CrMo4 Steel. En Key Engineering Materials. Trans Tech Publications, 2016. p. 221-224.
- [CHARSCHAN] CHARSCHAN, Sidney S.; TICE, Edward S. Laser annealing. U.S. Patent No 4,151,014, 24 Abr. 1979.
- [CHRISTIAN] CHRISTIAN, J. W. Physical properties of martensite and bainite. Special Report, 1965, vol. 93, p. 1-19.
- [COMSOL] COMSOL, A. B. COMSOL multiphysics users guide. Version: September, 2005, vol. 10, p. 333.
- [CORDOVILLA] CORDOVILLA, Francisco, et al. Caracterización de la reacción de oxidación superficial y su influencia sobre la absorción de radiación durante el proceso de Temple Superficial con Láser para el acero 42CrMo4. Revista de Metalurgia, 2016, vol. 52, no 2, p. 067.
- [CORDOVILLA2] CORDOVILLA, Francisco, et al. Numerical/experimental analysis of the laser surface hardening with overlapped tracks to design the configuration of the process for Cr-Mo steels. Materials and Design, 2016, vol. 102, p. 225-237.
- [CORDOVILLA3] CORDOVILLA, Francisco, et al. Numerical-experimental analysis of the effect of surface oxidation on the laser transformation hardening of Cr-Mo steels. Applied Surface Science, 2015, vol. 357, p. 1236-1243.

- [CORDOVILLA-BARÓ] CORDOVILLA-BARÓ, Francisco; GARCÍA-BELTRÁN, Ángel; OCAÑA-MORENO, José Luis. Aplicación de modelos simplificados para la determinación de ventanas de trabajo para el temple de aceros por láser. DYNA-Ingeniería e Industria, 2014, vol. 89, no 5.
- [DEEM] DEEM, H. Wo; WOOD, W. D. Flash thermal diffusivity measurements using a laser. Review of Scientific Instruments, 1962, vol. 33, no 10, p. 1107-1109.
- [DINESH] DINESH BABU, P.; BALASUBRAMANIAN, K. R.; BUVANASHEKARAN, G. Laser surface hardening: a review. International Journal of Surface Science and Engineering, 2011, vol. 5, no 2-3, p. 131-151.
- [DULEY] DULEY, W. W., et al. Coupling coefficient for cw CO2 laser radiation on stainless steel. Optics and Laser Technology, 1979, vol. 11, no 6, p. 313-316.
- [ERICSSON] ERICSSON, T.; CHANG, Y. S.; MELANDER, M. Residual Stresses and Microstructures in Laser Hardened Medium and High Carbon Steels. En Proceedings of the 4th International Congress on Heat Treatment of Materials, Berlin, Int. Federation for the Heat Treatment of Materials. 1985. p. 702-733.
- [FONDA] FONDA, R. W.; VANDERMEER, R. A.; SPANOS, G. Continuous Cooling Transformation (CCT) Diagrams for Advanced Navy Welding Consumables. NAVAL RESEARCH LAB WASHINGTON DC, 1998.
- [FORTUNATO] FORTUNATO, Alessandro, et al. A comprehensive model for laser hardening of carbon steels. Journal of Manufacturing Science and Engineering, 2013, vol. 135, no 6, p. 061002.
- [GARCIA BELTRÁN] GARCIA BELTRÁN, Ángel. Desarrollo y validación de un modelo computacional para la predicción y caracterización de procesos de tratamiento térmico superficial de materiales con láser. 1996. Tesis Doctoral. Industriales.

- [GARCIA BELTRÁN2] GARCIA BELTRÁN, Ángel; OCAÑA MORENO, Jose Luis; MOLPECERES ALVAREZ, Carlos Luis. TEM-PLUM: A process adapted numerical simulation code for the 3D predictive assessment of laser surface heat treatments in planar geometry. WSEAS Transactions on Computers, 2008, vol. 7, no 2, p. 65-74.
- [GARCÍA-BELTRÁN3] GARCÍA-BELTRÁN, A.; MARÍN, L. F.; OCAÑA, J. L. Análisis de la influencia del factor de solapamiento en el tratamiento térmico de superficies extensas de aceros por láser. Revista de Metalurgia, 2007, vol. 43, no 4, p. 284-293.
- [GAUDE] GAUDE-FUGAROLAS, D.; BHADESHIA, H. K. D. H. A model for austenitisation of hypoeutectoid steels. Journal of materials science, 2003, vol. 38, no 6, p. 1195-1201.
- [GIORLEO] GIORLEO, Luca; CERETTI, Elisabetta; GIARDINI, Claudio. Fe modeling of the apparent spot technique in circular laser hardening. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2013, vol. 69, no 9-12, p. 1961-1969.
- [GRUM] GRUM, J.; STURM, R. Calculation of Temperature Cycles, Heating and Quenching Rates During Laser Melt Hardening of Cast. En Lasers and Electro-optics Europe, 1996. CLEO/Europe., Conference on. IEEE, 1996. p. 195-195.
- [GRUM2] GRUM, Janez; STURM, Roman. Influence of laser surface melt-hardening conditions on residual stresses in thin plates. Surface and coatings technology, 1998, vol. 100, p. 455-458.
- [GRUM3] GRUM, Janez; STURM, Roman. Microstructure analysis of nodular iron 400-12 after laser surface melt hardening. Materials characterization, 1996, vol. 37, no 2-3, p. 81-88.
- [GUR] GUR, Cemil Hakan; PAN, Jiansheng (ed.). Handbook of Thermal Process Modeling Steels. CRC Press, 2008.

- [HAGINO] HAGINO, Hideki, et al. Design of a computer-generated hologram for obtaining a uniform hardened profile by laser transformation hardening with a high-power diode laser. *Precision Engineering*, 2010, vol. 34, no 3, p. 446-452.
- [HAIDEMENOPOULOS] HAIDEMENOPOULOS, G. N. Coupled thermodynamic/kinetic analysis of diffusional transformations during laser hardening and laser welding. *Journal of Alloys and Compounds*, 2001, vol. 320, no 2, p. 302-307.
- [HAMADA] HAMADA, A. S., et al. Enhancement in grain-structure and mechanical properties of laser reversion treated metastable austenitic stainless steel. *Materials and Design*, 2016, vol. 94, p. 345-352.
- [HEGGE] HEGGE, H. J., et al. Tempering of steel during laser treatment. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1990, vol. 21, no 3, p. 987-995.
- [HERRMANN] HERRMANN, Konrad, et al. (ed.). *Hardness testing: principles and applications*. ASM International, 2011.
- [HIBBITT] HIBBITT; KARLSSON; SORENSEN. *ABAQUS: Example Problems Manual*. Hibbitt, Karlsson and Sorensen, 2001.
- [HÖMBERG] HÖMBERG, Dietmar. A mathematical model for the phase transitions in eutectoid carbon steel. *IMA journal of applied mathematics*, 1995, vol. 54, no 1, p. 31-57.
- [HÖMBERG2] HÖMBERG, Dietmar. A numerical simulation of the Jominy end-quench test. *Acta Materialia*, 1996, vol. 44, no 11, p. 4375-4385.
- [HUERTA] HUERTA, Enrique Otero. *Corrosión y degradación de materiales*. Síntesis, 1997.
- [HUYAN] HUYAN, Fei; HEDSTRÖM, Peter; BORGSTAM, Annika. Modelling of the Fraction of Martensite in Low-alloy Steels. *Materials Today: Proceedings*, 2015, vol. 2, p. S561-S564.

- [ION] ION, John. Laser processing of engineering materials: principles, procedure and industrial application. Butterworth-Heinemann, 2005.
- [IORDANOVA] IORDANOVA, I.; ANTONOV, V. Surface oxidation of low carbon steel during laser treatment, its dependence on the initial microstructure and influence on the laser energy absorption. Thin Solid Films, 2008, vol. 516, no 21, p. 7475-7481.
- [KATSAMAS] KATSAMAS, A. I. A computational study of austenite formation kinetics in rapidly heated steels. Surface and Coatings Technology, 2007, vol. 201, no 14, p. 6414-6422.
- [KECHEMAIR] KECHEMAIR, D.; LUNEVILLE, E. Modelisation de la trempe superficielle des aciers par laser CO₂: exploitation du code THERM2D. CTME, ETCA, 1987.
- [KECHEMAIR2] KECHEMAIR, D.; LUNEVILLE, E. Simulation numérique et contrôle de la trempe superficielle des aciers par laser CO₂. Le Journal de Physique Colloques, 1987, vol. 48, no C7, p. C7-77-C7-83.
- [KENNEDY] KENNEDY, E.; BYRNE, G.; COLLINS, D. N. A review of the use of high power diode lasers in surface hardening. Journal of Materials Processing Technology, 2004, vol. 155, p. 1855-1860.
- [KI] KI, Hyungson; SO, Sangwoo; KIM, Sanseo. Laser transformation hardening of carbon steel sheets using a heat sink. Journal of Materials Processing Technology, 2014, vol. 214, no 11, p. 2693-2705.
- [KOISTINEN] KOISTINEN, D. P.; MARBURGER, R. E. A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels. acta metallurgica, 1959, vol. 7, no 1, p. 59-60.
- [KOISTINEN2] KOISTINEN, D. P.; MARBURGER, R. E. A simplified procedure for calculating peak position in X-ray residual stress measurements on hardened steel. Trans. ASM, 1959, vol. 51, p. 537-550.

- [KOMANDURI] KOMANDURI, R.; HOU, Z. B. Thermal analysis of the laser surface transformation hardening process. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2001, vol. 44, no 15, p. 2845-2862.
- [LAKHKAR] LAKHKAR, Ritesh S.; SHIN, Yung C.; KRANE, Matthew John M. Predictive modeling of multi-track laser hardening of AISI 4140 steel. *Materials Science and Engineering: A*, 2008, vol. 480, no 1, p. 209-217.
- [LEE] LEE, Seok Jae; LEE, Young Kook. Effect of austenite grain size on martensitic transformation of a low alloy steel. *En Materials Science Forum. Trans Tech Publications*, 2005. p. 3169-3172.
- [LEUNG] LEUNG, Michael KH; MAN, H. C.; YU, J. K. Theoretical and experimental studies on laser transformation hardening of steel by customized beam. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2007, vol. 50, no 23, p. 4600-4606.
- [LO] LO, K. H.; CHENG, F. T.; MAN, H. C. Laser transformation hardening of AISI 440C martensitic stainless steel for higher cavitation erosion resistance. *Surface and Coatings Technology*, 2003, vol. 173, no 1, p. 96-104.
- [MARTÍNEZ] MARTÍNEZ, Silvia, et al. Control loop tuning by thermal simulation applied to the laser transformation hardening with scanning optics process. *Applied Thermal Engineering*, 2016, vol. 98, p. 49-60.
- [MIETTINEN] MIETTINEN, Jyrki. Calculation of solidification-related thermophysical properties for steels. *Metallurgical and materials transactions B*, 1997, vol. 28, no 2, p. 281-297.
- [MIOKOVIC] MIOKOVIC, T., et al. Description of short time phase transformations during the heating of steels based on high-rate experimental data. *En Journal de Physique IV (Proceedings)*. EDP sciences, 2004. p. 591-598.
- [MIOKOVIC2] MIOKOVIC, T., et al. Influence of cyclic temperature changes on the microstructure of AISI 4140 after laser

- surface hardening. *Acta Materialia*, 2007, vol. 55, no 2, p. 589-599.
- [MIOKOVIC3] MIOKOVIC, T., et al. Prediction of phase transformations during laser surface hardening of AISI 4140 including the effects of inhomogeneous austenite formation. *Materials Science and Engineering: A*, 2006, vol. 435, p. 547-555.
- [MIOKOVIC4] MIOKOVIC, Tatjana, et al. Influence of heating rate, cooling rate and numbers of pulses on the microstructure of AISI 4140 after short-time-hardening. *International Journal of Materials and Product Technology*, 2005, vol. 24, no 1-4, p. 207-223.
- [MIYAMOTO] MIYAMOTO, I.; MARUO, H. Transformation hardening by linear-polarised laser beam-Development of novel laser beam shaping optics and its applications to materials processing (Report 2). 1995.
- [NÁNAI] NÁNAI, László; VAJTAI, Róbert; GEORGE, Thomas F. Laser-induced oxidation of metals: state of the art. *Thin Solid Films*, 1997, vol. 298, no 1, p. 160-164.
- [NISHIYAMA] NISHIYAMA, Zenji. Martensitic transformation. Elsevier, 2012.
- [OLSEN] OLSEN, F. O. "Theoretical Investigations in the Fundamental Mechanics of High Intensity Laser Light Reflectivity", *SPIE Proc. Vol 1020, High Power CO2 Laser Systems and Applications*, 114-122 (1988).
- [ORAZI] ORAZI, L., et al. An efficient model for laser surface hardening of hypo-eutectoid steels. *Applied Surface Science*, 2010, vol. 256, no 6, p. 1913-1919.
- [PANTSAR] PANTSAR, Henrikki; KUJANPÄÄ, Veli. Diode laser beam absorption in laser transformation hardening of low alloy steel. *Journal of Laser Applications*, 2004, vol. 16, no 3, p. 147-153.

- [PANTSAR2] PANTSAR, Henrikki; KUJANPÄÄ, Veli. Effect of oxide layer growth on diode laser beam transformation hardening of steels. *Surface and Coatings Technology*, 2006, vol. 200, no 8, p. 2627-2633.
- [PEDROTTI] PEDROTTI, Frank L.; PEDROTTI, Leno S. Introduction to optics 2nd edition. *Introduction to Optics 2nd Edition* by Frank L. Pedrotti, SJ, Leno S. Pedrotti New Jersey: Prentice Hall, 1993, 1993.
- [PELLIZZARI] PELLIZZARI, M.; DE FLORA, M. G. Influence of laser hardening on the tribological properties of forged steel for hot rolls. *Wear*, 2011, vol. 271, no 9, p. 2402-2411.
- [PORTER] PORTER, David A.; EASTERLING, Kenneth E.; SHERIF, Mohamed. *Phase Transformations in Metals and Alloys*, (Revised Reprint). CRC press, 2009.
- [PROKHOROV] PROKHOROV, A. M. *Laser Heating of Metals*. Bristol. 1990.
- [PRYOR] PRYOR, Alfonso, et al. Comportamiento a la oxidación a altas temperaturas de un acero AISI 316 modificado. *Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales*, 1986, vol. 6, no 1-2, p. 55-61.
- [REITZ] REITZ, John R.; MILFORD, Frederick J.; CHRISTY, Robert W. *Foundations of electromagnetic theory*. Addison-Wesley Publishing Company, 2008.
- [ROZZI] ROZZI, Jay C., et al. Transient, three-dimensional heat transfer model for the laser assisted machining of silicon nitride: I. Comparison of predictions with measured surface temperature histories. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2000, vol. 43, no 8, p. 1409-1424.
- [SANCHO] SANCHO, P. Diseño óptico de cabezal para temple por láser. Proyecto Fin de Carrera. Universidad de Navarra, Donostia-San Sebastian. 2013.

- [SANCHO2] SANCHO, P., DOMINGUEZ, J., ISAZA, J., CORDOVILLA, F., GARCÍA-BELTRAN, A., OCAÑAM J.L., High Spatial Adaptability Beam Delivery System for the Laser Surface Hardening of Automotive Components by High Power Fibre Lasers. 17th International Conference: Laser Optics 2016 Saint Petersburg, Russia June 27 - July 1, 2016
- [SHERCLIFF] SHERCLIFF, Hugh R.; ASHBY, M. F. The prediction of case depth in laser transformation hardening. Metallurgical Transactions A, 1991, vol. 22, no 10, p. 2459-2466.
- [SKVARENINA] SKVARENINA, Stephen; SHIN, Yung C. Predictive modeling and experimental results for laser hardening of AISI 1536 steel with complex geometric features by a high power diode laser. Surface and Coatings Technology, 2006, vol. 201, no 6, p. 2256-2269.
- [SLATTER] SLATTER, T., et al. The influence of laser hardening on wear in the valve and valve seat contact. Wear, 2009, vol. 267, no 5, p. 797-806.
- [SMOLJAN] SMOLJAN, B.; ILJKIC, D.; TOMASIC, N. Mathematical modelling of hardness of quenched and tempered steel. Archives of Materials Science, 2015, vol. 86, p. 86.
- [SMOLJAN2] SMOLJAN, Bozo; ILJKIC, Dario; TRAVEN, Furio. Mathematical modelling of mechanical properties of quenched and tempered steel. International Heat Treatment and Surface Engineering, 2013, vol. 7, no 1, p. 16-22.
- [SMOLJAN3] SMOLJAN, Bozo; ILJKIC, Dario; TRAVEN, Furio. Predictions of mechanical properties of quenched and tempered steel. Strojniski vestnik, 2010, vol. 56, p. 115-120.
- [SOLINA] SOLINA, A., et al. Origin and development of residual stresses induced by laser surface-hardening treatments. Journal of Heat Treating, 1984, vol. 3, no 3, p. 193-204.
- [SORIANO] SORIANO, C., et al. Effect of laser surface hardening on the microstructure, hardness and residual stresses of austempered ductile iron grades. Applied Surface Science, 2011, vol. 257, no 16, p. 7101-7106.

- [STEEN] STEEN, William M. Laser surface treatment. En Laser Material Processing. Springer London, 1991. p. 172-219.
- [TANI] TANI, G.; ORAZI, L.; FORTUNATO, A. Prediction of hypo eutectoid steel softening due to tempering phenomena in laser surface hardening. CIRP Annals-Manufacturing Technology, 2008, vol. 57, no 1, p. 209-212.
- [TOTTEN] TOTTEN, George E.; HOWES, Maurice AH (ed.). Steel heat treatment handbook. CRC Press, 1997.
- [UJIA] UJIA, E. Análisis conceptual del estudio a fatiga de un cigüeñal. Proyecto Fin de Carrera. Universidad de Navarra, Donostia-San Sebastian. 2013.
- [VARGA] VARGA, T. y SPÖRK, N. "Material Properties and Workpiece Classification", Proc. EuroLaser Academy, Aquisgrán (1993)
- [WOO] WOO, H. G.; CHO, H. S. Three-dimensional temperature distribution in laser surface hardening processes. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture, 1999, vol. 213, no 7, p. 695-712.
- [YANEZ] YANEZ, A., et al. Modelling of temperature evolution on metals during laser hardening process. Applied Surface Science, 2002, vol. 186, no 1, p. 611-616.
- [YANG] YANG, Y.-S.; NA, S.-J. A study on residual stresses in laser surface hardening of a medium carbon steel. Surface and Coatings Technology, 1989, vol. 38, no 3, p. 311-324.
- [YANZÓN] YANZÓN, Rodolfo, et al. Predicción de la dureza de un acero revenido en función de la temperatura y la composición química. Revista Iberoamericana de Ingeniería Mecánica, 2015, vol. 19, no 1, p. 29-39.
- [WECK] WECK, M. y otros, "Laser - a Tool for Turning Centres", Proc. LANE'94, Vol I, ed. M. Geiger y F. Vollertsen, Meisenbach Bamberg (1994).

Apéndice A

Revisión de los fenómenos de Transferencia de Calor

La transferencia de calor es un fenómeno central en el proceso de Temple Superficial con Láser. El éxito del mismo recae precisamente en la obtención de los ciclos térmicos adecuados en aquellas regiones del material que se pretenden tratar. Una correcta modelización del proceso de Temple Superficial con Láser pasa necesariamente por una aproximación rigurosa a este fenómeno.

La energía absorbida por el material proveniente del haz láser incidente se transforma en calor que se transfiere desde la zona de interacción en la interfaz material-haz láser hacia el resto de la pieza y hacia el ambiente. Son tres los procesos que controlan la transferencia de calor en un proceso convencional de Temple Superficial con Láser, a saber: conducción del calor a través del propio material, convección desde la superficie de la pieza al aire circundante y radiación térmica desde la superficie del material, siendo predominante entre los tres procesos el efecto del calor conducido en el seno del propio material, condicionado por las conocidas como propiedades termo-físicas del material, conductividad térmica, κ , calor específico, C_p , densidad, ρ , y difusividad térmica χ , relacionadas mediante la ecuación (A.1).

$$\chi = \frac{\kappa}{C_p \cdot \rho} \quad (\text{A.1})$$

Las propiedades termo-físicas del material son dependientes de la temperatura debido a las diferentes estructuras cristalinas que presenta el acero a distintas temperaturas y al nivel de agitación atómica asociado al calentamiento del material. La determinación de la relación del valor de cada una de las propiedades termo-físicas con los valores de temperatura asociados al proceso de Temple Superficial con Láser es una tarea previa necesaria al desarrollo de cualquier modelo con vocación de realismo y flexibilidad del proceso de Temple Superficial con Láser.

El presente capítulo introduce de forma detallada las ecuaciones básicas que permiten modelizar el fenómeno de transferencia de calor en el proceso de Temple Superficial con Láser, el significado físico de las magnitudes fundamentales que intervienen en el proceso, así como las técnicas disponibles para determinar la relación de cada una de las propiedades termo-físicas con la temperatura y las fases cristalinas del material, seguido de las relaciones concretas determinadas para el material de trabajo utilizado en la presente Tesis Doctoral.

A.1. Ecuación general de transmisión de calor y conducción térmica

Esta sección plantea el balance energético de un material sólido en el que tiene lugar un gradiente de temperaturas. Como consecuencia de esta diferencia se producirá un flujo de energía desde la zona con mayor temperatura a la zona de menor temperatura, por lo tanto, el medio conductor para transportar la energía calorífica de una región a otra del material sus propias partículas constitutivos, esto es, sus moléculas, átomo o electrones.

La conducción del calor en el seno de un material como fenómeno asociado a sus átomos o moléculas pone de manifiesto la importancia de la organización de dichas partículas fundamentales en el desarrollo del proceso. Este es el motivo por el cual los metales, caracterizados por lo que se conoce como una **estructura cristalina**, ordenada en patrones geométricos regulares, se caracterizan por *conducir mejor el calor*, que cualquier otro tipo de material, especialmente aquellos de estructura microscópica amorfa, como es el caso de los plásticos y algunos materiales cerámicos.

La capacidad de un material para conducir el calor se conoce como conductividad térmica y se mide mediante el conocido como coeficiente de conductividad térmica denotado por el símbolo κ . La conductividad térmica se define como la capacidad de un material para que sus partículas microscópicas puedan transmitir su energía cinética a sus partículas adyacentes. En el Sistema Internacional de Unidades la conductividad térmica se expresa en $W/m \cdot K$.

La tabla A.1 contiene el valor orientativo del coeficiente de conductividad térmica de algunos materiales buenos conductores, en las columnas de la izquierda, y de malos conductores o aislantes en las columnas de la derecha. Los valores están referidos a una temperatura de $300\ K$.

Definida la propiedad de los materiales que caracteriza su comportamiento para permitir que el calor fluya en su seno, el siguiente paso consiste en dominar la

Tabla A.1: Conductividad térmica de materiales buenos conductores

Material buen conductor	κ ($W/m \cdot K$)	Material aislante	κ ($W/m \cdot K$)
Acero	47	Amianto	0,04
Aluminio	237	Corcho	0,03
Bronce	150	Ladrillo	0,80
Cobre	380	Fibra de Vidrio	003
Estaño	64	Madera	0,13
Hierro	80	Mica	0,35
Latón	100	Parafina	0,21
Litio	300	Tierra	0,80
Mercurio	80	Vidrio	0,80
Níquel	84	Agua	0,60
Oro	310	Aire	0,02
Plata	410	Alcohol	0,16
Titanio	22	Glicerina	0,29
Zinc	130		

evolución espacio-temporal de las temperaturas en un cuerpo en el que se tiene un gradiente térmico, esto es, predecir la temperatura de cualquier punto de un cuerpo en el que se ha hecho una diferencia de temperaturas, y que por hipótesis, se considerará aislado del resto del universo.

Considérese un paralelepípedo de lado diferencial como el mostrado en la figura A.1. Bajo las hipótesis establecidas, utilizando el principio de la conservación de la energía se tiene que la diferencia entre la energía térmica que entra, q_x y la que sale q_{x+dx} a la energía acumulada en el propio paralelepípedo diferencia más la posible energía generada o absorbida por el propio material, debida a posibles reacciones químicas, o algún otro proceso que implique transformaciones con intercambio de energía.

Considerando la dirección x , la diferencia entre la energía que entra y la que sale, Δq , viene dada por la ecuación (A.2).

$$\Delta q = q_x - q_{x+dx} \quad (A.2)$$

Al tratarse de una variación que tiene lugar en una longitud diferencial, q_{x+dx} , viene dado por la ecuación (A.3).

$$\Delta q_{x+dx} = q_x + \frac{\partial q}{\partial x} dx \quad (A.3)$$

Figura A.1: Paralelepípedo de lado diferencial atravesado por un flujo de energía calorífica

De este modo la ecuación (A.2) puede escribirse como la ecuación (A.4).

$$\Delta q = q_x - \left(q_x + \frac{\partial q}{\partial x} dx \right) \Rightarrow \Delta q = -\frac{\partial q}{\partial x} dx \quad (\text{A.4})$$

Si en vez de flujos netos de energía se trabaja con flujos de energía por unidad de tiempo, la magnitud se denota mediante la letra $\dot{q}$. De este modo la ecuación (A.4), puede expresarse como se muestra en la ecuación (A.5).

$$\Delta \dot{q}_x = -\frac{\partial \dot{q}}{\partial x} dx \quad (\text{A.5})$$

Caracterizado el flujo térmico que atraviesa el elemento diferencial, el siguiente paso consiste en asociarlo con un incremento de temperatura mediante la conocida como **ley de Fourier**. Esta ley establece que la cantidad de energía térmica que atraviesa una superficie por unidad de tiempo es directamente proporcional al área de dicha superficie, a la conductividad del material y al incremento de temperatura experimentado, e inversamente proporcional a la distancia que separa dicha superficie de la región cuya temperatura superior a la del resto del cuerpo está induciendo el flujo térmico, eq. (A.6).

$$\dot{q} = \frac{\kappa A \Delta T}{d} \quad (\text{A.6})$$

En el paralelepípedo diferencial se tiene que $A = dy \cdot dz$, y la distancia entre sus dos caras perpendiculares a la dirección x es dx , por consiguiente la ley de Fourier aplicada sobre el paralelepípedo diferencia viene dada por la eq. (A.7).

$$\dot{q} = \frac{\kappa dy dz dT}{dx} \quad (\text{A.7})$$

Introduciendo el valor de $\dot{q}$ dado por la ecuación (A.7) en la ecuación (A.5) se llega a la ecuación (A.8).

$$\Delta \dot{q}_x = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa dydz \frac{dT}{dx} \right) \Rightarrow \Delta \dot{q}_x = \frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) dx dy dz \quad (\text{A.8})$$

De forma análoga en la dirección y se tiene el flujo de calor dado por (A.9).

$$\Delta \dot{q}_y = \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial y} \right) dx dy dz \quad (\text{A.9})$$

y para la dirección z dado por la ecuación (A.10).

$$\Delta \dot{q}_z = \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial z} \right) dx dy dz \quad (\text{A.10})$$

La energía acumulada por el paralelepípedo diferencial será igual la la variación de su energía interna por unidad de tiempo $\dot{U}$, por la masa de dicho paralelepípedo, m . La variación de energía interna viene dada por la ecuación (A.11), donde T referencia la temperatura en un instante dado respecto a una temperatura de referencia y C_p representa el calor específico del material.

$$\dot{U} = C_p \cdot \frac{T}{t} \quad (\text{A.11})$$

La masa del elemento diferencial será igual a su volumen $dx dy dz$ por la densidad del material, ρ , eq. (A.12).

$$m = \rho \cdot dx dy dz \quad (\text{A.12})$$

De este modo la acumulación de energía interna $\dot{U}$ viene dada por la ecuación (A.13).

$$\dot{U} = C_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} dx dy dz \quad (\text{A.13})$$

Finalmente, si se denota la energía producida por el material por unidad de volumen y de tiempo como $\dot{Q}$, esta contribución energética viene dada por la eq. (A.14).

$$\dot{Q} dx dy dz \quad (\text{A.14})$$

Realizando el balance entre el flujo de energía dado por las ecuaciones (A.8), (A.9) y (A.10), la energía interna acumulada por el material, (A.13) y la energía generada, (A.14), se llega a la ecuación general de conducción del calor, eq. (A.15).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\kappa \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \dot{Q} + \rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} \quad (\text{A.15})$$

La ecuación (A.15) permite obtener la evolución espacio-temporal de las temperaturas de cualquier punto de un cuerpo en el que existe un gradiente térmico. Entre otras hipótesis se ha establecido el aislamiento térmico entre el cuerpo estudiado y el resto del universo, condición que sin embargo no garantiza una representación realista del fenómeno en el caso de un tratamiento convencional de Temple Superficial con Láser. El proceso típicamente suele llevarse a cabo en condiciones de atmósfera no protectora donde la superficie caliente del material tratado emite calor en forma de ondas electromagnéticas mediante el mecanismo conocido como **radiación térmica**, o intercambiando calor con el aire circundante mediante un mecanismo de **convección térmica**. La modelización realista del proceso de Temple Superficial con Láser requiere de la consideración de dichos fenómenos.

A.2. Radiación térmica

La radiación térmica consiste en la transferencia de calor en forma de ondas electromagnéticas, y por lo tanto, buena parte de las características del fenómeno serán las propias que caracterizan su propagación: puede tener lugar tanto en presencia de materia como en el vacío, se propagan a la velocidad de la luz, los cuerpos pueden reaccionar reflejándolas, transmitiéndolas o absorbiéndolas, con el consiguiente aumento de energía interna y de temperatura.

Algunas de las características más importantes del fenómeno de la radiación térmica, pueden sintetizarse en los siguientes puntos:

- A diferencia de los fenómenos de convección o de conducción la radiación no precisa de una diferencia de temperaturas en distintas partes de un mismo cuerpo o entre cuerpos distintos en contacto. Según las leyes termodinámicas cualquier cuerpo cuya temperatura supere los 0 K emite energía en forma de radiación térmica. Esto no significa que siempre haya que tenerla en cuenta. Sólo se hace si su importancia relativa respecto a los otros mecanismos de transmisión de calor es grande. La radiación llega a ser predominante a partir de una temperatura de 550 C° .
- La radiación depende de la temperatura termodinámica del cuerpo emisor y es independiente de la temperatura del cuerpo receptor o del ambiente. Por tanto, la energía que radian todos los cuerpos es consecuencia directa de su temperatura (en cualquier estado térmico).

