

THESE

présentée

DEVANT L'INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUEES DE LYON

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR

ECOLE DOCTORALE DES SCIENCES POUR L'INGENIEUR DE LYON :
MECANIQUE, ENERGETIQUE, GENIE CIVIL, ACOUSTIQUE (M.E.G.A.)
SPECIALITE : MECANIQUE

par

Benoît WATREMETZ

Ingénieur I.N.S.A. de Lyon

MODELE THERMOMECHANIQUE 3D D'UN MATERIAU A GRADIENT DE PROPRIETES A L'AIDE DE TECHNIQUES MULTIGRILLES. APPLICATION AUX MOULES D'INJECTION DE POLYMERES

Soutenue le 29 septembre 2006 devant la commission d'examen :

Jury :	J. Lamon	Directeur de Recherche CNRS	LCTS-Bordeau I	Président
	C.H. Venner	Assistant Professor	University of Twente	Rapporteur
	C. Fretigny	Directeur de Recherche CNRS	PCSM-ESPCI	Rapporteur
	A.A. Lubrecht	Professeur	LaMCoS- INSA Lyon	
	M.C. Baietto-Dubourg	Directeur de Recherche CNRS	LaMCoS- INSA Lyon	
	Y. Berthier	Directeur de Recherche CNRS	LaMCoS- INSA Lyon	
	F. Hanriot	Ingénieur de Recherche	ESSILOR international	

SIGLE	ECOLE DOCTORALE	NOM ET COORDONNEES DU RESPONSABLE
	<u>CHIMIE DE LYON</u> Responsable : M. Denis SINOU	M. Denis SINOU Université Claude Bernard Lyon 1 Lab Synthèse Asymétrique UMR UCB/CNRS 5622 Bât 308 2 ^{ème} étage 43 bd du 11 novembre 1918 69622 VILLEURBANNE Cedex Tél : 04.72.44.81.83 Fax : 04 78 89 89 14 sinou@univ-lyon1.fr
E2MC	<u>ECONOMIE, ESPACE ET MODELISATION DES COMPORTEMENTS</u> Responsable : M. Alain BONNAFOUS	M. Alain BONNAFOUS Université Lyon 2 14 avenue Berthelot MRASH M. Alain BONNAFOUS Laboratoire d'Economie des Transports 69363 LYON Cedex 07 Tél : 04.78.69.72.76 Alain.bonnafous@ish-lyon.cnrs.fr
E.E.A.	<u>ELECTRONIQUE, ELECTROTECHNIQUE, AUTOMATIQUE</u> M. Daniel BARBIER	M. Daniel BARBIER INSA DE LYON Laboratoire Physique de la Matière Bâtiment Blaise Pascal 69621 VILLEURBANNE Cedex Tél : 04.72.43.64.43 Fax 04 72 43 60 82 Daniel.Barbier@insa-lyon.fr
E2M2	<u>EVOLUTION, ECOSYSTEME, MICROBIOLOGIE, MODELISATION</u> http://biomserv.univ-lyon1.fr/E2M2 M. Jean-Pierre FLANDROIS	M. Jean-Pierre FLANDROIS UMR 5558 Biométrie et Biologie Evolutive Equipe Dynamique des Populations Bactériennes Faculté de Médecine Lyon-Sud Laboratoire de Bactériologie BP 1269600 OULLINS Tél : 04.78.86.31.50 Fax 04 72 43 13 88 E2m2@biomserv.univ-lyon1.fr
EDIIS	<u>INFORMATIQUE ET INFORMATION POUR LA SOCIETE</u> http://www.insa-lyon.fr/ediis M. Lionel BRUNIE	M. Lionel BRUNIE INSA DE LYON EDIIS Bâtiment Blaise Pascal 69621 VILLEURBANNE Cedex Tél : 04.72.43.60.55 Fax 04 72 43 60 71 ediis@insa-lyon.fr
EDISS	<u>INTERDISCIPLINAIRE SCIENCES-SANTE</u> http://www.ibcp.fr/ediss M. Alain Jean COZZONE	M. Alain Jean COZZONE IBCP (UCBL1) 7 passage du Vercors 69367 LYON Cedex 07 Tél : 04.72.72.26.75 Fax : 04 72 72 26 01 cozzone@ibcp.fr
	<u>MATERIAUX DE LYON</u> http://www.ec-lyon.fr/sites/edml M. Jacques JOSEPH	M. Jacques JOSEPH Ecole Centrale de Lyon Bât F7 Lab. Sciences et Techniques des Matériaux et des Surfaces 36 Avenue Guy de Collongue BP 163 69131 ECULLY Cedex Tél : 04.72.18.62.51 Fax 04 72 18 60 90 Jacques.Joseph@ec-lyon.fr
Math IF	<u>MATHEMATIQUES ET INFORMATIQUE FONDAMENTALE</u> http://www.ens-lyon.fr/MathIS M. Franck WAGNER	M. Franck WAGNER Université Claude Bernard Lyon1 Institut Girard Desargues UMR 5028 MATHEMATIQUES Bâtiment Doyen Jean Braconnier Bureau 101 Bis, 1 ^{er} étage 69622 VILLEURBANNE Cedex Tél : 04.72.43.27.86 Fax : 04 72 43 16 87 wagner@desargues.univ-lyon1.fr
MEGA	<u>MECANIQUE, ENERGETIQUE, GENIE CIVIL, ACOUSTIQUE</u> http://www.lmfa.ec-lyon.fr/autres/MEGA/index.html M. François SIDOROFF	M. François SIDOROFF Ecole Centrale de Lyon Lab. Tribologie et Dynamique des Systèmes Bât G8 36 avenue Guy de Collongue BP 163 69131 ECULLY Cedex Tél :04.72.18.62.14 Fax : 04 72 18 65 37 Francois.Sidoroff@ec-lyon.fr

Remerciements

Ce mémoire conclue trois années de travaux réalisés au Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Solides de l'INSA de Lyon, dirigé par le professeur Alain Combescure.

Je remercie C. Frétigny, DR CNRS à l'ESPCI, et Dr. K. Venner de l'université de Twente (Pays-Bas) d'avoir accepté de juger ce travail, de faire parti du jury et pour la qualité des discussions que nous avons eu. Je remercie également J. Lamon, DR CNRS au LCTS de Bordeaux, Dr. F. Hanriot d'Essilor France, le professeur T. Lubrecht, MC. Baietto-Dubourg (Marie), DR CNRS et Y. Berthier, DR CNRS, du LaMCoS, les autres membres du jury.

J'adresse mes plus vifs remerciements à Marie-Christine Baietto qui a encadrée cette thèse, pour sa disponibilité et pour la sincérité de nos rapports. Je tiens également à remercier le professeur T. Lubrecht pour avoir suivi ce travail et pour m'avoir fait découvrir les techniques Multigrilles et P. Sainsot pour son implication et ses conseils.

Je remercie tous les membres du projet MASTHER pour leur implication dans la thèse et pour m'avoir fait découvrir le monde de la plasturgie.

Je remercie Prof. D. Fournier et V. Reita du laboratoire d'optique physique de l'ESPCI de leur accueil et pour le temps qu'elles ont consacré à m'apprendre à utiliser le dispositif expérimental de photoreflectance, ainsi que S. Gomez et L. David du CETHIL pour leur collaboration.

Je tiens également à remercier N. Bouscharain, pour sa participation active à mes travaux et pour avoir toujours entretenu une atmosphère conviviale dans le bureau et ailleurs.

Pour leur aide et leurs conseils techniques dans la réalisation du banc d'essais, je remercie C. Godeau, G. Roches et C. Vayssière. Merci également à C. Jobard et L. Missé pour leur implication dans ce projet.

Je remercie tous mes co-bureaux, Bruno, Nathalie, Fabienne, Annissa, Guillaume, Rachelle, Haytam et Francesco ainsi que tous les doctorants, ex-doctorants et permanents du LaMCoS que je ne peux tous citer ici, pour la bonne ambiance qu'ils continuent à entretenir dans le laboratoire et qui furent des collègues appréciés.

Je souhaite finalement remercier tous ceux qui m'ont apportés leur soutien amical et logistique durant ces trois années, et en particulier mon équipe de relecteurs : Nathalie,

Marie et mes parents pour leur patience et leurs précieux conseils. Que leur nom figure ici ou non, ils ne sont pas oubliés.

Table des matières

Introduction générale	1
1 Etude bibliographique : techniques de dépôts et caractéristiques des revêtements	6
1.1 Introduction	6
1.2 Méthodes de déposition du revêtement	8
1.2.1 Dépôts électrolytiques	8
1.2.2 Projection thermique	9
1.2.3 Procédés de diffusion	10
1.2.4 CVD	11
1.2.5 PVD	12
1.2.6 Synthèse	14
1.3 Etats physiques du matériau	15
1.3.1 Matériaux durs	16
1.3.2 Dépôts ultradurs	18
1.3.3 Contraintes résiduelles	20
1.3.4 Interface revêtement substrat	21
1.3.5 Matériaux à gradient de propriétés	21
1.3.6 Conclusion	22
1.4 Méthodes de caractérisation	23
1.4.1 Caractérisation des propriétés mécaniques	23
1.4.2 Caractérisation des propriétés thermiques	26
1.5 Bilan	28
2 Modèle thermoélastique	30
2.1 Introduction	30
2.2 Modèle thermique	31
2.2.1 Conduction thermique dans un solide à gradient de propriétés	31
2.2.2 Équation de la convection	32
2.3 Mécanique des milieux continus	32
2.3.1 Équations de Lamé dans un solide homogène	33
2.3.2 Équations de Lamé généralisées	34
2.4 Thermoélasticité	34
2.4.1 Dilatation thermique	34
2.4.2 Équations de Lamé généralisées en thermoélasticité	35

2.5	Conditions aux limites	36
2.5.1	Thermique	36
2.5.2	Mécanique	36
2.6	Méthodes de résolution	37
2.6.1	Solutions analytiques	37
2.6.2	Méthodes semi-analytiques : transformations intégrales	40
2.6.3	Méthodes numériques : discrétisation des équations	42
2.6.4	Méthodes numériques : résolution du système d'équations	44
2.6.5	Choix de la méthode de résolution	46
2.7	Synthèse	47
3	Résolution du problème thermoélastique	49
3.1	Modèle mécanique 3D : DF-FFT	49
3.1.1	Équations transformées	49
3.1.2	Résolution	50
3.2	Modèles 2D et 3D DF-MG	52
3.2.1	Techniques Multigrilles	52
3.2.2	Raffinement local de maillage	57
3.2.3	Taux de convergence théorique	59
3.2.4	Conditions aux limites	62
3.2.5	Détérioration de la convergence	63
3.2.6	Schémas de restriction et propriétés du matériau	66
3.3	Validation	70
3.3.1	Théorie de Hertz	70
3.3.2	Calculs éléments finis	73
3.3.3	Modèles multicouches	75
3.4	Résolution du problème de contact normal	78
3.4.1	Résolution du contact normal avec le modèle numérique	79
3.5	Synthèse	80
4	Étude des revêtements	82
4.1	Introduction	82
4.2	Couches polymères	82
4.2.1	Critères spécifiques aux couches polymères	83
4.2.2	Étude en deux dimensions	85
4.2.3	Étude en trois dimensions	87
4.2.4	Résultats expérimentaux	89
4.3	Effet du gradient de propriétés sur les contraintes résiduelles	92
4.3.1	Description du problème	92
4.3.2	Données sur les matériaux	92
4.3.3	Revêtement isotrope, interface abrupte	93
4.3.4	Revêtement à gradient de propriétés, interface diffuse	94
4.3.5	Conclusions	95
4.4	Bilan	96

