

Simulation thermomécanique d'un dépôt de projection avec prise en compte de l'histoire thermique et dynamique du matériau d'apport

Kh. FATAOUI^{1*}, B. PATEYRON¹, M. EL GANAOUÏ¹, N. CALVE¹, H. RHANIM², A. BELAFHAL².

¹SPCTS UMR6638 Université de Limoges, CNRS 123, avenue Albert Thomas 87060 Limoges Cedex

²Université Chouaib Doukkali, Faculté des Sciences, 24000 El Jadida, Maroc.

*(auteur correspondant : khalid.fataoui@etu.unilim.fr)

Résumé - L'étude porte sur la modélisation thermomécanique de dépôts d'alumine obtenus par projection plasma sur substrat en acier inoxydable. Un modèle 2D axisymétrique est développé pour décrire et prévoir l'histoire thermique de ce dépôt. Dans ce dernier, la solidification des gouttelettes écrasées (ou splats) par trempe et le refroidissement en fin du processus génèrent des contraintes mécaniques importantes. Ces contraintes sont à l'origine soit de fissuration dans le dépôt soit de décollement entre dépôt et substrat. C'est ce que le modèle essaie de prédire afin de les expliquer et de les maîtriser.

Nomenclature

C_p	chaleur spécifique ($J.K^{-1}.kg^{-1}$)	ν	coefficient de Poisson (-)
E	module d'Young (GPa)	ρ	masse volumique ($kg.m^{-3}$)
H	enthalpie spécifique ($J.kg^{-1}$)	σ	Contraintes (MPa)
R_{th}	résistance thermique de contact ($m^2.K.s.J^{-1}$)		<i>Indices et exposants</i>
T	température (K)	f	fusion
	<i>Symboles grecs</i>	q	trempe
α	coefficient de dilatation (K^{-1})	p	particule
β	sévérité thermique $0 < \beta < 1$	s	substrat
k	Conductivité thermique ($J.s^{-1}.K^{-1}.m^{-1}$)	th	thermique

1. Introduction

Les industries mécaniques en général créent des structures pour lesquelles les charges de service sont de plus en plus importantes. Cette évolution conduit les concepteurs à employer des matériaux les plus résistants, les plus légers possibles et à plus faible coût. Les matériaux multicouches et matériaux revêtus sont de ceux là. Pour protéger les surfaces en contact mécanique ou thermique, les dépôts céramiques sur substrat métallique sont donc couramment utilisés. Cependant, lors du processus d'élaboration de ces dépôts, un grand nombre de phénomènes parasites est induit. Ainsi, les dépôts par projection thermique sont le siège d'importantes contraintes résiduelles qu'il convient d'évaluer de manière qualitative et quantitative.

Les contraintes qui apparaissent ont un rôle déterminant sur les propriétés finales des pièces. Elles peuvent être à l'origine de réseaux de micro ou macro fissures, qui altèrent les caractéristiques mécaniques du dépôt. L'objectif de ce travail est de construire un modèle capable de prédire le comportement thermomécanique des matériaux pendant le cycle de projection correspondant à une phase de tir et un cycle de refroidissement.

2. Formation des contraintes résiduelles dans les dépôts

La contrainte résiduelle σ_0 est la somme de deux composantes, une contrainte de trempe et une contrainte thermique. La contrainte de trempe apparaît lors de l'écrasement des particules et la

contrainte thermique lors du refroidissement. Ces contraintes sont toutes deux des contraintes en tension. Les méthodes classiques de mesure ne permettent pas de les différencier.

$$\sigma_0 = \sigma_q + \sigma_{th} \quad (1)$$

avec :

$$\sigma_q = E \cdot \alpha \cdot (T_f - T_p) \quad \text{contrainte de trempe}$$

$$\sigma_{th} = 3 \cdot \beta \cdot E \cdot \alpha \cdot \Delta T \cdot (1 - \nu)^{-1} \quad \text{contrainte thermique}$$

E et α sont respectivement le module d'Young et le coefficient de dilatation de la particule. T_f est la température de fusion de la particule ($T_f = 2327\text{K}$ pour l'alumine de type corindon). T_p est la température du substrat pendant la projection. β représente la sévérité du refroidissement. Cette sévérité est souvent représentée par le nombre de Biot ou le coefficient h du transfert thermique convectif [1].