- La radiación no es calor pero se convierte en él mediante la absorción de las ondas electromagnéticas por la materia y deja, entonces, de ser radiación para fluir hacia el interior del sólido por conducción.
- La radiación térmica, como onda electromagnética, se mueve a través del espacio siguiendo líneas rectas y solamente las sustancias que se encuentran en el camino seguido las ondas emitidas por el cuerpo radiante pueden interceptar la radiación procedente de él.
- La longitud de onda, λ , en la que los cuerpos emiten radiación térmica varía en función de su temperatura termodinámica. Los valores de longitud de onda varían entre $\lambda = 10^{-7} \text{ m}$ y $\lambda = 10^{-4} \text{ m}$, incluyendo el espectro visible completo y entrando en parte de los espectros infrarrojo y ultravioleta.

El comportamiento de los materiales respecto a la absorción, transmisión y reflexión de la radiación térmica se ajusta a las leyes y fenómenos descritos en el capítulo correspondiente sobre propagación de ondas electromagnéticas en distintos medios.

La magnitud que permite evaluar la cantidad de energía en forma de radiación térmica emitida por un cuerpo se denomina **emisividad** y se cuantifica mediante el conocido como coeficiente de emisividad denotado mediante la letra griega ϵ , eq. (A.16)

$$\epsilon = \frac{\text{Radiación emitida por el cuerpo}}{\text{Radiación emitida por un cuerpo negro}} \quad (\text{A.16})$$

La definición de emisividad introduce el concepto de **cuerpo negro**; este se define como aquel que no refleja ni trasmite nada de la radiación incidente. Su nombre fue introducido por Kirchhoff en el año 1862, y resulta de utilidad teórica en el estudio de la emisión de radiación electromagnética. A pesar de que el concepto de cuerpo negro representa una idealización teórica existen sistemas físicos reales que suponen una buena aproximación, como es el caso de una cavidad aislada, que no recibe apenas radiación del exterior, y que sin embargo emite energía en función de la temperatura a la que se encuentre.

De las definiciones introducidas se desprende que un cuerpo negro, por consiguiente, tiene un coeficiente $\epsilon = 1$, mientras que en un objeto real, ϵ siempre se mantiene menor que 1.

La ley de Stefan-Boltzmann establece que un cuerpo negro emite radiación térmica, E con una potencia emisiva hemisférica total proporcional a la cuarta potencia de su temperatura T , eq. (A.17).

$$E = \sigma \cdot T^4 \quad (\text{A.17})$$

En la eq. (A.17) σ representa la constante de Stefan-Boltzman con un valor de $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/(m}^2 \cdot \text{K}^4)$ y T la temperatura termodinámica del cuerpo negro.

A partir de la definición del coeficiente de emisividad, eq. (A.16), se obtiene el valor de la potencia emisiva de una superficie real, eq. (A.18).

$$E = \epsilon \cdot \sigma \cdot T^4 \quad (\text{A.18})$$

A partir de estas definiciones el problema se centra en la determinación del coeficiente de emisividad de un material en particular para unas condiciones de trabajo determinadas.

A.3. Convección térmica

En el contexto del proceso de Temple Superficial con Láser, el fenómeno de la convección tiene lugar como consecuencia del movimiento relativo entre la superficie caliente de la pieza tratada y el aire circundante. Cuanto mayor sea esa velocidad más efectivo será intercambio de calor metal-aire, presentando un efecto apreciable en el balance térmico global de la pieza tratada.

La convección se produce como consecuencia del movimiento de las moléculas de aire calentadas al contacto con la superficie caliente de la pieza tratada. El coeficiente de película, coeficiente de convección o coeficiente de transmisión superficial, representado habitualmente como h , cuantifica la influencia de las propiedades del fluido, de la superficie y del flujo cuando se produce transferencia de calor por convección.

La transferencia de calor por convección se modela con la Ley del enfriamiento de Newton, tal y como se muestra en la ecuación (A.19):

$$dQ = h dA_s (T_s - T_{inf}) \quad (\text{A.19})$$

En la ecuación (A.19) el término h denota al coeficiente de película, A_s es el área del cuerpo en contacto con el fluido, T_s representa la temperatura en la superficie del cuerpo mientras que T_{inf} representa la temperatura a cierta distancia del cuerpo.

La determinación del coeficiente de película, que puede expresarse en unidades de W/m^2 , requiere un estudio específico para cada situación en función de:

- tipo de convección (forzada o natural)
- régimen del fluido (laminar o turbulento)
- la velocidad del flujo

- la viscosidad del fluido
- la densidad del fluido
- la conductividad térmica del fluido
- calor específico del fluido
- coeficiente de dilatación del fluido
- la geometría de la superficie de intercambio
- la rugosidad de la superficie de intercambio
- la temperatura

Con todas estas variables, el cálculo analítico presenta muchas dificultades. Los estudios experimentales permiten obtener los valores numéricos de las incógnitas para ciertos valores de los argumentos, y después seleccionar ecuaciones que expliquen los resultados obtenidos.¹ Las formas clásicas de estimarlo se basan en el empleo de correlaciones de números adimensionales (número de Nusselt), de manera que en general se dispone de una igualdad entre el número de Nusselt, que es proporcional al coeficiente de convección, y una cierta expresión que involucra al número de Reynolds y al número de Prandtl en convección forzada, y al de Prandtl y al número de Grashof en convección natural.

Apéndice B

Revisión sobre los fenómenos de Propagación de Ondas Electromagnéticas

B.1. Interacción de la Radiación Láser con la Materia

En esta sección desarrollaran las ecuaciones de propagación de ondas electromagnéticas en distintos medios, partiendo de sus ecuaciones de propagación en el espacio libre. Es estudio se llevará a cabo de forma progresiva, partiendo de situaciones más idealizadas hasta llegar a casos de interés práctico en este trabajo.

B.1.1. Ondas Electromagnéticas planas en el espacio libre

En estas condiciones, las ecuaciones de Maxwell se reducen a:

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = 0 \quad (\text{B.1})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (\text{B.2})$$

$$\nabla \wedge \mathbf{E} + j\omega\mu_0\mathbf{H} = 0 \quad (\text{B.3})$$

$$\nabla \wedge \mathbf{B} - j\omega\mu_0\mathbf{H} = 0 \quad (\text{B.4})$$

Las ecuaciones de onda para $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ se obtienen tomando el rotacional de las ecuaciones (B.3) y (B.4).

$$\nabla^2 \mathbf{E} + \epsilon_0\mu_0\omega^2 \mathbf{E} = 0 \quad (\text{B.5})$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} + \epsilon_0 \mu_0 \omega^2 \mathbf{H} = 0 \quad (\text{B.6})$$

Éstas son las ecuaciones diferenciales de una onda sin amortiguamiento que se propaga con una velocidad c :

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}} \quad (\text{B.7})$$

La ecuación (B.7) relaciona tres constantes básicas del electromagnetismo: la velocidad de una onda electromagnética c , la permitividad del espacio libre ϵ_0 , y la permeabilidad del espacio libre μ_0 . La constante μ_0 se toma de forma arbitraria de valor exactamente $4\pi \cdot 10^{-7}$ Henrios/metro. Por tanto ϵ_0 puede deducirse a partir del valor medido para la velocidad de las ondas electromagnéticas:

$$c = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s} \quad (\text{B.8})$$

$$\epsilon_0 = 8,8542 \cdot 10^{-12} \text{ F/m} \quad (\text{B.9})$$

Resolviendo el sistema formado por las ecuaciones diferenciales (B.5) y (B.6), se obtienen expresiones explícitas para $\mathbf{E}$ y $\mathbf{B}$.

$$\mathbf{E} = E_0 \cdot e^{\left(t - \frac{z}{c}\right)} \mathbf{i} \quad (\text{B.10})$$

$$\mathbf{H} = \epsilon_0 c E_0 \cdot e^{\left(t - \frac{z}{c}\right)} \mathbf{j} \quad (\text{B.11})$$

Los vectores $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ están orientados de tal forma que su producto vectorial $\mathbf{E} \wedge \mathbf{H}$ tiene el sentido de la propagación de la onda, como muestra la figura B.1.

B.1.2. Propagación de Ondas en medios homogéneos, isótropos, lineales y estacionarios

Se dice que un medio es *homogéneo* si sus propiedades no varían con la posición; *isótropo* si, para cualquier punto, sus propiedades son las mismas en todas direcciones, es *lineal* si satisface las ecuaciones (B.12):

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} \quad \mathbf{H} = \mathbf{B}/\mu \quad \mathbf{J}_f = \sigma \mathbf{E} \quad (\text{B.12})$$

dónde ϵ , μ , y la conductividad σ , son constantes independientes de $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$. Finalmente, se dice de un medio que es *estacionario*, si permanece fijo respecto al sistema de coordenadas empleado.

En estas condiciones las ecuaciones diferenciales de ondas para $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ quedan:

Figura B.1: Onda electromagnética que se propaga en la dirección positiva del eje z .

Fuente:[Reitz08]

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} - \sigma\mu \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \nabla \frac{\rho_f}{\epsilon} \quad (\text{B.13})$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} - \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} - \sigma\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = 0 \quad (\text{B.14})$$

Las expresiones de $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ que satisfacen las ecuaciones (B.13) y (B.14), pueden escribirse como:

$$\mathbf{E} = E_0 \cdot e^{j(\omega t - kz)} \mathbf{i} \quad (\text{B.15})$$

$$\mathbf{H} = \frac{k}{\omega\mu} E_0 \cdot e^{j(\omega t - kz)} \mathbf{j} \quad (\text{B.16})$$

Donde k se conoce como número de onda:

$$k = \frac{\omega}{c} \quad (\text{B.17})$$

Las propiedades de la propagación de ondas en estas condiciones pueden resumirse en:

- Los vectores $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ son normales entre sí.
- El producto vectorial $\mathbf{E} \wedge \mathbf{H}$ tiene igual dirección y sentido que la propagación de la onda.
- $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ no están necesariamente en fase ya que puede ser complejo el valor de k .

B.1.3. Propagación en medios no conductores

En medios no conductores el valor de la conductividad es nulo, $\sigma = 0$, y se asume que $\rho_f = 0$. En estas condiciones las ecuaciones de ondas (B.13) y (B.14) quedan:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (\text{B.18})$$

$$\nabla^2 \mathbf{H} - \epsilon\mu \frac{\partial^2 \mathbf{H}}{\partial t^2} = 0 \quad (\text{B.19})$$

Sustituyendo los valores de $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ en las ecuaciones (B.15) y (B.16), se llega a:

$$-k^2 + \epsilon\mu\omega^2 = 0 \Rightarrow k = \omega\sqrt{\epsilon\mu} \quad (\text{B.20})$$

Por tanto, la *velocidad de fase*, resulta

$$u \equiv \frac{\omega}{k} = \frac{1}{\sqrt{\epsilon\mu}} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r\mu_r}} \quad (\text{B.21})$$

menor que en el espacio libre, y el *índice de refracción*, se define como:

$$n \equiv \frac{c}{u} = \sqrt{\epsilon_r\mu_r} \quad (\text{B.22})$$

En un medio no magnético $\mu_r = 1$ y

$$n = \sqrt{\epsilon_r} \quad (\text{B.23})$$

El valor de ϵ_r y por tanto el de n es función de la frecuencia. Existen valores tabulados de ambas magnitudes, en el caso de n , centrados singularmente en las frecuencias ópticas.

Se cumple que:

$$\mathbf{H} = H_0 e^{j(\omega t - kz)} \mathbf{j} = \sqrt{\left(\frac{\epsilon}{\mu}\right)} E_0 e^{j(\omega t - kz)} \mathbf{j} \quad (\text{B.24})$$

En medios conductores los vectores $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ están en fase.

B.1.4. Propagación en medios conductores

Ahora, se trata de resolver las dos ecuaciones de ondas (B.13) y (B.14), para una onda que se propaga en la dirección del eje z , con $\rho_f = 0$. Sustituyendo las expresiones genéricas dadas por las ecuaciones (B.15) y (B.16), se llega a:

$$-k^2 + \omega^2\epsilon\mu - j\omega\sigma\mu = 0 \Rightarrow \quad (\text{B.25})$$

$$\Rightarrow k^2 = \omega^2 \epsilon \mu - j \omega \sigma \mu = \frac{\epsilon_r \mu_r}{(\lambda_0/2\pi)^2} \left(1 - \frac{j\sigma}{\omega \epsilon} \right) \quad (\text{B.26})$$

La cantidad $j\omega\epsilon/\sigma$, es la razón entre la cantidad de corriente de desplazamiento $\partial D/\partial t$ y la densidad de corriente de conducción $J_f = \sigma E$. El valor de este cociente recibe el nombre de $\mathcal{Q}$ del medio.

$$\mathcal{Q} = \left| \frac{\frac{\partial D}{\partial t}}{J_f} \right| = \left| \frac{\frac{\partial \epsilon E}{\partial t}}{\sigma E} \right| = \frac{\omega \epsilon}{\sigma} = \frac{\epsilon_r}{60 \sigma \lambda_0} \quad (\text{B.27})$$

Para no conductores, $\mathcal{Q} \rightarrow \infty$. Para los conductores normales, el valor de la conductividad es del orden de, $\sigma = 10^7 \text{ m}\Omega/m$, y puede aproximarse $\epsilon_r = 1$. Por consiguiente, la razón $\mathcal{Q}$ es muy pequeña para los conductores corrientes. Entonces:

$$k^2 = \frac{\epsilon_r \mu_r}{(\lambda_0/2\pi)^2} \left(1 - \frac{j}{\mathcal{Q}} \right) \quad (\text{B.28})$$

y el número de ondas k es complejo:

$$k = k_r - j k_i \quad (\text{B.29})$$

donde k_r y k_i son ambos positivos:

$$k_r = \frac{1}{(\lambda_0/2\pi)} \sqrt{\frac{\epsilon_r \mu_r}{2}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{1}{\mathcal{Q}}} + 1} \quad (\text{B.30})$$

$$k_i = \frac{1}{(\lambda_0/2\pi)} \sqrt{\frac{\epsilon_r \mu_r}{2}} \sqrt{\sqrt{1 + \frac{1}{\mathcal{Q}}} - 1} \quad (\text{B.31})$$

$$k = \frac{\sqrt{\epsilon_r \mu_r}}{(\lambda_0/2\pi)} \left(1 + \frac{1}{\mathcal{Q}} \right)^{1/4} e^{j \arctan(k_i/k_r)} \quad (\text{B.32})$$

La parte real k_r del número de ondas es $2\pi/\lambda$, donde λ es la longitud de onda en el medio. La parte imaginaria k_i es la inversa de la distancia δ en la que la amplitud se atenúa por un factor e . La cantidad $\delta = 1/k_i$, se llama longitud de atenuación.

El índice de refracción es complejo:

$$n = \frac{\lambda_0}{2\pi} (k_r - j k_i) \quad (\text{B.33})$$

Las expresiones para los vectores $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ quedan:

$$\mathbf{E} = E_0 e^{j(\omega t - k_r z) - k_i z} \mathbf{i} \quad (\text{B.34})$$

$$\mathbf{H} = H_0 e^{j(\omega t - k_r z - \theta) - k_i z} \mathbf{i} \quad (\text{B.35})$$

Donde θ representa la fase de $\mathbf{E}$, respecto a $\mathbf{H}$:

$$\theta = \arctan \frac{k_i}{k_r} \quad (\text{B.36})$$

La figura B.2, muestra la atenuación de la onda electromagnética al propagarse en un material conductor.

Figura B.2: Atenuación de una onda al penetrar en un medio conductor. Fuente: [Reitz08]

B.1.5. Propagación en medios buenos conductores

En materiales buenos conductores, el valor de Q , es mucho menor que la unidad:

$$\sqrt{\sqrt{1 + \frac{1}{Q^2}} \pm 1} \approx \sqrt{\frac{1}{Q}} \quad (\text{B.37})$$

dentro del 1 % para:

$$Q = \frac{\omega \epsilon}{\sigma} \leq \frac{1}{50} \quad (\text{B.38})$$

Lo cual es equivalente a que la densidad de corriente de conduction σE es, por lo menos, 50 veces mayor que la densidad de corriente de desplazamiento $\partial D / \partial t$. Un conductor que satisface esta condición, es por definición un *buen conductor*.

Para buenos conductores, la ecuación (B.25) queda simplificada a:

$$k^2 = -j\omega\sigma\mu \Rightarrow \quad (\text{B.39})$$

y

$$\Rightarrow k = \sqrt{-j\omega\sigma\mu} = \sqrt{\frac{\omega\sigma\mu}{2}}(1 - j) \quad (\text{B.40})$$

Entonces $k_i = k_r$ y

$$\delta = \sqrt{\frac{2}{\omega\sigma\mu}} \quad (\text{B.41})$$

Se cumple la relación:

$$\frac{E}{H} = \sqrt{\frac{\omega\mu}{\sigma}} e^{j\pi/4} \quad (\text{B.42})$$

Lo que indica que para un buen conductor $\mathbf{E}$ está adelantada $\pi/4$ radianes respecto a $\mathbf{H}$.

Las expresiones para los vectores $\mathbf{E}$ y $\mathbf{H}$ quedan:

$$\mathbf{E} = E_0 e^{-z/\delta} \cos\left(\omega t - \frac{z}{\delta}\right) \mathbf{i} \quad (\text{B.43})$$

$$\mathbf{H} = H_0 e^{-z/\delta} \cos\left(\omega t - \frac{z}{\delta} - \frac{\pi}{4}\right) \mathbf{j} \quad (\text{B.44})$$

La distancia δ de atenuación en conductores se llama *profundidad pelicular* o *profundidad de penetración*. Esta magnitud decrece si la conductividad σ , la permeabilidad relativa μ_r , o la frecuencia f aumentan. Por tanto, los buenos conductores son siempre opacos a la luz, salvo en forma de películas extremadamente delgadas.

Apéndice C

Caracterización de las propiedades térmicas del material

C.1. La técnica Laser-Flash

Las propiedades térmicas de los materiales con los que se ha trabajado en el presente Trabajo Fin de Máster han sido determinadas utilizando la técnica conocida como **Laser Flash**. El método Laser Flash fue desarrollado por Deem y otros en el año 1960 (ver [Deem60]).

Este método es aplicable a una gran variedad de materiales. En general, es posible caracterizar materiales con una difusividad térmica entre $0,01 \text{ mm}^2/\text{s}$ y $1000 \text{ mm}^2/\text{s}$, y conductividad térmica entre $0,005$ y 2000 W/mK . El equipo utilizado ha sido de la marca y modelo *LFA 457 Microflash*, su esquema se muestra en la figura C.1.

Utilizado en este trabajo es posible medir difusividades térmicas en el rango de temperaturas $T_{amb} - 1000 \text{ }^\circ\text{C}$, de forma simultánea sobre tres muestras de sección cuadrada. La cámara en la que se sitúan las muestras está aislada del elemento calefactor mediante un tubo protector que permite realizar ensayos en bajo vacío o atmósfera inerte, reductora o incluso oxidante. El procedimiento llevado a cabo se describe a continuación:

Se aplica un pulso energético a una de las caras de la muestra, que debe ser plana y con un paralelismo perfecto entre caras. El pulso calienta la superficie, y el calor absorbido se propaga por la muestra, causando un incremento de temperatura en la cara opuesta, (ver la figura C.2).

Mediante un detector IR se recoge la variación de temperatura de la cara opuesta, en función del tiempo, tal y como se muestra en la figura C.3. Con la ayuda de un

Figura C.1: Esquema del equipo utilizado para la técnica Laser Flash. Fuente: [APRAIZ64]

Figura C.2: Principio de funcionamiento. Fuente [APRAIZ64]

modelo teórico aplicado al termograma obtenido, se calcula la difusividad térmica. El modelo utilizado para obtener la difusividad térmica de todas las muestras fue Cape-Lehmann, que asume que la energía del láser se absorbe completamente en una capa delgada. Este modelo tiene en cuenta, además, la duración del pulso.

Este equipo permite además obtener la capacidad calorífica (C_p), de forma bastante aproximada, por comparación con otro material cuya capacidad calorífica es conocida. Una adecuada elección del patrón y preparación de la superficie de las muestras permite reducir el error en la determinación de la capacidad calorífica has-

Figura C.3: Temperatura superficial en función del tiempo. Fuente [APRAIZ64]

ta el 5 %, respecto otros métodos, como la calorimetría diferencial de barrido. En este caso se utilizó una muestra de *Fe* como patrón.

Una vez medidas la difusividad térmica, la capacidad calorífica y la dependencia de la densidad con la temperatura, se puede determinar la conductividad térmica a través de la ecuación (C.1).

$$\chi = \frac{\kappa}{C_p \cdot \rho} \quad (\text{C.1})$$

La figura C.4, muestra la composición de los aceros ensayados:

Acero	Composición									
	C	Cr	Cu	Mn	Mo	Ni	P	S	Si	V
Acero 1	0.37	0.12	0.16	1.34	0.022	0.062	0.016	0.06	0.51	0.083
Acero 2	0.36	0.16	0.18	1.32	0.024	0.088	0.015	0.057	0.56	0.088
Acero 3	0.38	0.11	0.15	1.45	0.023	0.11	0.017	0.055	0.57	>0.02

Figura C.4: Composición de los aceros

Se realiza la medición de dos muestras de cada tipo de acero, para comprobar la reproducibilidad en las medidas de difusividad térmica. Las muestras analizadas son de sección cuadrada, de 10,0 *mm* de lado y espesor 2,5 *mm*. Para obtener

un adecuado paralelismo y planitud de las caras, las muestras deben mecanizarse mediante corte por hilo. Mediante un lijado se redujo la rugosidad superficial. Sobre las muestras se aplicó un recubrimiento de grafito para incrementar la absorción de la energía del láser en la cara expuesta a éste, y aumentar la emisividad de la cara opuesta. Para evitar que el detector recogiese la señal del pulso del láser, y ésta interfiriese en la señal debida a la variación de la temperatura de la muestra, fue necesario aplicar una fina capa de *Au*. Se utilizó una atmósfera dinámica de argón en todo el rango de medida, tras evacuar mediante purgas a temperatura ambiente el oxígeno del interior de la cámara.

Tal y como se ha mencionado anteriormente, para determinar el C_p se usa hierro puro como patron de medición. Mediante el programa de cálculos termodinámicos *Thermo-Calc* se obtiene la dependencia de la densidad con la temperatura. No se ha considerado necesario determinar dicha dependencia mediante ensayos de dilatometría: la experiencia del laboratorio encargado de los ensayos en este tipo de aceros y en el uso del programa *Thermo-Calc* permite afirmar que las discrepancias en los valores de la densidad determinados por ambos métodos no tendrán un efecto apreciable en la conductividad térmica.

Se realizaron medidas a temperatura ambiente y a intervalos de 100 °C, hasta 700 °C. La velocidad de calentamiento fue de 10 °C/min. Se realizaron 5 disparos de láser para cada temperatura, con intervalos de 1 minuto entre disparos, para permitir una homogeneización de la temperatura de las muestras tras cada disparo. Los resultados que se muestran corresponden a la media y la desviación típica correspondiente a los 5 disparos de láser que se efectuaron.

C.2. Obtención de diagramas de transformación

La presente sección ofrece el método de elaboración de los diagramas de transformación a partir de ciclos térmicos que simulan las condiciones del tratamiento superficial por láser en aceros.

Siguiendo las pautas marcadas se detallan a continuación para el material estudiado:

- Los resultados relativos a la transformación durante el calentamiento.
- Las curvas de transformación obtenidas en los enfriamientos aplicados.
- Las micro-estructuras generadas tras cada enfriamiento caracterizadas mediante microscopía óptica y microscopía de barrido (SEM).

- Las durezas obtenidas en cada muestra
- Los diagramas CCT resultantes.

La figura C.5 muestra el ciclo térmico aplicado para el estudio del material.

Figura C.5: Ciclo térmico para el estudio del material. Fuente: Etxe-Tar

Los ciclos se han realizado en un dilatómetro Bähr 805A que, gracias a un horno de inducción, permite una gran versatilidad de velocidades de calentamiento. Los enfriamientos se realizan mediante la utilización de Helio que permite templar las muestras así como aplicar velocidades de enfriamiento más lentas de una manera controlada. Las temperaturas de inicio y final de las transformaciones de fase de han definido como 5 % y 95 % de la fracción transformada medida sobre las curvas de transformación. Las temperaturas de transformación intermedias se han definido a partir de los cambios de pendiente intermedios.

La Figura C.6 muestra la evolución de la fracción transformada durante el calentamiento en el material.

Figura C.6: Evolución de la transformación durante el calentamiento. Fuente: Etxe-Tar

La figura C.7 muestra curva de evolución de la fracción transformada durante el enfriamiento.

Figura C.7: Evolución de la transformación durante el enfriamiento. Fuente: Etxe-Tar

Para las condiciones descritas se obtiene una estructura martensítica como la que se muestra en la figura C.8.

Figura C.8: Micro-estructura obtenida como consecuencia del ciclo térmico aplicado.

Fuente: Etxe-Tar

Con la compilación de los diagramas expuestos anteriormente resulta posible construir un diagrama CCT para el material estudiado, como el que se muestra en la figura C.9.

Figura C.9: Diagrama CCT obtenido a través del estudio de las transformaciones durante calentamiento y enfriamiento. Fuente: Etxe-Tar

Apéndice D

Propiedades micro-estructurales de los aceros considerados en el trabajo

El material de referencia utilizado en todos los trabajos, tanto a nivel teórico como práctico, durante el presente proyecto ha sido el Acero forjado. En este apéndice se pretenden poner de manifiesto sus principales propiedades y características a fin de comprender su comportamiento ante distintas condiciones de funcionamiento.

D.1. Diagrama $Fe - Fe_3C$

El carbono es el elemento de aleación que ejerce mayor influencia sobre las propiedades de las aleaciones de base férrea y, por tanto, para el estudio sistemático de las aleaciones férreas se va a utilizar el diagrama hierro-carbono. La cementita es un carburo metaestable que resulta muy refractario a su descomposición en las fases estables. En las aleaciones férreas más utilizadas, esto es los Aceros, no es posible encontrar grafito salvo en circunstancias muy especiales y todo el carbono aparece disuelto en el hierro o formando carburos. El diagrama hierro-cementita o diagrama hierro-carbono metaestable es la herramienta que permite estudiar en primera aproximación la estructura de los aceros más utilizados.

Las fases presentes en el diagrama hierro-cementita, representado en la figura , son las cuatro soluciones sólidas de inserción que tienen como solvente las distintas variedades alotrópicas del hierro, las dos formas de la cementita y el líquido homogéneo.

La solución sólida α tiene como solvente al hierro con estructura C.C. y se conoce como ferrita. La solubilidad del carbono en la ferrita alcanza un valor máximo de

Figura D.1: Diagrama Hierro-Cementita. Fuente: Blog elementos estructurales. Fuente: [APRAIZ64]

0,022 % a 727 °C. La ferrita existente a 770 °C pierde a esta temperatura su carácter ferromagnético y se transforma en la solución sólida β que se conoce como ferrita β o ferrita no magnética. Existe también una tercera solución sólida con estructura C.C. que es estable por encima de 1396 °C y se conoce como ferrita δ .

Es importante destacar que la ferrita magnética y la ferrita no magnética son fases diferentes porque sus propiedades físicas son distintas y, por tanto, la transformación magnética de la ferrita es una transición de fase.

En el diagrama hierro-cementita aparece una cuarta solución sólida con estructura C.C.C. que se conoce como austenita y se identifica con la letra γ . La austenita puede llegar a disolver hasta un 2,11 % de carbono a 1148 °C. La solubilidad del carbono en la austenita es mayor que en las distintas formas de la ferrita como consecuencia de la diferencia entre el tamaño de los intersticios de las redes de C.C.C. y C.C. del hierro.

La cementita es un carburo complejo con estructura ortorrómbica y fórmula Fe_3C que funde a 1227 °C. El contenido en carbono de la cementita, que se puede calcular a partir de su fórmula, resulta ser de 6,67 %. La cementita que es ferro-

magnética a temperatura ambiente, deja de serlo cuando se calienta por encima de $230\text{ }^{\circ}\text{C}$.

En el diagrama hierro-cementita aparecen tres reacciones invariantes en las que intervienen tres fases que son:

- Reacción peritética ($1495\text{ }^{\circ}\text{C}$): $\delta(0,09\% \text{ de } C) + L(0,53\% \text{ de } C) \rightarrow \gamma(0,17\% \text{ de } C)$
- Reacción eutética ($1148\text{ }^{\circ}\text{C}$): $L(4,30\% \text{ de } C) \rightarrow \gamma(2,11\% \text{ de } C) + Fe_3C$
- Reacción eutética ($727\text{ }^{\circ}\text{C}$): $\gamma(0,77\% \text{ de } C) \rightarrow \alpha(0,22\% \text{ de } C) + Fe_3C$

El constituyente bifásico que resulta de la reacción eutectoide está formado por láminas alternadas de ferrita y cementita y recibe el nombre de perlita. Como las densidades de la ferrita y cementita en la perlita debe coincidir con la relación entre los pesos de ambas fases en este agregado bifásico. Esta relación se puede obtener por aplicación de la regla de la palanca y resulta ser de 8,66 a 1.

El agregado eutético que resulta de la solidificación del líquido con un 4,30 % de carbono se denomina ledeburita y está formado por glóbulos de austenita cotorreados por una matriz de cementita.

Una de las posibles definiciones de acero es “una aleación hierro-carbono forjable”, es decir, una aleación que se puede conformar por deformación en caliente. Para determinar cuáles son las aleaciones que se pueden forjar hay que considerar la plasticidad de los constituyentes que aparecen a temperatura elevada en el diagrama hierro-cementita.