5	Application aux moules d'injection	97
5.1	Introduction	97
5.2	Présentation du problème	97
5.3	Injection des thermoplastiques	98
5.3.1	Présentation du procédé	98
5.3.2	Propriétés des polymères	99
5.3.3	Écoulement du polymère dans le moule	100
5.3.4	Conditions à l'interface moule-polymère	102
5.4	Modèle de cycle d'injection	105
5.4.1	Décomposition du cycle	105
5.4.2	Coefficient d'échange thermique	105
5.5	Propriétés des revêtements	108
5.5.1	Traitements retenus	108
5.5.2	Caractérisation mécanique d'une couche mince	108
5.5.3	Caractérisation thermique des revêtements	111
5.6	Étude de la tenue du revêtement	114
5.6.1	Étude globale : modèle principal	114
5.6.2	Étude locale : utilisation d'un modèle simplifié	118
5.7	Synthèse	124
	Conclusion générale	127
	Outils et résultats	127
	Conséquences industrielles	130
	Perspectives	130
	Bibliographie	139
A	Microscopie à photoréflectance	140
A.1	Description de l'outil	140
A.1.1	Principe du montage	140
A.1.2	Ondes thermiques, modèle	140
A.2	Mesures des propriétés des revêtements	142
B	Banc de mesure des propriétés mécaniques d'une couche mince : description et validation	146
B.1	Description	146
B.2	Validation	147
B.3	Essais	147
B.3.1	Éprouvettes	147
B.3.2	Premier protocole	149
B.3.3	Deuxième protocole	150
B.3.4	Discussion sur les résultats	151
C	Rapport de mesures des propriétés mécaniques des revêtements par nano-indentation	153

D	Discrétisation des équations du problème thermoélastique	166
D.1	Equation de la conduction 3D dans un solide non homogène	166
D.2	Equation de l'élasticité linéaire dans un massif non homogène	167
D.2.1	Condition au limites	169

Notations principales

Thermique

k	conductivité thermique	W/mK
D	diffusivité thermique	m ² /s
ρ	masse volumique	kg/m ³
c_p	capacité calorifique	J/Kg/K
T	variation de température	K
Q	flux thermique	W/m ²

Mécanique

a	demi-largeur de la zone de contact (Hertz)	m
E	module d'Young	Pa
P	champ de pression	Pa
P_0	Pression de Hertz	Pa
ν	coefficient de Poisson	
α	coefficient de dilatation	
λ, μ	coefficients de Lamé	Pa
$\{\mathbf{u}\} = \{u \ v \ w\}$	vecteur des déplacements	m
$[\boldsymbol{\sigma}]$	tenseur des contraintes	Pa
$[\boldsymbol{\varepsilon}]$	tenseur des déformations	

indices

r	propriétés du revêtement
s	propriétés du substrat

Méthodes de résolution

h	pas de maillage
e	erreur numérique
r	résidu
f	second membre
\mathcal{L}	opérateur
Ω^h	niveau correspondant au pas de maillage h
Ω^n	niveau n

Introduction générale

La notion de traitement de surface recouvre un grand nombre de procédés et de gammes de traitements. Leur objectif est de donner à la surface traitée d'une pièce des propriétés physico-chimiques, mécaniques ou géométriques particulières afin de la protéger des agressions extérieures sans altérer les propriétés en volume de la pièce. Les traitements se retrouvent dans de nombreuses applications : par exemple, les couches épaisses de céramique sont utilisées dans les moteurs aéronautiques pour protéger les aubes des turbines contre les hautes températures. Des couches minces sont également utilisées dans de nombreuses applications où des pièces sont en contact (outils de coupe, paliers, vérins, ...). Les intérêts sont multiples :

- protection contre l'oxydation grâce à la bonne stabilité chimique des couches,
- protection contre l'usure,
- diminution du coefficient de frottement et par conséquent de l'échauffement mais également des efforts supportés par la pièce,
- esthétique.

L'application visée ici concerne l'amélioration du procédé d'injection des matières plastiques et plus précisément les conséquences sur l'aspect des pièces injectées.

La surface du moule participe à la formation de défauts à travers son interaction avec la matière plastique pendant les différentes phases du procédé. Le revêtement doit satisfaire trois objectifs dans cette application :

1. protéger la surface polie du moule contre les dégradations durant la phase de nettoyage (rayures),
2. protéger cette surface pendant les phases de stockage (corrosion),
3. augmenter la cadence de production via la réduction du temps d'injection grâce à l'amélioration de la thermique du moule,
4. diminuer l'adhésion des résidus de moulage afin d'éviter l'encrassement de l'empreinte

Ces buts recherchés guident l'optimisation d'un revêtement en fonction des sollicitations qu'il va subir. Le processus de choix d'un traitement de surface se décompose en 4 phases (cf figure 1) :

1. définition du besoin,
2. analyse de ce besoin et détermination des qualités attendues du traitement,
3. analyse des qualités et détermination des propriétés mécaniques, thermiques et géométriques du traitement,
4. vérification de la viabilité de la solution proposée sous contraintes thermomécaniques.

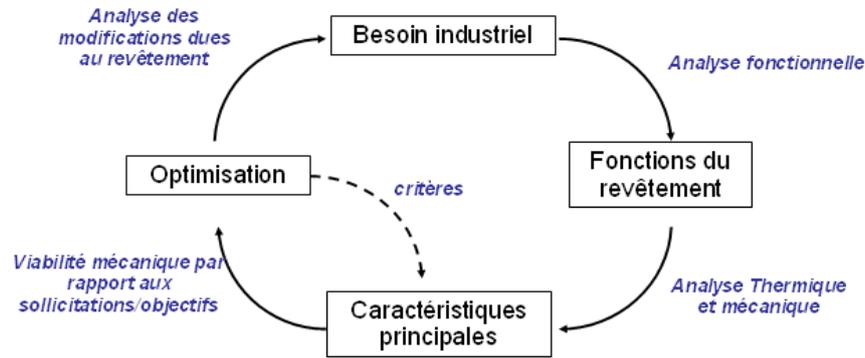


figure 1 - Cycle de choix d'un traitement de surface

En fonction des contraintes subies, il est souvent nécessaire de modifier certaines propriétés pour obtenir une solution optimisée, avec une durée de vie correspondant aux attentes initiales. Enfin, il faut s'assurer que le traitement ne perturbe pas les propriétés de volume de la pièce et sa fonction dans le mécanisme.

Le choix d'un revêtement est donc un processus complexe faisant intervenir de nombreux paramètres. L'évolution des méthodes de dépôt et de caractérisation permettent un meilleur contrôle de sa qualité et de ses propriétés et des études plus poussées de son comportement sous diverses sollicitations. Le secteur des revêtements et traitements de surface subit, depuis deux ou trois décennies, une mutation technologique importante résultant de nouvelles exigences techniques et réglementaires et de récents développements industriels :

- augmentation de la fiabilité et de la durabilité des pièces traitées,
- évolution et apparition de nouveaux procédés,
- évolution des normes et des réglementations.

La gamme de choix est devenue importante avec des procédés de dépôts plus ou moins rapides, coûteux et polluants, des épaisseurs allant du micromètre au millimètre et une gamme de propriétés mécaniques et thermiques très large (cf figure 2).

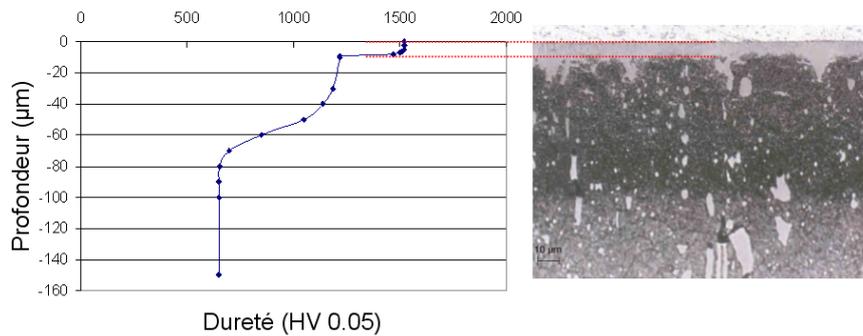
Traitement ou revêtement		0.1 µm	1 µm	10 µm	100 µm	1 mm	Epaisseur	
Revêtement	Voie humide	Dépôts électrolytique, chimiques par enduction						
	Voie sèche		PVD, CVD divers					
	Projection thermique					Projection céramiques et dépôts		
Diffusion	Métaux et métalloïdes	Traitements thermochimiques par voie gazeuse, CVD, ...						
		Traitements thermochimiques en bains de sels						
Transformation structurale	Traitements thermiques mécaniques					Trempe superficielle		
					Galetage, grenailage, choc laser			

figure 2 - Epaisseur du revêtement ou de la zone traitée [13]

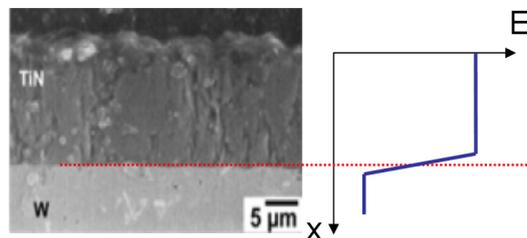
L'étape de vérification et d'optimisation est souvent menée de manière empirique en s'appuyant sur des essais de caractérisation qui ne sont pas toujours représentatifs des sollicitations subies lors du fonctionnement réel et dont les résultats ne peuvent être extrapolés. L'utilisation d'un modèle prédictif permet de systématiser les premières étapes de sélection via le calcul des champs de contraintes et de température dans un système revêtement/substrat et, par l'intermédiaire de critères spécifiques, de vérifier et d'optimiser la solution par rapport au problème posé.

Ce travail a pour but d'enrichir les modélisations existantes et de développer un modèle innovant en proposant une description englobant les traitements de surface dans leur ensemble. Ces traitements couvrent une gamme allant des couches minces aux propriétés homogènes dans l'épaisseur (cf figure 3(b)) jusqu'aux procédés de diffusion introduisant un gradient de propriétés dans l'épaisseur du substrat sur plusieurs millimètres (cf figure 3(a)). Pour mener à bien ce développement, il est nécessaire de prendre en compte une variation continue et quelconque des propriétés mécaniques et thermiques dans l'épaisseur du matériau. Les avantages principaux de ce type de modélisation sont :

- la disparition du saut de propriétés entre le revêtement et le substrat
- la généralisation du concept de traitement comme une variation locale mais continue des propriétés du solide.