La liaison à l'interface impose la continuité des déformations et un gradient de contraintes est généré dans le composite. La différence de coefficient de dilatation entre les deux matériaux est à l'origine d'un retrait général du dépôt. En effet le coefficient de dilatation du substrat est plus grand que celui du dépôt. Une contrainte de compression se crée dans le revêtement et le substrat devient le siège d'une contrainte de traction. Le refroidissement se traduit donc par une flexion de l'ensemble. Ce qui suggère une métrologie fondée sur la méthode de la flèche (figure 1) particulièrement la méthode de la flèche in situ qui permet de distinguer entre les deux types de contraintes thermiques et de trempe selon la technique élaborée par Kuroda et al. [2].

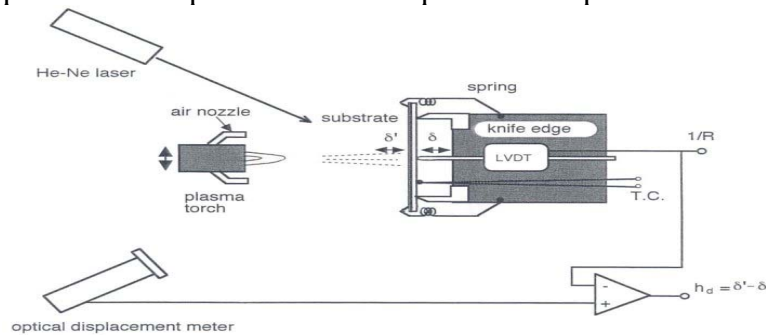


Figure 1 : Schémas du dispositif de mesure des contraintes résiduelles in situ : KURODA, 1988.

3. Modèle thermomécanique d'une goutte sur un substrat

Dans ce travail est étudiée l'évolution des contraintes et de la température dans l'ensemble composé d'un substrat d'acier et d'une goutte d'alumine. Cette dernière s'écrase et s'étale sur la surface du substrat à une température de 3000 K. L'énergie thermique est perdue essentiellement par conduction à travers l'interface avec le substrat. Ce dernier est préchauffé à 700 K, dans cet état les contraintes de trempe sont nulles. La goutte d'alumine se met en équilibre thermique avec le substrat et se refroidit, ce qui génère des contraintes thermiques. Puis l'ensemble est ramené à la température ambiante à 300 K, ce qui induit des contraintes de trempe. Ce système est étudié en modèles mono et bidimensionnel.

Les contraintes qui interviennent au cours du procédé de projection plasma, sont modélisées et intégrées à un code de calcul par éléments finis en deux étapes : une de calcul thermique qui permet d'obtenir la répartition des températures au cours du refroidissement, puis une de calcul mécanique qui évalue les contraintes en tenant compte de l'évolution des températures précédemment calculées. Les modèles sont construits en géométrie axisymétrique. Les matériaux sont supposés homogènes, isotropes et leurs propriétés varient avec la température comme le montre la figure 2.

La figure 3 représente le schéma du modèle. A l'instant $t=0$, une lamelle d'alumine à température T_p est en contact avec un substrat d'acier à température T_s à travers une résistance thermique de contact R_{th} . Le modèle ne prend pas en compte l'écoulement d'alumine liquide

correspondant à l'étalement de la goutte. En conséquence l'apport de l'énergie cinétique de la goutte n'est pas pris en compte, de même que l'évolution des conditions des conditions aux limites du transfert thermique. Les gouttelettes arrivent avec des vitesses de l'ordre de 100 m/s, l'écrasement d'une goutte de 30 μm de diamètre s'effectue donc en un temps $\Delta t = 30 \cdot 10^{-8}$ s, ce qui est du même ordre de grandeur mais supérieur au temps caractéristique de solidification qui est de l'ordre de $20 \cdot 10^{-8}$ s.