La cementita, como compuesto intersticial que es, admite deformaciones plásticas muy reducidas y es muy frágil. Como la matriz del eutético, el constituyente que aparece cotorreando las fases proeutéticas, es la cementita, la presencia de la ledeburita hace muy difícil la conformación en caliente de las aleaciones hierro-carbono. De todos los constituyentes presentes por encima de $727\text{ }^{\circ}\text{C}$, solo la austenita con estructura C.C.C. presenta la suficiente plasticidad para admitir el conformado por deformación. Para que una aleación hierro-carbono resulte forjable, su estructura en caliente debe estar formada por una única fase, la austenita, y, por tanto, la cantidad de carbono en los aceros viene limitada por la máxima solubilidad de este aleante en la austenita. En general, el contenido en carbono de los aceros no supera el 2,1 %.

D.1.1. Puntos críticos de los aceros

Se llaman puntos críticos a aquellas temperaturas a las que comienzan o finalizan las diferentes transformaciones de fase que experimentan los aceros en estado sólido. Los métodos que se utilizan con más frecuencia para la determinación empírica de los puntos críticos son, entre otros, aquéllos que registran las variaciones de una propiedad física mientras varía la temperatura, por ejemplo, dilatometría, calorimetría o difracción de rayos X. También pueden utilizarse las curvas $t - T$ de enfriamiento lento, detectando los punto en los que se produce una reducción en la velocidad de enfriamiento. Los puntos críticos se identifican convencionalmente con la letra A que es la inicial de la palabra francesa *arrêt* que significa enfriamiento. Los puntos se identifican con subíndices según temperatura de aparición creciente.

El primer cambio de fase que aparece en el calentamiento desde temperatura ambiente, se identifica con A_0 , es la temperatura a la que se produce la transformación magnética de la cementita. La temperatura de la reacción eutectoide, que es la siguiente reacción que se produce al seguir calentando el acero, se designa con A_1 .

Mientras que cualquier acero presenta transformaciones a las temperaturas A_0 y A_1 las transformaciones que puede sufrir a temperaturas superiores dependen de su composición química. Cuando se calienta un acero con un contenido de carbono inferior a 0,35 % por encima de A_1 , la primera transformación que se observa es el cambio de magnetismo de la ferrita A_2 .

Al elevar la temperatura sobre A_2 , la proporción de austenita va creciendo hasta que, al alcanzar la temperatura A_3 , se llega a tener una estructura monofásica. A temperaturas más elevadas aparece el punto crítico A_4 que está asociado a la formación de ferrita δ .

La transformación A_2 no se observa en el calentamiento de acero hipoeutectoides con contenidos de carbono superiores a 0,35 % y en este caso la temperatura de fin de austenización se identifica como A_{32} . Para aceros con composición eutectoide e hipereutectoide, la desaparición de la ferrita se produce a una temperatura constante que se conoce como A_{321} .

Los aceros hipereutectoides solo experimentan una transformación cuando se calientan por encima de A_{321} . La temperatura a la que finaliza la austenización de un acero hipereutectoide en su calentamiento se conoce con A_{cm} .

Para distinguir entre los valores críticos obtenidos en distintas condiciones experimentales se utilizan las letras c y r , iniciales de las palabras francesas *chauffage* *refroidissement* que significan calentamiento y enfriamiento, respectivamente.

El conocimiento de los puntos críticos de los aceros es necesario para la correcta aplicación de los tratamientos térmicos ya que las temperaturas de tratamiento vienen con mucha frecuencia referidas a las críticas. Así, se habla de tratamientos subcríticos cuando la temperatura máxima que se alcanza en la realización de los mismos es menos que el punto crítico inferior A_1 , de tratamientos supercríticos si se supera la temperatura crítica superior y se llega a tener una estructura austenítica o de tratamientos intercríticos en el resto de los casos.

D.1.2. Simplificaciones del diagrama

Las simplificaciones que pueden asumirse para el manejo del diagrama son las siguientes:

- Se omite la transformación peritética. Este hecho está justificado en cuanto que en los tratamientos térmicos no se alcanza la temperatura crítica A_4 y, por tanto, los detalles de la transformación son irrelevantes de cara a la interpretación de las modificaciones estructurales que se producen en los mismos.
- No se tienen en cuenta las transformaciones magnéticas de la ferrita y la cementita ya que los tratamientos buscan actuar fundamentalmente sobre las propiedades mecánicas de los aceros..
- Se supone nula la solubilidad del carbono en la ferrita, suposición que resulta razonable a cualquier temperatura.

D.2. Constituyentes microscópicos de los aceros

Los aceros son aleaciones cuya microestructura está formada, en la gran mayoría de las ocasiones, por diversos microconstituyentes. Las propiedades de estas aleaciones van a venir determinadas por la naturaleza y proporción de sus microconstituyentes así como su morfología y distribución.

Cuando se conoce cuáles son las características individuales de cada uno de los constituyentes presentes en una aleación y el modo en que cada uno de ellos contribuye a las del agregado que forman, es posible estimar las propiedades de una aleación en función de sus constituyentes. A su vez, su morfología y distribución depende en gran medida de como se ha enfriado hasta temperatura ambiente, bien desde el tratamiento térmico o desde la conformación.

D.2.1. Ferrita

La ferrita, fase mayoritaria de los aceros al carbono en estado recocido, es una solución sólida que tiene como solvente a la forma alotrópicas con estructura cúbica centrada del hierro. Los aleantes disueltos en la ferrita pueden entrar tanto por inserción como por sustitución. Los dos aleantes más importantes por inserción son el carbono y el nitrógeno. La solubilidad de estos elementos en la ferrita es muy reducida debido a que la deformación de la red que se produce cuando estos elementos entraran en los intersticios menores de la red de hierro α es muy importante. El fenómeno de de inserción del hierro y del nitrógeno en los intersticios menores está relacionado con la geometría de estos huecos.

La resistencia a la tracción de la ferrita que aparece en los aceros no aleados en estado recocido es cercana a los 230 MPa y su alargamiento a la rotura puede llegar a ser del 40 %. Como la ferrita se comporta de un modo similar al de los sólidos plásticos ideales, su dureza se puede aproximar por medio de la relación de Tabor y resulta ser del orden de 90 HB . La resiliencia a temperatura ambiente de la ferrita es muy elevada, mayor que 200 KU (1 $KU = 130 J$), y su temperatura de transición frágil-dúctil se encuentra muy por debajo de 0 $^{\circ}C$. La ferrita es el constituyente más dúctil, más tenaz y más blando de los presentes en los aceros no aleados en estado recocido.

La ferrita es el constituyente de los aceros que presenta un carácter ferromagnético más marcado. Su permeabilidad, que puede llegar a alcanzar en condiciones favorables valores del orden de las centenas de millar, depende fuertemente de la cantidad de solutos presentes en la ferrita.

La ferrita no es coloreada por ninguno de los reactivos de ataque habituales para la metalográfica de aceros de modo que los granos de este constituyente aparecen con tonalidades claras en la observación microscópica.

D.2.2. Cementita

La cementita es un carburo de hierro de fórmula Fe_3C y estructura ortorrómbica. Ya que las diferencias entre las electronegatividades del hierro y el carbono y el tamaño de sus iones son relativamente importantes, la cementita se puede clasificar como un compuesto intersticial.

Como la relación entre los radios metálicos del hierro y el carbono es inferior a 0,59, la estructura de la cementita es compleja con una celdilla unidad que contiene 136 átomos.

La complejidad descrita de la celdilla de cementita es suficiente para pensar que el movimiento de las dislocaciones en un compuesto con esta estructura debe resultar difícil. Por consiguiente, la cementita debe ser dura y frágil. Este carburo es el más duro de los constituyentes de los aceros no aleados recocidos pudiendo presentar durezas superiores a los 67 *HRC*, teniendo como contrapartida prácticamente nulas ductilidad y tenacidad.

La cementita a temperatura ambiente presenta carácter débilmente ferromagnético, carácter que se pierde al calentar por encima de los 230 °C.

Mientras que la cementita no se oscurece tras el ataque con el nital, sí lo hace cuando se utiliza el picrato sódico alcalino en caliente como reactivo de ataque.

Carburos, nitruros y carbonitruros

Se llaman aleantes carburígenos a aquellos que se encuentran situados a la izquierda del hierro en la tabla periódica y que, por tanto, son más electropositivos que este metal. Por esta razón los aleantes carburígenos tienden a formar carburos y nitruros con más facilidad que el hierro.

Además de reaccionar con el carbono, los elementos carburígenos pueden hacerlo con el nitrógeno que siempre está presente en los aceros para formar nitruros o carbonitruros. El aluminio que se emplea como desoxidante en los aceros también puede formar nitruros.

Estos constituyentes desempeñan un papel fundamental en el control del tamaño de grano de los aceros tanto en el laminado en caliente como en el tratamiento térmico. Como los compuestos referidos son más estables que la cementita, su disolución en la austenita se produce a temperaturas mayores que A_{c3} . Los carburos, nitruros y carbonitruros sin disolver bloquean el crecimiento del grano austenítico durante el mantenimiento a temperaturas supercríticas de modo que permiten obtener una estructura fina al enfriar hasta temperatura ambiente.

D.2.3. Perlita

La perlita, el constituyente eutectoide de los aceros recocidos, está formada por láminas de cementita y ferrita alternadas. Para los enfriamientos lentos característicos de los recocidos, el contenido en carbono de la perlita es cercano a 0,77 % y el espacio interlaminar queda por encima de los 0,4 μm , espesor que está en el límite de la resolución del microscopio óptico. Estos parámetros tienen un efecto importante sobre las propiedades mecánicas del eutectoide.

La perlita aparece en general en el enfriamiento lento de la austenita o por transformación isotérmica de la austenita en la zona de los $650\text{ }^{\circ}\text{C}$ a $725\text{ }^{\circ}\text{C}$. La ferrita y cementita que componen la perlita aparecen formando láminas paralelas y alternadas que tienen reflejos nacarados, propiedad de la cual le viene el nombre de perlita.

Según la velocidad de enfriamiento, esas laminillas aparecen más o menos separadas y cuando el enfriamiento ha sido bastante rápido, las láminas se acercan mucho, de forma que en el microscopio, aun con grandes aumentos, no se pueden distinguir.

La resistencia a la tracción de la perlita de los aceros no aleados recocidos puede variar entre 680 y 860 MPa y, en consecuencia, su dureza Brinell lo hace entre 200 y 250 HB . El alargamiento a la rotura de la perlita suele estar en torno al 15 %. Tras el ataque con nital, la perlita se observa al microscopio con aspecto similar al de las huellas digitales.

Es interesante recordar que la coloración de la perlita no es más que un efecto de las sombras y de los relieves de los elementos que la forma, pues ni la ferrita ni la cementita son coloreados por los ataques que ensombrecen la perlita; estos reactivos destacan el relieve de la cementita y ésta es la causa del aparente colorido de la perlita.

D.3. Consideraciones sobre la templabilidad

Los aceros admiten un conjunto de tratamientos de cara a optimizar su respuesta a solicitudes muy diversas: mecánicas, térmicas, corrosivas, abrasivas, magnéticas, eléctricas, dilatómetricas, etc.

Existen por ello una gran variedad de tratamientos, que pueden afectar al conjunto de la pieza o sólo a su superficie exterior, para responder a dichas solicitudes, hablándose de tratamientos en masa o tratamientos superficiales y, a su vez, los tratamientos pueden ser de tipo térmico, mecánico, químico, termomecánico, termquímico, etc.

Desde un punto de vista termodinámico una aleación templada es una aleación en estado fuera de equilibrio y, en ese sentido, puede definirse el tratamiento de temple como un ciclo térmico que conduce a la obtención, a temperatura ambiente, de una microestructura distinta del equilibrio.

En el caso del acero, el tratamiento clásico de temple implica la obtención de martensita tras el enfriamiento y, por tanto, la obtención de una dureza y resistencia

mecánica mucho más elevada que la correspondiente al estado de equilibrio. Las precauciones generales a tener en cuenta en las etapas de calentamiento y permanencia a temperatura son del máximo interés y es preciso extremar el control de ambos procesos.

La permanencia debe ser lo suficientemente prolongada para asegurar la homogeneidad térmica y, en lo posible, química de la pieza y, por otra parte, no alargarla innecesariamente por el desfavorable crecimiento del tamaño de grano que supondría.

Los factores condicionasteis del temple debidos al propio acero templado son los siguientes:

- Composición química: contenido en carbono y elementos de aleación. Es difícil determinar constitutivamente la influencia de los elementos de aleación pues aunque su estudio es posible aisladamente, éste se complica extraordinariamente ante la presencia simultánea de varios de ellos. En cualquier caso la influencia aislada no es lineal.
- Temperatura de temple: Los aceros hipoeutectoides se templan siempre a temperaturas superiores a A_{c3} . Por el contrario los hipereutectoides al carbono o de baja aleación se templan a temperaturas intercríticas entre A_{c321} y A_{cm} .
- Tamaño de grano: El tamaño de grano austenítico influye aborreciblemente sobre la velocidad crítica de temple y está directamente relacionado con la temperatura de austenización.
- Cantidad de inclusiones: Es conocido el efecto que sobre la nucleación heterogénea tienen las inclusiones, metálicas o no, de acero. Los aceros con menor contenido inclusionario presentan menores velocidades críticas de temple.

Se denomina templabilidad a la capacidad que tiene un acero de formar martensita, por enfriamiento adecuado, en puntos del interior de la pieza. La templabilidad está ligada a la velocidad crítica de temple y, por tanto, a la morfología y situación de la curva $C.C.T.$ con respecto al eje de temperaturas.

Los aceros al carbono no aleados que poseen velocidades críticas de temple altas no darán temples correctos más que en secciones muy delgadas; sin embargo, los aceros aleados que tienen velocidades críticas mucho más pequeñas, inferiores a los $50\text{ }^{\circ}\text{C/s}$ darán temples correctos para espesores muy superiores.

Mientras que la templabilidad del acero depende de su contenido en carbono y de los elementos de aleación, la dureza máxima obtenida tras el temple solo es función del contenido en carbono y del porcentaje de martensita obtenido, siendo la influencia de los elementos de aleación sobre la dureza prácticamente despreciable.

Aceros templados

Al calentar un acero (pongamos que con 1, 10 % de C) a 1000 °C, o sea por encima del punto crítico, se modifica la estructura cristalina que tenía a temperatura ambiente, quedando el acero formado a esa temperatura por cristales de austenita. Si se produce un enfriamiento lento del acero, los cristales formados se desdoblán, y se transforman nuevamente en las ya mencionadas perlita y cementita. Pero si tras el calentamiento, luego se produce un enfriamiento rápido, no tiene lugar la producción de cementita y austenita, sino que lo que se puede observar ante el microscopio, son algunos cristales de austenita, mezclados con agujas de martensita.

Cuando se examinan al microscopio los aceros templados o templados y revenidos a temperaturas adecuadas, suele ser difícil interpretar su estructura, porque los constituyentes son muy finos y difusos. Para facilitar el examen microscópico, es recomendable utilizar aceros con 1, 10 % de carbono a 1000 °C.

Austenita

Es una solución sólida de carbono o carburo de hierro en hierro gamma. Puede contener desde 0 a 1,7 % de carbono y es, por lo tanto, un constituyente de composición variable. Todos los aceros se encuentran formados por cristales cuando se calientan a temperatura superior a las críticas. Aunque generalmente es un constituyente inestable, se puede obtener esa estructura a temperatura ambiente por enfriamiento rápido de aceros de alto contenido en carbono o de muy alta aleación.

Su resistencia es de 88 a 105 kg/mm^2 aproximadamente, su dureza de 300 Brinell y su alargamiento del 30 al 60 %. Es poco magnética, blanda, muy dúctil y tenaz. Tiene gran resistencia al desgaste, siendo el constituyente más denso de los aceros.

Martensita

Es el constituyente típico de los aceros templados. Se admite que está formado por una solución sólida sobresaturada de carbono o carburo de hierro en hierro alfa, y se obtiene por enfriamiento rápido de los aceros desde alta temperatura. Su contenido en carbono suele variar generalmente desde pequeñas trazas hasta el 1 %, y algunas veces, en los aceros hipereutectoides, aun suele ser más elevado.

Sus propiedades físicas varían con su composición, aumentando su dureza, resistencia y fragilidad con el contenido en carbono, hasta un máximo para $C = 0,90$ % aproximadamente. Después de los carburos y de la cementita, es el constituyente más duro de los aceros. Tiene una resistencia de 170 a 250 kg/mm^2 , una dureza de 50 a 68 Rockwell-C y alargamiento de 2,5 a 0,5 %. Es magnética.

Presenta un aspecto marcadamente acicular, formando agujas en zigzag, con ángulos de 60° . Cuando aparecen las agujas de martensita sobre un fondo blanco de austenita, la observación con grandes aumentos es bastante clara. Esta estructura se suele obtener en los aceros de alto contenido en carbono y alta aleación. Por el contrario, cuando la transformación es completa, al no existir el fondo blanco de austenita, la observación es más difícil. Cuando el temple se hace a la temperatura correcta, en general se obtienen estructuras de martensita muy fina, de aspecto difuso, que suelen exigir 1000 o más aumentos para su interpretación.

La martensita cristaliza en el sistema tetragonal, estando formada su red elemental por un paralelepípedo que difiere muy poco del cubo de cuerpo centrado del hierro alfa. Parece que en la martensita son los átomos de carbono los causantes de la deformación de la red cúbica del hierro alfa, que se transforma en tetragonal, teniendo el paralelepípedo elemental dos lados iguales, y el tercero, que es un poco mayor, guarda con los otros dos una relación que varía desde 1,06 a 1 cuando el contenido en carbono tiende a 0.

Por calentamiento a baja temperatura la red tetragonal inestable de la martensita se transforma en red cúbica idéntica a la del hierro alfa, precipitándose el carbono en forma de pequeñas partículas submicroscópicas. Para diferenciar ambos tipos de martensita, se llama martensita alfa a la de red tetragonal obtenida en el temple y martensita beta, a la de red cúbica, obtenida calentando a baja temperatura la martensita alfa.

D.4. Propiedades del acero *AISI* 4140

Como aproximación estandarizada al material utilizado en el presente proyecto, que es un Acero Forjado, se considerará el acero *AISI* 4140. Las propiedades del material utilizado se aproximan de manera razonable a las del acero utilizado, por lo que su presentación supone una buena aproximación.

Es un acero medio carbono aleado con cromo y molibdeno de alta templabilidad y buena resistencia a la fatiga, abrasión e impacto. Este acero puede ser nitrurado para darle mayor resistencia a la abrasión. Es susceptible al endurecimiento por tratamiento térmico. El *AISI* 4140 tiene suficiente carbono presente para permitir el tratamiento térmico adecuado. Los procedimientos de protección recomendados son para llevar el acero hasta $912,78^\circ\text{C}$ para someterlo a un proceso de normalización. Después que se enfríe correctamente, calienta el acero a $843,33^\circ\text{C}$ antes de extinguirlo en aceite. La tenacidad del acero hace el mecanizado difícil en su forma endurecida. Sin embargo, después de recocido, seguido por un enfriamiento lento,

el acero es mucho más suave y más fácil de mecanizar. Luego puede ser tratado térmicamente después de mecanizar para producir un elemento duro, preciso. Ya que el *AISI* 4140 es un acero moderadamente simple con un alto grado de dureza y resistencia a la tracción, es útil para aplicaciones mecanizadas como engranajes, pernos y sujetadores. El costo más bajo debido a la química simple, junto con las propiedades físicas también hacen que sea una buena opción para los ejes, árboles y componentes estructurales. Sin embargo, dado que el acero tiene un contenido de carbono menor que otros aceros, no se endurece en el mismo grado. Esto hace los bordes duros y afilados, como aquéllos encontrados en los cuchillos, complicados. Alguna de las propiedades mecánicas de este acero son:

- 275-310 *HB*
- Límite de fluencia: 690 *MPa*
- Esfuerzo máximo: 900-1050 *MPa*

Apéndice E

Application of simplified models
for the determination of working
windows for laser hardening of
steels

APPLICATION OF SIMPLIFIED MODELS FOR THE DETERMINATION OF WORKING WINDOWS FOR LASER HARDENING OF STEELS

Francisco Cordovilla, Ángel García Beltrán, José Luis Ocaña-Moreno

Universidad Politécnica de Madrid. Centro Láser (CLUPM). Edificio Tecnológico "La Arboleda" Campus Sur U.P.M. Carretera de Valencia, km. 7,300 C.P. 28031 Madrid. Phone: +34 91 332 42
francisco.cordovilla.baró@upm.es

Received: 21/jan/2014 - Accepted: 15/apr/2014 - DOI: <http://dx.doi.org/10.6036/7079>

ABSTRACT:

The laser is one of the processes for surface laser hardening and it is necessary to determine its working parameters in a proper way. This document studies two simplified models described in the bibliography and develops, from them, a practical methodology to estimate operative margins of its parameters (working windows) considering a wide set of process characteristics. By using the main relationships from the models along with the characteristics of a particular material, a wide variety of characteristic diagrams is obtained, some of which are finally used to get working windows corresponding to particular requirements

Keywords: Laser hardening, process variables, simplified model, laser processing diagram, characteristic diagram, working windows.

1. - INTRODUCTION

Surface laser hardening of steel is a process which, despite providing very high technological value solutions for mechanical components needed for improvement in their surface properties (typically wear resistance), has not penetrated sufficiently in the field of manufacturing technology. There exist intrinsic difficulties linked to the process, fundamentally the design of the appropriate thermal cycles in connection with the evolution of the material thermal properties with temperature. Nevertheless, it is considered that the lack of penetration has been often associated with the difficulties for a correct selection of the treatment based on numerical simulations sufficiently realistic, which are absolutely necessary for predicting and evaluating the thermal cycles applied over the different geometrical surfaces of the treated components. Those numerical simulations have been a fundamental tool for the prediction of the thermal cycles and the authors have contributed with previous works in this line ([4] and [5]). Nevertheless, in the case of industrial environments where the geometrical complexity of the process is not too high, the penetration of the laser technology has not been enough either, as a consequence of the absence or, at least, the lack of a systematic application of simplified models with capacity for predicting parametric domains (working window), in a simple and direct way which allows the designers of the process its reliable application over the production process.

The main objective of this paper is to describe a methodology, along with its application to diverse representative cases, focused on obtaining parametric windows in the use of power lasers in the hardening processes of steels taking into account the thermal properties of the material, its properties of interaction with laser radiation and the characteristic geometry of the laser beam, so that it can be used directly by the users of the technology. In a complementary way, with the objective of facilitating the understanding of the hardening process and its interpretation according to the treated material properties, the corresponding normalized process diagrams are analyzed with the purpose of giving an additional guide for the final design of the process. For this purpose the Ashby and Easterling [1], and Miyamoto and Mauro [9] models are taken as starting point. These authors provide expressions for the temperature field and the hardened depth as a consequence of the process. In the own references where the models are presented and in [7] and [11], it is briefly raised the need to use laser processing diagrams to facilitate the design of it, stressing the importance of choosing the best combination of variables. Nevertheless, in any case that references develop a comprehensive methodology equipped with the versatility and scope of the methodology, as it is developed in this article, with the capability to its practical and realistic application in manufacturing environments.

By using the suggested methodology it is possible to make a first justified estimation of the process parameters, which allows the designers to manage a reasonable set of information for making future decisions. The main process variables used are the laser power, the process speed, the surface temperature, the hardened depth and the beam size. The graphical representation of the relationships between all, and some other derived from them, provides, not only a tool to relate specific values of the variables, but also, and even more important, a representation of tendencies and behaviors which describes the physic involved in the process.

The following section shows a brief review about the concept of laser processing diagram as a useful tool for the estimation of the more suitable process parameters, and the introduction to two hardening simplified process models which are used to obtaining characteristic diagrams. Once the main relationships from the models have been shown, they are used to obtain different characteristic diagrams, for a particular material, which shows the wide potential of the developed methodology. Finally, some process conditions and requirements are purposed, and using the calculated characteristic diagrams their corresponding working windows have been calculated.

2. - MATERIAL AND PROCEDURE

Firstly a brief introduction to the concept of laser processing diagram will be developed. The importance of this concept lies in its practical applicability for estimating the process parameters in an easy and simple way. After, on one hand, the Ashby and Easterling model [1], and, on the other, the Miyamoto and Mauro model [9] are presented. These models provide simplified solutions for the temperature field in the working piece. While the first one is valid with gaussian laser beams (fig. 2 right), the second one works with rectangular and rectangular-gaussian sources (fig. 3 left and right respectively). Despite the wide use of the gaussian source, many applications of the laser technology use different kind of beam shapes, that, for a simplified study, can be approximated by a rectangular or rectangular-gaussian beam.

2.1. - LASER PROCESING DIAGRAMS

The graphical approach is applied to the interaction of laser beams and materials by identifying the principal process variables and processing mechanisms. A complete description of laser process diagrams can be found in [7]. This subsection introduces dimensionless diagrams, whose main advantage is that they are able to show relationships between variables without taking into account the material properties, providing, as a consequence, a wider insight of the process.

Consider a stationary gaussian beam heating without melting the surface of a large block of material. After an initial transient, the heat flow becomes steady state and the temperature field around the laser source becomes constant. The following group of dimensionless variables (denoted by the symbol $*$) can be defined with practical purpose (following [11]):

- Dimensionless temperature rise:

$$T^* = \frac{(T - T_0)}{(A_1 - T_0)} \quad (1)$$

- Dimensionless beam power:

$$Q^* = \frac{AQ}{r_B K (A_1 - T_0)} \quad (2)$$

- Dimensionless beam speed:

$$v^* = \frac{r_B v}{\chi} \quad (3)$$

- Dimensionless time:

$$t^* = \frac{t}{t_0} \quad (4)$$

- Dimensionless x^* , y^* , z^* coordinates:

$$(x^*, y^*, z^*) = (x/r_B, y/r_B, z/r_B) \quad (5)$$

Working in this way allows to broaden the scope of modeling for taking into account a wide variety of materials. Fig. 1 shows an example of a dimensionless diagram where different laser process are classified.

Figure 1. Normalized model-based laser processing diagram showing contours for the onset of surface melting and vaporization constructed from a surface heat flow model (solid lines); experimental data for metals and alloys, ceramic and glasses, and polymers are shown as regions budded by broken lines. Source [7]

2.2. - ASHBY AND EASTERLING MODEL

This subsection introduces the Ashby and Easterling model [1], which provides a simplified solution for the temperature field and hardened depth in samples processed using a laser beam with a gaussian energy distribution. In this paper, the relationships between process variables provided by the model are used in an innovative way to get characteristic diagrams (dimensionless and not). In the following, the way of proceeding with the model variables is indicated.

Generally, the hardening depth depends on two sets of process variables. Firstly, the steel properties: transformation temperatures, thermal conductivity, specific heat, absorptivity, etc. Secondly, properties of the laser performance: power, beam size, process speed and energy distribution. Taking into account all of them, the model insert the so called temperature field equation, getting a simplified solution widely contrasted through comparison with analytical models.

The critical values of different dimensionless parameters are identified in order to predict the conditions for hardening, and control the start of the surface melting.

The next assumptions are made:

- The surface absorptivity, A , is constant.
- The latent heat of the ferrite-austenite transformation is negligible.
- The thermal conductivity, diffusivity and specific heat are constant.
- The eutectoid temperature A_1 is given by the phase diagram.
- The working surface is a plane.

The coordinate system has the origin at the beam centre, with radius r_B . The laser, of total power, Q , moves along the x direction with speed v , with the y axis across the track, and z the distance below the surface. The interaction time is defined as, $t_{int}=2r_B/v$. A schematic representation of the process is shown in fig 2.

Fig. 2. Laser beam traversing the surface of the material, with speed v along the x direction (left) and gaussian energy distribution

Under these conditions the general solution for the temperature field is:

$$T(0, y, z, t) = T_0 + \frac{AQ}{2v\pi\kappa[t \cdot (t+1)]^{1/2}} \exp\left\{\frac{-1}{4\chi}\left[\frac{(z+z_0)^2}{t} + \frac{y^2}{t+t_0}\right]\right\} \quad (6)$$

Important reference parameters appear in equation [6]. The first one, t_0 , is a characteristic heat-transfer time defined by $t_0 = r_B^2 / 4\chi$. The second one, z_0 is a characteristic length, its function is to limit the surface temperature to a finite value, i.e. the real surface is considered a z_0 distance under the 'model surface' (for a detailed understanding of the importance of z_0 see reference [1] appendix A).

The distance z_0 is similarly normalized, $z_0^* = z_0 / r_B$. The temperature field equation with dimensionless variables is then:

$$T^*(0, y, z, t) = \frac{(2/\pi)(Q^*/v^*)}{[t^*(t^*+1)]^{1/2}} \exp\left\{-\left[\frac{(z^*+z_0^*)^2}{t^*} + \frac{y^{*2}}{t^*+1}\right]\right\} \quad (7)$$

The time, t_p^* , needed to reach the peak temperature, which is the maximum temperature transmitted by the laser beam on a given position (x^*, y^*), is obtained differentiating the temperature field equation with regard to time. The maximum depth and possible origin of the melting happens in the central position, therefore $y^*=0$. Under these conditions the following equation is obtained:

$$t_p^* = \frac{1}{4} [2(z^* + z_0^*)^2 - 1 + [4(z^* + z_0^*)^4 + 12(z^* + z_0^*)^2 + 1]^{1/2}] \quad (8)$$

Using dimensional variables (taking into account equations [1]-[5]), the expression for the time of peak temperature is given by:

$$t_p = \frac{1}{4} t_0 \left[\frac{2(z+z_0)^2}{r_B^2} - 1 + \left[\frac{4(z+z_0)^4}{r_B^4} + \frac{12(z+z_0)^2}{r_B^2} + 1 \right]^{1/2} \right] \quad (9)$$

The importance in using peak temperature lies in that it determines the maximum hardened depth as well as the chance of surface melting. Introducing t_p^* and making $y^*=0$ in equation [7], the following equation is obtained:

$$T_p^*(0,0,z,t) = \frac{(2/\pi)(Q^*/v^*)}{[t_p^*(t_p^*+1)]^{1/2}} \exp\left\{-\left[\frac{(z^*+z_0^*)^2}{t_p^*}\right]\right\} \quad (10)$$

Solving this equation for the dimensionless power:

$$Q^* = T_p^* [t_p^* (t_p^* + 1)]^{1/2} \frac{\pi}{2} v^* \exp \left\{ \frac{(z^* + z_0^*)}{t_p^*} \right\} \quad (11)$$

Equation [11] allows the designers to obtain diagrams to relate Q^* with v^* . In that expression the value of t_p^* is given by the equation [8], z and v^* are intrinsic process variables and therefore known data. The only unknowns are T_p^* and z_0 .