(a) Vue microscopique d'un acier nitruré et évolution de la dureté dans la profondeur. ©HEF R&D



(b) Vue microscopique d'un revêtement de TiN sur substrat de Tungstène [39]

Le premier chapitre de ce document est une revue non exhaustive des différents procédés de traitement qui existent à l'heure actuelle. Il met en perspective les propriétés mécaniques des revêtements en fonction des microstructures et du mode de dépôt. Cette étude bibliographique permet de comprendre l'utilité d'un modèle global et de poser les hypothèses indispensables pour approcher au mieux le problème physique du traitement de

surface.

Le second chapitre présente les modèles existants et pose les hypothèses des équations de la thermoélasticité dans un massif en trois dimensions à gradient de propriétés soumis à un chargement quelconque sur sa surface. Ce chargement se présente sous la forme d'un flux thermique ou d'une température imposée et d'un champ de pression quelconque ou des déplacements imposés. L'hypothèse d'élasticité peut sembler réductrice, mais c'est une étape indispensable pour mettre en place et valider un modèle efficace avant d'introduire des comportements non linéaires. De plus, de nombreux cas rencontrés en tribologie peuvent être traités avec ces hypothèses, et la prise en compte de lois de comportement plus complexes (plasticité, viscoélasticité, ...) requiert la formulation de ces lois et la quantification des paramètres.

Ce chapitre s'attache également au choix d'une méthode de résolution adaptée. Deux techniques parmi les méthodes analytiques, semi-analytiques et numériques ont été retenues :

- la méthode DF-FFT, qui consiste à résoudre numériquement les équations de l'élasticité et de la conduction discrétisées à l'aide de la méthode des différences finies dans le domaine de Fourier,
- la méthode DF-MG qui utilise une discrétisation aux différences finies et les techniques multigrilles pour accélérer la résolution.

Le troisième chapitre est consacré au développement de ces deux méthodes. Après la présentation des techniques Multigrilles, une analyse sur les deux paramètres importants qui altèrent la vitesse de convergence de la méthode de résolution y est menée. Ces paramètres sont un gradient de propriétés important et une épaisseur faible affectée par cette variation. Après avoir mis en évidence ces problèmes, nous proposons et implémentons des méthodes spécifiques qui améliore les échanges entre les différents niveaux et permettent de retrouver la vitesse de convergence optimale. Enfin, des comparaisons entre les différents modèles développés et la littérature sont utilisés pour valider les calculs.

Les quatrième et cinquième chapitres sont consacrés à des simulations numériques dédiées à des applications industrielles. Le quatrième chapitre présente tout d'abord une étude d'un massif PMMA revêtu avec une couche de PS soumis à un essai de rayure. Ensuite, nous avons mis en place une simulation à partir d'une extension du modèle multigrilles pour déterminer le champ de contraintes résiduelles d'origine thermique qui s'établit dans un revêtement de diamant polycristallin sur un substrat en alliage de titane lors du procédé de dépôt. Les valeurs seront comparées aux mesures de ce champ effectuées par spectrométrie RAMAN.

Le dernier chapitre est dédié à l'application plasturgie. Face à la difficulté d'obtenir les propriétés mécaniques et thermiques des couches, et notamment celles employées dans le projet, nous avons développé au LaMCoS un banc d'essais simple avec comme objectif la quantification globale du module d'Young des revêtements. En parallèle, une collaboration avec le laboratoire d'optique physique de l'ESPCI nous a permis de quantifier les propriétés thermiques des différentes couches. Ces grandeurs indispensables sont ensuite utilisées comme données d'entrée du modèle pour simuler le comportement de moules revêtus au cours du procédé d'injection et mettre en place une étude paramétrique. Cette étude permet de mettre en avant les paramètres les plus influents et de choisir le meilleur

INTRODUCTION GENERALE

traitement en fonction des sollicitations et des propriétés attendues.

Chapitre 1

Etude bibliographique : techniques de dépôts et caractéristiques des revêtements

1.1 Introduction

Le point de départ de cette revue bibliographique est liée à l'étude de l'influence d'un revêtement déposé à la surface des moules utilisés dans les procédés d'injection de polymères. En effet, la transformation des plastiques est de plus en plus complexe en raison des contraintes imposées de rendement et de qualité en constante évolution et des processus d'injection de plus en plus sévères dus à une technicité croissante des pièces. Les conséquences sont notamment l'évolution de la nature des polymères, des états de surface du moule et des pièces injectées. De plus, les contraintes industrielles imposent une diminution des rebuts et une productivité toujours accrue.

Ce contexte a pour conséquence un accroissement des sollicitations subies par l'outillage couplé à une diminution de la taille et du nombre de défauts de volume et de surface (ligne de soudure, brûlures, tâches blanches,... [2]) acceptables sur les pièces injectées. La dégradation des outillages peut se manifester de différentes manières :

- usure,
- dégradation par fatigue thermique ou mécanique,
- encrassement.

Pour contrer ces effets, une intervention sur la qualité du matériau des outils et sur l'état de surface des moules est nécessaire. Le revêtement semble être une solution viable pour améliorer les conditions de fonctionnement des moules d'injection. Il existe néanmoins une multitude de revêtements et le choix n'est pas trivial. Une étude approfondie des phénomènes mis en jeu est donc nécessaire pour choisir un traitement et valider son utilisation. L'objectif d'un dépôt est de protéger la surface d'un substrat (volume) des agressions extérieures et d'améliorer ses propriétés de surface. Ces agressions peuvent être d'origine thermique (barrières thermiques), chimique (traitements anti-corrosion) ou mécanique (dépôts anti-usure). Divers procédés sont utilisés pour modifier la surface des pièces mécaniques afin d'optimiser leur comportement et leurs performances. Le choix du procédé va dépendre de l'application visée, des conditions d'utilisation et de la température admissible par le matériau du substrat et celui du ou des dépôts. L'application aux moules

d'injection des polymères doit aussi améliorer le procédé. Le choix du dépôt est donc complexe en regard des différentes interactions avec son environnement. Il est le résultat de compromis entre différents paramètres suivant le type d'application. L'approche utilisée pour le choix du revêtement passe par la détermination des facteurs responsables de l'endommagement et des types de sollicitations globales (subies par l'ensemble de l'outil et se répercutant sur le revêtement) et locales (champ de pression, traction et échauffements locaux). A partir de ces observations, il est possible de s'approcher au mieux des critères de sélection et déterminer les caractéristiques du revêtement (épaisseur, propriétés, ordre) qui permettent d'atteindre les performances attendues.

Cette démarche passe par une étude des revêtements existants, de leurs propriétés et de leur mode de fabrication. En effet, il existe une température limite à ne pas dépasser pour éviter une modification microstructurale potentielle du substrat (revenu, recristallisation, transformation de phase, ...). La figure 1.1 résume les possibilités offertes à l'heure actuelle

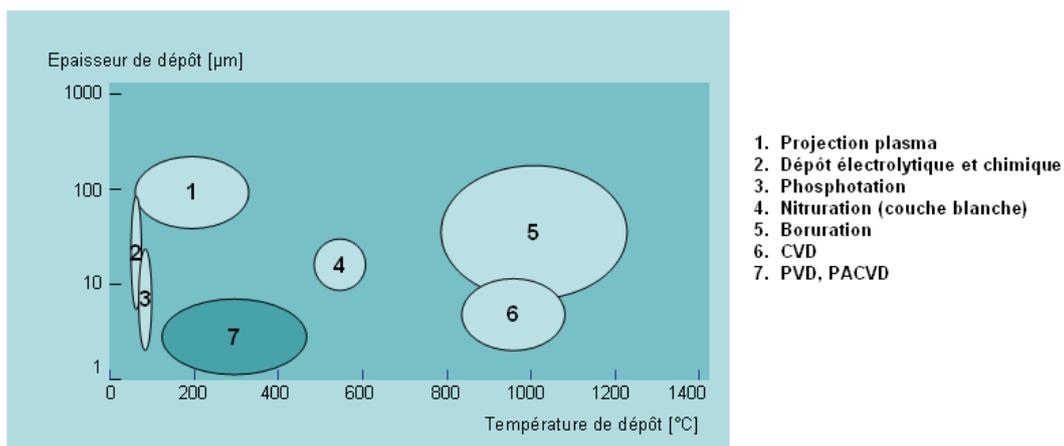


figure 1.1 - *Épaisseurs de couche et températures de dépôt en fonction des différents procédés [9]*

en terme d'épaisseur du dépôt et de température atteinte en fonction des différents modes de déposition. Ces méthodes sont classées en cinq groupes :

- projection,
- dépôt électrolytique ou chimique,
- diffusion,
- dépôt physique,
- dépôt chimique.

Les revêtements ont des propriétés et des épaisseurs différentes suivant le procédé choisi. Ce dernier a également une influence d'importance variable sur le substrat, conditionnée par les niveaux de températures atteintes lors des différentes opérations de traitement et des contraintes résiduelles induites.

L'objectif de ce chapitre est de présenter les différents types de traitement avec leurs avantages et leurs inconvénients, les différents matériaux qui peuvent être déposés. Nous ferons également un bilan des méthodes utilisées pour la caractérisation des propriétés mécaniques et thermiques.

1.2 Méthodes de déposition du revêtement

Il existe deux types de dépôts : les dépôts par voie sèche et les dépôts par voie humide (bains). Les dépôts par voie humide représentent la majeure partie du marché du revêtement (principalement utilisés pour la décoration). Nous nous intéresserons ici néanmoins aux dépôts par voie sèche car ce sont les plus utilisés dans le domaine de la tribologie et ils connaissent un fort développement.

Les procédés par voie sèche sont très variés : dépôt par projection, par voie chimique ou par voie gazeuse. La principale méthode d'application des dépôts par voie humide est l'électrolyse dans des bains contenant le réactif à déposer.

1.2.1 Dépôts électrolytiques

C'est une des seules techniques par voie humide utilisée pour protéger les pièces mécaniques (chromage). Le substrat sur lequel doit s'effectuer le dépôt constitue la cathode d'un montage électrolytique, l'électrolyte dans lequel il baigne contient des ions métalliques M^+ de charge positive. La polarisation des électrodes va provoquer une migration de ces ions vers la cathode, c'est-à-dire le substrat. L'ion métallique est neutralisé par les électrons fournis par la cathode et se dépose sur celle-ci sous forme de métal M . Les matériaux déposés par cette technique sont nombreux : zinc, étain, chrome, fer, cobalt, nickel, or, cuivre, argent, plus de nombreux alliages. Nous allons voir plus particulièrement l'exemple du chromage, car le chrome dur est le revêtement privilégié dans le domaine de la mécanique pour les pièces en rotation ou en translation qui ont à résister à l'usure et doivent avoir de bonnes qualités de frottement (vérins), et pour les domaines où l'adhérence pourrait être un handicap pour le procédé (plasturgie, cylindres de laminoir, ...).