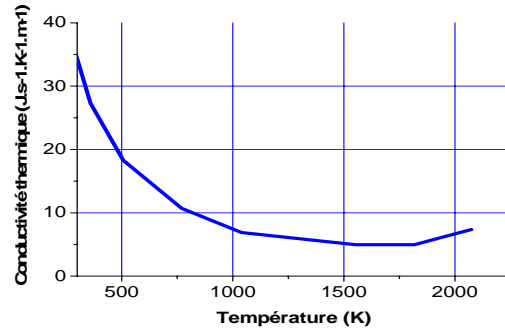
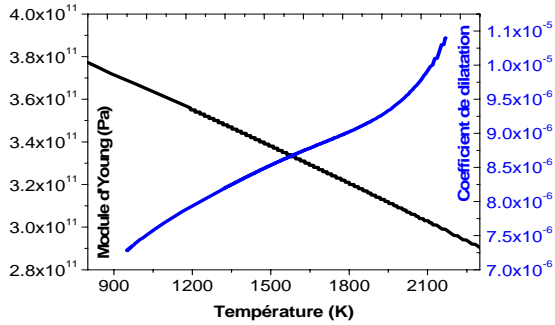


Figure 2-a: Variation du coefficient de dilatation α et le module d'Young E de l'alumine solide en fonction de la température.

Figure 2-b: Variation de la conductivité thermique k de l'alumine solide en fonction de la température.

Il y a donc lieu de prendre en compte ultérieurement ces interactions thermiques au cours de l'écrasement de la goutte.

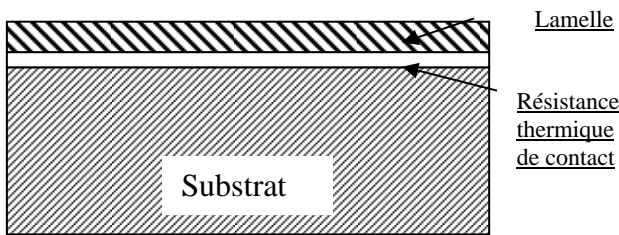


Figure 3: Domaine physique représenté lamelle/substrat avec résistance thermique de contact.

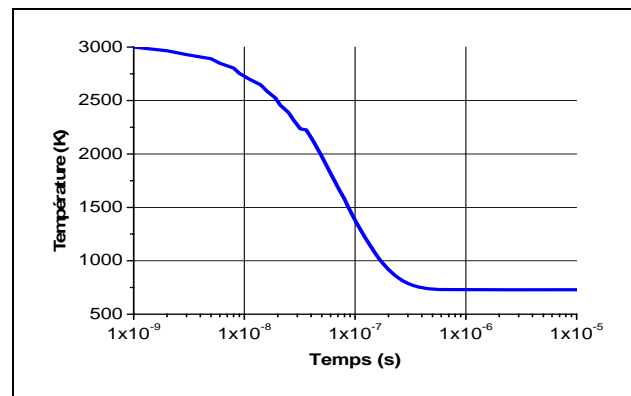


Figure 4: Refroidissement de la première lamelle (goutte étalée) d'alumine fondue sur un substrat d'acier.

3.1 Hypothèses et modèles

3.1.1 Calcul thermique

Ces calculs thermiques transitoires sont effectués en prenant en compte les propriétés des matériaux non linéaires avec la température. Le temps est une variable explicite et tous les paramètres sont fonction de la température. La résolution de l'équation de la chaleur (équation 2) permet d'obtenir les températures sur l'ensemble des nœuds du maillage.

$$\text{div} (k \overrightarrow{\text{grad}} T) + \dot{q} = \frac{\partial \rho C_p T}{\partial t} \quad (2)$$

k représente la conductivité thermique (figure 2-b), C_p est la chaleur spécifique, et \dot{q} ($W.m^{-3}$) correspond à la puissance thermique générée dans l'ensemble. Cependant, pour expliquer la chaleur latente liée au changement de phase, on remplace C_p par $(C_p + D.H)$, avec H la chaleur latente, et D est une impulsion Gaussienne normale (d'intégrale unité), selon l'équation :

$$D = \exp\left(\frac{(T - T_m)^2}{dT^2}\right) / (dT\sqrt{\pi})$$

Avec T_m et dT représentent la température de fusion et la moitié de la largeur du pic (dans ce cas 6 K). Le modèle est basé sur la variation de C_p pendant le changement de phase.