Bass (see [2]), provides a general solution for the peak temperature on the surface induced by a Gaussian beam acting during the same time as the interaction time. The results are valid for beam radius much higher than the distance corresponding to interaction time. The expression is given by:

$$(T_p^*)_{z^*=0} = \frac{1}{\pi^{3/2}} Q^* \tan^{-1} \left(\frac{8}{v^*} \right)^{1/2} \quad (12)$$

The equation [12] can be matched with the equation [10], since at $z=0$ both represent peak temperature over the surface:

$$\frac{(2/\pi)(Q^*/v^*)}{[t_p^* (t_p^* + 1)]^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{(z_0^*)^2}{t_p^*} \right\} = \frac{1}{\pi^{3/2}} Q^* \tan^{-1} \left(\frac{8}{v^*} \right)^{1/2} \quad (13)$$

Using the equation [13] along with the equation [8] at $z=0$, the value of z_0 is obtained:

$$\left\{ \begin{array}{l} T_p^* = \frac{1}{4} [2(z^* + z_0^*)^2 - 1 + [4(z^* + z_0^*)^4 + 12(z^* + z_0^*)^2 + 1]^{1/2}] \\ \frac{(2/\pi)(Q^*/v^*)}{[t_p^* (t_p^* + 1)]^{1/2}} \exp \left\{ -\frac{(z_0^*)^2}{t_p^*} \right\} = \frac{1}{\pi^{3/2}} Q^* \tan^{-1} \left(\frac{8}{v^*} \right)^{1/2} \end{array} \right\} \Rightarrow z_0^* \quad (14)$$

By knowing the parameter z_0 together with all the data from the process, the equations of the model can be used in order to characterize all the hardening parameters. For a detailed description of the model see [10].

Despite the advantages of this model, its field of application is limited only to Gaussian irradiance profile, while other energy distribution is commonly used too in industrial environments. Given this, the next subsection introduces a brief description of the Miyamoto and Maruo model, which works with rectangular and rectangular-gaussian irradiance profiles.

2.3. - MIYAMOTO AND MARUO MODEL

This subsection describes the main relationships provided by the Miyamoto and Maruo model for a rectangular and a rectangular-gaussian irradiance profile (see [9]). The initial hypotheses are the same as in the Ashby and Easterling model. Under these conditions explicit expressions for irradiance, surface temperature as a function of process speed and hardened depth as a function of the process speed are presented. Departing from this situation provides a very useful procedure to obtain working windows with only these three process variables is proposed.

Consider a rectangular or a rectangular-gaussian heat irradiance profile as shown in fig. 3:

Fig 3. Rectangular and rectangular-gaussian transversal intensity distribution

The irradiance in the case of a rectangle is given by:

$$I_{rect} = \frac{Q}{4ab} \quad (15)$$

and, in the case of a rectangular-gaussian irradiance profile by:

$$I_{rect-g}(x) = \frac{Q}{2ab\sqrt{\pi}} \exp\left(\frac{-x^2}{r_b^2}\right) \quad (16)$$

The parameter β is defined from a and b dimensions of the distribution:

$$\beta = \frac{a}{b} \quad (17)$$

Temperature as a function of the depth can be approximated by:

$$T_{max}(z) = \frac{\gamma A Q}{16\sqrt{\pi} \kappa b} \sqrt{\frac{2\chi}{\beta v b + 2\delta\chi}} \exp\left\{-\left(\frac{z}{\sqrt{\beta b}}\right)\left(1 + \frac{p v b}{2\chi}\right)^{0.5}\right\} \quad (18)$$

The depth in which the hardening happens is:

$$Z_h = \frac{\sqrt{\beta b}}{\left(1 + \frac{p V b}{2\chi}\right)^{0.5}} \ln\left(\frac{\gamma A Q}{16\sqrt{\pi} \kappa b T_h} \sqrt{\frac{2\chi}{\beta V b + 2\delta\chi}}\right) \quad (19)$$

The value of the constant δ for a rectangular profile is given by:

$$\begin{aligned} \beta \leq 0,25 &\Rightarrow \delta = 0,25 \\ \beta > 0,25 &\Rightarrow \delta = 3,5(\sqrt{\beta} - 0,5)^2 + 0,28 \end{aligned} \quad (20)$$

And, for a rectangular-gaussian profile by:

$$\begin{aligned} \beta \leq 0,25 &\Rightarrow \delta = 0,1 \\ \beta > 0,25 &\Rightarrow \delta = 2,7(\sqrt{\beta} - 0,5)^2 + 0,12 \end{aligned} \quad (21)$$

The values of the constants γ and p in the expressions [20] and [21] are: $\gamma = 8,1$; $p = 0,7$ for a rectangular profile and, $\gamma = 7,1$; $p = 0,65$ for a rectangular-gaussian profile.

Once all the variables for equations [18] and [19] are known, it is possible to obtain characteristic diagrams which can be used to determine the process speed for a given desired depth (and other process variables as the laser power or the beam size), and check if that speed leads or not to a higher temperature than the melting point of the material. Examples of this method are shown in section 3.

2.4. – WORKING MATERIAL

The 42CrMo4 steel has been selected as working material. This is typical steel used for industrial machines such as different parts of automotive engines, and therefore, allows a realistic application of the developed methodology.

All the models use constant thermal properties. For this study, the values adopted are an average of the real thermal properties of the 42CrMo4 steel in the interval 25-1500 °C. Due to the lack of reliable information in the case of high temperatures, the data available in handbooks [12] have been contrasted and completed with the procedure suggested in [8]. As a result, the thermal values of the material are adopted as:

1. Thermal conductivity, $\kappa = 30 \text{ W/m}\cdot\text{K}$.
2. Specific heat, $C_p = 665 \text{ J/kg}\cdot\text{K}$.
3. Density, $\rho = 7550 \text{ kg/m}^3$.
4. Thermal diffusivity, $\chi = 5,98 \cdot 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$.

It is considered that the hardening temperature is, $T_h = 900 \text{ °C}$, in which the austenitic transformation ends, also known as Ac_3 . The melting point has been established as, $T_m = 1415 \text{ °C}$.

3. - RESULTS

In this section, the methodology developed from the simplified models presented in [1] and [9], is used to obtain characteristic diagrams. These diagrams represent, in a graphical way, the relationship between process variables for a particular material. In this way, it makes easy the selection of those values which best fits the process requirements.

Generally the input data will be the desired depth and the process features such as the laser power or the beam size, and the output will be the process speed that satisfied that conditions. Nevertheless the versatility of the developed technology allows the user to consider other different possibilities.

3.1. - DIAGRAMS USING THE ASHBY AND EASTERLING MODEL

This subsection shows different possibilities using the methodology developed in 2.1. Some relationships between significant process variables are shown with the format of characteristic diagrams. Despite the large amount of relationships which can be established, this study focuses on those relationships that are more interesting from the point of view of the process designers.

Fig. 4 shows a dimensionless diagram of dimensionless power, Q^* vs. dimensionless speed, v^* , provided that the surface temperature reaches the hardening temperature, $T(z=0) = T_{Ac3}$, with different beam radius, $r_B = 1, 2, 5, 7$, and 10 mm , which are typical sizes with this process.

Fig. 4. Dimensionless power, Q^* vs. dimensionless speed, v^* for different beam radius, with the condition that the surface reaches the hardening temperature

This diagram highlights the dependence between Q^* and v^* , no matter the material used. Independently of the size of the beam radius, the faster the process is, the higher the power should be to keep constant the surface temperature. In the same way, the bigger the beam radius is, the bigger should be the beam power.

If the fig. 4 is particularized for a given material, then, it turns into a dimensional parameters diagram with high practical interest. Fig. 5 shows a Q vs. v diagram for the 42CrMo4 steel with a beam radius, $r_B=5$ mm, it displays the functions corresponding to reach hardening temperature at $z=0$ (the surface), $z=0,5$ and $z=1$ mm, respectively.

Fig.5. Laser power vs. speed with $r_B=5$, to reach hardening temperature at $z=0$; 0,5 and 1 mm

Once more, it is easy to notice about the dependence between v and Q . As the desired depth increases the power needed using the same speed becomes higher. In the cases of $z=0$ and 0,5 mm the relationship between power and speed keeps close to the linearity, nevertheless, as the depth increases this relationship tends to an exponential behavior, as can be easily understood looking to equation [11], where the depth, z , appears in an exponential term.

Despite the information provided by fig. 5 it has an enormous practical interest, it means only a partial view of the process. The laser power needed for a particular hardened depth with a certain process speed, can lead to the surface melting in the piece. To have a more accurate knowledge about all the phenomena involved in the process, fig. 6 should be considered.

Fig. 6 shows a dimensionless diagram, $T^*(z=0)$ vs. v^* for different levels of dimensionless power, obtained using equation [10].

Fig.6. Dimensionless surface temperature $T^*(z = 0)$, vs. dimensionless speed, v^* , with $r_B = 5$ and dimensionless power, $Q^* = 4; 5; 10$ and 20

This representation highlights how, the higher the power is, the higher value the surface temperature reaches. According to the definition of dimensionless temperature (equation [1]), a value of $T^*=1$, means that the hardening temperature has been reached. Therefore, a value much higher than 1, for a given depth, means that the amount of energy introduced in the sample would lead to a temperature which exceeds the hardening point, and then approaching or even overcoming the melting temperature.

Relating other process variables more sophisticated diagrams can be obtained. The fig. 7 displays the beam intensity, I , as a function of the process interaction time, t_{int} , for different temperature conditions, and with beam radius, $r_B = 5$ and 7 mm, which are typical hardened depths.

Fig. 7. Intensity vs. interaction time for hardened depths $z_h = 0; 0, 5$ and 1 mm with $r_B = 5$ and 7 mm

The diagram can be used as a design tool by itself. For a particular case depth, the appropriate combinations of I and t_{int} would be those which laying over curve corresponding to the desired depth, remain below the curve of the surface melting for the beam radius used.

All the diagrams shown are only a few representative and practical cases from all the possibilities using the described methodology. By using different process variables and the relationships between them a big amount of diagrams can be built. The decision about it corresponds to the process designers who know the objectives and conditions.

3.2. - DIAGRAMS USING THE MIYAMOTO AND MARUO MODEL

Fig. 8 and 9 shows two characteristic diagrams built using the relationships provided by the Miyamoto and Maruo model for a rectangular source (equations [18] and [19]). Fig. 8 displays the hardened depth as a function of the process speed for different beam shapes, $a = 1; 2; 5; 7$ and 8 mms, $b = 5$ mm in all cases. Fig. 9 displays the surface temperature as a function of the process speed, also for different beam shapes. In both cases the laser power is $Q = 3$ kW.

Fig.8. Hardened depth, z_h vs. speed, v , for different beam sizes and laser power, $Q=3$ kW. Arrows show an example developed in section 3.3

Fig.9. Surface temperature, $T(z=0)$ vs. speed, v , for different beam sizes and laser power, $Q=3$ kW. Arrows show an example developed in 3.3

For a given process features and a desired depth, the figures inform about the possibilities of carrying out the process, and if it is possible, provide the speed interval in which the process meets the requirements.

Once the features of the process, laser power and beam size, are determined, and a desired case depth is established, with the fig. 8, starting from the depth on the abscise axis, the corresponding value over the curve is clearly determined. Now, projecting that value over the coordinate axis, the value of the speed is obtained. This value corresponds to the process speed which leads to the desired hardened depth. It could be consider as the maximum speed, v_{Max} , if it is higher, the desired depth would never be reached. Nevertheless, it could happen that the obtained speed leads to surface temperature higher than the melting point.

The fig. 9 allows the process designers to check if a certain value of speeds leads or not to the surface melting. Proceeding in a similar way as before, the melting temperature of the material should be projected from the abscise axis to the curve, and from there, to the coordinate axis. The value obtained, v_{Min} , can be considered as the minimum speed. If it is lower, the process would lead to the melting of the surface. Now, the values of v_{Max} and v_{Min} should be compared, and two possibilities can happen.

1. If $v_{Min} > v_{Max}$ the process is not feasible. The speed, v_{Max} , would lead to an overheating of the surface.
2. If $v_{Min} < v_{Max}$ the process is feasible. The working windows would be determined between v_{Min} and v_{Max} .

This procedure provides a simple and intuitive way to obtain working windows. In the next section some examples will be developed for some particular applications.

3.3. – OBTAINING WORKING WINDOWS

With the aim of facilitating the understanding of all the data provided by the figures, in this subsection, three practical examples will be developed, obtaining the working windows associated to two sets of realistic requirements.

- Case 1: Consider the functions shown in fig. 7. It displays irradiance, I , vs. interaction time, t_{int} for different beam radius and hardened depths. Suppose the objective of hardening 1 mm depth using a beam radius $r_B=5$ mm. The feasible points lays on the curve of irradiance for $r_B=5$ mm (with big circles), under the curve associated to the irradiance which causes surface melting with the same radius (big squares). In these conditions the process variables would be:

$$I < 700 \text{ W/cm}^2 \\ t_{int} > 8 \text{ s}$$

If the desired hardened depth is 0,5 instead of 1 mm, then, the corresponding curve (matched with big rhombs), cut the melting curve in a lower interaction time. The process variables would be now:

$$I < 975 \text{ W/cm}^2 \\ t_{int} > 0,75 \text{ s}$$

- Case 2: Consider a process using a rectangular beam with the following characteristics:
 - Absorbed power, $Q=3$ kW
 - Hardened depth, $z_h=1$ mm
 - Rectangular-Gaussian beam geometric parameter, $a=5$ mm
 - Hardening temperature, $T_{Ac3}=900$ °C
 - Melting temperature, $T_m=1415$ °C

In fig. 8, starting from the ordinate axis, the point corresponding to 1 mm should be projected over the curve of $a=5$ mm (matched with big triangles), and then, projecting again over the abscise axis. The process is indicated by arrows. The point matched over the axes is $v_{Max}=600$ mm/min. If the process speed were higher, 1 mm depth would never be reached.

Consider now fig. 9. Starting again from the ordinate axis with the melting temperature and projecting again over the curve and, from there, to the abscise axis, the point obtained now represents, $v_{Min}=500$ mm/min. If the process were slower, the surface would be melted.

As $v_{Max}=600 > v_{Min}=500$ (mm/min), the process is feasible, and the working window is:

$$500 < v < 600 \text{ (mm/min)}$$

- Case 3: Equal to case 2 but looking for 1,5 mm

Proceeding in a similar way than in the case 2 the new working window is:

$$500 < v < 525 \text{ (mm/min)}$$

The three cases shown are only some examples using the methodology suggested in this paper. A wide variety of cases could be studied considering their own characteristics and requirements.

4. - DISCUSSION

All the calculated diagrams have demonstrated the viability of the presented methodology to relate variables and trends of the laser hardening process. Despite the procedure allows the user to study the relationships between any process variables, the results focus on some of the most interesting. In this way, fig. 4 shows the relationship between power and process speed to keep constant a given value of temperature independently of the material used. The figure displays how the higher the speed is, the higher the laser power should be, more than in a linear way. Analyzing this fig. it is easy to understand that, trying to increase the productivity of a certain process by increasing the speed of it has some limitations. Fig. 5 is a particularization of the previous graph for a commonly used material. From this figure it can be observed that for achieving 1 mm of hardened depth, laser power dramatically increases with speed. For a process speed of 750 mm/min, the laser power reaches a value of 6000 W.

Fig. 6 presents the problem from a complementary point of view. Some limitations of the hardening process come not only from a big power needed, but also from the importance of avoiding the surface melting of the material. It is essential to control the effect that a given combination of speed and power has on the surface temperature. This dimensionless representation provides a wide insight of the behavior of surface temperature, once more, independently of the material. Speed and power have different effects over the temperature. While increasing speed leads to a lower surface temperature, increasing the power has the inverse effect. For a particular application, every possible combination of power and speed should be checked using a diagram like this.

Fig. 7 introduces the use of two variables obtained as a combination of the basic ones; the interaction time which is the result of dividing the beam diameter by the process speed, and the beam irradiance which is the power divided by the effective area of the beam. In the same graphic are represented the functions of the irradiance which produces surface melting and hardened depth for 0,5 and 1 mm. This graph highlights the influence of the hardened depth over the working windows. As is shown in the previous subsection, the increment from 0,5 to 1 mm of hardened depth leads to a interaction time more than ten times larger (from 0,75 to 8 s), which, according to the definition of the interaction time, means that the process should be ten times slower. Only by using that diagram it is possible to achieve such interesting information.

Diagrams provided by the Miyamoto and Maruo model show behaviors for a rectangular beam. By using diagrams as shown in fig. 8 and 9 working windows can be easily obtained. Once more the influence of the hardened depth has a dramatic effect over the working windows. While for 1 mm depth the length of it is about 100 mm/min (from 500 to 600), in the case of 1,5 mm the window reduces to only 25 mm/min (from 500 mm/min to 520 mm/min).

5. - CONCLUSIONS

This paper presents a new classic type methodology based on analytic simplified models to obtain characteristic diagrams and working windows in the process of laser hardening of steels. The main conclusions are:

1. A wide set of dimensionless process parameters have been defined and their importance for a better understanding of the process physics.
2. The Ashby and Easterling model and the Miyamoto and Maruo model are introduced, providing their main relationships between variables of the laser hardening process.
3. The relationships coming from the simplified models are used to define a procedure which allows characteristic diagrams and working windows to be obtained. This procedure provide in fast and simple way important information with practical interest during the design of the process.
4. Characteristic diagrams for a particular material have been obtained and analyzed.
5. All the results have been discussed showing their utility for a first step of the process design.
6. Despite its apparent simplicity the developed methodology allows the designers of the process of laser hardening a first approach of parametric working windows, as a function of the thermal properties of the material, that might exclude some options considered “a priori” as possible options.
7. Regarding with the last point, the obtained results using the methodology described are clearly influenced by a correct specification of the thermo physical properties of the materials, and in that sense, the predictions are highly sensitive and must be based on data experimentally contrasted. But, at the same time, the own capability of the methodology to provide results from that values, facilitates an additional analysis of working margins as a function of the possible variability of them.

6. - SYMBOLS LIST

•	A	[]	Absorptivity coefficient
•	A ₁	[K]	Eutectoid temperature
•	C _p	[J kg ⁻¹ K ⁻¹]	Specific Heat
•	I	[W/m ²]	Laser beam irradiancy
•	Q	[W]	Laser power
•	r _B	[m]	Laser Beam Radius
•	T	[K]	Temperature
•	t	[s]	Time
•	T ₀	[K]	Initial Temperature
•	t ₀	[s]	Characteristic heat transfer time
•	t _{int}	[s]	Interaction time
•	T _h	[K]	Hardening temperature
•	T _p	[K]	Peak temperature
•	T _m	[K]	Melting point
•	t _p	[s]	Time need to reach peak temperature
•	v	[m/s]	Translation speed of the laser
•	x	[m]	x coordinate
•	y	[m]	y coordinate
•	z	[m]	z coordinate
•	z ₀	[m]	Characteristic length
•	Z _h	[m]	Hardened depth
•	κ	[Wm ⁻¹ K ⁻¹]	Thermal conductivity
•	ρ	[kgm ⁻³]	Density
•	χ	[m ² s ⁻¹]	Thermal diffusivity

7. - REFERENCES

- [1] Ashby M F, Easterling K E. "The transformation hardening of steel surfaces by laser beams – I. Hypo-Eutectoid steels", *Acta Metall.* April 1984. Vol. 32, P. 1935-1948. (doi:10.1016/0001-6160(84)90175-5)
- [2] Bass M, Bertolotti M. *Physical Processes in Laser-Materials interaction*. New York: Plenum Press, 1983
- [3] Carslaw H S, Jeager J C. *Conduction of Heat in solids*. Oxford: Clarendon Press, 1959. 520 P.
- [4] García-Beltrán A, Ocaña J L. "Modelo numérico tridimensional para la simulación de procesos de tratamiento superficial de materiales con láser", *Revista de metalurgia*. 1998. Vol. 35, P. 75-83. (doi:10.3989/revmetalm.1999.v35.i2.609)
- [5] García-Beltrán A, Marín L F, Ocaña J L. "Análisis de la influencia del factor de solapamiento en el tratamiento térmico de superficies extensas de aceros por láser", *Revista de Metalurgia*. 1996. Vol. 43-4, P. 284-293. (doi:10.3989/revmetalm.2007.v43.i4.74)
- [6] García-Beltrán A, Ocaña J L, Molpeceres C L "TEMPLUM: A process adapted numerical simulation code for the 3D predictive assessment of laser surface heat treatments in planar geometry", *Wseas transactions on computers*. 2008. Vol. 7, P. 65-74
- [7] Ion J C. *Laser processing of engineering materials. Principles, procedure and industrial application*. Oxford: Elsevier Butterworth-Heinemann, 2005. 576 P.
- [8] Miettinen J. "Calculation of Solidification-Related Thermophysical Properties for Steels", *Metallurgical and materials transactions B*. April 1997. Vol 28-B, p. 281-297. (doi:10.1007/s11663-997-0095-2)
- [9] Miyamoto I, Maruo H. "Transformation Hardening by linear-polarized laser beam – Development a novel laser beam shaping optics and its applications to materials processing (Report 2)", *Welding International*, 1995. Vol. 9-2, p. 108-115. (doi:10.1080/09507119509548764)
- [10] Pan J, Gür C. *Handbook of Thermal Process Modeling of Steels*. Florida: CRC Press, 2009, p. 500-626
- [11] Shercliff H R, Ashby M F. "The prediction of Case Depth in Laser Transformation Hardening", *Metallurgical Transactions A*. 1991. Vol 22-A, P. 2459-2466. (doi:10.1007/BF02665012)
- [12] Totten G E. *Steel heat treatment handbook*. Florida: CRC Press 2006
- [13] Yung C S, Wenda T, Bailey N S. "Predictive modeling and experimental results for residual stresses in laser hardening of AISI 4140 steel by a high power diode laser" *Surface & Coatings Technology*. 2009. Vol. 203, P.2003-2012. (doi:10.1016/j.surfcoat.2009.01.039)

Apéndice F

Caracterización de la reacción de oxidación superficial y su influencia sobre la absorción de radiación durante el proceso de temple superficial con láser para el acero 42CrMo4

Caracterización de la reacción de oxidación superficial y su influencia sobre la absorción de radiación durante el proceso de temple superficial con láser para el acero 42CrMo4

Francisco Cordovilla^a, Jesús Domínguez^b, Paula Sancho^b, Ángel García-Beltrán^{a,✉}, José Luis Ocaña^a

^aUniversidad Politécnica de Madrid, Centro Láser (CLUPM). Edificio Tecnológico “La Arboleda”

Campus Sur U.P.M., Carretera de Valencia, km. 7,300 C.P. 28031 Madrid

^bIKERGUNE A.I.E., San Antolín 3, 20870 Elgoibar, Guipúzcoa, España

✉ Autor para la correspondencia: agarcia@etsii.upm.es

Enviado: 24 Abril 2015; Aceptado: 31 Enero 2016; Publicado on-Line: 21 Junio 2016

RESUMEN: El temple superficial con láser es un proceso en el que se depositan elevadas expectativas por sus innumerables ventajas en términos de calidad y productividad frente al temple por inducción. Su implantación efectiva, no obstante, se está viendo lastrada ante la falta de herramientas predictivas fiables y flexibles. Existen diversos modelos para el cálculo de temperaturas, aunque pocos realizan un tratamiento exhaustivo de la oxidación superficial y sus importantísimas implicaciones sobre la absorción de radiación láser. Este artículo adopta un modelo acoplado temperaturas/oxidación disponible en la literatura, utilizándolo, por primera vez, para la simulación de procesos sencillos llevados a cabo en distintas condiciones de potencia y velocidad, para el acero 42CrMo4. Dichas condiciones han sido reproducidas experimentalmente, registrando la temperatura máxima superficial y el espesor de óxido generado. Ambos resultados han mostrado un elevado grado de coincidencia con los resultados teóricos, avalando la fiabilidad y utilidad del modelo.

PALABRAS CLAVE: Absorción; Acero; Láser; Oxidación; Superficial; Temple

Citation / Cómo citar este artículo: Cordovilla, F., Domínguez, J., Sancho, P., García-Beltrán, A., Ocaña, J.L. (2016) “Caracterización de la reacción de oxidación superficial y su influencia sobre la absorción de radiación durante el proceso de temple superficial con láser para el acero 42CrMo4”. *Rev. Metal.* 52(2):e067. doi: <http://dx.doi.org/10.3989/revmetalm.067>.

ABSTRACT: *Characterization of the surface oxidation reaction and its influence on the radiation absorption during the surface laser hardening process of the 42CrMo4 steel.* Surface laser hardening of steel is a process that produces an enormous interest due to its uncountable advantages in terms of quality and productivity against induction hardening. The effective implantation of this process, nevertheless, is being hampered because of the lack of reliable and flexible predictive tools. There are different models focused on the temperature calculation, though, few make a thorough analysis of the surface oxidation associated with the process and its important implications over the absorption coefficient. This work proposes and explains a coupled model temperature/oxidation available in literature, applied, for the first time, for the simulation of simple processes carried out with different conditions of power and speed, for the 42CrMo4 steel. These conditions have been reproduced experimentally, tracking the maximum surface temperature and the oxide thickness. Both results have shown a high degree of coincidence with theoretical predictions, confirming the capabilities and utility of the model.

KEYWORDS: Absorption; Hardening; Laser; Oxidation; Steel; Superficial

Copyright: © 2016 CSIC. This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution-Non Commercial (by-nc) Spain 3.0 License.

1. INTRODUCCION

El temple superficial con láser es una técnica en la que un haz láser con las características adecuadas es utilizado como fuente térmica recorriendo la superficie de una pieza de acero con el objetivo de que bajo las zonas irradiadas, a lo largo de cierto espesor, se produzcan unas condiciones de calentamiento seguido de un auto-enfriamiento rápido del material que favorezcan la obtención de martensita (Ion, 2005). El alcance típico del tratamiento es de entre 1 y 3 mm, y está limitado por la posibilidad de generar ciclos térmicos adecuados a partir de cierta profundidad sin superar la temperatura de fusión del material en la superficie (Miokovik *et al.*, 2004).

Las aplicaciones del proceso de temple superficial con láser se encuentran en aquellos componentes cuyas sollicitaciones en servicio requieren alguna de las propiedades mecánicas de la martensita, como dureza y resistencia al desgaste, en las zonas externas de los mismos, sin perder la elasticidad del material sin tratar. Este tipo de especificaciones se encuentran, por ejemplo, en los apoyos y muñequillas del cigüeñal de un motor alternativo donde la capa externa debe resistir la fricción asociada al movimiento relativo, mientras que el conjunto de la pieza debe ser capaz de soportar las cargas cíclicas correspondientes al funcionamiento del motor.

Uno de los fenómenos colaterales que tiene lugar durante la realización del proceso de temple superficial con láser es la oxidación de la superficie tratada (Nánai *et al.*, 1997; Pantsar y Kujanpää, 2006). Las elevadas temperaturas que se generan durante el calentamiento, de entre 900 °C y 1400 °C, aceleran la cinética de la reacción de oxidación entre el hierro y el oxígeno presente en el aire circundante, dando lugar a la formación de una película compuesta principalmente de Fe_3O_4 (Antonov *et al.*, 2002; Avery, 2002). El desarrollo de dicha película modifica la absorción de radiación láser, pudiendo experimentar un incremento de hasta el 40% respecto a las condiciones originales.

Debido al importante incremento de absorción asociado a la oxidación resulta muy conveniente realizar una consideración realista del fenómeno a la hora de configurar cualquier modelo térmico del proceso y para la determinación de las transformaciones metalúrgicas producidas como consecuencia del mismo.

El análisis teórico de las temperaturas producidas por el proceso de temple superficial con láser ha dado lugar a numerosos trabajos que abarcan desde la utilización de modelos simplificados como en Cordovilla-Baró *et al.* (2014), hasta modelos tridimensionales basados en el método de los elementos finitos (García-Beltrán *et al.*, 2007; Leung *et al.*, 2007; Oliveira *et al.*, 2007; García-Beltrán *et al.*, 2008; Bailey *et al.*, 2009). Sin embargo, estos trabajos, o bien utilizan un valor constante para

caracterizar la absorción, o bien plantean el incremento de absorción asociado a la oxidación como una función de la temperatura instantánea.

En los trabajos de Pantsar y Kujanpää (2004); Pantsar y Kujanpää (2006) se llevan a cabo sendos estudios experimentales relativos a la influencia sobre la absorción de distintas variables del proceso de temple superficial con láser, como la velocidad del proceso (tiempo de interacción) o la potencia del haz láser, dando una interpretación de los resultados basada en la dependencia temporal del crecimiento de la capa de óxido, que, no obstante, no está orientada a su implementación directa en un modelo físico/numérico del proceso.

El trabajo de Duley *et al.* (1979) introduce la noción de coeficiente acoplado para considerar simultáneamente la absorción propia del material base y la asociada a la oxidación.

Por su parte, las investigaciones llevadas a cabo por Nánai *et al.* (1997) ponen de manifiesto la importancia de las características particulares del calentamiento con láser, como los elevados gradientes térmicos, o la naturaleza electromagnética de la fuente térmica sobre los parámetros que caracterizan la cinética de la reacción química de oxidación para distintos metales, transcurriendo en condiciones alejadas del equilibrio, no haciéndose una consideración específica de las condiciones del temple superficial con láser.

El presente trabajo utilizará, con algunas modificaciones, el modelo acoplado temperaturas/oxidación desarrollado por Cordovilla *et al.* (2015), por primera vez, para procesos con un haz láser de distribución espacial sencilla (distribución uniforme), frente a condiciones de proceso variadas, para comprobar el alcance de la flexibilidad del modelo. Se considerará la reacción de oxidación, para el cálculo de espesor de película de óxido, transcurriendo en condiciones alejadas del equilibrio, con parámetros cinéticos, factor de frecuencia y energía de activación, dependientes de las condiciones del proceso, y ajustados en base a resultados experimentales específicos. A su vez, la función propuesta en el modelo original para relacionar el espesor de óxido con un incremento de absorción, ha sido reajustada en base a hipótesis adicionales, considerando novedosamente la posible presencia de una capa de óxido inicial en el proceso, así como un ángulo de incidencia aleatorio en la propagación de la radiación electromagnética en la interfaz material de base-óxido.