Chromage [13]

Le chrome possède de nombreuses propriétés mécaniques (grande dureté, faible coefficient de frottement) et physico-chimiques (bonne résistance à la corrosion, pouvoir réflecteur). Le chromage "dur" est très développé dans l'industrie mécanique pour les pièces frottantes sur lesquelles l'épaisseur des couches de chrome peut varier de quelques microns à quelques centaines de micromètres.

Les revêtements électrolytiques de chrome réalisés dans des conditions d'électrolyse stationnaire possèdent une grande dureté (900 à 1000 Vickers) et sont donc appelés chrome "dur". Leur principal défaut est la présence de contraintes internes de traction élevées dans le revêtement qui peuvent atteindre 1000 MPa en fonction des conditions de dépôt, liées notamment à la présence d'hydrogène occlus dans le revêtement. Ces contraintes résiduelles provoquent la fissuration du revêtement dès que son épaisseur est supérieure à $0.2 \mu\text{m}$. La solution consiste en un traitement thermique du système revêtement/substrat pour désorber l'hydrogène, ce qui provoque une dégradation des propriétés du dépôt, dont la dureté, et cela proportionnellement au temps de recuit. Enfin, l'utilisation du chrome est limitée à cause de contraintes environnementales. En effet, le procédé fait intervenir du chrome hexavalent qui est maintenant interdit par les normes en vigueur.

Les perspectives de développement du chromage passent par deux impératifs :

1. développer des procédés utilisant des sels moins toxiques (chrome trivalent) ou avec des rejets de chrome hexavalent les plus faibles possibles,

2. améliorer les performances des dépôts obtenus (contraintes résiduelles, dureté).

Néanmoins, l'utilisation du chrome trivalent laisse espérer une amélioration des qualités du dépôt, même s'il paraît difficile de remplacer les très bonnes propriétés du chrome hexavalent en général.

1.2.2 Projection thermique

La seconde technique pour déposer les revêtements utilisés en tribologie est la projection thermique. Son utilisation est très répandue, principalement pour les barrières thermiques et les céramiques. Sa première utilisation date de 1909. Son développement est lié à l'amélioration des techniques de chauffe et d'accélération des particules. Il existe diverses techniques de projection ou de rechargement par flamme (plasma atmosphérique ou sous vide, arc électrique, laser, ...) de produits durs, métaux ou céramiques. Le principe repose sur l'injection de fines particules dans un flux gazeux chaud (chauffé électriquement ou par combustion). Mises sous forme pâteuse, elles sont projetées avec une vitesse élevée sur un substrat afin de former un revêtement dense et homogène par empilements successifs. Le matériau projeté doit pouvoir fondre sans se décomposer. Il est introduit dans la source de chaleur sous forme de fil, de poudre ou encore de fil creux garnis de poudre. Il existe beaucoup de techniques de projection différentes. Nous allons détailler ici seulement les plus utilisées :

- Projection plasma [12], [11] : la projection plasma consiste à introduire des particules solides dans un jet de gaz, dont la température atteint couramment $11000\text{ }^{\circ}\text{C}$ et la vitesse $1000\text{-}1500\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$. Ces particules sont accélérées et fondues avant de s'écraser sur la pièce à revêtir. Le dépôt est ainsi formé par l'empilement des lamelles solidifiées obtenues par l'impact des particules sur le substrat préalablement « préparé » (figure 1.2). Ce procédé est utilisé en particulier pour déposer des matériaux à haute température de fusion tels que des alliages réfractaires ou des céramiques. Les caractéristiques des dépôts réalisés par projection plasma sont la résistance à l'usure et à la corrosion et l'isolation thermique et électrique.

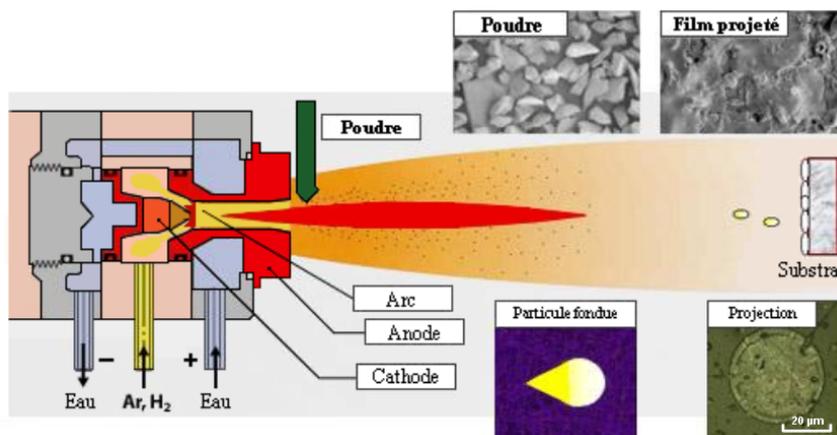


figure 1.2 - Principe de la projection plasma [106]

- Projection supersonique : le principe est le même que précédemment mais avec des températures plus basses (2800°C) et des vitesses de projection beaucoup plus élevées, jusqu'à Mach 6 au moment de l'impact. Les revêtements ainsi obtenus sont parmi les meilleurs que l'on sache obtenir, par leur homogénéité, leur absence de porosité et leur excellent accrochage sur le support. La dureté est également très élevée.
- Projection supersonique à froid : plus connue sous le nom de "Cold Spray", cette technique, encore en développement, consiste à utiliser un jet de gaz chaud à haute pression (20 à 35 bars) pour projeter une poudre préchauffée. Les particules adhèrent au substrat et les unes aux autres par déformations plastiques, ce qui permet de limiter l'échauffement et les contraintes résiduelles.

Caractéristiques des revêtements [5]

Les caractéristiques spécifiques des dépôts réalisés par projection thermique sont la porosité et une structure à grains fins. Suivant la méthode et l'application visée, cette porosité peut varier de 30% à moins de 1% (projection sous atmosphère contrôlée et pression réduite) ce qui permet d'obtenir des propriétés proches de celles du matériau massif.

La structure à grains très fins est due à la trempe brutale provoquée lors de l'impact des particules projetées (gouttelettes de matériau fondues) sur le substrat. Cette trempe, à laquelle peuvent venir se rajouter les changements de phase et la dilatation du dépôt, provoque aussi de fortes contraintes résiduelles qui conduisent le plus souvent à une perte d'adhérence du revêtement. Il existe des solutions palliatives pour contrer cet effet (gradient de composition, sous-couches d'adhérence, cold spray, ...). Il s'agit là de caractéristiques physiques liées à la microstructure des couches formées.

1.2.3 Procédés de diffusion

Les procédés de diffusion sont caractérisés par l'insertion d'atomes étrangers dans un substrat pour en changer les propriétés. La matière diffusée forme des solutions solides, le plus souvent interstitielles, et distord les réseaux cristallins. Il en résulte une augmentation de la dureté superficielle due à la création de contraintes résiduelles de compression et une amélioration de la résistance à la corrosion et à l'oxydation. A la différence des autres traitements de surface, il n'y a pas formation de dépôt. Le substrat est modifié superficiellement pour adapter ses propriétés mécaniques et chimiques à l'application visée. On distingue :

- la diffusion de métalloïdes, carbone, azote, soufre, bore, par voie liquide (bains de sels) ou gazeuse et plus récemment, par bombardement ionique,
- la diffusion de métaux, aluminium et chrome notamment, qui améliore la résistance à l'oxydation à haute température.

Les avantages de ces procédés sont une bonne résistance des pièces traitées à la corrosion et à la fatigue grâce à une évolution graduelle des propriétés dans la profondeur et une bonne reproductibilité du processus. Par contre, les couches obtenues sont relativement molles, ce qui limite leur domaine d'application. Le choix du substrat est très limité et le temps de traitement est relativement long.

Parmi les procédés de diffusion, la nitruration est largement utilisée pour améliorer les propriétés des surfaces soumises à des contraintes d'origine tribologique (outils, roulements,

engrenages). Quelques explications sur ce procédé sont données ci-dessous.

Nitruration

La nitruration est un traitement thermo-chimique au cours duquel de l'azote interagit et diffuse dans un matériau métallique dont la température est comprise entre 300 et 600°C. Pour les alliages à base de fer, ce type de traitement permet d'obtenir simultanément un gradient de contraintes de compression et un gradient de dureté suivant la profondeur du matériau (cf figure 1.3) qui peuvent être exploités pour améliorer leur résistance à l'usure et à la fatigue. Les techniques de nitruration sont largement décrites dans la littérature [5, 51, 54] du fait de leur grande utilisation pour le traitement des aciers. La figure 1.3

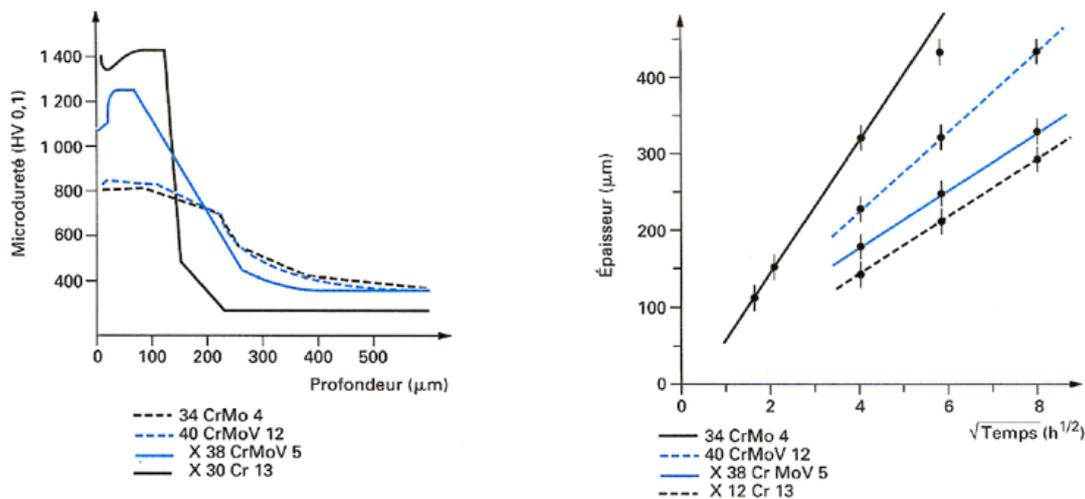


figure 1.3 - Influence de l'acier sur la profondeur et la vitesse de traitement [54]

montre que le procédé est relativement long. De plus, les transformations structurales et la vitesse de diffusion vont dépendre du type d'acier à traiter. Le processus doit donc être adapté pour chaque nuance de substrat.

Il faut noter que la caractéristique citée ici est la dureté. L'amélioration de la tenue à la corrosion et à la fatigue est indicative et non quantitative ce qui ne permet pas une sélection systématique.