L'ensemble évacue l'énergie thermique reçue par des échanges convectifs. Le flux thermique échangé entre l'ensemble et l'environnement s'exprime de la façon suivante :

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_y = h (T - T_a) \quad (3)$$

Le coefficient d'échange thermique, h est un paramètre essentiel du modèle (ici $h = 8 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$), avec la résistance thermique de contact R_{th} (ici $R_{th} = 10^{-6} \text{ m}^2.\text{K}.\text{J}^{-1}.\text{s}^{-1}$):

$$\left[k \frac{\partial T}{\partial x} \right] = \frac{[\Delta T]}{R_{th}} \quad (4)$$

3.1.2 Calcul mécanique

Le modèle mécanique est construit selon l'hypothèse des déformations planes. La composante de la déformation due à l'expansion thermique s'exprime de la façon suivante :

$$\varepsilon'_{ij} = \alpha T \delta_{ij} \quad (5)$$

Avec α le coefficient de dilatation du matériau, T la température et δ_{ij} élément de la matrice unité d'ordre 3.

3.2 « Layers » modèle thermomécanique 1D

Ce code mis à disposition des utilisateurs (<http://layers.free.fr>) [4-6] est un logiciel de génie thermique adapté aux milieux multi couches [7]. Il permet d'estimer l'évolution thermique d'une déposition sur un substrat chauffé par apport de couches successives de matériaux liquides qui se figent en cours de refroidissement. Une évaluation des contraintes thermiques selon la théorie de Clyne [8-9] a été ajoutée. Une résistance thermique contact R_{th} , représentée par une lame de conductivité thermique équivalente à celle de l'air et de chaleur spécifique nulle, peut être introduite pour représenter l'imperfection de l'accrochage de la lamelle sur le substrat, (ici elle est prise égale à $10^{-6} \text{ m}^2.\text{K}.\text{s}.\text{J}^{-1}$).

Ce modèle 1D permet une étude assez fine de la thermique de la déposition d'une goutte d'alumine liquide sur un substrat à température T_s . La température initiale de la goutte d'alumine liquide est supposée de 3000 K. La chaleur latente de fusion H_f ($H_f = 1.046 \cdot 10^{+6} \text{ J.kg}^{-1}$ pour l'alumine) est prise en compte en la répartissant sur la chaleur spécifique ($C_p = 900 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$ pour l'alumine) dans le créneau de température d'une centaine de Kelvins de part et d'autre de la température de fusion ($T_f = 2327 \text{ K}$). A l'instant initial du contact la température de l'interface lamelle et substrat sur la couche simulant la résistance thermique de contact s'établit en raison des effusivités.

La figure 4 montre que la lamelle (particule), supposée d'épaisseur $1 \mu\text{m}$, se solidifie par échange thermique avec le substrat en moins de 10^{-7} s et qu'en 10^{-6} s sa température de surface atteint quasiment la température du substrat. Sur la figure 5 le schéma des contraintes montre que le substrat est légèrement dilaté à -2 MPa (contraintes négatives) alors que la lamelle (dépôt) est fortement comprimée à près de 200 MPa. L'analyse 1D est réductrice puisque c'est une goutte de matière limitée radialement qui est déposée et non pas une couche continue.

Un modèle 2D axisymétrique est utilisé pour simuler l'évolution des contraintes dans l'ensemble du substrat et de la goutte (figure 6). Fondé sur la méthode des éléments finis [3], le modèle est intégré au logiciel de simulation Comsol© [10]. La température à l'instant de l'impact est calculée par le logiciel *Jets&Poudres* [11].

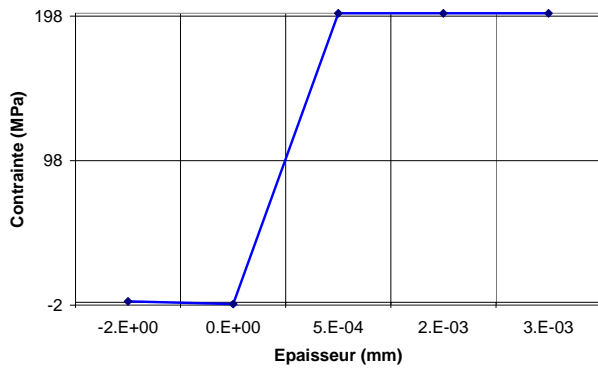


Figure 5 : Contrainte après refroidissement de la première lamelle (goutte étalée) d'alumine fondue sur un substrat d'acier.