Finalmente, las distintas condiciones del proceso simuladas han sido reproducidas experimentalmente, permitiendo comparar la temperatura máxima superficial con la calculada por el modelo, así como la comparativa de los espesores de óxidos teóricos y experimentales. La coincidencia de ambos resultados ha servido para constatar la utilidad del modelo frente a condiciones de proceso variables.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

El material considerado para llevar a cabo todos los estudios del presente trabajo ha sido el acero AISI 4140 equivalente a la denominación 42CrMo4 según la normativa europea (UNE-EN-10083-1, 2008). La utilización de este material se fundamenta en su amplio uso en aplicaciones de maquinaria industrial, donde el conjunto de solicitaciones a las que puede ser sometido indican, en una gran variedad de situaciones, el tratamiento de temple superficial con láser.

Los trabajos experimentales se han llevado a cabo sobre piezas cilíndricas de 64 mm de diámetro y 20 mm de ancho, conectadas a un eje de 30 mm de diámetro por el que se transmite un movimiento circular uniforme. Como fuente láser se ha utilizado un láser de diodo emitiendo a 900 ± 10 nm con una distribución uniforme. La estimación del orden del espesor de la capa de óxido formada tras el tratamiento se ha llevado a cabo mediante un equipo para la medida del espesor de recubrimientos no conductores sobre materiales conductores modelo TEC-CM20. La Fig. 1 muestra un esquema de la disposición del proceso experimental.

En los siguientes apartados se introducirán las leyes cinéticas para caracterizar los fenómenos de oxidación justificando la adopción de la ley utilizada para el proceso de temple superficial con láser. Conocida esta ley, el siguiente paso es asociar dicho espesor con un valor de absorción para lo cual se propondrá una función matemática. Posteriormente, los parámetros que definen dicha función serán concretados de cara a su aplicación en

un modelo de temple superficial por láser orientado a la evaluación espacio-temporal de temperaturas.

2.1. Cinética de la reacción de oxidación

Es necesario determinar la ley que relaciona el espesor de la película de óxido formada, y , con el tiempo, t . Según Otero-Huerta (2012), la mayoría de los fenómenos de oxidación pueden ajustarse a una ley de tipo lineal, parabólica, logarítmica o asintótica.

La modelización lineal implicaría un crecimiento constante de la película de óxido, y por lo tanto, un aislamiento nulo, lo cual no se corresponde con la estructura porosa y agrietada observable en la capa. Por su parte, la modelización asintótica implicaría, a su vez, que la reacción ha de detenerse para un determinado espesor. Este comportamiento se asocia a una capa con propiedades íntegramente aislantes que tampoco se corresponde con la realidad, por su misma naturaleza porosa y agrietada. El comportamiento logarítmico tiene lugar en un intervalo de temperaturas en torno a 200 °C y está asociado a una velocidad de oxidación lenta debido a la baja difusividad iónica a esas temperaturas, en cualquier caso, alejadas de las temperaturas típicas del proceso de temple superficial con láser.

Debido a todas las consideraciones anteriores la ley cinética adoptada para modelizar la oxidación que tiene lugar durante el temple superficial con láser debe ser una ley tipo parabólico (Ec. (1)).

$$y = \sqrt{K_p \cdot t} \quad (1)$$

La constante cinética para la ley parabólica de oxidación es una función de la temperatura que viene dada por la conocida como ecuación de Arrhenius (Ec. (2)).

$$K_p = \frac{F_f \cdot e^{\frac{-E_a}{R \cdot T}}}{\rho^2} \quad (2)$$

En la Ec. (2) F_f representa lo que se conoce como factor de frecuencia; E_a , es lo que se conoce como energía de activación de la reacción; R es la constante universal de los gases ideales, ρ es la densidad del óxido y T la temperatura.

La energía de activación de una reacción química puede definirse como la energía mínima por unidad de materia para que pueda iniciarse dicha reacción (Avery, 2002). Si bien el mecanismo por el cual tiene lugar el comienzo de una reacción química, que puede denominarse como *iniciación*, se considera instantáneo en muchas situaciones, las elevadas velocidades de calentamiento características del temple superficial por láser (normalmente entre 1000 K s^{-1} y 4500 K s^{-1}) hacen que la energía térmica aportada por el haz láser tienda a sobre-elevar

FIGURA 1. Representación esquemática del proceso experimental.

la temperatura antes de que la fase de iniciación de la reacción haya culminado, iniciándose la reacción a una temperatura tanto más elevada respecto a las condiciones de equilibrio cuanto mayor sea la velocidad de calentamiento (Cordovilla *et al.*, 2015).

Conforme a estas hipótesis se plantea la energía de activación dependiente funcionalmente del curso temporal de la irradiancia del haz láser hasta alcanzar el valor máximo. Esta dependencia funcional queda plasmada en la Ec. (3), donde se utiliza la notación ϕ para indicar dependencia funcional, la irradiancia es representada mediante el término I y t significa tiempo.

$$E_a = \phi \left[\frac{dI(t)}{dt} \right] \text{ si } I(t) \leq I_{\max} \quad (3)$$

La Ec. (3) permite obtener un valor global para la energía de activación que caracteriza el inicio de la reacción de oxidación superficial en función de la distribución y geometría del haz láser y de la velocidad del proceso.

El factor de frecuencia determina la tasa de crecimiento de la película de óxido una vez que la reacción ha superado la fase de iniciación.

En la ecuación de Arrhenius el factor de frecuencia representa la frecuencia de colisiones entre átomos durante el transcurso de la reacción química (Avery, 2002). Parece lógico establecer que cuanto mayor sea el valor de la irradiancia neta del láser aplicada sobre una región, más favorecida se verá la movilidad atómica y por lo tanto más elevado deberá ser el valor del factor de frecuencia.

Sin embargo, si para calcular el factor de frecuencia, una vez que la reacción de oxidación se ha iniciado, se tuviera en cuenta exclusivamente el valor de la irradiancia local, se estaría ignorando el hecho de que, según la Ec. (3), la energía de activación ha podido resultar distinta para haces similares en su región frontal y distintos en su parte trasera, y, por lo tanto, que la reacción habrá comenzado a una temperatura diferente (Cordovilla *et al.*, 2015).

Teniendo en cuenta tanto el valor de la irradiancia instantánea, como el de la energía de activación, el valor instantáneo del factor de frecuencia puede expresarse mediante una relación funcional como en la Ec. (4), donde el término ϕ_2 representa la dependencia funcional.

$$F_f = \phi_2 [I(t), E_a] \quad (4)$$

Los valores concretos tanto de la Ec. (3), como de la Ec. (4) deben determinarse para cada aplicación particular. En este trabajo, se presentarán los valores obtenidos para un acero 42CrMo4, verificados ante distintas condiciones de proceso.

Para una descripción detallada sobre la cinética de las reacciones químicas que transcurren en

condiciones alejadas del equilibrio puede consultarse el trabajo de Alvin *et al.* (2007).

2.2. Función para relacionar el espesor de óxido con el coeficiente de absorción

El coeficiente de absorción es uno de los parámetros con mayor repercusión en el estudio térmico del proceso de temple superficial con láser. El valor total de dicho parámetro resulta de la combinación de efectos electromagnéticos de propagación y atenuación de las ondas en un medio conductor, al que se suma la acción de una rugosidad superficial incrementada como consecuencia del desarrollo de una película de óxido.

En el modelo desarrollado por Cordovilla *et al.* (2015), se lleva a cabo un estudio de la propagación de la radiación electromagnética en la interfaz material de base-óxido. Este análisis está cimentado sobre la hipótesis de que el material se encuentra inicialmente libre de óxido y que el ángulo de propagación en dicha interfaz se mantiene constante. En el presente trabajo se plantea el análisis de la absorción considerando una pequeña capa inicial de óxido, como corresponde a la mayoría de las aplicaciones industriales, así como un ángulo de incidencia aleatorio en la propagación de la radiación en la interfaz material de base-óxido.

El comportamiento de la radiación en la interfaz se ilustra esquemáticamente en la Fig. 2. El fenómeno por el cual la presencia de una capa de óxido aumenta la absorción total, A_T , se fundamenta en que la rugosidad de dicha capa tiene capacidad para retener, a través de múltiples reflexiones en su seno, una cantidad de radiación muy superior a la absorbida por el material de base en condiciones libres de óxido. Esta radiación retenida en la capa se propagará entre ella misma y la superficie del material de base a lo largo de múltiples reflexiones con un ángulo de incidencia aleatorio. Cabe, por lo tanto, la definición de dos tipos de eficiencias de retención de radiación por parte de la capa de óxido: a) capacidad para retener la radiación incidente desde el exterior, absorción inicial, $A_I(y)$, y b) capacidad para mantener en la interfaz la radiación retenida a lo largo de los múltiples reflexiones, $\mu_R(y)$, hasta su absorción en el material según las ecuaciones de Fresnel, o liberación total a través de la capa de óxido. Nótese que ambos tipos de eficiencia se hacen dependientes del espesor de película y . La Ec. (5) representa matemáticamente la secuencia de retención de radiación en la capa de óxido y los sucesivos reflexiones.

$$A_T = A_I(y) \cdot A_F(\theta_{90^\circ}) + R_F(\theta_{90^\circ}) \cdot \mu_R(y) \cdot A_I(y) \cdot A_F(\theta_{90^\circ}) \\ + R_F(\theta_{90^\circ})^2 \cdot \mu_R(y)^2 \cdot A_F(\theta_{90^\circ}) \cdot A_I(y) + \dots \quad (5)$$

FIGURA 2. Esquema del proceso de absorción asociado a la película de óxido.

En la Ec. (5) los términos $A_F(\theta_{90^\circ})$ y $R_F(\theta_{90^\circ})$ representan la absorción y radiación respectivamente dadas por las conocidas como ecuaciones de Fresnel, para un ángulo de incidencia, θ , aleatorio entre 0° y 90° . La Ec. (5) se corresponde con una serie convergente de razón menor que 1 ($R_F(\theta_{90^\circ}) \cdot \mu_R(y) < 1$), cuya expresión general viene dada por la Ec. (6):

$$A_T = \frac{A_F(\theta_{90^\circ}) \cdot A_I(y)}{1 - R_F(\theta_{90^\circ}) \cdot \mu_R(y)} \quad (6)$$

Las características de la Ec. (6) son:

- Comportamiento asintótico en función de $\mu_r(y)$, coherente con el hecho observable de que la absorción está limitada al 100% por mucho que crezca la película de óxido.
- Asume la presencia inicial de una capa de óxido, que es la que realiza la retención primaria de radiación. Si el espesor de la capa es muy pequeño, se asume que el valor de $A_I(y)$ se hace igual a 1, predominando el efecto de la absorción directa por parte del material de base (comportamiento no lineal de la variable $A_I(y)$).
- Desde la incidencia de una determinada cantidad de energía hasta completar su absorción máxima posible, se considera constante el espesor de óxido, debido a que el recorrido de la luz es mucho más rápido que la reacción química.
- En lugar de considerar un valor de absorción directamente dependiente de la película de óxido, se considera una eficiencia de redirección que, dependiendo de la radiación reflejada por el material, determinará el valor de A_T final en cada situación.
- Los valores de $A_F(\theta_{90^\circ})$ y $R_F(\theta_{90^\circ})$ se calculan de forma sencilla asumiendo que cualquier ángulo entre 0° y 90° resulta equiprobable.

2.3. Modelo acoplado temperaturas/oxidación

En esta sección se desarrollará un modelo térmico sencillo, basado en el método de los elementos finitos, orientado a la evaluación espacio-temporal de temperaturas en el proceso de temple superficial con láser. El modelo incorpora el cálculo de la capa de óxido y la absorción asociada, conforme a los conceptos desarrollados en las secciones anteriores.

Se considera un haz láser recorriendo con velocidad constante la superficie de la pieza tratada. En estas condiciones se resolverá la ecuación general de transmisión de calor, sobre el volumen de la pieza estudiada, acompañada por las condiciones de contorno que permitan garantizar una representación realista del fenómeno.

La Ec. (7) representa la formulación utilizada para el fenómeno general de transmisión de calor, donde el término Q hace referencia a la fuente de calor externa, dotada de movimiento.

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + Q \quad (7)$$

Los términos ρ , C_p , y κ representan respectivamente la densidad, el calor específico y la conductividad térmica del material, todas ellas consideradas dependientes de la temperatura usando la metodología para el cálculo de propiedades termo-físicas de acuerdo a Miettinen (1997).

La Ec. (8) considera una condición de contorno de convección para representar el intercambio de calor entre el aire y la superficie caliente de la pieza.

$$\kappa \cdot \nabla T = h(T_{amb} - T) \quad (8)$$

El término h en la Ec. (8) es el coeficiente de película, función de la velocidad relativa entre el aire y la pieza.

La Ec. (9) indica el fenómeno de radiación térmica desde la superficie caliente del material.

$$\kappa \cdot \nabla T = \varepsilon \sigma (T_{amb}^4 - T^4) \quad (9)$$

El término σ representa la constante de Stefan-Boltzmann para la radiación con un valor dado por la Ec. (10):

$$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 \cdot K^4} \quad (10)$$

El término ε representa la emisividad del material. Se adoptará un valor constante de $\varepsilon=0,8$, determinado experimentalmente para el acero 42CrMo4, mediante el método de la esfera integradora (Kechemair y Luneville, 1987).

Finalmente, el término correspondiente a la fuente de calor externa, Q , de la Ec. (7), se calculará a partir del valor de la irradiancia neta del haz láser, I , definida como la potencia del láser, P , por unidad de área, S , multiplicada por el valor de la absorción total en cada instante, $A_T(t)$, en las Ecs. (11) y (12).

$$Q = A_T(t) \cdot I \quad (11)$$

$$I = \frac{P}{S} \quad (12)$$

El coeficiente de absorción total que forma parte de la definición de la fuente térmica externa constituye el nexo de unión entre el cálculo de temperaturas y el desarrollo de la película de óxido en la superficie del material tratado.

La siguiente sección muestra los resultados de algunos procesos llevados a cabo con distintos parámetros utilizando el presente modelo acoplado, analizándose la comparativa con los correspondientes resultados experimentales.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La presente sección muestra los parámetros cinéticos obtenidos para distintas pruebas en función de sus respectivas condiciones de proceso, así como el valor de la absorción máxima total para el acero 42CrMo4.

Posteriormente, se detallarán los ciclos térmicos puntuales y la evolución temporal de la película de óxido puntual para tres pruebas especialmente representativas, obtenidos ambos resultados aplicando el modelo descrito en la sección 2. Estos resultados pondrán de manifiesto, por primera vez, los valores típicos del espesor de película de óxido, y su desarrollo dinámico en relación a la evolución temporal de la temperatura superficial.

3.1. Caracterización de la energía de activación y el factor de frecuencia para el acero 42CrMo4

Los parámetros cinéticos han sido ajustados mediante un proceso iterativo, en el que partiendo de valores de referencia de acuerdo a Pryor *et al.* 1986, Nánai *et al.* (1997), Abuluwefa (2012), para la energía de activación y el factor de frecuencia de reacciones en condiciones próximas al equilibrio, se han ido modificando conforme a las hipótesis establecidas, comparando los cursos de temperaturas de un modelo térmico sencillo que incorpora la cinética de la oxidación, con resultados experimentales, hasta conseguir la coincidencia de los cursos térmicos teóricos.

La Tabla 1 sintetiza los valores propuestos, obtenidos en el presente estudio, para distintas condiciones de proceso. En el caso de la energía de activación los valores calculados muestran un buen ajuste para una función tipo asintótico en función del curso temporal de la irradiancia, (coeficiente de correlación 0,9), por lo que se adopta esa función matemática para su integración en los cálculos numéricos. La función muestra una asíntota para un valor aproximado de $2,2 \times 10^5 \text{ J mol}^{-1}$, lo cual más que como un valor concreto, debe interpretarse como una tendencia a limitarse el efecto de la rapidez del calentamiento, a partir de valores elevados.

En la ecuación para el cálculo de F_f , Ec. (4), los valores de $I(t)$, y de E_a , han sido ajustados mediante una función polinómica de grado 2 para E_a , y I para I_{Med} . En este caso la forma matemática de la función empleada para el ajuste da una menor idea del fenómeno físico que tiene lugar, debido a su mayor complejidad y cantidad de variables implicadas.

Respecto a los valores de $A_F(\theta_{90^\circ})$ y $R_F(\theta_{90^\circ})$ se obtienen mediante las ecuaciones de Fresen,

TABLA 1. Parámetros de proceso y valores cinéticos correspondientes

Potencia (W)	Velocidad de proceso (mm min ⁻¹)	I _{Max} (W cm ⁻²)	dI/dt (W cm ⁻² s ⁻¹)	E _a (J mol ⁻¹)	I _{Med} (W cm ⁻²)	F _f (kg ² m ⁻⁴ s ⁻¹)
2070	200	2089	940	55000	297	0,1
5700	650	4025	3640	190000	317	2000
6000	1000	3688	5257	208000	324	1200
3500	600	3524	5515	209000	508	87000
4930	1000	4531	11819	219000	622	95000

asumiendo que la probabilidad de que la incidencia se produzca con cualquier ángulo entre 0° y 90° es la misma. Los valores de la eficiencia de redirección $\mu_R(y)$, y de la absorción inicial de la película de óxido $A_I(y)$, se han estimado considerando que el espesor de película máximo medido, en el presente trabajo, para las pruebas de temple con láser realizadas ha sido de $30\ \mu\text{m}$, que el efecto de la oxidación empieza a resultar significativo a partir de una capa de óxido de $5\ \mu\text{m}$, y que la absorción máxima total documentada en un acero 42CrMo4 es próxima al 75% (Pantsar y Kujanpää, 2004).

Además de su influencia sobre la absorción, cuantificada mediante la Ec. (6), los valores puestos de manifiesto a lo largo del presente trabajo dan una idea de la cantidad de material perdido o transformado en forma de óxido durante el tratamiento. Esa información puede resultar de vital importancia a la hora de evaluar posteriores pos-procesados de la pieza, de mecanizado o decapado, sobre los espesores de material que puede ser eliminado o su influencia sobre las tolerancias del proceso.

De forma orientativa, la Tabla 2 muestra el valor medio, y_{med} , y la desviación típica, $\sigma(y)$, del espesor de película de óxido obtenido mediante la técnica del análisis de impedancia, para pruebas realizadas a velocidades de 200, 600 y $1000\ \text{mm min}^{-1}$. Estos resultados proporcionan un orden de magnitud con los que comparar las predicciones del modelo en base a la precisión de la técnica experimental empleada.

3.2. Resultados del modelo acoplado temperaturas/oxidación

A continuación se muestran los resultados detallados de tres de los procesos utilizados para determinar los parámetros cinéticos. Se considerarán distintas condiciones de velocidad de proceso y de potencia con el objetivo de caracterizar la oxidación asociada tanto a condiciones de calentamiento relativamente lentas, como a calentamientos más acelerados. En todos los casos se utiliza un haz tipo rectangular de dimensiones $16\ \text{mm} \times 5,5\ \text{mm}$. Las condiciones concretas de cada prueba se sintetizan en la Tabla 3.

Se plantea la representación conjunta de la evolución de las temperaturas y de la capa de óxido prevista por el modelo. Este formato permite correlacionar de forma gráfica la temperatura superficial con el desarrollo de la película de óxido, favoreciendo la comprensión del proceso.

La Fig. 3 muestra los ciclos térmicos de distintos puntos equiespaciados bajo superficie en un mismo radio cada $0,5\ \text{mm}$ y el desarrollo de la película de óxido. Como corresponde a una prueba realizada con una velocidad relativamente lenta ($200\ \text{mm min}^{-1}$), el tiempo de interacción, durante el cual la temperatura permanece por encima de la

TABLA 2. Valor medio del espesor de película de óxido y desviación típica para pruebas realizadas con distintas condiciones de velocidad de proceso

	$y_{\text{med}}\ (\mu\text{m})$	$\sigma(y)\ (\mu\text{m})$
Pruebas a $200\ \text{mm s}^{-1}$	23	5
Pruebas a $600\ \text{mm s}^{-1}$	11	4
Pruebas a $1000\ \text{mm s}^{-1}$	7	3

TABLA 3. Condiciones de proceso de las pruebas utilizadas para validar el modelo

Prueba	Velocidad de proceso (mm s^{-1})	Potencia (W)	$T_{\text{Max}}^{\text{Superficial Exp.}}\ (^\circ\text{C})$
1	200	2070	1233
2	600	3500	1253
3	1000	4930	1234

temperatura crítica ($727\ ^\circ\text{C}$), es considerable tanto en superficie, como en las primeras décimas de mm bajo la misma. El error relativo referido a la temperatura máxima en superficie es del 2% (ver datos disponibles en la Tabla 3). Respecto al desarrollo de la película de óxido, en concordancia con la baja velocidad del proceso y el elevado tiempo de interacción, se obtiene un espesor en torno a los $17\ \mu\text{m}$, próximo al valor máximo esperable.

Comparando el curso térmico superficial y la evolución temporal de la película de óxido, puede apreciarse que el comienzo del crecimiento significativo de la capa de óxido tiene lugar a una temperatura en torno a los $500\ ^\circ\text{C}$ mientras que su estabilización tiene lugar, una vez superada la temperatura máxima superficial, a unos $700\ ^\circ\text{C}$. El hecho de que ambas temperaturas hayan resultado diferentes puede asociarse con el comportamiento parabólico de crecimiento de la capa, que considera cierto carácter aislante, y por lo tanto, des-acelerador de la cinética de la reacción cuando el espesor ya ha alcanzado cierto valor.

La Fig. 4 muestra los ciclos térmicos correspondientes a un proceso realizado a $600\ \text{mm min}^{-1}$ junto con el crecimiento de la película de óxido bajo el centro del haz láser. A diferencia de la Fig. 3, en este caso el tiempo de interacción resulta mucho menor y consecuentemente la penetración del tratamiento también lo es. La realimentación de la absorción con valores asociados al espesor de la película de óxido ha arrojado un error relativo nuevamente del 2% referido a la temperatura máxima.

Asimismo, la Fig. 4, muestra un espesor de película de óxido de unos $7\ \mu\text{m}$, menor que en el caso de la prueba 1, como consecuencia del menor tiempo de interacción asociado a la mayor velocidad de proceso.

En el caso de la prueba 2 el comienzo de la reacción tiene lugar a una temperatura apreciablemente

FIGURA 3. Ciclos térmicos de un punto bajo las condiciones de la prueba 1 (eje vertical izqda.) y evolución del espesor de película (eje vertical dcha.).

FIGURA 4. Ciclos térmicos de un punto bajo las condiciones de la prueba 2 (eje vertical izqda.) y evolución del espesor de película (eje vertical dcha.).

superior que la determinada para la prueba 1, unos 650 °C. Este hecho resulta totalmente coherente con las hipótesis establecidas, habiendo transcurrido el proceso a mayor velocidad, y por lo tanto mediante un proceso de calentamiento más repentino. El mayor valor de energía de activación asociado, ha dado lugar a una temperatura superior. Al igual que en el caso anterior la reacción se estabiliza para una temperatura superior a la que comenzó.

La Fig.5 representa los ciclos térmicos y el espesor de película obtenidos bajo las condiciones

correspondientes a la prueba 3. En este caso la velocidad de proceso relativamente elevada, 1000 mm min⁻¹, da lugar a un tiempo de interacción reducido, y a una penetración pequeña del tratamiento. Otra vez el error relativo referido a la temperatura máxima en superficie está en el entorno del 2%, validando los resultados para realizar cualquier tipo de cálculo metalúrgico posterior, para los que la precisión de los cursos térmicos resulta crítica.

La capa de óxido calculada es también reducida, tal y como se muestra en la misma Fig. 5, alrededor

FIGURA 5. Ciclos térmicos de un punto bajo las condiciones de la prueba 3 (eje vertical izqda.) y evolución del espesor de película (eje vertical dcha.).

FIGURA 6. Sección transversal pulida y atacada de las muestras experimentales tratadas correspondientes a los tests 1, 2 y 3.

de unos 5 μm , obteniéndose, no obstante una reducción menor respecto a la prueba 2, que entre ésta y la prueba 1.

En relación a las temperaturas para el comienzo de la oxidación, la prueba 3 arroja el valor más alto de todos, alrededor de los 775 °C en la superficie.

Finalmente, la Fig. 6 muestra la sección transversal pulida y atacada correspondiente a las probetas de los tres tests desarrollados en la presente sección. Esta imagen permite tener una idea del alcance de la transformación martensítica de cada una de las pruebas, y puede ser utilizada como referencia experimental para comparar con el cálculo de las transformaciones metalúrgicas que se puedan

obtener con los resultados térmicos presentados en este trabajo.

Más allá de la trascendencia física sobre la caracterización del desarrollo de la película de óxido en función de la condiciones de calentamiento, cabe poner de manifiesto su utilidad para una aplicación práctica del proceso. De este modo, para el caso de procesos en los que la potencia sea controlada automáticamente, mediante la realimentación de los valores de temperatura, conocidas la velocidad del proceso y la distribución energética del haz láser, pueden utilizarse los datos presentados en este trabajo, para estimar las condiciones de absorción de la superficie a tratar, ayudando a una calibración

del sistema de control de potencia que prevea de antemano la evolución del espesor de óxido sobre la superficie.

Asimismo, para el tratamiento de superficies extensas con pasadas del haz láser solapadas entre sí, el método de cálculo presentado en este trabajo permite calcular las condiciones superficiales de oxidación que va a encontrar la segunda pasada, al transcurrir sobre zonas tratadas por las regiones laterales del haz durante la primera, permitiendo un reajuste fundamentado de las condiciones del proceso.

4. CONCLUSIONES

Este trabajo ha desarrollado los conceptos necesarios para una aproximación realista al fenómeno de la oxidación durante el proceso de temple superficial con láser, incorporando la dependencia de los parámetros cinéticos, energía de activación y factor de frecuencia, con las condiciones del proceso y del haz láser utilizado. Todos estos conceptos se han orientado a su incorporación en un modelo para calcular la evolución y distribución de temperaturas asociadas al proceso, reproduciéndose experimentalmente las pruebas simuladas y comparando la temperatura máxima superficial en la realidad con la predicha por el modelo. De forma sintética las aportaciones del trabajo son:

- Se ha puesto de manifiesto la importancia del fenómeno de la oxidación superficial durante el proceso de temple superficial con láser.
- Se ha identificado la ley cinética que caracteriza el crecimiento de la capa de óxido.
- Se ha identificado la relación entre parámetros que caracterizan la cinética de la reacción de oxidación, energía de activación y factor de frecuencia, con las características del proceso.
- Se ha planteado una función para asociar el valor instantáneo de la película de óxido con el valor de absorción superficial, atendiendo a consideraciones teóricas y experimentales.
- Se ha desarrollado y aplicado un modelo acoplado temperaturas/oxidación que ha mostrado capacidad para predecir la temperatura máxima obtenida en condiciones experimentales similares a las simuladas, así como obtener valores para el espesor de película de óxido que entran dentro del orden de magnitud de las medidas experimentales.
- La precisión de los resultados arrojados por el modelo, relativos a la temperatura superficial y al espesor de película de óxido, permiten plantear su aptitud para aplicaciones de predicción de los cambios metalúrgicos inducidos por el proceso.

Como posibles mejoras orientadas al perfeccionamiento y a la aplicación práctica del modelo cabe destacar:

- El desarrollo de una metodología específica y precisa para la determinación del espesor de óxido formado durante el temple superficial con láser, capaz de mejorar las medidas realizadas con el equipo utilizado para el presente trabajo, abundando en la caracterización precisa de todos los componentes presentes en dicha capa de óxido.
- Aplicación del modelo acoplado temperaturas/oxidación para el cálculo de las fracciones de fases metalúrgicas producidas tanto durante las fases de calentamiento y enfriamiento durante el temple superficial con láser, utilizando parámetros típicos del proceso, como los presentados de forma novedosa en el presente trabajo.
- Profundizar en la comprensión de los fenómenos subyacentes a las tendencias y funciones asignadas para los parámetros cinéticos, energía de activación y factor de frecuencia, en función de las condiciones del proceso.
- Utilizar sistemas para la medida de temperaturas bajo superficie (termopares), a fin de validar las predicciones hechas por el modelo sobre evolución espacio-temporal de las temperaturas en puntos no superficiales.

AGRADECIMIENTOS

El trabajo de investigación que sirve de base al presente artículo se ha desarrollado en el marco del Proyecto de investigación LEIA, financiado por el CDTI (Proyecto IDI-111198).

REFERENCIAS

- Alvin, P., Penner, A.P., Rakhal C.B., Wendell, F. (2007). Activation energy and non-equilibrium effects in thermal reactions. *Int. J. Chem. Kinet.* 9 (3), 371–377. <http://dx.doi.org/10.1002/kin.550090306>.
- Abuluwefa, H.T. (2012). Kinetics of high temperature oxidation of High Carbon Steels in Multi-component gases approximating industrial steel reheat furnace atmospheres. *Proceedings of the International MultiConference of Engineers and Computer Scientist (IMECS 2012)*, Hong Kong, pp. 1664–1668.
- Antonov, V., Iordanova, I., Gurkovsky, S. (2002). Investigation of surface oxidation of low carbon sheet steel during its treatment with Nd:Glass pulsed laser. *Surf. Coat. Tech.* 160 (1), 44–53. [http://dx.doi.org/10.1016/S0257-8972\(02\)00344-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0257-8972(02)00344-4).
- Avery, H.E. (2002). *Cinética química básica y mecanismos de reacción, Cap. IV: Dependencia de la velocidad con la temperatura*, Editorial Reverté, Barcelona, España, pp. 51–61.
- Bailey, N.S., Tan, W., Shin, Y.C. (2009). Predictive modeling and experimental results for residual stresses in laser hardening of AISI 4140 steel by a high power diode laser. *Surf. Coat. Tech.* 203 (14), 2003–2012. <http://dx.doi.org/10.1016/j.surfcoat.2009.01.039>.