1.2.4 CVD

La technique CVD (*Chemical Vapor Deposition* ou dépôt chimique en phase vapeur) est un processus de déposition de films minces. Le substrat est exposé à un ou plusieurs précurseurs gazeux qui réagissent et/ou se décomposent sur le substrat pour former un film mince. Ces réactions sont activées soit par une énergie thermique (système classique) à pression atmosphérique ou basse pression, soit par une assistance de type Plasma (PACVD) radiofréquences, micro-ondes ou de type Laser (LACVD).

Les revêtements obtenus ont une grande résistance à l'usure et leur production est économique, surtout quand leur épaisseur est importante. Le dépôt pénètre dans les irrégularités des substrats (alésages,...). Par contre, la température de traitement est élevée (environ 900 °C [51, 87]), ce qui peut entraîner une modification des propriétés et de la géométrie

de la pièce revêtue. Deux technologies se sont développées [5] ces dernières années pour abaisser les températures de dépôt :

- OMCVD : cette technologie utilise des composés moins stables comme les organométalliques et est utilisée dans le traitement des aciers à outil avec des revêtements de type Cr(C,N). La réaction de décomposition chimique s'effectue à des températures plus basses (entre 200 et 400°C).
- PACVD (*Plasma Activated CVD*) : dépôt CVD avec assistance plasma. Des espèces réactives sont créées par ionisation des phases vapeurs. La réaction se fait alors à plus basse température. Le procédé PACVD est une évolution de la technique CVD classique. Il permet non seulement de diminuer la température de chauffage de la pièce traitée mais aussi de déposer de nouvelles familles de matériaux. Le substrat est chauffé à 400°C, et de façon découplée, une décharge continue ou alternative est provoquée dans le mélange gazeux des précurseurs pour ioniser et créer des espèces actives. Les revêtements à base de titane ont profité du développement de ce procédé (TiN, TiC, (Ti,Al)N) mais aussi les dépôts à base carbone, créés à partir de la décomposition d'un mélange d'hydrocarbures et d'hydrogène (DLC, diamants). Cette famille, caractérisée par des liaisons de type diamant ou graphite, présente un haut niveau de dureté, de bonnes propriétés tribologiques, principalement un faible coefficient de frottement face à l'acier [48], et une grande inertie chimique. Enfin, les revêtements issus de la décomposition sous plasma de précurseurs organosilicés est en développement [87]. La richesse de la chimie sous plasma permet la synthèse de matériaux très divers allant des "polymères plasma, [51]" jusqu'à des compositions minérales de type SiC, SiO_x ou Si(C,N) amorphes. Ces revêtements possèdent de très bonnes propriétés anti-corrosion, anti-adhérence, surtout avec les polymères fondus, et une bonne imperméabilité aux gaz.

Actuellement, la principale application des dépôts CVD est la famille des DLC et autres revêtements à base carbonée issus de la dégradation d'un hydrocarbure. Les tests mécaniques mis en place par les fabricants caractérisent principalement la dureté du matériau. Il est très difficile de trouver les propriétés de ce type de revêtement tellement la famille est large. Elle s'étend de couches polymères jusqu'au diamant très dur et rigide. Le choix se fera donc principalement par optimisation expérimentale suivant l'application.

1.2.5 PVD

La technique PVD (*Physical Vapor Deposition* ou dépôt physique en phase vapeur) est en plein essor, surtout pour des raisons environnementales. Elle s'effectue sous vide poussé et à des températures comprises entre 150 et 500 °C. Le matériau à déposer (des métaux comme le titane, le chrome ou l'aluminium), sous forme solide et d'une grande pureté, est évaporé par chauffage (effet Joule) ou par bombardement ionique, électronique ou photonique. Simultanément, un gaz réactif (par exemple de l'azote ou un gaz contenant du carbone) est introduit dans l'enceinte ; il forme un composé avec la vapeur de métal et vient se déposer sur les outils ou composants, sous la forme d'une couche mince très adhérente. Pour obtenir une épaisseur de dépôt homogène, on fait tourner les pièces à vitesse constante sur plusieurs axes.

Pour le PVD, on parle de famille de procédés puisqu'il existe plusieurs manières d'appliquer ce processus. Cette méthode de dépôt permet d'obtenir, à basse température, des couches denses ayant une bonne adhérence et de faibles contraintes internes. Un certain nombre de revêtements peut être produit avec ce système et notamment des combinaisons de métaux ou d'alliages, des nitrures ou des carbures d'alliages (TiAlN, TiCN, ...). Enfin, le dernier avantage de cette famille est la bonne reproductibilité du processus. De ce fait, cette technologie permet de réaliser des dépôts multicouches ou des revêtements à gradient de propriétés [48]. Soulignons que les revêtements de Nitrure de Titane, utilisés pour les applications tribologiques se sont développés grâce à cette technique.

De nombreuses améliorations ont été apportées à la technique PVD depuis sa création principalement au niveau du procédé d'évaporation de la matière et des champs électriques utilisés pour accélérer le processus. Les principales évolutions sont décrites ici :

- évaporation par arc : l'évaporation de la cible par effet Joule présente des inconvénients et en particulier la dépendance de la vitesse d'évaporation à la pression de vapeur saturante de l'élément.

L'évaporation par arc améliore la vitesse de dépôt grâce à une grande densité de puissance. La cible est évaporée par un arc électrique provoqué par une pointe proche de la cible. Les sources de vapeur peuvent assurer à la fois une très forte activation de la vapeur métallique et le bombardement du substrat par des atomes très fortement ionisés. L'évaporation par arc permet d'atteindre un degré d'ionisation de 100%.

- pulvérisation / Sputtering : c'est un processus physique dans lequel les atomes d'une source solide sont éjectés dans un gaz grâce au bombardement de ce matériau par des ions issus d'un plasma réalisé dans une enceinte entre des parois à la masse et la cible portée à un potentiel négatif.

L'éjection des atomes de surface est un effet purement mécanique dû au choc de ces ions sur la cible. Le gaz métallique ainsi créé réagit avec un autre gaz introduit dans l'enceinte du réacteur (réactif contenant le composant non-métallique du dépôt). Ce gaz qui n'est pas dans son état d'équilibre thermodynamique se dépose sur le substrat.

Avec cette technique, la composition est connue à l'avance puisqu'elle est identique

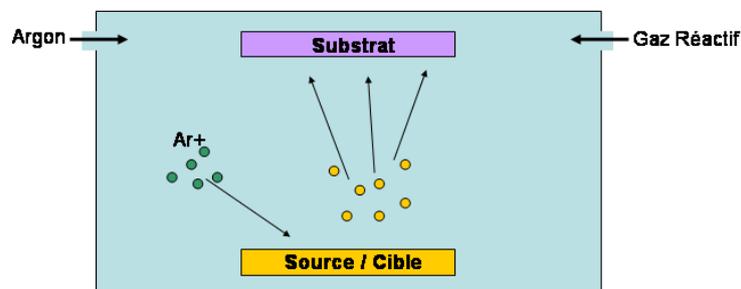


figure 1.4 - Principe du dépôt par pulvérisation [5]

au matériau source. Les proportions stoechiométriques des différents éléments formant l'alliage sont respectées, contrairement aux procédés par évaporation thermique où la pression de vapeur saturante va être différente pour chaque atome.

Par contre, la vitesse de dépôt est faible à cause du degré d'ionisation du gaz formant le plasma (de 0.1 à 0.3 %, [5]). Le processus est donc lent et coûteux.

- pulvérisation magnétron : c'est une évolution de la pulvérisation classique. Le système classique de création des ions métalliques est appelé système diode à courant continu (diode DC), avec la cible formant la cathode et le substrat (anode) relié à la masse. Le substrat est alors entièrement immergé dans le plasma.

Une décharge diode DC est entretenue par les électrons secondaires éjectés de la cathode sous l'effet du bombardement ionique. Les électrons ne rencontrant pas de molécules de gaz s'éloignent perpendiculairement à la cathode et sont captés par l'anode. L'ionisation du gaz autour de la cible est faible et par conséquent le bombardement de la cible et la vitesse de croissance du film (proportionnelle à la vitesse de pulvérisation) le sont aussi. L'utilisation d'un champ magnétique parallèle à la surface (perpendiculaire au champ électrique) confine la décharge autour de la cathode (cible) et les trajectoires des électrons s'enroulent autour des lignes de champ (figure 1.5). Cet effet crée une forte ionisation du plasma autour de la cible augmentant considérablement la vitesse de pulvérisation.

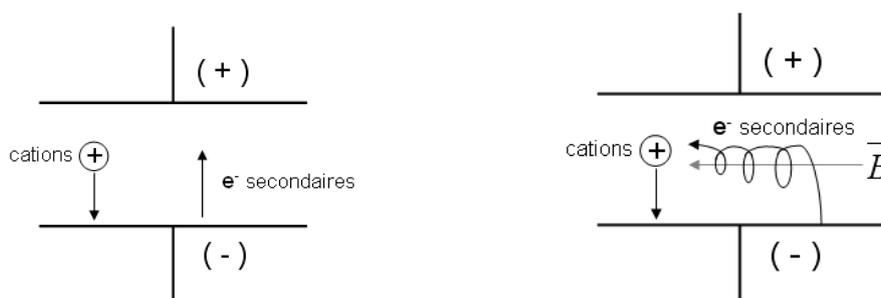


figure 1.5 - *Système diode et système magnétron*

- Plaquage ionique : également appelée *ion-plating* c'est un procédé associé à une technique d'évaporation. Typiquement, le substrat est mis à un potentiel négatif, et les cations du gaz plasmagène sont attirés vers le matériau à revêtir. Cette différence de potentiel augmente l'énergie des ions venant se déposer sur la surface. Il y a plusieurs avantages à utiliser cette technique [86, 59, 19, 5] :
 - les ions pulvérisent les espèces contaminant la surface ou éliminent les phases de dépôt liées faiblement à la surface densifiant ainsi la couche.
 - ils pénètrent sous la surface, créant une interface de pseudo-diffusion (voir 1.3.4), même avec des matériaux insolubles,
 - la porosité à l'interface diminue,
 - il y a formation de contraintes résiduelles de compression.

1.2.6 Synthèse

Les cinq méthodes décrites ci-dessus ont chacune leurs avantages et leurs inconvénients. A part les techniques PVD et CVD utilisées pour des applications semblables, les autres

CHAPITRE 1. ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE : TECHNIQUES DE DÉPÔTS ET CARACTÉRISTIQUES DES REVÊTEMENTS

restent spécifiques et certaines technologies telles que les barrières thermiques nécessitent la mise en place de techniques appropriées. Le tableau ci-dessous récapitule les avantages et inconvénients de chaque technique ainsi que leurs domaines applications.