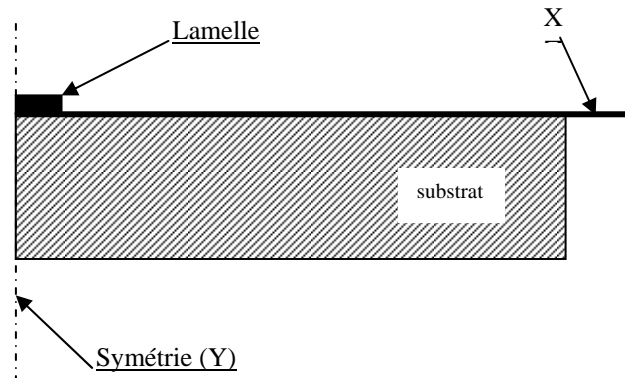


Figure 6 : Schéma du modèle 2D axisymétrique de la lamelle et du substrat.

3.3 Modèle thermomécanique 2D axisymétrique

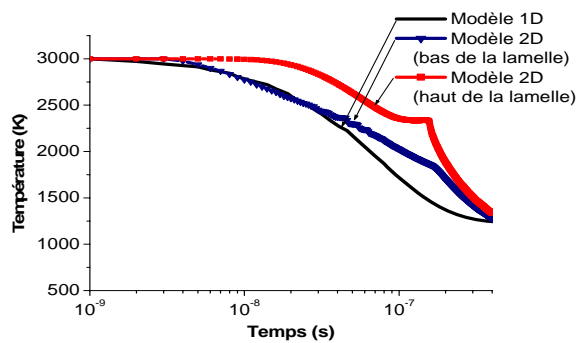


Figure 7 : Evolution de la température de la goutte d'alumine en fonction du temps, pour les deux modèles.

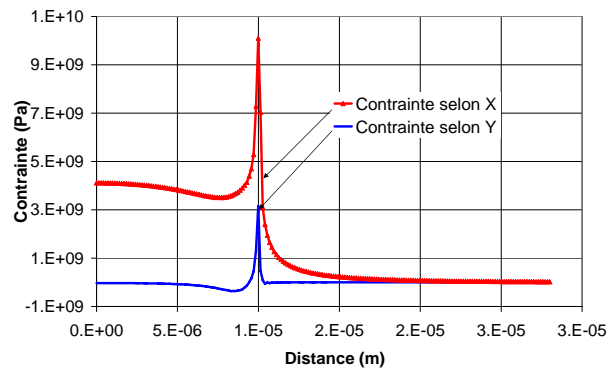


Figure 8 : après refroidissement, contraintes selon X (dimension radiale de la lamelle) et Y (épaisseur de la lamelle) en fonction de la distance à l'axe de symétrie dans le plan de contact de la lamelle et du substrat.

Dans le plan de contact de la lamelle et du substrat, la température chute en quelques micro secondes ainsi que le montrent la figure 7 et le temps de solidification est presque de $0.2 \mu\text{s}$ pour le modèle 2D axisymétrique, qui estime que le temps pour atteindre la température de fusion 2327 K est 8.10^{-8} s pour le haut de la lamelle, le bas de la lamelle l'atteindre à 4.10^{-8} s , par contre le modèle 1D l'estime à 3.10^{-8} s .

Les contraintes décroissent légèrement de 4 GPa au centre jusqu'à un minimum relatif puis croissent pour atteindre un pic de 10 GPa au bord de la lamelle. La contrainte maximum admissible de l'alumine qui est estimée voisine de 0.08 GPa est très largement dépassée et les ruptures par fissuration observées expérimentalement sont bien expliquées. Les contraintes décroissent ensuite asymptotiquement vers zéro avec l'éloignement de ce bord. Ainsi la lamelle (splat) est soumise à des efforts plus importants en périphérie ce qui justifie a posteriori les décollements observés expérimentalement dans cette zone (figure 8).

La figure 9 représente l'évolution des contraintes de tremp, thermique et résiduelle dans la goutte d'alumine en fin de solidification et avant refroidissement jusqu'à la température ambiante 300 K .

La figure 10 représente les déplacements dans l'ensemble, après refroidissement, en fonction de la distance à l'axe de symétrie. Celles-ci croissent du centre jusqu'au bord de lamelle où elles amorcent une décroissance rapide avec l'éloignement et tendent asymptotiquement vers zéro.