- Cordovilla-Baró, F., García-Beltrán, A., Ocaña-Moreno, J.L. (2014). Aplicación de modelos simplificados para la determinación de ventanas de trabajo para el temple de aceros por láser. *Dyna* 89 (5), 533–541. <http://dx.doi.org/10.6036/7079>.
- Cordovilla, F., García-Beltrán, A., Domínguez, J., Sancho, P., Ocaña, J.L. (2015). Numerical-experimental analysis of the effect of surface oxidation on the laser transformation hardening of Cr–Mo steels. *Appl. Surf. Sci.* 357, 1236–1243. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.09.143>.
- Duley, W.W., Semple, D.J., Morency, J.P., Gravel, M. (1979). Coupling coefficient for cw CO₂ laser radiation on stainless steel. *Opt. Laser Technol.* 11 (6), 313–316. [http://dx.doi.org/10.1016/0030-3992\(79\)90008-2](http://dx.doi.org/10.1016/0030-3992(79)90008-2).
- García-Beltrán, A., Marín, L.F., Ocaña, J.L. (2007). Análisis de la influencia del factor de solapamiento en el tratamiento térmico de superficies extensas de aceros por láser. *Rev. Metal.* 43 (4), 284–293. <http://dx.doi.org/10.3989/revmetalm.2007.v43.i4.74>.
- García-Beltrán, A., Ocaña, J.L., Molpeceres, C.L. (2008). TEM-PLUM: A process adapted numerical simulation code for the 3D predictive assessment of laser surface heat treatments in planar geometry. *WSEAS Transactions on Computers* 7 (2), 65–74.
- Ion, J.C. (2005). *Laser processing of engineering materials. Principles, procedure and industrial application. Chapter 9: Surface Hardening*, Elsevier, Oxford, pp. 221–249.
- Kechemair, D., Luneville, E. (1987). *Modelisation de la tempre superficielle des aciers par laser CO₂ continu*. Rapport, Établissement Technique Central de L'Armement (E.T.C.A.), France.
- Leung, M.K.H., Man, H.C., Yu, J.K. (2007). Theoretical and experimental studies on laser transformation hardening of steel by customized beam. *Int. J. Heat Mass Tran.* 50 (23–24), 4600–4606. <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.03.022>.
- Miettinen, J. (1997). Calculation of solidification-related thermophysical properties for steels. *Metall. Mater. Trans. B* 28 (2), 281–297. <http://dx.doi.org/10.1007/s11663-997-0095-2>.
- Miokovik, T., Schwarzer, J., Schulze, V., Vöhringer, O., Löh, D. (2004). Description of short time phase transformations during the heating of steels based on high-rate experimental data. *J. Phys. IV France* 120, 591–598. <http://dx.doi.org/10.1051/jp4:2004120068>.
- Nánai, L., Vajtai, R., George, T.F. (1997). Laser-induced oxidation of metals: state of the art. *Thin Solid Films* 298 (1–2), 160–164. [http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090\(96\)09390-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090(96)09390-X).
- Oliveira, F.L.G., Andrade, M.S., Cota, A.B. (2007). Kinetics of austenite formation during continuous heating in low carbon steel. *Mater. Charact.* 58 (3), 256–261. <http://dx.doi.org/10.1016/j.matchar.2006.04.027>.
- Otero-Huerta, E. (2012). *Corrosión y degradación de materiales. Cap.: Cinética de corrosión a alta temperatura* (2ª Ed.), Editorial Síntesis, Madrid, pp. 283–299.
- Pantsar, H., Kujanpää, V. (2004). Diode laser beam absorption in laser transformation hardening of low alloy steel. *J. Laser Appl.* 16, 147–153. <http://dx.doi.org/10.2351/1.1710879>.
- Pantsar, H., Kujanpää, V. (2006). Effect of oxide layer growth on diode laser beam transformation hardening of steels. *Surf. Coat. Tech.* 200 (8), 2627–2633. <http://dx.doi.org/10.1016/j.surfcoat.2004.09.001>.
- Pryor, A., Réquiza, R., Berrocal, A., Miranda, A. (1986). Comportamiento a la oxidación a altas temperaturas de un acero AISI 316 modificado. *Revista Latinoamericana de Metalurgia y Materiales* 6 (1–2), 55–61.
- UNE-EN-10083-1 (2008). Aceros para temple y revenido. Parte 1: Condiciones técnicas de suministro, AENOR, Madrid, España.

Apéndice G

**Numerical-experimental analysis
of the effect of surface oxidation
on the laser transformation
hardening of Cr Mo steels**

Numerical-experimental analysis of the effect of surface oxidation on the laser transformation hardening of Cr–Mo steels

Francisco Cordovilla^a, Ángel García-Beltrán^{a,*}, Jesús Dominguez^b, Paula Sancho^b, José L. Ocaña^a

^a Centro Láser UPM, Universidad Politécnica de Madrid, Campus Sur U.P.M. Carretera de Valencia, km. 7,300, 28031 Madrid, Spain

^b IKERGUNE A.I.E., San Antolín, 3, 20870 Elgoibar, Guipúzcoa, Spain

ARTICLE INFO

Article history:

Received 18 June 2015

Received in revised form 9 September 2015

Accepted 16 September 2015

Available online 21 September 2015

Keywords:

Austenite

Hardening

Laser

Non-equilibrium

Oxidation

Steel

ABSTRACT

Laser surface hardening is a technology that enables important advantages to be obtained in comparison with conventional techniques in terms of accuracy of the heat affected zone and productivity. Nevertheless, the development of realistic and flexible models has to be fulfilled in order to control the effects of every set of process conditions. Despite many different models having been developed, very few of them deal with the increment of absorption related with the instantaneous value of the layer of oxide growth during the process in a non-protective atmosphere. This work analyzes the problem of oxide formation at the external surface using kinetic relations, whose parameters have been related with the process variables, considering non-equilibrium conditions. Then, the oxide thickness was associated with a value of absorption through an innovative formula that considers the path of the laser radiation in the interface oxide-base material. The thermal calculations obtained by this method have allowed phase changes to be predicted using Avrami law. Both thermal and metallurgical results for different process conditions have been compared with experimental data showing an excellent agreement.

© 2015 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

Laser surface hardening is an innovative technology to increase the hardness and wear resistance for industrial parts undergoing cyclical loads and/or friction. This process has the potential to offer high standards of quality and accuracy of the heat affected zone in comparison with conventional techniques.

In the laser surface hardening process martensite is obtained by a laser beam, with relatively high energy density, that traverses the surface of a steel part causing a very quick heating (between 1000 K/s and 6000 K/s), followed by another quick self-quenching of the material. The typical scope of the treatment lies between 1 mm and 3 mm, and it is limited by the possibility of having adequate thermal cycles beyond these positions without melting the surface [1].

The success in its implantation lies not only in its technological advantages, but also in a thorough understanding of the complex physical phenomena arising from the non-equilibrium

metallurgical changes induced by the thermal cycle, and the modification of the surface properties during the process carried out in a non-protective atmosphere, allowing the designers and users of the process to predict the temperatures and the transformation profile from a certain combination of process parameters.

One of the collateral consequences of the process is the oxidation of the treated surfaces, [2,3]. The high temperature reached during the process, (between 900 °C and 1400 °C), accelerates the kinetic of the chemical reaction between the steel and the surrounding air, leading to the formation of a layer mainly composed by Fe₃O₄ [4,5]. This layer increments the absorption of the laser radiation up to 40% from the original conditions. Given this significant increment, it is essential to introduce a realistic approach of the phenomena in the development of any thermal and metallurgical model of the process.

Another important characteristic of the laser surface hardening is fast austenization. The heating rate produced by a moving laser source is comparable in order of magnitude with the time taken by the carbon atoms to diffuse inside the base material to form austenite. The higher the heating rate the higher final austenization temperature results [6], and therefore, equilibrium critical temperature, Ac₃, only means an energy threshold from which the reaction

* Corresponding author.

E-mail address: agarcia@etsii.upm.es (Á. García-Beltrán).

is thermodynamically possible [7], but not a reliable reference to ensure complete phase change from the base material into austenite.

There are different approaches to model the process, whose initial hypothesis and computational requirements determine the accuracy of the results and their flexibility to deal with changing process conditions.

In [8] a simplified methodology, assuming flat geometry, material with constant thermal properties, constant absorption coefficient and critical equilibrium temperature to consider metallurgical changes, is used to obtain working windows from the requirements of the users. While the simplicity of hypothesis avoids complex computational works, at the same time, the results are intervals of acceptance instead of particular values.

When the uncertainty of the results has to be reduced, 3D finite element models are needed. In some works [9–11], thermal 3D models representing the absorption due to the oxidation with a constant value, and using critical temperatures to estimate the formation of austenite are proposed. The use of 3D domains broadens the flexibility of the model, enabling different arrangements or geometrical singularities to be studied, but, the consideration of a single absorption coefficient restricts the study to a set of process conditions close to those used to determine empirically that coefficient. If any other combination of parameters is utilized, not only the final thickness of the oxide layer, but also the kinetics of the chemical reaction will be different, [3], and therefore, a constant overall coefficient may not offer reliable results.

The references [12–15] develop studies where the transformation of the base material into austenite is studied locally considering the carbon diffusion in the interface of the different grains of base material using Fick law. It shows a sigmoid behavior for the overall transformation, as Avrami law for phase change predicts. This methodology implies a very accurate approach of the metallurgical transformation, at the expense of high computational requirements since a discretization representing the grain size and distribution of the base material is needed. These computational requirements limit the size and geometrical complexity of the domains to study, preventing the models from dealing with realistic situations in terms of time of the process and singularities.

The present work, firstly, deals with the kinetic of the oxidation reaction when a laser is irradiating the surface. In [2,16] several experiments are carried out in order to study the influence over the absorption of some parameters as the speed process (determining the interaction time) or the power of the beam. The different absorption coefficients are interpreted as a consequence of the influence of the process parameters over the growing of the oxide layer.

In [3], the particular features of a laser heating are highlighted. The elevated thermal gradients and the electromagnetic nature of the thermal source show influence over the kinetic parameters, activation energy and frequency factor, that characterize the oxidation reaction happening in far from equilibrium conditions. Different working materials are analyzed, but not particularized for the case of laser surface hardening.

Following the preceding ideas this work proposes the determination of the oxide layer coupled with the thermal courses, using a kinetic law, whose parameters have been functionally related with some process parameters characteristic of the laser surface hardening, enabling a flexible model to face a wide range of process conditions. Once the instantaneous thickness can be calculated, the next step is to associate it with another instantaneous increment of absorption. An innovative formula deduced from the path followed by the radiation in the interface oxide-base material will be put forward.

Secondly, the accurate thermal courses calculated through the thermal-oxidation coupling will be analyzed with Avrami law to

calculate the fraction of austenite resulting from the process. This procedure will be done in a way similar to what [6] proposes, although, using real thermal cycles, with non-constant heating and cooling rates. Despite involving a certain computational effort, because the thermal courses have to be discretized into almost-isothermal steps, the effort is significantly lower than having to design and solve a network representing the microstructure of the base material, and the availability of the model to calculate realistic geometries and long duration processes is ensured.

In the next sections all the theoretical background will be developed, starting from the generalities of the thermal model, and some results will be shown.

2. Material and experimental procedure

The AISI 4140 (EN 42CrMo4) steel in a quenched and tempered state has been selected as working material. The chemical composition is shown in Table 1. This steel is typically used for different parts of industrial machines and automotive engines given its high resistance to impact, fatigue and friction. Its temperature dependent thermo-physical properties have been developed from the methodology proposed in [17] and data available in [18].

The geometry of the investigated component corresponds to cylindrical rods with diameter 68 mm and width 20 mm (whose size has been taken from the real dimensions of the rod journals of the crankshaft from a conventional automotive engine). A 30 mm diameter axis has been fixed concentrically with the rod allowing it to be animated with uniform circular movement. Fig. 1 displays a scheme of the process. The most important user-controlled parameters are the process velocity, V_p , as a product of the sample radius, R , by the angular velocity of the rod, ω ; the offset between the axis of the laser beam and the vertical axis at the center of the rod measured within the plane that contains both of them, Off , and the characteristics of the laser beam itself: beam size, power, P , spatial distribution or irradiance, I and wavelength, λ . Considering the offset as a process parameter enables the effect of changing both, the projected area of the beam over the surface and the incidence angle, to be studied, broadening the flexibility of the process.

The laser source is a high power diode laser delivering radiation at wavelength of $\lambda = 900 \pm 10$ nm. The energy distribution is shown

Table 1
Chemical composition of the AISI 4140 steel.

Element	Fe	C	Mn	Cr	Mo	Si	P	S
Concentration (wt.%)	97.29	0.40	0.87	0.9	0.2	0.25	0.04	0.05

Fig. 1. Schematic representation of the process

Fig. 2. Energy distribution modeled as an interpolation of points

in Fig. 2. The aim of such distribution is to get as close as possible to uniformity in the depth of the transformed profile as well as maximizing the interaction time of the beam for any point. It has been designed taking into account the ideas of a customized beam for the hardening process presented in [19] and of a computer-generated hologram developed in [20]. In this case the energy distribution is equivalent to a distribution of several fronts with a uniform level of energy along the length of each front, with the aim of causing a uniform distribution of the heat affected zone, with a length of 20 mm, a width of 10 mm and a maximum irradiance value of 5500 W/cm².

All the samples have been cut using an Al₂O₃ wheel, then ground, and finally conveniently polished. Nital (2% nitric acid and 98% ethanol) was used in order to etch the samples. The microstructure characterization has been carried out by an optical microscopy looking for an accurate measurement of the depth and width of the transformed zone. In order to have an estimation of the oxide layer after the process, it has been additionally checked using a thickness measurer, model TEC-CM20 from Tecnimetal, capable of detecting the layer of a non-conducting material over the surface of a conducting one (impedance analysis).

Different processes have been carried out varying the conditions of V_p , P , which has been kept constant within each experiment, and Off . Temperature, T , has been monitored using a pyrometer brand Infracwin.

3. Theoretical modeling

This section introduces the three knowledge fields necessary to the development of a coupled model temperature/oxidation which includes the calculations for the metallurgical transformations under the fast heating and cooling associated with the laser surface hardening process. Firstly, the equations of the heat transfer phenomena to be solved with a 3D finite element model will be introduced. Secondly, the kinetic behavior of the non-equilibrium oxidation reaction over the surface of the material is characterized applying the concepts introduced in [3] for general laser oxidation of metals, to the particular case of the hardening of steel. Then, a completely innovative equation to relate the length of the oxide layer with the increment in absorption is demonstrated and integrated into the thermal model. Thirdly, the realistic thermal courses from the coupled thermal/oxidation calculations are used to predict the fraction of austenite during heating and first moments of cooling using Avrami law in a similar way to what is done in [6] with idealized thermal courses. Fig. 3 shows a scheme of the model.

Fig. 3. Work flow of the model

3.1. Heat transfer phenomenon

As has been described for the experimental procedure, the process consists in a laser beam irradiating the surface of a rotating cylindrical rod. Under these circumstances the general heat transfer equation is solved, Eq. (1).

$$\rho C_p \cdot \partial T / \partial t = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + [Q(x, y - d)] \quad (1)$$

The terms ρ , C_p and κ represent density, specific heat and thermal conductivity respectively and d the value of the process offset; all of them have been regarded as temperature dependent in the range of 300–1500 K. Q refers to the spatial distribution of the absorbed irradiance of the laser beam. The introduction of d in the definition of the thermal source allows an easy way to consider this parameter in the model, just by transferring the coordinates of the energy distribution in the only direction in which the offset takes place, (see the scheme of the process in Fig. 1).

Some boundary conditions have been established. The heat exchange with the air at room temperature surrounding the treated material is described by Eq. (2).

$$\kappa \cdot \nabla T = h(T_{amb} - T) \quad (2)$$

The term h , represents the so-called film coefficient. Values between 12 W/m² K and 50 W/m² K have been adopted depending on the process speed.

The losses of energy in form of radiation released from the hot surfaces of the material are included in Eq. (3).

$$\kappa \cdot \nabla T = \varepsilon \sigma (T_{amb}^4 - T^4) \quad (3)$$

The symbol ε indicates the so-called emissivity of the material. A value of $\varepsilon = 0.8$ independent of temperature has been selected according to experimental analysis. The term σ represents the Stefan–Boltzmann constant for radiation, $\sigma = 5.67 \times 10^{-8}$ W/(mK).

Latent heats of the metallurgical transformation have been considered taking into account the non-equilibrium conditions of heating and cooling.

3.2. Oxidation of the surface during the treatment

The high temperature reached during the process under a non-protective atmosphere leads unavoidably to the oxidation of the iron present in the surface of the part, developing a layer mainly constituted by Fe₃O₄, [4,5]. The growth of the oxide layer while the laser beam irradiates any region of the surface increases the amount of energy absorbed into the material due to the increment in the roughness of it. Although it is a widely accepted phenomenon and many authors deal with it [2,4,5], few of them study the way in which the laser, as a high density energy source producing a very fast heating, moves the reaction far away from the equilibrium. [3], nevertheless, shows the dependence of the kinetic parameters on the Arrhenius equation, activation energy, E_a , and the pre-exponential term usually referred as frequency factor, F_f , with the temperature reached as a result of a laser heating, observing changes of even several magnitude orders depending on it. This work proposes the calculation of the thickness of the oxide layer, y , using a kinetic law whose parameters, E_a , and F_f , are dependent on the process characteristics. Then, the instantaneous thickness will be related, at every step of the calculation, with the corresponding rise of absorption using an innovative formula based on theoretical considerations. This approach enables a dynamic feedback between the absorption due to the oxidation and the thermal courses to be implemented onto the model, differing from the use of a unique constant value to consider the oxidation, as is typically done.

According to [21], most of the oxidation phenomena follow a kinetic law linear type, Eq. (4), parabolic type, Eq. (5), logarithmic

type, Eq. (6) or asymptotic type, Eq. (7); where K_l , K_p , K_{log} , and K_a represent their kinetic constants respectively, dependents of E_a , F_f and T .

$$y = K_l \cdot t \quad (4)$$

$$y = \sqrt{K_p \cdot t} \quad (5)$$

$$y = K_{log} \cdot \ln(t) \quad (6)$$

$$y = K_a(1 - \exp(K_a \cdot t)) \quad (7)$$

The linear modeling, Eq. (4), would imply that the growing speed of the layer is constant, or, in other words, that a specific thickness of it does not affect the developing of further thicknesses. It would be only possible if the layer disappears immediately after its creation. This behavior is not observed in a hardening process.

The asymptotic law, Eq. (7), assumes that the oxide layer is limited to a maximum thickness, which means that, it is capable of isolating completely the base material and stopping the reaction. The high thermal gradients during the process and the porous structure of the layer indicate that this hypothesis is not possible either.

The logarithmic law, Eq. (6), according to [21], is predominant at relatively low temperature, around 200 °C, given the low ionic conductivity at that temperature. Nevertheless, the conditions of the laser hardening imply much higher temperatures. Therefore, the most appropriate law to characterize the growing of the oxide layer on a laser hardening process is the parabolic law, Eq. (5).

The kinetic constant of the parabolic law, K_p , is given by Eq. (8).

$$K_p = F_f \cdot \exp(-E_a/RT)/\rho^2 \quad (8)$$

R , represents the gas constant and ρ , the density of the oxide, introduced to express the oxide layer directly in length units.

The activation energy can be described as the threshold barrier that has to be surpassed to start a chemical reaction. While in non-catalyzed reactions it is regarded as a constant value [22], the very fast continuous heating imposed by the laser during the hardening process competes with the time taken for the reaction between the activation energy having been reached and it starts properly, that, we will call *initiation* of the chemical reaction. Although the time consumed by the initiation normally can be neglected, the very high heating rate caused by the laser, will make the temperature keep rising while initiation is taking place, resulting in a start of the chemical reaction at a higher temperature than if it happens with a slower heating rate. As a consequence of this process, the higher the heating rate is the higher the apparent activation energy results, according to the final temperature in which the reaction starts. This enables the activation energy to be considered as a function of the heating rate, Eq. (9).

$$E_a = \varphi_1(dT/dt) \quad (9)$$

In addition, in order to integrate these calculations in a numerical model, when the laser beam guarantees a continuous heating of any point, the activation energy can be related directly with the temporal course of the irradiance of the beam while it is reaching its maximum value, Eq. (10).

$$E_a = \varphi_2[(dI(r)/dr) \cdot (dr/dt)] \quad (10)$$

The frequency factor quantifies the number of collisions between the molecules of the reagent [23]. Once the reaction has started, and the activation energy has been surpassed, the frequency factor determines the growing rate of the oxide layer. Again the presence of a high density source of energy such as a laser beam over the area where the chemical reaction is taking place stimulates the pace of collisions, and therefore, the frequency factor has to be functionally related with the irradiance of the laser after the start of it. Nevertheless, similar values of irradiance over the surface may

Fig. 4. Two hypothetical beams leading to a more progressive heating on the left and a more abrupt one on the right

be acting on reactions that might have been initiated with very different activation energies. Fig. 4 displays the longitudinal section of two hypothetical beams where their frontal side is different, leading to a more progressive heating on the left, and a more abrupt one on the right, but, whose rear regions are completely equal. The arrow represents the direction of their movement.

According to Eq. (10) the activation energies for the beams of Fig. 4 have been different, and, although, once the reaction has started is going to be stimulated by the same level of irradiance, the effect of the different conditions at the start has to be taken into account. Consequently, the frequency factor has to be functionally related not only with the irradiance of the beam, but also with the apparent activation energy that the process conditions have imposed to the reaction, Eq. (11).

$$F_f = \varphi_3[I(t), E_a] \quad (11)$$

In the results section, values of E_a and F_f have been adjusted according to Eqs. (10) and (11), providing empirical formulas for E_a and F_f easy to integrate into a flexible numerical model, capable of facing very different conditions of the process.

The aim of an accurate determination of the oxide layer is to use this information to calculate the increment of absorption associated with the state of the surface. When the base material remains unoxidized and the roughness of the surface is considered negligible, the amount of energy absorbed by the material is given by the so-called Fresnel Equations [24], Eqs. (12) and (13).

$$A_p = \frac{4 \cdot n \cdot \cos(\theta)}{(n^2 + k^2) \cdot \cos(\theta)^2 + 2 \cdot n \cdot \cos(\theta) + 1} \quad (12)$$

$$A_s = \frac{4 \cdot n \cdot \cos(\theta)}{(n^2 + k^2) + 2 \cdot n \cdot \cos(\theta) + \cos(\theta)^2} \quad (13)$$

Eqs. (12) and (13), provide the amount of energy absorbed into the material as a function of the kind of polarization, p , or s , the incidence angle at every point, θ , and the optical properties of the material, refractive index, n , and extinction coefficient, k , which in turn, depend on the wavelength of the incidence radiation, λ .

If the oxide layer appears, part of the energy initially reflected from the base material, that can be called *Fresnel Reflection*, R_f , (equal to $1 - A_f$, *Fresnel Absorption*, to indicate that comes from Eqs. (12) and (13)), will again be reoriented against the surface of the material, repeating the process: some of the redirected radiation will be absorbed, and part again sent to the oxide layer. This sequence is repeated until the energy has been completely absorbed or released from the material; Fig. 5.

Mathematically, the total energy absorbed by the base material, A_T , can be considered the sum of the energy absorbed in every single impact of the radiation, compound of the energy reflected in the previous impact that has been efficiently redirected by the oxide layer. The efficiency of the oxide layer to redirect the radiation against the material, is denoted by μ_{ox} , and will depend on the

Fig. 5. Scheme of the path followed by the laser radiation in the interface between the base material and the oxide

thickness of the oxide layer at every moment, Eq. (14).

$$A_T = A_F + R_F \cdot \mu(y)_{Ox} \cdot A_F + R_F^2 \cdot \mu(y)_{Ox}^2 \cdot A_F + R_F^3 \cdot \mu(y)_{Ox}^3 \cdot A_F + \dots \quad (14)$$

Eq. (14) corresponds to a convergent series ($R_{EM} \cdot \mu_{Ox} < 1$), whose general term is shown in Eq. (15).

$$A_T = \frac{A_F}{[1 - R_F \cdot \mu(y)_{Ox}]} \quad (15)$$

In Eq. (15), if μ_{Ox} is considered directly proportional to the thickness of oxide, y , then A_T will show an asymptotic behavior tending to a value of 1, coherent with the fact that absorption has to be limited to 100% no matter how much the thickness surpasses a certain value.

While the oxide layer has not appeared, $y=0$, the value of A_T matches the absorption coming from Eqs. (12) and (13), A_F .

In the time from when a given amount of energy has reached the part until it has been completely absorbed or released, the thickness of the oxide layer can be assumed constant, since the speed of light is much faster than the development of the chemical reaction.

Different from the works where the oxidation is characterized by a global absorption coefficient or with an increment of absorption dependent of the thickness, Eq. (15) introduces the idea of “redirecting efficiency”, μ_{Ox} , which will lead to different final values of absorption according to the energy initially reflected by the surface, R_F .

In the section of results the value of $\mu_{Ox}(y)$ will be adjusted for the working material from experimental data and theoretical considerations.

3.3. Fast austenization

The heating conditions imposed by a laser beam, with heating rates between 1000 K/s and 10,000 K/s, raise the temperature of austenization far from the critical temperatures given by the binary diagram, which therefore cannot be used as a valid reference. According to the studies carried out in [6] where the Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov theory (hereafter Avrami law) is used with idealized thermal cycles (constant heating and cooling rates), this work, calculates the fraction of austenite with realistic thermal cycles oriented to an industrial hardening process.

The austenite fraction, f_A , obtained in an isothermal phase change is given by Eq. (16).

$$f_A = 1 - \exp[-(b \cdot t)^n] \quad (16)$$

In Eq. (16), t represents time and b and n are parameters characterizing the kinetics of the phase transformation.

The parameter b is a function of temperature given by Eq. (17).

$$b(T) = C \cdot \exp[-\Delta H/(\sigma \cdot T)] \quad (17)$$

The term ΔH represents the activation enthalpy of the transformation of the base material into austenite, C , is a velocity constant, σ , the Boltzmann constant, and T , temperature in K.

Since Eq. (16) represents the fraction transformed with time at a given temperature, the way to adapt this method to the thermal courses imposed by the laser heating is discretizing them into small increments so that, even with the highest heating rate of the course, the rise of temperature is lower than a few degrees. Eq. (18) represents the sequence of the calculations.

$$f_{A,i+1} = f_{A,i} + \left. \frac{\partial f_{A,i}}{\partial t} \right|_{t_i^*} \cdot \Delta t \quad (18)$$

In Eq. (18) the term Δt is the duration of every increment and t_i^* represents the time that would have been necessary to obtain the accumulated fraction of austenite at the i increment if all the process had been carried out at the temperature of it. The expression to calculate t_i^* , Eq. (19), is obtained by clearing t from Eq. (16).

$$t_i^* = \frac{1}{b(T_i)} \cdot \left[\frac{\ln 1}{(1 - f_{A,i})} \right]^{1/n} \quad (19)$$

This methodology enables the model to consider the austenization whatever the process conditions are, provided that Δt is small enough to consider the heating rate. It is important to notice that these calculations involve not only the austenite obtained during the heating, but also in the first moments of the cooling, after the maximum temperature has been reached, when the temperature is still over the critical equilibrium temperature, being the reaction possible from a thermodynamic point of view.

For a more detailed explanation of the use of Avrami law for laser surface hardening see [6], whose parameters to calculate the austenitic transformation have been adopted in the present study, since the working material, AISI 4140 steel, is the same.

4. Results and discussion

This section presents the results of the coupled model temperature-oxidation and the austenite fraction obtained as a consequence of some processes carried out under different conditions of V_p , P , and Off . For each one, the maximum temperature of its thermal cycle will be contrasted with the maximum temperature registered by the pyrometer during the experimental procedure, the oxide layer predicted will be checked to be within the margins detected by the equipment to measure non-conducting layers, and the predicted austenite fraction in a transversal section of the part (transformation map) will be directly compared with the heat-affected zone where the chemical etching has revealed phase changes in the experimental equivalent section, assuming that all the austenized zone will transform into a heat-affected zone.

Fig. 6. Thermal cycles and oxide layer of Test 1

Fig. 7. Heat affected zone vs. calculated for Test 1

Fig. 8. Thermal cycles and oxide layer of Test 2

In the first place, the values of the kinetic parameters characterizing the oxidation of the surface, E_a , and F_f , will be adjusted under different process conditions, allowing Eqs. (10) and (11) to be expressed with explicit empirical expressions easy to introduce into any numerical model. The efficiency of the oxide layer to redirect radiation against the surface, $\mu_{ox}(y)$, has been estimated at the same time, completing Eq. (15).

4.1. Characterization of the kinetic parameters for the oxidation reaction

The characterization of the kinetic parameters has been carried out through a successive procedure, which, starting with parameters of reactions close to the equilibrium taken from [25,26], have been modified, coherently with the established hypothesis, until achieving results in the model matching the experimental temperatures, and, predicted oxide layers similar to the measurements. As is apparent from this argument, if the thermal courses were used for the adjustment procedure, the increment of absorption due to the oxide had to be taken into account at the same time. Therefore, the kinetic parameters were needed to be determined after a reasonable estimation of the redirecting efficiency of the oxide for different thicknesses.

The values of the maximum absorption reported by [2,16], in the range of 60–73%, depending on the process parameters, along with our own measurements of the oxide thickness, between 5 μm and 30 μm , enables the relation, $\mu_{ox}(y)$, to be constructed.

Table 2 synthesizes different process conditions tested and the resulting kinetic parameters.

Table 2

Processes carried out to obtain the behavior of the kinetic parameters.

V_p (mm/min)	P (W)	Off (mm)	T_{Max} (°C)	E_a (J/mol)	F_f (Kg ² /m ⁴ s)
250	3050	31	1360	210,000	1500
400	3400	31	1150	217,000	5500
600	4000	26	1375	220,000	60,000
1000	4930	10	1252	225,000	90,000

Fig. 10. Thermal cycles and oxide layer of Test 2

From the experimental results E_a is expressed through an explicit expression, Eq. (20):

$$E_a = -4.188 \cdot 10^8 \cdot (dl/dt)^{-1.136} + 230582 \quad (20)$$

In Eq. (20), the magnitude dl/dt has to be expressed in W/cm² s. Its asymptotic behavior shows that the effect of increasing the suddenness of the heating tends to have a limited effect on the activation energy from a certain value. Despite the proposed equation having an asymptote close to 230,600 J/mol, it has to be interpreted as a trend in the not very quickly growing behavior of the function, more than as a fixed value.