Méthode	Avantages	Inconvénients	Applications
1. Dépôt électrolytique	Rapide Économique	Polluant	Chromage « dur », Décoration : plaquage
2. Projection thermique	Rapide Économique Matériaux non miscibles	Porosités Faible reproductibilité Contraintes résiduelles	Barrières thermiques, Céramiques, Revêtements réfractaires.
3. Procédés de diffusion	Gradient de propriétés Résistance à la corrosion	Procédé long Choix de substrats limités	Surfaces soumises à l'usure et à la fatigue
4. CVD	Économique Dépôt dans les irrégularités Diversité des matériaux	Température Dépendance à la pression de vapeur saturante	Films minces à base carbonée
5. PVD	Température de dépôt Reproductibilité Contrôle : multicouches	Lent Coûteux Difficultés dans les irrégularités	Films minces, Films durs, ultra-durs, Dépôts multicouches pour applications critiques

Cette partie fournit une étude non exhaustive des procédés de dépôt et des dernières technologies mises en place pour améliorer les réactions. Chaque technique possède son propre champ d'application. Les structures des traitements et des couches dépendent également de la façon dont ils ont été déposés. La prochaine partie est consacrée à cette microstructure et aux conséquences en matière de propriétés mécaniques et thermiques.

1.3 Etats physiques du matériau

Les techniques de dépôt décrites précédemment permettent de contrôler plus ou moins bien la structure et la composition du revêtement. Les propriétés mécaniques, thermiques ou chimiques recherchées dépendent d'une multitude de paramètres. Cette partie s'attache à décrire et à comprendre l'origine des propriétés physiques des revêtements. Le premier paragraphe est consacré à l'étude des dépôts classiquement utilisés en tribologie : les revêtements durs. Le second s'intéresse à un nouveau type de dépôt qui arrive sur le marché. Enfin, les deux derniers paragraphes décrivent l'état des contraintes résiduelles dans le revêtement et l'interface avec le substrat. Ces deux points participent aux propriétés globales du revêtement : les contraintes résiduelles lui confèrent une résistance aux dégradations, souvent traduite comme une augmentation de dureté, et les caractéristiques de l'interface influencent la tenue mécanique sur le substrat.

1.3.1 Matériaux durs

Les matériaux utilisés pour l'élaboration des revêtements des applications mécaniques sont le plus souvent des matériaux durs. Les plus utilisés sont :

- le titane (Ti),
- le chrome (Cr),
- l'aluminium (Al),
- le carbone (C),
- le silicium (Si)
- le zircon (Z).

On les retrouve sous forme de composés, souvent nitrurés pour augmenter encore la dureté, avec différentes associations suivant les propriétés recherchées. Le zircon entre dans la composition des céramiques, généralement utilisées comme barrières thermiques. Le carbone est utilisé à l'état pur pour des opérations de lubrification solide (graphite) ou de protection (diamant), ou associé avec l'hydrogène (DLC).

Holleck a proposé une classification en fonction de la nature des liaisons chimiques [64] des matériaux qui possèdent une dureté élevée et susceptibles d'être utilisés comme revêtements durs. Ce classement est présenté sur la figure 1.6.

Il faut noter que ce classement associe les propriétés mécaniques telles que la résistance

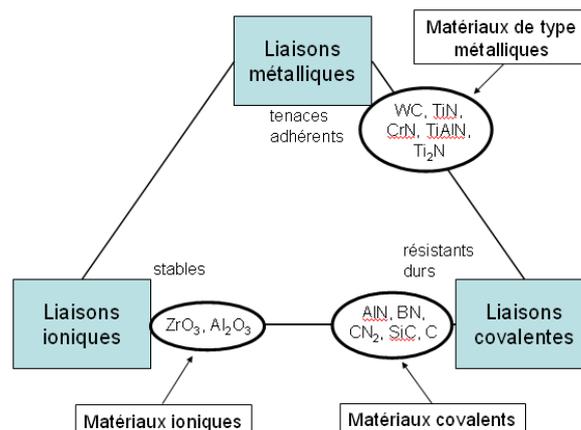


figure 1.6 - Liaisons chimiques dans les matériaux durs [39]

et la ténacité. Il ne mentionne pas les conditions de chargement et la géométrie.

Montes [39] a étudié ces matériaux en détail à travers leurs propriétés mécaniques, thermo-mécaniques et thermodynamiques. Plusieurs tendances se dessinent :

- tous ces matériaux ont une dureté et un point de fusion élevés,
- la fragilité et la dureté étant souvent liées, les matériaux à liaisons ioniques offrent une faible résistance à la fissuration : ils ont un comportement fragile avec peu de déformations plastiques.
- le coefficient de dilatation thermique augmente, des matériaux à liaisons covalentes vers les matériaux à liaisons métalliques en passant par les matériaux à liaisons ioniques.

La structure du dépôt, et donc la méthode utilisée lors de la déposition, va aussi influencer ses propriétés mécaniques. Fortuna et al. [49] ont étudié la structure des films de TiN (cf

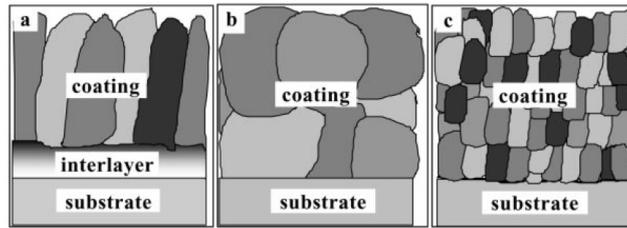


figure 1.7 - Images schématiques de la microstructure des dépôts de TiN : (a) PVD (Balzers et Metaplas); (b) CVD (Valenite); (c) PMD; d'après [49]

figure 1.7) en corrélation avec des mesures de contraintes résiduelles. Les conclusions de leur travail sont les suivantes :

- les dépôts PVD ont des grains colonnaires et des contraintes résiduelles importantes principalement situées dans les grains.
- les dépôts CVD montrent une structure homogène. La taille est indépendante de la direction et le taux de contraintes résiduelles est faible.
- les grains formés par PMD (*Plasma-enhanced Magnetron sputtered Deposition*, pulvérisation magnétron assistée par plasma) ont une forme allongée perpendiculairement à la surface et de fortes contraintes résiduelles (environ $0.13E$, avec E le module d'Young) localisées dans les grains.

On retrouve le même type de résultat avec les dépôts électrolytiques. L'opération de chromage peut se dérouler à différentes températures de bains. Suivant la température, mais aussi la densité de courant appliquée à la cathode, la microstructure du revêtement change [47, 107]. A basse température de dépôt, les grains sont gros et sans direction de croissance privilégiée, la dureté et les contraintes sont faibles ($700/800 \text{ HV}_{100}$, 300 MPa). Par contre, à plus haute température, la taille des grains diminue et la croissance est colonnaire, provoquant une augmentation de la dureté et des contraintes résiduelles dans le revêtement ($1700/1900 \text{ HV}_{100}$, 1 GPa). Ces deux exemples montrent les variations de microstructure, de contraintes résiduelles et finalement de propriétés mécaniques en fonction des paramètres du procédé, à composants identiques. Des revêtements ayant la même composition chimique mais une méthode d'élaboration différente verront leur structure et les contraintes internes, et donc leurs propriétés mécaniques et thermiques, changer. Ceci renforce la nécessité d'une caractérisation des propriétés mécaniques et thermiques pour les différents constituants et paramètres du procédé (durée, température, vitesse, ...).

Les structures multicouches composées d'un empilement de ces matériaux se développent avec l'amélioration du procédé PVD. Elles offrent plusieurs avantages par rapport à leurs équivalents monocouches :

- résistance à la corrosion,
- faibles contraintes résiduelles,
- résistance à haute température.

Schäffer et al. [101] ont montré que les deux derniers points sont liés. En effet, une exposition à haute température provoque une relaxation des contraintes résiduelles. Or, ce sont ces contraintes qui confèrent les propriétés de dureté aux dépôts monocouches. Une telle exposition va donc entraîner une baisse de dureté dans un revêtement monocouche.

1.3.2 Dépôts ultradurs

Les dépôts les plus connus de cette famille sont les diamants et les DLC (Diamond Like Carbon). On y trouve aussi les DLC multicouches, les CN_x , les c-BN (Nitrures de Bore) et les $\beta - C_3N_4$ ainsi que la plupart des céramiques. Ils se caractérisent par une très grande dureté (3000-5000 HV, ou une dureté plastique $H_v > 40$ GPa).

Les revêtements ultradurs monocouches ont généralement une base carbone qui est ensuite adaptée selon les besoins et le type d'application (cf figure 1.8). Il n'existe que deux matériaux intrinsèquement ultradurs : le diamant ($H_v = 70-90$ GPa) et le c-BN (Nitrure de Bore cubique, $H_v = 48$ GPa). Théoriquement, la dureté et la résistance qui peuvent être atteintes par un matériau est environ $0.1 G$, avec G le module de cisaillement [111]. Dans la pratique, la dureté des dépôts constitués d'un seul matériau est d'un ou plusieurs ordres de grandeur inférieurs à cette limite théorique. Pour comprendre cette différence entre le comportement théorique et les propriétés mesurées, il faut chercher les causes de cette "super dureté". Veprek [111] et Karvankova [72] donnent deux origines possibles à cette propriété :

1. la nanostructure particulière du matériau ou de la solution,
2. une très forte contrainte résiduelle de compression.

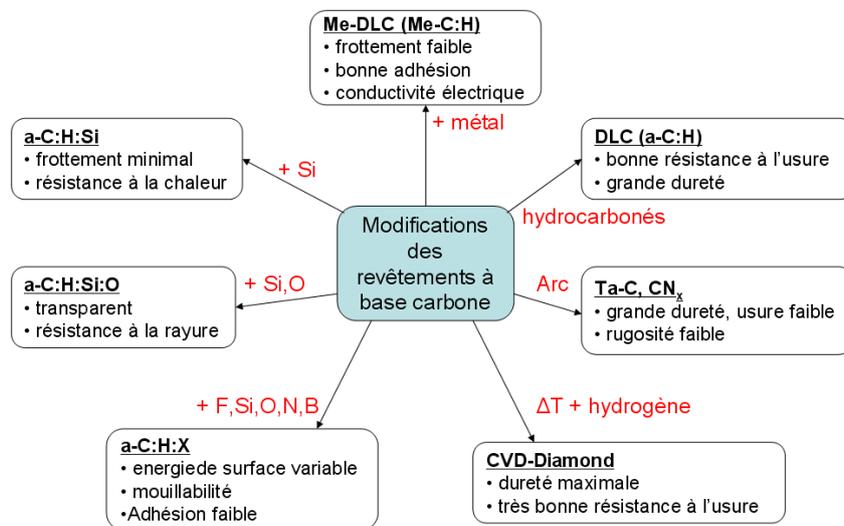


figure 1.8 - Revêtements à base carbone [18]

Le principal inconvénient des dépôts "mono-composants" est le taux très élevé de contraintes résiduelles qui ne permet pas de réaliser des revêtements épais. De plus, de la même manière que les dépôts durs, ils ne sont pas stables et perdent leur intégrité à haute température. Pour palier à ces faiblesses, de nouvelles techniques se développent avec comme objectif la réalisation de dépôts "multicomposants" ou multicouches.

- Dépôts multicouches

Les dépôts multicouches ont deux objectifs :

- réduire les contraintes résiduelles dans le revêtement,
- bénéficier des propriétés de différents composants pour devenir multi-fonctionnels (par exemple associer un composant très dur avec un autre ayant un faible coefficient

de frottement).