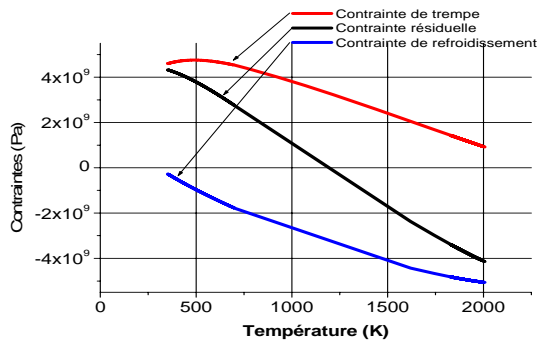


Figure 9: Evolution des contraintes de trempage, thermique et résiduelle dans la goutte d'alumine en fonction de la température après refroidissement.

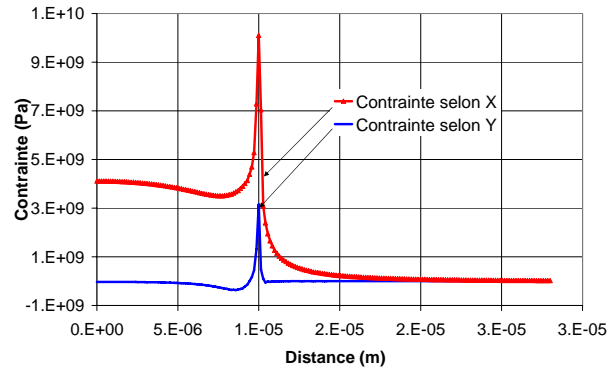


Figure 10: Evolution du déplacement de matière en fonction de la distance à l'axe de symétrie dans le plan de contact de la lamelle et du substrat après refroidissement.

4. Conclusion

Ce travail préliminaire confirme l'importance des contraintes résiduelles dans les lamelles élémentaires d'un dépôt en cours de construction. Le modèle développé permet des analyses performantes. Le développement suivant étudiera le couplage dynamique de la solidification et refroidissement de la lamelle déposée avec la génération des contraintes et déformations.

Il est désormais possible d'envisager non seulement l'impact d'une lamelle isolée sur l'axe du système étudié, mais des impacts successifs de lamelle afin de simuler la construction d'un dépôt par projection plasma en 2D en intégrant le couplage thermomécanique lié à l'écoulement liquide lors de l'écrasement de la goutte.

Remerciements : Ecole doctorale STS, CR Limousin et programme de coopération Franco-Marocain.

Références

- [1] N. Tessier-Doyen, *Etude expérimentale et numérique du comportement thermomécanique de matériaux réfractaires modèles*, Thèse université de Limoges, 27/11/2003.
- [2] S. Kuroda, T. W. Clyne, *Thin Solid Films*, 200, (1991), pp. 49-66.
- [3] Darrel Pepper, (1992); *The finite element method : basic concepts and applications*, Hemisphere Pub. Corp. Library of Congress, Cataloging-in-Publication Data. ISBN: 1-56032-104-0.
- [4] B. Pateyron, G. Delluc, A. Haddadi, P. Fauchais. "Modeling of thermal history of splat layer during coating formation.", *Prog in Plasma Proc of Materials 1999*, P. Fauchais and J. Amouroux Ed, Begell House, NY (USA), 1999, 451-459.
- [5] A.C. Leger, A. Haddadi, B. Pateyron, G. Delluc, A. Grimaud, P. Fauchais, *Residual stresses during coating generation: plasma sprayed alumina coating on XC18 measurements and calculations*, C. Coddet Ed., IPSE, ASM Int., Ohio (USA) 1998, 895-903.
- [6] B. Pateyron, A. Vardelle, M. El Ganaoui, G. Delluc, P. Fauchais, *1D modeling of coating formation under plasma spraying conditions: Splat cooling and laying.*, *Prog in Plasma Proc of Materials 1999*, P. Fauchais and J. Amouroux Ed., Begell House, NY (USA), 2001, 519-526.
- [7] M. F. Elchinger, B. Pateyron, P. Fauchais, *Rev. Gén. Therm. Fr.*, (305), (1987), pp 311-321.
- [8] T. W. Clyne, S. C. Gill, *Journal of Thermal spray Technology*, 5, (4), (1996), pp 401-418.
- [9] Y. C. Tsui and T. w. Clyne, *An analytical model for predicting residual stresses in progressively deposited coatings. Part 1: Planar geometry*, *Thin Solid Films* 306 (1997), pp 23-33.
- [10] Comsol ©<http://www.comsol.com>
- [11] Jets&Poudres <http://jets.poudres.free.fr>