In the same way, F_f is fitted, according to the hypothesis set in Eq. (11), using a polynomial equation, with grade 2 for the irradiance and 1 for the activation energy, Eq. (21).

$$F_f = 96170 + 134900 \cdot E_a - 113500 \cdot I - 140700 \cdot E_a \cdot I + 4270 \cdot I^2 \quad (21)$$

Eq. (21) requires I to be introduced in W/cm² and E_a in J/mol.

Eqs. (20) and (21) have been planned from theoretical considerations, and adjusted empirically. A comprehensive understanding of the activation energy under very high heating rates has to be

Fig. 9. Heat affected zone vs. calculated for Test 2

Fig. 11. Heat affected zone vs. calculated for Test 3

Table 3
Parameters of the tests.

	P (W)	V_p (mm/min)	Off (mm)	T_{Max} Exp. (°C)
Test 1	2070	200	21	1233
Test 2	3750	600	27	1250
Test 3	4300	500	31	1150

accomplished, including the influence of the heating rate over the initiation of the chemical reaction and other nonlinearities; additionally, the interpretation of the resulting mathematical functions and the coefficients from the adjusting process need to be deeply understood and particular situations taken into account in future works. However, the process conditions used to prepare the functions cover most of the laser surface heating possibilities, and lead to satisfactory results that will be shown in the successive sections.

4.2. Thermal courses, oxide layer and phase change

This section displays the output of the coupled temperature-oxidation model with temperature courses for equally spaced points along a radial direction, the evolution of the oxide thickness for a point in the surface of every sample, and a transversal section with the austenite fraction calculated from the thermal courses.

Table 3 synthesizes the characteristics of the experimental tests and the maximum temperature measured.

Fig. 6 displays the thermal courses provided by the model for Test 1 whose values are indicated on the left vertical axis, and the development of the oxide layer, that is referred to on the right horizontal axis. Z represents the depth under the surface for the thermal cycles.

As it corresponds to a relatively slow process, the interaction time (time during which temperature remains above the equilibrium critical temperature), is considerable for the points around 1.5 mm. The maximum temperature predicted by the calculations is 1239 °C, that presents very slight differences with the experimental result (see Table 3).

The growth of the oxide layer shows certain correspondence with the thermal cycles. The final value, around 20 μm , lies within the expected magnitude order.

Fig. 7 represents the comparison between the austenite fraction predicted by the calculations and the heat affected zone revealed by the chemical etching of the treated sample.

Numerical calculations are able to predict the depth of the affected zone and the general shape of it, although some irregularities can be appreciated as a consequence of the graphical interpolation of the calculated values, the general shape is satisfactory.

Fig. 8 displays the thermal courses and the oxide layer corresponding to Test 2.

As it corresponds to a faster process the interaction time has been drastically reduced in comparison with Test 1, partially compensated with a larger value of Off . The correlation between the oxide layer development and the thermal course for $Z = 0$, compared with Test 1, shows a starting of the oxidation at a higher temperature in the case of test 2, given the higher suddenness of the heating (for the same spatial distribution of the laser beam, V_p is threefold

and P almost twofold). In addition, the slope of the growing of the oxide layer is also bigger as a consequence of the higher levels of irradiance associated with a higher power.

Fig. 9 shows the comparison between the experimental and the predicted transformation zone for Test 2.

Fig. 9 shows a good correspondence between the calculated and the experimental heat affected zone, for both depth and general shape. In comparison with Test 1, the maximum depth is shorter as corresponds to a faster process.

Fig. 10 represents the thermal cycles and the oxide layer associated with Test 3.

Maximum temperature of 1160 °C practically matches the empirical result and the oxide layer happens to be the most reduced of the three as corresponds to a fast process in which the maximum temperature is lower than in the others.

Fig. 11 shows the austenization map corresponding to Test 3.

Fig. 11 demonstrates again that the method allows a good agreement between calculations and experimental results. In this case, maximum depth lies around 1.2 mm, which is coherent with the conditions of the process, and the lower temperature reached in comparison with both the others.

5. Conclusions

The main and most innovative characteristics of the model and the major results are synthesized as follows:

- A coupled temperature-oxidation 3D model including the relation of the kinetic parameters characterizing the oxidation with the features of the process has been developed. This improves the flexibility of the model to deal with very different process conditions considering the oxidation phenomenon associated to every single one.
- The calculations of the increment of absorption as a consequence of the development of the oxide layer, for every stage of it during its growth have been included.
- The feedback of the thermal calculations with the absorption due to every stage of the oxide layer has led to very accurate results in the comparison between the real and calculated maximum temperature with a relative error within 5% in all the cases.
- The model is able to offer the temporal course of the oxide thickness, which, in every test has fallen between the margins experimentally determined. These results have been checked through the measurement of the experimental oxide layer.
- The transformation profile using Avrami law with discretized almost- isothermal steps, has been obtained showing a good agreement between theoretical and experimental results.
- The resulting model has shown its capability to face different process conditions and domains, allowing a wide range of situations to be considered, particularly, those which imply changes in the heating rate or in the interaction time.

Some tasks and further studies are needed to deepen the understanding of the phenomena happening during laser surface hardening:

- (a) The influence of the process variables included in Eqs. (20) and (21) and the non-equilibrium reaction described by them need additional studies to understand completely the nature of the phenomenon.
- (b) Despite the oxide layer having been measured indirectly through impedance analysis, an optical characterization to analyze its compactness and the trail of possible release of material during the irradiation, would add interesting complementary information.
- (c) A further characterization of the products from the cooling of the formed austenite, to develop not only a comparison between austenite profile and heat affected zone but also an accurate study of all the products obtained during cooling and the concentration of everyone.

Acknowledgements

The research and development work that is the basis of the present study has been developed under the LEIA project funded by CDTI (Spain Project; IDI-111198).

References

- [1] J.C. Ion, Surface hardening, in: J.C. Ion (Ed.), *Laser Processing of Engineering Materials. Principles, Procedure and Industrial Application*, first ed., Elsevier Butterworth-Heinemann, Oxford, 2005, pp. 221–249.
- [2] H. Pansar, V. Kujanpää, Effect of oxide layer growth on diode laser beam transformation hardening of steels, *Surf. Coat. Technol.* 200 (2006) 2627–2633.
- [3] L. Nánai, R. Vajtai, T.F. George, Laser-induced oxidation of metals: state of the art, *Thin Solid Films* 298 (1997) 160–164.
- [4] V. Antonov, I. Iordanova, S. Gurkovsky, Investigation of surface oxidation of low carbon sheet steel during its treatment with Nd:Glass pulsed laser, *Surf. Coat. Technol.* 160 (2002) 44–53.
- [5] A. Iordanova, V. Antonov, Surface oxidation of low carbon steel during laser treatment, its dependence on the initial microstructure and influence on the laser energy absorption, *Thin Solid Films* 516 (2008) 7475–7481.
- [6] T. Miokovic, J. Schwarzer, V. Schulze, et al., Description of short time phase transformations during the heating of steels based on high-rate experimental data, *J. Phys. IV. France* 120 (2004) 591–598.
- [7] D.A. Porter, K.E. Easterling, M.Y. Sherif, *Phase Transformation in Metals and Alloys*, third ed., CRC Press, Florida, 2009.
- [8] F. Cordovilla, A. García-Beltrán, J.L. Ocana, Aplicación de modelos simplificados para la determinación de ventanas de trabajo para el temple de aceros por láser, *Dyna Ingeniería e Industria* 89 (2014) 533–541.
- [9] A. García-Beltrán, L.F. Marín, J.L. Ocaña, Análisis de la influencia del factor de solapamiento en el tratamiento térmico de superficies extensas de aceros por láser, *Rev. de Metal.* 43 (1996) 284–293.
- [10] A. García-Beltrán, J.L. Ocaña, C.L. Molpeceres, TEMPLUM: a process adapted numerical simulation code for 3D predictive assessment of laser surface heat treatments in planar geometry, *WSEAS Trans. Comput.* 1 (2008) 65–74.
- [11] A. Yanez, J.C. Álvarez, A.J. López, et al., Modelling of temperature evolution on metals during laser hardening process, *Appl. Surf. Sci.* 186 (2002) 611–616.
- [12] S. Skvarenina, Y.C. Shin, Predictive modeling and experimental results for laser hardening of AISI 1536 steel with complex geometric features by a high power diode laser, *Surf. Coat. Technol.* 201 (2006) 2256–2269.
- [13] R.S. Lakhar, Y.C. Shin, M.J.M. Krane, Predictive modeling of multi-track laser hardening of AISI 4140 steel, *Mater. Sci. Eng. A* 480 (2008) 209–217.
- [14] L. Orazi, A. Fortunato, G. Cuccolini, et al., An efficient model for laser surface hardening of hypo-eutectoid steels, *Appl. Surf. Sci.* 256 (2010) 1913–1919.
- [15] A.I. Katsamas, A computational study of austenite formation kinetics in rapidly heated steels, *Surf. Coat. Technol.* 201 (2007) 6414–6422.
- [16] H. Pansar, V. Kujanpää, Diode laser beam absorption in laser transformation hardening of low alloy steel, *J. Laser Appl.* 16 (2004) 147–153.
- [17] J. Miettinen, Calculation of solidification-related thermophysical properties for steels, *Mater. Trans. B* 28 (1997) 281–297.
- [18] G.E. Totten, *Steel Heat Treatment Handbook*, CRC Press, Florida, 2006.
- [19] H. Hagino, S. Shimizu, H. Ando, et al., Design of a computer-generated hologram for obtaining a uniform hardened profile by laser transformation hardening with a high-power diode laser, *Precis. Eng.* 30 (2010) 446–452.
- [20] M.K.H. Leung, H.C. Man, J.K. Yu, Theoretical and experimental studies on laser transformation hardening of steel by customized beam, *Int. J. Heat Mass Transf.* 50 (2007) 4600–4606.
- [21] E. Otero-Huerta, Cinética de corrosión a alta temperatura, in: E. Otero-Huerta (Ed.), *Corrosión y degradación de materiales*, second ed., Editorial Síntesis, 2012, pp. 256–261.
- [22] P. Alvin, A.P. Penner, C.B. Rakhil, et al., Activation energy and non-equilibrium effects in thermal reactions, *Int. J. Chem. Kinet.* 9 (2014) 371–377.
- [23] H.E. Avery, Cinética química básica y mecanismos de reacción, first ed., Editorial Reverté S.A., Spain, 1982.
- [24] J.R. Reiz, F.J. Milford, R.W. Christy, *Fundamentos de la teoría electromagnética*, fourth ed., Addison Wesley Iberoamericana, Mexico, 1996.
- [25] H.T. Abuluwefa, Kinetics of high temperature oxidation of high carbon steels in multi-component gases approximating industrial steel reheat furnace atmospheres, in: *Proc. Int. Multiconf. of Engineers and Computer Scientists*, vol. 2, 2012.
- [26] A. Pryor, R. Réquiza, A. Berrocal, et al., Comportamiento a la Oxidación a Altas Temperaturas de un Acero AISI 316 Modificado, *Revista Latinoamericana de Metal. y Materiales* 6 (1986) 55–61.

Apéndice H

Numerical/experimental analysis
of the laser surface hardening with
overlapped tracks to design the
configuration of the process
for Cr-Mo steels

Numerical/experimental analysis of the laser surface hardening with overlapped tracks to design the configuration of the process for Cr-Mo steels

Francisco Cordovilla^{a,*}, Ángel García-Beltrán^a, Paula Sancho^b, Jesús Domínguez^b,
Leonardo Ruiz-de-Lara^a, José L. Ocaña^a

^a Universidad Politécnica de Madrid. Centro Láser (CLUPM). Edificio Tecnológico "La Arboleda" Campus Sur U.P.M. Carretera de Valencia, km. 7.300, C.P. 28031 Madrid, Spain

^b IKERGUNE A.I.E., San Antolin, 3, 20870 Elgoibar, Guipúzcoa, Spain

ARTICLE INFO

Article history:

Received 12 February 2016

Received in revised form 11 April 2016

Accepted 12 April 2016

Available online 13 April 2016

Keywords:

Austenite

Design

Hardness

Laser-hardening

Overlapping

Oxidation

ABSTRACT

Laser surface hardening is a promising technology to improve wear and fatigue properties of steel surfaces. When the dimensions of the surface to be treated are larger than the cross section of the laser beam several overlapped tracks are needed, and the distance between consecutive tracks becomes a fundamental design parameter. This work aims to optimize that parameter with the purpose of fulfilling a set of initial requirements for the process. A laser hardening temperatures/oxidation coupled model available in the literature is applied for the first time to the case of an overlapping process, extending its capabilities to take into account the tempering of the second track over the martensite of the first one. This model in conjunction with a convenient geometrical characterization of the heat affected zone enables a design strategy to be implemented which, using metallurgical and hardness maps, has the capability of attending different criteria. All the conditions proposed in the design of a suitable overlapping distance have been reproduced empirically for the case of the 42CrMo4 steel, and a comparison of hardness has been carried out, showing a good degree of agreement.

© 2016 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

In the laser surface hardening process a moving laser beam, with proper characteristics, irradiates the surface of a steel part to increase the hardness in a few millimeters of the material under its path, leaving the remaining of the part unaffected. This procedure leads to a material which is locally prepared to resist wear and fatigue, keeping in the whole of the part its original properties [1]. This way of working provides important advantages compared to conventional techniques, in terms of productivity and accuracy of the heat affected zone [2].

When the dimensions of the region to be treated are larger than the transversal area of the laser beam, consecutive overlapped tracks are needed. In this context the already complex phenomena of the laser surface hardening, increases with the tempering caused by the heat affected zone of the next track, dissolving the martensite generated by the previous one. In this context, physical models of the process constitute a fundamental tool to analyze the better configuration to avoid regions with hardness values under the nominal requirement, or when it is unavoidable, reduce to the maximum the extension of those regions.

There are different models which deal with the laser surface hardening and the overlapping processes. Reference [3] develops an interesting study of the metallurgical phases and the hardness distribution when several tracks are needed, using Fick law to study the carbon diffusion

during austenization, and Avrami law to consider the tempering of the martensite generated in a laser track, by the heat affected zone of the following one. Nevertheless, the use of a mass transfer equation to consider austenization, which has to be coupled with the heat conduction equation and adapted to the microstructure of the material, requires a considerable computational effort that limits the size and geometrical complexity of the problems to study, preventing from considering very realistic situations. Reference [4] proposes another kinetic model and details a procedure to calculate the hardness as a function of the metallurgical phases, offering results for different overlapping factors, showing a good agreement with the experimental results. In both cases, references [3,4], the study is approached from the process parameters to the results, instead of proposing a methodology to design the process and the overlapping from a set of requirements, as the design of any manufacturing process normally requires.

Reference [5], on its own side, presents a study where the effect of the overlapping distance between consecutive tracks is systematized, offering useful information about the effect of different overlapping distances over the scope of the treatment, in relation with other process parameters, like the power or the speed. On the other hand, critical equilibrium temperatures are used to make predictions, not considering the non-equilibrium phase change imposed by the laser heating, conditioning the accuracy of the results. Additionally, equally as references [3, 4], the increment of abortion due to the oxidation of the surface, is considered by means of an overall value not related with the instantaneous growing of the oxide layer.

* Corresponding author.

E-mail address: francisco.cordovilla.baro@upm.es (F. Cordovilla).

In the first place, the present work applies the laser surface hardening model developed previously by the authors in [6], innovatively to the study of the process with overlapping tracks. That model uses Avrami law to calculate austenization, according to the procedure proposed in [7], but, with completely realistic thermal cycles.

Additionally, it surpasses models where the increment of absorption due to the oxidation is described by an overall coefficient empirically obtained for a fixed set of process conditions [8–11], which may not represent properly any others, limiting enormously the flexibility of the studies. The oxidation reaction is related with the process conditions [12–14] and considered happening far from the equilibrium [15].

The intrinsic advantages of the model are broadened in the case of the overlapping process. The calculations to obtain the thickness of the oxide layer in all the area covered by a first track, enables the superficial and absorption conditions of the next one, in the region of superposition, to be known in advance, and to evaluate, therefore, if the process conditions have to be re-adjusted to have a similar thermal effect. In the field of the metallurgical transformations, Avrami law is used not only to analyze austenization, but also to study the tempering phenomenon, when the heat affected zone of a given track transforms the martensite of the previous one back into base material.

Once a model has been introduced and adapted as a proper tool to study the phenomena happening in two consecutive tracks (or more), this work proposes a systematic procedure for the design of the process from realistic requirements, attending different criteria for its practical application.

The design needs initially from a topological characterization of the regions under a laser track, considering the extension of both, the hardening transformation and the heat affected zone. This characterization is sufficient by itself to demonstrate that the distance between consecutive tracks to meet a value of hardness at a certain depth has to be strictly shorter than the width in which a single track meets it, and not exactly equal to it, as intuition dictates.

After knowing the initial limitations of the process, a practical design exercise is shown in the section of results. It starts from the process conditions and a set of requirements in terms of minimum hardness and the depth that it must reach. From this frame, a systematic procedure is developed to find the most suitable overlapping distance which meets requirements and maximizes the productivity of the process. It takes into account different improvement criteria according to the post-processing of the treated surface. These analyses reveal the high complexity of the phenomena, where the pursuit of a high value of hardness in the lowest part of the hardened region is opposite to the same objective at the top. Finally, it is clarified that the aggressiveness of the tempering associated with the track, meaning its capability to destroy martensite, constitutes a major limiting factor, forcing, in most of the times, to take a solution of compromise and to accept transition bands with hardness values under nominal requirement.

Calculations developed to carry out the design exercise, mostly in the form of metallurgical phases and hardness maps, were validated empirically, with experiments reproducing the simulations and with the Vickers test to measure hardness, showing an excellent degree of coincidence. The working material and experimental set up is detailed in the next section.

2. Material and experimental procedure

The AISI 4140 (EN 42CrMo4) steel in a quenched and tempered state has been selected as working material. This steel is typically used in machinery and automotive engine applications where some components or certain surfaces of them are exposed to alternative loads and/or friction. These situations represent an optimal application of the laser surface hardening process, treating locally the critical regions to improve the hardness, leaving the remains of the part unaffected. Thermo-physical temperature-dependent properties of the material are

available in [16], which for the cases of high temperature processing can be extended using the methodology proposed in [17].

The experimental procedure has consisted of several tests where two parallel straight trajectories have been irradiated over the working material. Since the power of the laser, the speed, the diameter and energy distribution of the beam have been kept constant during the different tests, the effect of modifying the distance between parallel tracks, the overlapping distance, has been studied. Fig. 1 represents schematically the development of each test.

The dimensions of the samples are 200 mm length, 100 mm width and 30 mm thickness, ensuring a bulk of material large enough to spread the heat conveniently. The laser source was a Nd:YAG ($\lambda = 1064$ nm) releasing energy with a Gaussian spatial distribution.

The way of analyzing the samples was the Vickers Test measurement on transversal sections previously cut using an Al_2O_3 wheel and conveniently polished. A hardness map has been elaborated by performing indentations each 200 μm in both depth and width under the treated region. The aim of such an accurate characterization of the hardness induced by the treatment is to have trustable data to compare with the results provided by the numerical model.

Additionally, the experimental cross sections of the real tests will be compared with the transformation maps. All the samples have been cut using an Al_2O_3 wheel, then ground, and finally conveniently polished. Nital (2% nitric acid and 98% ethanol) was used in order to etch the samples.

The temperature during the process has been monitored by an Infrarind pyrometer for information purpose.

3. Theoretical background

This section introduces the basis to tackle a laser surface hardening process needed for several tracks. In the first place, the coupled thermal/oxidation model presented in [6], which relates dynamically the increment of absorption due to the oxidation with the growing of the oxide layer considering a non-equilibrium chemical reaction is applied innovatively for the case of overlapping tracks. It, not only broadens the flexibility of the overlapping model to deal with different process conditions, but additionally reports the thickness of oxide after every track allowing process parameters to be readjusted according to the expected absorption.

Secondly, a proper characterization of the heat affected zone is pursued. It is focused on a realistic application of the process by taking into account the prosecution of some hardness requirements. This approach constitutes an essential tool to understand qualitatively the way in which each track affects the microstructures produced by the previous one, demonstrating that the length between two consecutive ones has to be strictly shorter than the width in which a single track meets the hardness requirement, and not exactly equal to it in an extreme case, as intuition dictates.

The final step, after calculating temperatures and knowing the limitations for the length between tracks, is to calculate that length to achieve the most convenient distribution of metallurgical phases, or hardness (both are equivalent), under the path of two consecutive tracks. Two relevant transformations are considered: i) fast austenization, for the transformation into austenite experienced by the base material, which finally will be assumed to transform into martensite, and ii) tempering, for the dissolution of the martensite formed by the first track back into base material. Several works deal with fast austenization during heating in AISI 4140 steel [7], and the dissolution of the martensite when tempering happens [3], using Avrami law in both cases, given the diffusion nature of the transformations. From these considerations, this work, uses Avrami law to calculate the metallurgical transformation maps associated with two consecutive tracks, from which, it establish a discussion to obtain the optimum length between tracks, considering possible different criteria which will be shown that may have opposite effects.

Fig. 1. General Scheme of the experimental procedure.

3.1. Thermal/oxidation coupled model

The thermal cycles induced in the material by a laser surface hardening process are the driving force for all the metallurgical transformations, and therefore the accuracy of the calculations to obtain them determines the quality of all the further analysis over the process.

This work proposes the use of the thermal/oxidation coupled model developed by the authors in a previous work [6] which takes into account dynamically the increment of absorption due to the instantaneous thickness of the oxide layer that grows when the process is carried out in a nonprotective atmosphere, and considers the latent heat associated with the metallurgical phase changes. The application of this model for the first time to the case of overlapping laser surface hardening allows all its advantages to be transferred, adding at the same time new interesting features. Given the dynamic coupling temperature/oxidation in the original focus of the model, it is used not only to determine the growing of the oxide layer during each track, but advantageously, also to take into account the effect of the preheating induced in the material by the previous tracks on the kinetic of the current track. In this way, at a given time of the treatment, the heat accumulated due to the previous instants is considered in both, thermal and oxidation calculations, leading to a very realistic approach to the process, providing results with a very high level of accuracy. The main equations of the model are shown in the following.

Eq. (1) represents the general heat conduction equation.

$$\rho C_p \cdot \partial T / \partial t = \nabla \cdot (\kappa \nabla T) + Q \quad (1)$$

In Eq. (1) the term ρ represents the density of the material, C_p is the heat capacity and κ the thermal conductivity, all of them have been regarded as temperature dependent on the range 300 K–1500 K. The terms T , and t represents temperature and time respectively, and Q makes reference to the external source of heat.

Some boundary conditions have been established. The heat exchange with the air at room temperature surrounding the treated material is described by Eq. (2).

$$\kappa \cdot \nabla T = h(T_{amb} - T) \quad (2)$$

The term h , represents the so-called film coefficient. Values between 12 W/m² K and 50 W/m² K have been adopted depending on the process speed [6].

The losses of energy in form of radiation released from the hot surfaces of the material are included in Eq. (3).

$$\kappa \cdot \nabla T = \varepsilon \sigma (T_{amb}^4 - T^4) \quad (3)$$

The symbol ε indicates the so-called emissivity of the material. A value of $\varepsilon = 0.8$ independent of temperature has been selected according to experimental analysis [18]. The term σ represents the Stefan-Boltzmann constant for radiation, $\sigma = 5.67 \times 10^{-8}$ W/(m² K⁴).

Latent heats of the metallurgic transformation have been considered taking into account the non-equilibrium conditions imposed by fast heating and cooling.

Taking into account the ideas proposed in [6], the growing of the oxide layer has been calculated by means of a parabolic kind-type relation, Eq. (4), where y represents the thickness of the oxide layer, K_p is the kinetic constant for a parabolic behavior and t means time [19].

$$y = \sqrt{K_p \cdot t} \quad (4)$$

The parabolic kinetic constant is given by an Arrhenius type relation, Eq. (5).

$$K_p = F_f \cdot \exp(-E_a/RT) / \rho^2 \quad (5)$$

The terms R and T represent respectively the ideal gas constant and temperature, ρ in this case is the density of the oxide formed, mainly Fe₃O₄ according to [13]. F_f is the so-called frequency factor of the reaction and E_a is the activation energy [20,21]. In accordance with the hypotheses on which the present model are based, the high speed heating imposed by the laser and the presence of a source of energy on the area where the reaction is taking place moves it far from equilibrium conditions, and F_f and E_a , which in reactions happening close to the equilibrium are regarded as constant, in the case of a laser heating, have been functionally related with heating rate and the irradiance which is locally irradiating each point [15].

Fig. 2. Thermal cycle of a point which experiences hardening and tempering.

The reference [6] offers explicit expressions for E_a and F_f adjusted from experimental results for the AISI 4140 steel, which have been used in the present work.

Once it is possible to calculate the instantaneous thickness of the oxide layer from the space-time evolution of the thermal cycles, the next step is to associate it with an increment in the value of the absorption. This increment reflects the effect of a larger roughness on the surface of the material which traps part of the radiation which has been initially reflected, causing a dramatic increment of the absorption, from values typically about 40% for the unoxidized material up to values about 80% [12].

The model developed in [6] considers the travel of the light in the interface base material - oxide layer to propose an innovative formula, Eq. (6).

$$A_T = A_F / [1 - R_F \cdot \mu(y)_{Ox}] \quad (6)$$

In Eq. (6) A_T represents the total absorption of radiation including the effect of the oxide layer. A_F and R_F are the absorption and reflection respectively from the unoxidized base material; these values are given by the so-called Fresnel equations [22] as a function of the incidence angle, the kind of polarization and the optical properties of the material, refractive index and extinction coefficient, which in turn are a function of the wavelength of the incident radiation. The term $\mu(y)_{Ox}$ introduces the efficiency of the oxide layer to trap and redirect radiation, which depends directly on the thickness of the laser, y .

These phenomena adapt properly to the overlapping process, enabling the surface condition due to the oxide of a first track to be considered in the study of the absorption of the next one.

For a complete description of all of them, and particular values check [6] and its references. The following section focus on a rigorous characterization of the heat affected zone, to establish the different zones under the laser path, as a tool to start the design process.

3.2. Diffusion transformations

When two consecutive tracks take place in an overlapping process, the piece of material under the first track undergoes a fast heating, where part of the initial microstructure transforms into austenite, another fast self-quenching, where the austenite is assumed to transform integrally into martensite, and, when the second track travels parallel to the path of the first, a reheating is caused (implying a temperature higher than 250 °C), and part of the martensite is assumed to transform again into the base material. Fig. 2 shows schematically a possible thermal cycle experienced by a point in the hardened region of the first track which has been reached by the tempering region of the second track.

While the transformation of the austenite into martensite happens through a very specific mechanism due to the fast quenching [23], the transformations of both, the base material (ferrite + pearlite) into

austenite, and the martensite back into base material, are driven by the diffusion of the carbon, and therefore, can be described by the same physical phenomenon.

This work proposes the use of Avrami law for both transformations, austenization and tempering, to obtain the profile of concentrations of every metallurgical phase after two consecutive tracks, enabling innovatively a discussion about the most suitable overlapping distance to be established, as will be shown in the results chapter.

Eq. (7) represents Avrami law for an isothermal phase change.

$$f_p = 1 - \exp[-(b \cdot t)^n] \quad (7)$$

In Eq. (7), f_p represents the volume fraction of a product consequence of a diffusion transformation, t represents time, and b and n are parameters characterizing the kinetics of the phase change.

The parameter b is a function of temperature given by Eq. (8).

$$b(T) = C \cdot \exp[-\Delta H / (\sigma \cdot T)] \quad (8)$$

The term ΔH represents the energy threshold for the starting of the corresponding diffusion transformation, C , is a velocity constant, σ , the Boltzmann constant, and T , temperature in K.

The main advantage of using Avrami law versus mass transfer equations is that metallurgical transformations can be obtained from the cycles calculated in the thermal model, avoiding, therefore, the need for solving simultaneously two coupled partial differential equations, facilitating the numerical problem without prejudicing the precision of the results.

Since phase changes during a laser treatment happens at a not constant temperature, the thermal cycle of every point has to be discretized into isothermal steps (or almost), whose duration ensures that the increment in temperature is shorter than a few degrees. This procedure is represented by Eq. (9) where the fraction of a diffusion product at a given step, $f_{p,i+1}$, is equal to the accumulated fraction, $f_{p,i}$, plus the variation during the step time, Δt .

$$f_{p,i+1} = f_{p,i} + \partial f_{p,i} / \partial t|_{t_i} \cdot \Delta t \quad (9)$$

In Eq. (9) the term $\partial f_{p,i} / \partial t|_{t_i}$ takes into account the kinetics of the phase change. Since Eq. (9) corresponds to a sigmoid function, with a final asymptote tending to 1 (100% of the transformation), the pace of the transformation at a given step, depends not only on temperature

Table 1
Kinetic parameters of the diffusion transformation during surface laser hardening.

	ΔH (eV)	C (1/s)	n (dimensionless)
Austenization	4.185	2.84e20	1.525
Tempering	2.040	51.11e8	0.109

Fig. 3. Regions under a laser track.

according to Eq. (8), but also on the fraction of the metallurgical phase accumulated in the previous steps, and therefore, while calculating the increment of the corresponding metallurgical phase for every step, it is necessary to consider the time taken to obtain the accumulated product fraction as if all the transformation had happened at the current step temperature, Eq. (10):

$$t_i^* = 1/b(T_i) \cdot [\ln 1/(1-f_{p,i})]^{1/n} \quad (10)$$

In this way, the partial derivative of Eq. (9) can be expressed as Eq. (11) shows:

$$\partial f_{p,i}/\partial t|_{t_i^*} = n \cdot b(T_i) \cdot [\ln(1/(1-f_{p,i}))]^{n-1/n} \cdot (1-f_{p,i}) \quad (11)$$

Introducing Eq. (11) into Eq. (9) the mathematical problem is solved, enabling diffusion of base material into austenite, or, martensite back into base material, to be calculated using the proper kinetic parameters for each transformation. Reference [7] studies fast austenization with idealized thermal cycles using the AISI 4140 steel as working material, while in [3] the diffusion of the carbon associated with the tempering is analyzed for the same material. Since AISI 4140 is also the material used for all the experiments carried out in this work, the kinetic parameters proposed in those studies have been adopted to develop all the calculations oriented to determination of the optimum overlapping distance between consecutive tracks, and the study of the metallurgical transformations. These kinetic parameters are synthesized in Table 1.