Les dépôts multicouches permettent d'obtenir des propriétés supérieures à celles des produits monocouches (dureté, ténacité, contraintes résiduelles plus faibles) et d'ajuster les propriétés en fonction des sollicitations appliquées à la pièce [31]. Une application particulière de ces multicouches : la superstructure.

C'est un revêtement multicouches dont la période (épaisseur des couches successives) est de l'ordre d'une dizaine de nanomètres, avec des composés (nitrures, oxydes), ayant le même type de maille mais des paramètres légèrement différents. Par exemple, un dépôt à effet de superstructure TiAlN/CrN de période 3.8 nm est utilisé dans les applications à hautes températures ou un TiAlYN/VN de période 9 nm pour des applications tribologiques.

- Dépôts nanostructurés Ce type de dépôt permet d'obtenir des duretés très élevées (cf figure 1.9) jusqu'à 7000 HV et une bonne ténacité. Il en existe deux types :
 1. les nanocristallins/nanocomposites du type Ti-B-N, Ti-B-C, ...
 2. les nanocristallins amorphes (nc-a) du type TiC/a-C :H, TiC/a-C, Si-C-N, ...

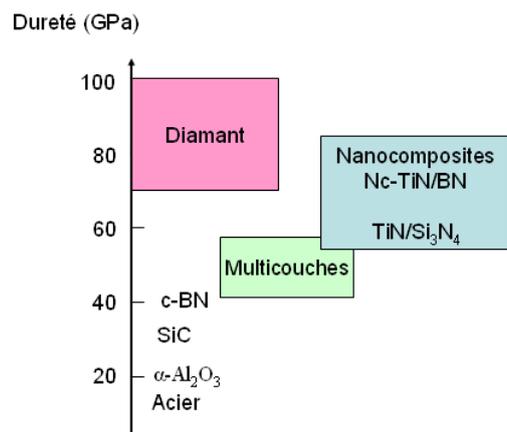


figure 1.9 - Dureté des matériaux

La difficulté est de définir un protocole d'élaboration permettant d'obtenir un matériau stable ayant les propriétés recherchées. Niederhofer et al. [81] et Veprek [110] ont étudié les causes de cette dureté. L'hypothèse avancée repose sur une combinaison entre les frontières des grains du matériau associée à une diminution de la taille des cristaux et à un blocage du glissement entre ces frontières par la formation d'une interface forte entre les différents composants. Sans cette interface, on constate généralement un adoucissement quand la taille des cristaux est inférieure à 10-30 nm. Cette hypothèse permet aussi d'expliquer les propriétés des revêtements nanostructurés :

- leur stabilité jusqu'à 1000°C lorsqu'ils sont constitués de nitrures non miscibles entre eux,
- leur grande recouvrance élastique (80-94%) et une grande résistance à la formation de fissures.

Ce bilan rapide sur les dépôts durs met en exergue la dépendance entre les paramètres de dépôt, les composants et la microstructure. Nous allons maintenant nous intéresser à un point essentiel pour la qualité et la tenue de ces dépôts que sont les contraintes résiduelles.

1.3.3 Contraintes résiduelles

Les dépôts sont soumis à des sollicitations en fonctionnement. Il s’y ajoute des contraintes résiduelles générées par le procédé de dépôt et par la différence de propriétés entre le substrat et les revêtements.

Ces contraintes peuvent être calculées avec la relation suivante ([86] pages 110-111, [98],[34]) :

$$\sigma = \sigma_{st} + \sigma_I + \sigma_{therm} \quad (1.1)$$

avec :

σ_{st} : contraintes d’origine structurale provenant de la différence de réseaux cristallins,
 σ_I : contraintes intrinsèques dues au processus de croissance du dépôt,
 σ_{therm} : contraintes d’origine thermique dues à la différence de coefficients de dilatation dépôt/substrat et de la variation de température.

Les contraintes intrinsèques peuvent avoir plusieurs origines [8] :

- présence d’atomes dans les zones interstitielles (gaz résiduels, réactions chimiques),
- processus de re-cristallisation,
- vides microscopiques et arrangement spatial des dislocations,
- transformation de phase.

Il existe des méthodes de calcul pour obtenir une estimation de ce type de contraintes [86].

Les contraintes thermiques peuvent être approximées dans le revêtement. En écrivant la différence des déformations d’origine thermique autour de l’interface dans le cadre de l’elasticité linéaire et en utilisant la loi de Hooke il vient :

$$\sigma_t = \frac{E_d(\alpha_d - \alpha_s)(T_d - T_u)}{(1 - \nu_d)} \quad (1.2)$$

avec T_d la température de dépôt, T_u la température d’utilisation, α_d , E_d et ν_d respectivement le coefficient de dilatation, le module d’Young et le coefficient de poisson du dépôt et α_s le coefficient de dilatation du substrat.

L’estimation quantitative de ces contraintes résiduelles passe nécessairement par des techniques de mesure, passées en revue par Béranger et Mazille [27]. Elles sont classées en trois catégories :

- méthodes destructives : la pièce est usinée progressivement sans créer de nouvelles contraintes tout en observant son retour à l’équilibre.
- méthodes semi-destructives : un enlèvement local de matière est effectué et la mesure de la relaxation de la matière permet d’en déduire les contraintes,
- méthodes non destructives : la distance interréticulaire du matériau est mesurée à l’aide des techniques de diffraction X et de la relation de Bragg [113]. Cette distance varie avec le taux de contraintes dans le matériau. Il existe aussi des méthodes qui consistent à mesurer la vitesse des ultrasons dans la matière, vitesse qui dépend de l’état de contrainte. Enfin, la plus simple des mesures est la méthode de la flèche associée avec

la formule de Stoney [104]. Elle consiste à mesurer la déformation d'une lame mince après dépôt et ainsi remonter aux contraintes dans le revêtement.

1.3.4 Interface revêtement substrat

L'objectif d'un revêtement ou d'une façon plus générale d'un traitement de surface est de conférer à cette dernière des propriétés fonctionnelles données. L'interface entre le revêtement et le substrat détermine l'adhérence du dépôt. Il existe quatre familles d'interface [86, 80], définies comme suit :

1. l'interface abrupte : elle correspond à un changement brutal de composition chimique entre le dépôt et le substrat sur une distance de 0.2-0.5 nm. Ce type d'interface présente une très faible adhérence car due uniquement aux forces de Van Der Walls.
2. l'interface diffusion : elle est caractérisée par changement graduel de la composition chimique dans la zone d'interface. Une variation graduelle est aussi observée dans les propriétés mécaniques (module d'Young, coefficient de dilatation) ainsi qu'une diminution des contraintes résiduelles thermiques et mécaniques (voir 1.3.3). Ce type d'interface présente une très bonne adhérence intrinsèque et en service.
3. l'interface composée : elle résulte de la formation d'un composé chimique entre le dépôt et le substrat. Ce type d'interface nécessite une diffusion au préalable. La formation d'un nouveau composé peut provoquer des contraintes résiduelles mécaniques et éventuellement une formation de fissures à l'interface. Généralement, ce type d'interface présente une bonne adhérence.
4. l'interface pseudo-diffusion : elle est définie par un changement graduel de la composition chimique durant le dépôt. Les traitements par diffusion appartiennent à cette catégorie mais il n'y a pas de dépôt à la surface.

L'adhérence est meilleure en cas de continuité dans la composition du revêtement et du substrat et dans les propriétés mécaniques.

Outre ces aspects, l'interface joue également un rôle thermique important. Le rôle de la microstructure formée lors du dépôt est considérable. L'interface est une couche de transition hétérogène, siège de défauts, dislocations, lacunes et composés d'inter-diffusion. Elle provoque donc de fortes chutes de conductivité. Le procédé de dépôt sera donc là aussi très important sur l'évolution des propriétés thermiques.

Un moyen de limiter au maximum le rôle de l'interface est d'utiliser un gradient de propriétés sur une épaisseur plus importante. En effet, le classement a montré que plus l'interface est diffuse, meilleurs sont l'adhérence et la conductivité thermique. La limite à ce concept est la disparition totale de l'interface, comme dans le cas des procédés de diffusion.

1.3.5 Matériaux à gradient de propriétés

Apparu en 1984 au Japon pour des applications aéronautiques et spatiales à très haute température, ce type de revêtement est plus connu sous le nom de FGM (*Fonctionnally Graded Material*). Ce concept est en plein développement et la majorité des publications

le concernant est apparue ces dix dernières années. Les barrières thermiques sont la principale application de ce type de revêtement. L'objectif est d'éviter la forte différence entre les propriétés thermiques de la céramique et celles de l'acier ou du titane, qui peut créer des phénomènes de délamination. Shodja et al. [103] a étudié les contraintes thermomécaniques dans un système FGM/substrat soumis à un chargement hertzien glissant et un échauffement au niveau du contact. Il apparaît que ce type de solution est plus résistant à la fatigue thermique et mécanique que les revêtements classiques.

La tribologie est un champ d'application important des FGMs. Guler [60, 61] a étudié le

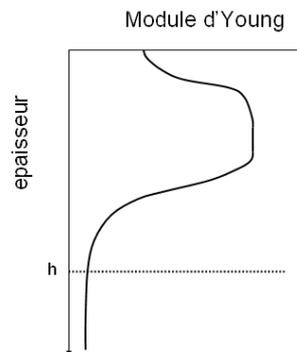


figure 1.10 - *Variation optimale du module d'Young dans un revêtement, d'après [102]*

contact de deux massifs revêtus avec des revêtements à gradient de propriétés en fonction du type de variation des propriétés mécaniques dans la couche. Schwarzer [102] a montré qu'une couche avec un module d'Young variable selon la profondeur avec une valeur au niveau de l'interface définie par celle du substrat, passant par un maximum puis diminuant à nouveau vers la surface, est la plus adaptée pour protéger une pièce soumise à de forts chargements normaux et tangentiels (cf figure figure 1.10). Cette variation (valeur maximale, épaisseur) doit être adaptée en fonction des propriétés du substrat et du chargement. Ce type de modulation des propriétés est maintenant réalisable avec certains matériaux. Linss et al. [76] a montré que les propriétés d'un revêtement de B-C-N variaient d'un facteur 3 dans le cas amorphe en fonction du taux d'azote présent dans le gaz de l'enceinte de dépôt. En faisant varier ce taux au cours du processus, il est possible de moduler les propriétés mécaniques du revêtement.

1.3.6 Conclusion

Les deux dernières sections ont montré que la composition, la microstructure et les propriétés mécaniques et thermiques d'un dépôt varient suivant le traitement utilisé ou les matériaux mis en oeuvre. De plus, ces mêmes propriétés vont varier dans l'épaisseur en fonction du type de technique employé. Les procédés de diffusion forment un gradient de propriétés sur plusieurs centaines de micromètres, alors que les dépôts par CVD ou PVD forment des couches homogènes, avec une interface de quelques centaines de nanomètres. Ces observations montrent que dans tous les cas, une interface brutale diminue les propriétés d'adhérence des couches.