3.3. Topological characterization of the heat affected zone

A typical way of working in the laser surface hardening process consists of establishing an objective of minimum hardness at a certain depth. In the case of single track processes, the problem is limited to the selection of the parameters that best meet that requirement [1], and the part of the heat not causing austenization (and therefore hardening) is normally not analyzed. Nevertheless, when two consecutive tracks are needed, the non-hardened but heated region of the second one is capable of activating the mechanism of carbon diffusion in the martensite obtained by the first (tempering), and consequently, making

the hardness value initially obtained dramatically decrease. This phenomenon introduces the overlapping distance, Ol_D , as a fundamental variable of the process, to avoid hardness values under specification, or, when it is not achievable, to mitigate the decrease as much as possible.

Fig. 3 shows a schematic representation of the regions of a cross section under a laser track in the material.

In view of Fig. 3 the effect of the laser treatment has led to a hardened region, where the requirement of hardness has been met, and another region which has exceeded a temperature of around 250 °C, but not had a thermal cycle resulting in an amount of martensite enough to reach the requirement of hardness. This last region will be called tempering region. The length along which the hardened region meets the requirement of hardness at the objective depth is the effective width, W_{Ef} .

When a large area has to be treated by overlapping tracks the decision about the value of the overlapping distance, Ol_D , has to be taken. In a first approach, intuition suggests that the effective width, W_{Ef} , is the maximum possible value that the overlapping distance can adopt, without leaving untreated zones, maximizing at the same time the productivity of the process, and preventing the hardened region of the first track from being excessively exposed to the tempering region of the second one. However, this intuitive idea is wrong, and if Ol_D is made equal to W_{Ef} , the presence of a region with a content of martensite lower than the requirement of hardness is guaranteed. Fig. 4 shows a scheme of such a situation. The regions under the laser tracks have not been shaded to have a clear representation.

In Fig. 4 a circle has been placed indicating the region around which the barriers between the hardened regions of the two consecutive tracks cross. The left area of the circle (painted in black) contains the points which, being inside the hardened region of the first track at the objective depth are next to the barrier, and therefore, have the minimum amount of martensite to reach the requirement of hardness. If these points undergo any tempering cycle, even a very light one, unavoidably their amount of martensite will decrease, and hardness will drop under the requirement, since it was initially at the limit. In fact, the tempering cycles in the local surroundings of the circle are not the lightest ones, since they are beside the hardened region of the second track, and therefore their effect has to be necessarily significant.

Fig. 4. Two consecutive tracks separated W_{Ef} (left) and detailed view of the cross area between the hardened regions (right).

Fig. 5. Overlapping process with Ol_D shorter than W_{Ef} (left) and detailed view of the cross area between the hardened region (right).

From these considerations Eq. (12) can be set as a general condition for a successful overlapping process:

$$Ol_D < W_{Ef} \quad (12)$$

Fig. 5 displays a situation where Eq. (12) is fulfilled.

In the situation shown in Fig. 5 the point of cross between the hardened regions of the two tracks (black circle) is below the objective depth and it does not matter if the tempering cycles of the second track lead to a decrease of martensite. At the same time, the cross of the barrier of the second track with the line that indicates the objective depth meets a region in the hardened zone of the first track (black square) that is relatively far from its own barrier and therefore the content of martensite is not near to the limit, and may resist the tempering cycle.

Eq. (12) is revealed innovatively as a necessary condition to deal with an overlapping process, which, nevertheless, is not sufficient to guarantee the nominal hardness at every point. It is theoretically possible that the tempering cycles of the second track are capable of making the concentration of martensite descend to under the minimum value to fulfill the hardness requirement, even starting with a concentration of 100% of martensite from the first track, especially in the case of a very high value of hardness pursued. When this happens, a transition band with a value of hardness lower than the requirement has to be admitted and the improvement problem becomes the minimization of this transition band attending proper criteria. This analysis needs for the use of kinetic relations to take into account the diffusion of the carbon imposed by the annealing.

The next section shows transformation maps and criteria based on the previous equations and kinetic values.

4. Results and discussion

This section offers a practical example of adjustment of the distance between consecutive tracks. It starts from the characteristics of a laser processing and an objective for the hardness requirement at a given depth, from typical conditions of industrial processes [24]. The characteristics of the laser processing and each of the hardness requirements will determine an effective width, constituting a starting point of the analysis according to Eq. (12). Once the distance that should not be reached between consecutive tracks has been calculated, transformation maps associated with discrete shorter distances will be obtained using the diffusion equations from Section 3.2. The hardness values predicted by these maps will be contrasted with experimental hardness values obtained in equivalent process conditions to show the accuracy of the predictions made by the model. Finally, after proving the reliability of the transformation maps, different criteria will be introduced according to the finishing conditions of the treated surfaces, which, in conjunction with the data provided by the transformation maps, will lead to a systematic procedure to adjust the overlapping distance. Some physical limitation of the process that leads to the need of accepting regions whose hardness descends locally under the requirement will be shown.

4.1. Characteristic of the process and requirements

Numerical calculations considering the temperature/oxidation coupled model introduced in Section 3.1 have been carried out with the purpose of having reference process parameters from a validated model. These calculations enable space-time evolution of temperatures, development of the oxide layer, and metallurgical transformations to be obtained as input data for the analysis of the overlapping process, which will be validated on its own side. Other recent studies carry out theoretical and experimental analysis on the surface laser hardening process. The comprehensive model introduced in [25] offers thermodynamic values for the diffusion transformation for a particular steel, which are used to estimate phase changes under different process conditions. A model-based control methodology is proposed in [26], where the laser beam is handled by a system of two galvanometric mirrors on a control loop, using the calculations from the model to tune its movement optimizing dynamically the heat distribution in the material. Nevertheless, none of these works deals with the oxidation and the influence of the process parameters on the kinetic of the oxidation reaction, as [6] does, or establish previously a set of requirements to fulfill, leading to a design analysis, as this work proposes. In [26], the kinetic of oxidation reaction would not be needed because there is always a constant temperature in the surface during the simulation due to the simulated temperature control loop. Cylindrical parts are treated with overlapped tracks in [27] by means of the so-called apparent spot technique, implying the use of electronic control of the process and high processing speeds only possible with geometries of revolution. Also, references [28,29], offer very specific analyses of the laser surface hardening process, that develop strategies to calculate the final residual stress distribution of the material. The work developed in [30] offers a different approach to the laser reverse annealing on cold deformed structures, considering the changes in the microstructure and the mechanical properties of the studied material. Finally, in [31], a computational study using mass transfer equations under fast heating conditions is carried out, considering consecutively the diffusion of carbon in pearlite and ferrite for a low carbon steel. This work concludes that the overall behavior of the austenization process versus time, follows a sigmoid curve as Avrami law predicts, which is the kinetic law used in the present work, as Section 3.2 and Eq. (7) indicates.

Typical values for the power of the laser and its traversing speed have been adopted as a starting point for the analysis, without a special consideration of its properness to face an overlapping process. This approach emphasizes the capability of the proposed methodology to study the overlapping distance whatever the initial conditions and requirements are, independently of an exclusive study of the spread of

Table 2
Parameters of the process.

Power (W)	Traversing speed (mm/min)	Energy distribution	Beam diameter (mm)	Peak irradiance (W/cm ²)
1800	250	Gaussian	16	2980

Fig. 6. Thermal courses and oxide development corresponding to the proposed process parameters.

the heat affected zone, which normally is tackled in models focused mainly on diffusion and heat transfer.

Table 2 contains the values for the different process parameters.

Thermal cycles of points equal-spaced under the center of the laser beam, as well as the development of the oxide layer in the surface are shown in Fig. 6.

Fig. 7 represents a Continuous Cooling - Time diagram corresponding to the working material, adapted from [32], where the cooling curves of the points undergoing austenization at the center of the track have been displayed.

From Fig. 7 it can be seen that the conditions of the cooling ensures the formation of martensite, taking into account, additionally, that the bainitic transformation for this material takes place at 400 °C in around 7 s cooling which is far from the current cooling rates.

Fig. 8 shows the transformation map and hardness distribution in a transversal section perpendicular to the direction of the laser movement. Martensite fraction has been obtained through the kinetic relations presented in Section 3.2, to obtain firstly the austenite fraction, which, according to Fig. 7, has transformed integrally into martensite. The concentration of martensite and base material have been used,

according to the methodology introduced in [33], to transform metallurgical phases into Vickers hardness, obtaining coherent values with other works dealing with the same material, like [7]. Maximum hardness has been rounded to 800 HV and base material hardness to 320 HV aiming to handle simple data. The contours show small irregularities because of the graphical interpolation made to limit the computational effort.

Fig. 9 shows the heat distribution in the same section as Fig. 8 to highlight the much larger size of the heat affected zone until 500 °C in comparison with the extension of the real hardened region, which highlights the need of taking into account the considerations made in Section 3.3, to prevent the martensite formed in the first track from being destroyed with the consecutive one.

All this information about temperatures, metallurgical phases and hardness, associated to a single run of the laser beam over the material, are the starting point to design the overlapping process.

A typical configuration for any overlapping process could be a minimum hardness requirement, $H_R = 500$ HV at 1 mm depth along the cross section covered by the consecutive tracks. From Fig. 8 the effective width meeting that requirement is, $W_{Ef} = 6$ mm, which, considering

Fig. 7. Continuous Cooling - Time diagram with the cooling curves of the points under the center of the track.

Fig. 8. Metallurgical transformation and hardness map corresponding to the process parameters.

Eq. (12) implies that the overlapping distance has to be strictly shorter than that value, $Ol_D < 6$ mm.

Overlapping distances of 4 mm and 5 mm will be analyzed by obtaining their respective transformation and hardness maps which in the first place will be compared with experimental results. This procedure enables the adjustment analysis to be initiated with a resolution of 1 mm, which could be considered enough for most of the applications. As it will be shown in Section 4.3, the practical application of the criteria adapts to the resolution of the transformation map, and therefore the accuracy that the process needs, has to be established previously to its elaboration.

As a final result from the analysis of the single track process, the oxide thickness in the lateral zones of the track can be obtained, to have such valuable information as the superficial condition where the center of the next track is going to pass. This considers the effect on the absorption enabling advantageously the process parameters to be re-adjusted if necessary. Fig. 10 represents temperature and oxide thickness in the surface at 4 mm from the center of the first track in the direction of the overlapping.

From Fig. 10 it can be seen that, despite reaching a considerable temperature, the amount of oxide where the center of the next track is going to pass, in the worst case, 4 mm, is around $1.3 \mu\text{m}$, which is a negligible value. The analysis of a single track allows therefore the initial absorption circumstances of the following track to be considered as corresponding to the base material, clarifying that it is not essential to modify the process conditions.

The following section presents the transformation maps associated with the overlapping distances of 4 mm and 5 mm along with their corresponding experimental validation.

4.2. Overlapping transformation maps

Kinetic equations introduced in Section 3.2 have been used to obtain the transformation map when two parallel tracks are applied sequentially with overlapping distances of 4 mm and 5 mm with the process parameters introduced in Section 4.1. The calculations consider the martensite obtained by the first track. Then, its partial dissolution by the diffusion mechanisms activated by the heat affected zone of the second track, and, at the same time the martensite obtained by itself.

Fig. 11 represents the predicted transformation and hardness map associated with 4 mm of overlapping distance and the real hardened zone under two consecutive tracks obtained in an experimental test reproducing the process conditions.

From the comparison between predicted and real transformation profile in Fig. 11, some data can be extracted. The width of the real tracks at the surface lies around 8.1 mm while the predicted width results in a value of 9.2 mm. It implies a 13.6% relative error. In the same way the experimental depth varies between 1.4 mm and 1.5 mm showing a maximum relative error of 8%. A qualitative analysis of both images indicates a slight growth of the hardened region of the second track in the experimental test, that have not been completely reflected by the theoretical one. It can be related with a superior influence of the residuary heating between the first and the second track, whose accuracy has to be improved in the thermal model, probably adjusting the barrier conditions of the problem. Nevertheless, values or relative error under 20% in all the measurements endorse the prediction as a valid tool to perform the overlapping study.

Fig. 9. Heat affected zone until 500 °C under the path of the laser.

Fig. 10. Temperature in the surface at 4 mm of the center of the track and oxide thickness.

Analyzing the hardness map of Fig. 11, for an overlapping distance of 4 mm an important part of the hardened region of the first track is covered by the hardened region of the second one, causing a re-hardening of it and keeping the hardness value. The region that is not covered by the hardened region and covered by the heat affected zone, experiences a notable reduction of hardness.

Fig. 12 shows the transformation and hardness map for the case of 5 mm overlapping distance and the real hardened zone under two consecutive tracks.

Carrying out another comparison between the predicted and real profiles, in Fig. 12, the width of the real test is 8.2 mm offering an 11% relative error in comparison with the predicted one, that is 9.2 mm, and the experimental test offers a depth between 1.5 mm and 1.6 mm resulting in 7% of maximum relative error. In this case the effect of the residuary heat between tracks has not been as significant as in the case of a 4 mm overlapping distance, probably because of the larger distance between parallel tracks. The relatively low error figures enable again the theoretical transformation maps, to be used as a predictive tool to tackle the overlapping analysis.

Focusing on the transformation map, in contrast with the case of 4 mm overlapping distance, Fig. 12 shows that the hardened region of the second track does not cover most of the hardened region of the first one. At the same time the larger separation between tracks has allowed the hardened region of the first track not to be as exposed to the most aggressive part of the heat affected zone of the second one as in the case of Fig. 11, keeping at some positions hardness values close to the original ones.

In addition to the comparison between real and experimental cross sections, the Vickers test with a 1 kg load has been used to validate the hardness predictions made by the model.

Fig. 13 represents the comparison between the expected and real hardness for the case of 4 mm overlapping distance at different depths, 0.2 mm, 0.4 mm, 0.8 mm, and 1 mm, the error bars have been calculated through the propagation of uncertainty method, from the Vickers formula.

Fig. 14 represents the comparison between the expected and real hardness for the case of 5 mm overlapping distance at different depths, 0.2 mm, 0.4 mm, 0.8 mm, and 1 mm.

Fig. 11. Predicted transformation and hardness map for two consecutive tracks separated 4 mm (up) and real ones (down).

Fig. 12. Predicted transformation and hardness map for two consecutive tracks separated 5 mm (up) and real one (down).

Both comparisons displayed in Figs. 13 and 14, with 4 mm and 5 mm of overlapping distances respectively, show a good agreement of the predictions with the experimental hardness, not only in the absolute values, but also, and more important, in the evolution of the hardness along longitudinal and depth directions.

The capability of the diffusion calculations, based on the kinetic equations introduced in Section 3.2, to predict the hardness distribution under two consecutive parallel tracks carried out with realistic thermal cycles, validates transformation maps as an interesting tool to tackle the overlapping process. The next section uses it to decide whether of the

Fig. 13. Theoretical vs. real hardness at 0.2 mm, 0.4 mm, 0.8 mm and 1.0 mm for 4 mm overlapping distance.

two possibilities considered, 4 mm or 5 mm, best fits the requirements proposed in Section 4.1.

4.3. Design of the overlapping distance

Once the condition given by Eq. (12) has been considered and the length that the overlapping distance must not, has been established, the question that arises is how much the overlapping distance has to be reduced to fulfill the hardness requirement without prejudicing the productivity of the process. There are different approaches based on whether considering exclusively the hardness at the objective of depth or considering additionally the reduction in hardness in positions above the objective of depth, which are opposite and depends on the post-processing of the treated surface, implying machining and major exposition of the regions close to the objective of depth or not, implying a major exposition of the surface of the part.

a) Criterion focused mainly on maintaining the hardness at the objective of depth

The criterion for the adjusting the overlapping distance focused on the success of the process at the objective of depth is simple and easy to program, given its quantitative nature:

The second track must go back from the effective width until its first tempering cycle beside the first track at the objective of depth meets the first position in the hardened region of the first track whose martensite concentration is capable of resisting that tempering, keeping therefore a fraction of martensite leading to a hardness superior or equal to the minimum hardness requirement.

Attending to this criterion, for a resolution of 1 mm in the example introduced in Section 4.2, the optimum overlapping distance would be

the case of 4 mm as the plots in Figs. 12 and 13 (down and right in them) show. In the case of 5 mm overlapping distance, the most aggressive cycles of the second track meet regions with low martensite content, at that depth, leading to a value close but under the requirement, around 450 HV. Nevertheless, the overlapping of 4 mm, matches the most aggressive tempering cycles of the second track with the first position capable of resisting them, being the maximum distance that it is productive to go back to, according to this criterion and the resolution of the calculations.

However, this criterion does not consider the effects happening in positions above the objective of depth. In this way, avoiding values of hardness inferior to the minimum requirement in a deeper position, has led not only to making upper positions descend to a lower value but, also, has caused a larger descent of the hardness since the beginning of hardened region of the first track, along the longitudinal profile, as Figs. 10 and 11 clarify, because of an over-exposition of the superior parts of the hardened region of the first track, to the most aggressive tempering thermal cycles of the second one.

Therefore, the criterion which optimizes the overlapping distance for the objective of depth, is prejudicial for the hardness profile at upper positions, and must only be used when a machining of the treated surface is prescribed. For other cases, a criterion considering more generally the hardened region is proposed.

b) Criterion focused on all the hardened region

It follows the a) criterion adding that, the reduction in the overlapping distance must stop when the beginning of the hardened region of the second track, surpasses the center of the hardened region of the first one, although leaving some values under minimum requirement at the objective of depth.

Fig. 14. Theoretical vs. real hardness at 0.2 mm, 0.4 mm, 0.8 mm and 1.0 mm for 5 mm overlapping distance.

Fig. 15. Computational scheme of the criteria to adjust the overlapping distance.

This criterion assumes that it might be impossible to keep the hardness requirement along all the profile. It is based on the idea that the most aggressive tempering cycles of the second track, could make the hardness value descend under requirement, even starting with a 100% concentration of martensite, and, for fixed process conditions, nothing can avoid that completely concerning the overlapping distance, and making the hardened region of the second track surpass the center of the first one, overexposes regions with a decreasing amount of martensite to the most aggressive tempering cycles of the second track. Taking that physical limitation into account, the strategy of the criteria is based on distributing homogeneously the regions with hardness under requirement, not prejudicing excessively positions close to the surface, when it is not going to be machined.

Under the last criterion the case of 5 mm overlapping distance has led to a much more beneficial distribution of hardness in the hardened region of the first track, at different depths, without causing a very large length under requirement the objective of depth.

It is important to note that in both cases, at the upper part of the hardened region of the first track, just beside the hardened region of the second one, there is always a certain reduction of the hardness under requirement that cannot be avoided. As it was proposed previously, an initial concentration of 100% of martensite, has not been capable of resisting the most aggressive tempering cycles of the second track (the closest cycles to the surface and the hottest ones), constituting a physical limitation of the process. It can only be avoided by reducing the objective of hardness of the process to a value more proximal to the base material, or, when it is possible, by following a) criterion, and machining the surface, removing the upper positions, that have been more affected by the tempering cycles.

To clarify the procedure, Fig. 15 offers a computational scheme of both criteria.

According to Fig. 14 the hardened region of the first track and the tempering region of the second one have to be discretized into small rectangles. The length of these rectangles determines the longitudinal accuracy while the height determines the accuracy in depth. Following the a) criterion the martensite concentration of every element at the objective of depth (line of elements shaded), $M_1, M_2, M_3, M_4, \dots$, is the starting point to calculate the diffusion problem with the corresponding tempering cycle, $T_1, T_2, T_3, \dots$, as a function of the relative position of the first and the second track. For instance, after satisfying Eq. (12), an initial position could match M_3 with T_1 and therefore M_2 with T_2 and M_1 with T_3 . In these circumstances the most unfavorable position is M_1-T_3 where the most aggressive tempering cycles is affecting a position relatively close to the barrier of the first hardened region. If this combination leads to an insufficient concentration of martensite at M_1 , the criterion indicates that the second track must move the length of a rectangle back to the left (leading to the analysis M_2-T_3), repeating the process again and again, until matching T_3 with such a M_i that allows the

maximum possible concentration of martensite to be achieved. Nevertheless it might happen that to fulfill it, the second track needs to go back so much that the first point of the hardened region in the second track surpasses the center of the first one. When this happens, criterion b) which is focused on all the hardened area rather than only on the objective depth, establishes that the moving back of the second track must stop, to balance the spread of tempered zones between the objective depth and the positions close to the surface.

5. Conclusions

Then main contribution and analysis developed by the present work is synthesized in the following:

- A laser surface hardening model, which considers fast austenization and the increment of absorption associated to the surface oxidation, has been extended, with additional kinetic background, to predict the phase change due to the tempering, and applied successfully to the overlapping process.
- A rigorous characterization of the regions caused in the material as consequence of two consecutive tracks, has been shown up, demonstrating that a typical intuitive approach to design the process does not lead to a successful result.
- A design procedure has been proposed through a practical exercise. It starts from a set of process specifications and requirements, emphasizing a realistic approach to pursuit a particular objective, instead of limiting to an abstract analysis of the effects of different sets of process parameters, without an application. The data provided by the model, mainly transformation maps which have been tested experimentally showing a good agreement, have constituted the tools to carry out the design of the process.
- Different adjusting criteria have been introduced to optimize the result of the design, according to the finishing conditions of the part.
- Independently of the criterion, it has been highlighted the enormous complexity of achieving a compromise result which meets requirements in both, the upper and lower part of the hardened region, because of some physical limitations of the process, which may force to accept values under requirement in some times.

Acknowledgements

The research and development work that is the basis of the present study has been developed under the LEIA project funded by CDTI (Spain Project IDI-111198).

References

- [1] J.C. Ion, Surface hardening, in: J.C. Ion (Ed.), *Laser processing of engineering materials. Principles, procedure and industrial application*, first ed. Elsevier Butterworth-Heinemann, Oxford 2005, pp. 221–249.
- [2] E. Kennedy, G. Byrne, D.N. Collins, A review of the use of high power diode lasers in surface hardening, *J. Mater. Process. Technol.* 155–156 (2004) 1855–1860, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2004.04.276>.
- [3] R.S. Lakhar, Y.C. Shin, M.J.M. Krane, Predictive modeling of multi-track laser hardening of AISI 4140 steel, *Mater. Sci. Eng. A* 480 (2008) 209–217, <http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2007.07.054>.
- [4] G. Tani, L. Orazi, A. Fortunato, Prediction of hypo eutectoid steel due to tempering phenomena in laser surface hardening, *CIRP Ann. Manuf. Technol.* 57 (2008) 209–212, <http://dx.doi.org/10.1016/j.cirp.2008.03.057>.
- [5] A. García-Beltrán, L.F. Marín, J.L. Ocaña, Análisis de la influencia del factor de solapamiento en el tratamiento térmico de superficies extensas de aceros por láser, *Rev. Metal.* 43 (2007) 284–293, <http://dx.doi.org/10.3989/revmetal.2007.v43.i4.74>.
- [6] F. Cordovilla, A. García-Beltrán, J. Domínguez, et al., Numerical-experimental analysis of the effect of surface oxidation on the laser transformation hardening of Cr–Mo steels, *Appl. Surf. Sci.* 357 (2015) 1236–1243, <http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.09.143>.
- [7] T. Miokovic, J. Schwarzer, V. Schulze, et al., Description of short time phase transformations during the heating of steels based on high-rate experimental data, *J. Phys. IV France* 120 (2004) 591–598, <http://dx.doi.org/10.1051/jp4:2004120068>.
- [8] F. Cordovilla, A. García-Beltrán, J.L. Ocaña, Aplicación de modelos simplificados para la determinación de ventanas de trabajo para el temple de aceros por láser, *Dyna Ingeniería e Industria* 89 (2014) 533–541, <http://dx.doi.org/10.6036/7079>.
- [9] A. García-Beltrán, J.L. Ocaña, C.L. Molpeceres, TEMPLUM: a process adapted numerical simulation code for 3D predictive assessment of laser surface heat treatments in planar geometry, *WSEAS Trans. Comput.* 1 (2008) 65–74.
- [10] A. Yanez, J.C. Álvarez, A.J. López, et al., Modelling of temperature evolution on metals during laser hardening process, *Appl. Surf. Sci.* 186 (2002) 611–616, [http://dx.doi.org/10.1016/S0169-4332\(01\)00696-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0169-4332(01)00696-1).
- [11] S. Skvarenina, Y.C. Shin, Predictive modeling and experimental results for laser hardening of AISI 1536 steel with complex geometric features by a high power diode laser, *Surf. Coat. Technol.* 201 (2006) 2256–2269, <http://dx.doi.org/10.1016/j.surfcoat.2006.03.039>.
- [12] H. Pantisar, V. Kujanpää, Effect of oxide layer growth on diode laser beam transformation hardening of steels, *Surf. Coat. Technol.* 200 (2006) 2627–2633, <http://dx.doi.org/10.1016/j.surfcoat.2004.09.001>.
- [13] V. Antonov, I. Iordanova, S. Gurkovsky, Investigation of surface oxidation of low carbon sheet steel during its treatment with Nd:Glass pulsed laser, *Surf. Coat. Technol.* 160 (2002) 44–53, [http://dx.doi.org/10.1016/S0257-8972\(02\)00344-4](http://dx.doi.org/10.1016/S0257-8972(02)00344-4).
- [14] A. Iordanova, V. Antonov, Surface oxidation of low carbon steel during laser treatment, its dependence on the initial microstructure and influence on the laser energy absorption, *Thin Solid Films* 516 (2008) 7475–7481, <http://dx.doi.org/10.1016/j.tsf.2008.03.031>.
- [15] L. Nánai, R. Vajtai, T.F. George, Laser-induced oxidation of metals: state of the art, *Thin Solid Films* 298 (1997) 160–164, [http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090\(96\)09390-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090(96)09390-X).
- [16] G.E. Totten, *Steel Heat Treatment Handbook*, CRC Press, Florida, 2006.
- [17] J. Miettinen, Calculation of solidification-related thermophysical properties for steels, *Metall. Mater. Trans. B* 28 (1997) 281–297, <http://dx.doi.org/10.1007/s11663-997-0095-2>.
- [18] J. Jacquez, H. Kuppenheim, Theory of the integrating sphere, *J. Opt. Soc. Am.* 45 (1955) 460–470.
- [19] E. Otero-Huerta, *Cinética de corrosión a alta temperatura*, in: E. Otero-Huerta, *Corrosión y degradación de materiales*, second ed. Editorial Síntesis, 2012 256–261.
- [20] H.E. Avery, *Cinética química básica Y Mecanismos de reacción*, first ed. Editorial Reverté S.A, Spain, 1982.
- [21] P. Alvin, A.P. Penner, C.B. Rakhal, et al., Activation energy and non-equilibrium effects in thermal reactions, *Int. J. Chem. Kinet.* 9 (2014) 371–377.
- [22] J.R. Reiz, F.J. Milford, R.W. Fundamentos de la teoría electromagnética, fourth ed. Addison Wesley Iberoamericana, Mexico, 1996.
- [23] M.F. Ashby, K.E. Easterling, The transformation hardening of steel surface by laser beam – I: hypo-eutectoid steels, *Acta Metall.* 32 (1984) 1935–1948, [http://dx.doi.org/10.1016/0001-6160\(84\)90175-5](http://dx.doi.org/10.1016/0001-6160(84)90175-5).
- [24] T. Slatter, H. Taylor, R. Lewis, et al., The influence of laser hardening on wear in the valve and valve seat contact, *Wear* 267 (2009) 797–806, <http://dx.doi.org/10.1016/j.wear.2009.01.040>.
- [25] A. Fortunato, A. Ascari, E. Liverani, et al., A Comprehensive Model for Laser Hardening of Carbon Steels, *J. Manuf. Sci. E-T Asme* 135 (2013), <http://dx.doi.org/10.1115/1.4025563>.
- [26] A. Martínez, E. Lamikiz, Ukar, et al., Control loop tuning by thermal simulation applied to the laser transformation hardening with scanning optics process, *Appl. Therm. Eng.* 98 (2016) 49–60, <http://dx.doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2015.12.037>.
- [27] L. Giorleo, E. Ceretti, C. Giardini, Fe modeling of the apparent spot technique in circular laser hardening, *Int. J. Adv. Manuf. Technol.* 69 (2013) 1961–1969, <http://dx.doi.org/10.1007/s00170-013-5162-z>.
- [28] I. Cerny, I. Fürbacher, D. Mikulova, et al., An effect of laser hardening on contact and bending fatigue of a 42CrMo4 steel, *Key Eng. Mater.* (2015) 221–224, <http://dx.doi.org/10.4028/www.scientific.net/KEM.665.221>.
- [29] H. Ki, S. So, S. Kim, Laser transformation hardening of carbon steel sheets using a heat sink, *J. Mater. Process. Technol.* 214 (2014) 2693–2705, <http://dx.doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2014.06.013>.
- [30] A.S. Hamda, A. Järvenpää, E. Ahmed, et al., Enhancement in grain-structure and mechanical properties of laser reversion treated metastable austenitic stainless steel, *Mater. Des.* 94 (2016) 345–352, <http://dx.doi.org/10.1016/j.matdes.2016.01.049>.
- [31] A.I. Katsamas, A computational study of austenite formation kinetics in rapidly heated steels, *Surf. Coat. Technol.* 201 (2007) 6414–6422, <http://dx.doi.org/10.1016/j.surfcoat.2006.12.014>.
- [32] F.C. Campbell, *Elements of Metallurgy and Engineering Alloys*, first ed. ASM international, Ohio, 2008 655.
- [33] R. Yanzon, V. Aranda, A. Sánchez, et al., Predicción de la dureza de un acero revenido en función de la dureza y de la composición química, *Revista Iberoamericana de Ingeniería Mecánica* 19 (2015) 29–39.