Enfin, les contraintes résiduelles ont un rôle très important dans l'élaboration, la tenue et les propriétés des dépôts. Il est donc important de les quantifier tout comme il est

important de quantifier les propriétés mécaniques et thermiques de ces couches afin de pouvoir effectuer une sélection objective.

1.4 Méthodes de caractérisation

La section précédente nous a permis d'établir qu'il n'est pas possible de déterminer les propriétés d'un revêtement à partir de sa composition chimique ou en le comparant avec les matériaux massifs. Pour utiliser un modèle, il faut déterminer des valeurs globales. Pour cela, il existe des familles d'essais instrumentés, à différentes échelles, développées afin de caractériser mécaniquement les revêtements. L'exploitation des données issues de ces essais repose sur des modèles théoriques, eux-mêmes basés sur des lois de comportement. Nous en analyserons les conséquences.

Les tests doivent s'adapter à la mesure souhaitée (caractérisation de la surface, du volume ou de la tenue de l'interface) et être représentatifs des conditions de service auxquelles la pièce sera soumise. De plus, l'échelle microstructurale associée aux revêtements ainsi que leur grande homogénéité chimique leur confèrent des propriétés très supérieures à celles des matériaux massifs de même composition. Il est donc nécessaire de caractériser les dépôts sur le substrat à épaisseur et traitement donnés. Nous allons évoquer les différentes techniques disponibles.

1.4.1 Caractérisation des propriétés mécaniques

Différentes techniques permettent de caractériser le module d'Young réduit, l'adhérence d'un revêtement à un substrat, de relier le chargement à un endommagement critique ou, plus récemment, de caractériser le tenseur d'élasticité d'une couche. Nous allons décrire brièvement les techniques les plus utilisées.

Indentation

Le principe du test d'indentation est simple : un indenteur dur est chargé normalement sur un échantillon dont les propriétés sont inconnues. La charge est augmentée graduellement jusqu'à une charge limite. La surface de l'empreinte laissée par l'indenteur permet de calculer la dureté du matériau. Le volume contraint lors du test est très important, ce qui pose un problème pour un système revêtement/substrat. La mesure des propriétés d'un revêtement exige la réduction de la taille de l'indenteur. Les tests de micro-dureté ont donc été développés dans cet objectif. Néanmoins, l'évaluation des propriétés d'un dépôt fin (inférieur à $10\ \mu\text{m}$, [29, 50]) reste très complexe. La taille du contact est du même ordre de grandeur que les dimensions des rugosités de surface. L'exploitation des mesures en est fortement perturbée.

La génération suivante des essais a permis de limiter l'influence du substrat : c'est la technique de **nanoindentation**, développée au début des années 80 par Loubet et al. [77]. Le principe reste identique, sauf que la charge, la profondeur de pénétration, le temps et quelquefois la raideur de contact sont contrôlés en continu. La charge appliquée en fonction de la pénétration est enregistrée (cf figure 1.11). L'aire déformée est calculée à partir de la géométrie de l'indenteur.

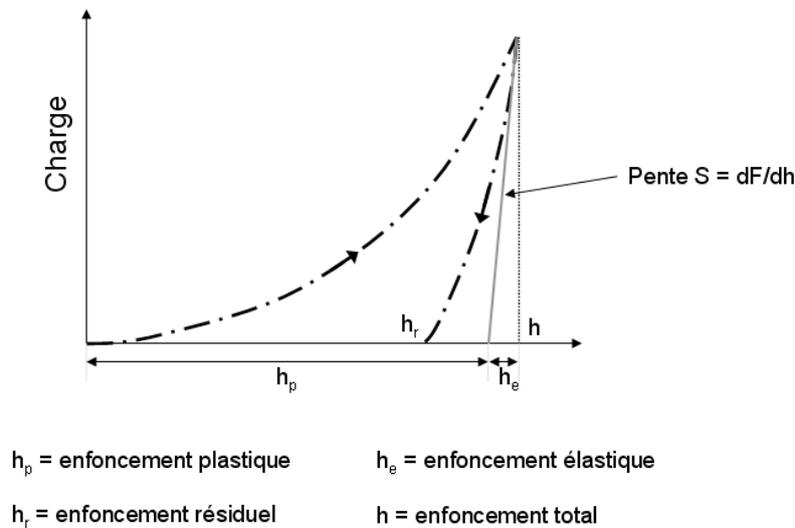


figure 1.11 - Principe de la mesure par nanoindentation, d'après [27]

L'étape suivante est la mesure dynamique, développé au début des années 90 par Oliver et Pharr [83]. Elle permet de mesurer les propriétés d'élasticité du matériau à différentes profondeurs en surimposant une oscillation de petite amplitude à fréquence assez élevée au signal continu qui contrôle la charge de l'indenteur.

La principale difficulté de ces techniques repose sur les modèles utilisés pour extraire la valeur du module d'Young. Ils n'intègrent généralement pas les contraintes résiduelles ou les défauts de géométrie de l'indenteur et de la surface. Pour palier à ces lacunes, la nanoindentation est de plus en plus souvent couplée avec des simulations numériques du contact [8] pour tenir compte des différents phénomènes qui composent la réponse du matériau.

Bull [29] conclut que pour s'affranchir complètement de l'influence du substrat sur les propriétés élastiques mesurées dans le revêtement, la pénétration de l'indenteur doit être inférieure à 1% de l'épaisseur du dépôt. Ce rapport est d'environ 10% dans le cas de la détermination de la limite élastique ou de la dureté. De plus, la mesure directe de l'évolution des propriétés en fonction de la profondeur est impossible dans l'état : la valeur mesurée à une profondeur donnée est la somme de la réponse du matériau pour les profondeurs inférieures. Des modèles beaucoup plus complexes sont donc nécessaires pour parvenir à ce type de données [66].

Test de la rayure

Ce test consiste à appliquer un indenteur à la surface d'un dépôt tout en le déplaçant unidirectionnellement sous une charge croissante, jusqu'à provoquer éventuellement le détachement du dépôt du substrat. La charge critique (charge à laquelle se produit le décollement du dépôt) caractérise l'adhérence. Ce test a été proposé par Heavens en 1950 et popularisé par Benjamin et Weaver dans les années 60. C'est le seul test qui donne des résultats permettant de quantifier l'adhérence d'un dépôt et qui peut être utilisé simplement pour un contrôle de qualité dans une production industrielle.

Les paramètres les plus importants d'un test de rayure sont :

- le rayon de l'indenteur,

- la vitesse de déplacement,
- le taux d’augmentation de la charge.

Il n’existe pas de norme pour ce genre de test. La valeur de charge critique servira donc surtout à comparer les revêtements entre eux, car elle dépend non seulement des propriétés du système revêtement/substrat, mais aussi des propriétés intrinsèques de la machine d’essais. En effet, un des paramètres les plus importants de ce type de test est le rayon de l’indenteur. Randall et al. [94] ont montré que la charge critique peut augmenter d’un ordre de grandeur quand le rayon de la pointe passe de 20 à 200 μm . Malgré la complexité

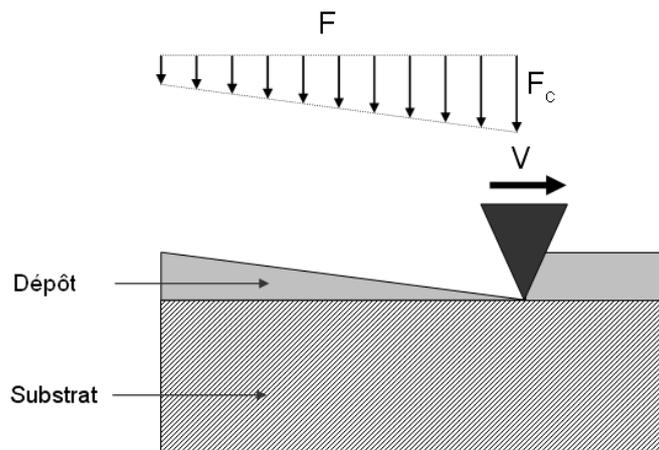


figure 1.12 - Test de rayure

des phénomènes mis en jeu au cours de l’essai de rayure, ce test fournit un classement des différents revêtements sur un même substrat pour les conditions de chargement conduisant à un endommagement A. L’extrapolation de ce classement à d’autres conditions de chargement mettant en jeu des mécanismes d’endommagement différents de A est particulièrement délicate.

Essais in-situ

Ce sont des essais de traction ou de flexion trois points qui sont effectués sous microscope. Les observations in-situ permettent de suivre en continu l’endommagement du dépôt [100] et de mesurer précisément les contraintes et les déformations appliquées au système.

Pour analyser les résultats, la fissuration du revêtement est observée. Quand la déformation dépasse une valeur critique (sortie du domaine élastique), il apparaît des fissures régulièrement espacées ; ce phénomène est appelé fissuration transversale primaire. Pour des déformations supérieures, le nombre de fissures ne cesse d’augmenter jusqu’à saturation.

L’hypothèse principale de ce type d’essai est la parfaite adhérence du dépôt sur le substrat. Cette hypothèse permet de calculer les contraintes dans la couche, auxquelles s’ajoutent les déformations et contraintes résiduelles (voir 1.3.3). Le calcul des propriétés de ténacité et d’élasticité est effectué par méthode inverse à partir de la mesure de la distance à saturation entre les fissures.

Mesure par ondes acoustiques

La mesure par ondes acoustiques est une méthode non destructive sans contact. Elle est actuellement en plein essor avec le développement de nouveaux modèles [6].

Cette technique consiste à émettre des ondes acoustiques dans le massif par le choc thermomécanique provoqué par des impulsions lasers sur la surface. Les déplacements sont mesurés par un second laser à l'aide des variations de réflectivité afin de déterminer les propriétés par méthode inverse.

Récemment, Reverdy et Audoin [96] ont mis en place une technique qui permet de générer des ondes planes dans le massif. Ce type d'onde est beaucoup plus facile à exploiter car les modèles qui décrivent son comportement sont plus simples. De cette façon, ils ont pu déterminer la matrice d'élasticité d'un matériau hétérogène. Cette technique de mesure sans contact est actuellement appliquée aux problèmes de contrôles non destructifs et aux mesures de propriétés dans des solides hétérogènes (matériaux composites). Ce type de mesure est très avantageux car il permet de mettre en place des essais dans des conditions extrêmes puisque la mesure est sans contact (variation des propriétés avec la température). Des études sont en cours pour l'étendre à la détermination des propriétés des revêtements.

1.4.2 Caractérisation des propriétés thermiques

Les propriétés thermiques des couches minces sont très différentes de celles des matériaux massifs à cause de leur structure spécifique, de la présence d'interfaces (joints de grain, interface revêtement/substrat) et d'hétérogénéités. La conductivité thermique de certains matériaux peut être jusqu'à 100 fois inférieure à celle du matériau massif [40].

Mesurer les propriétés thermiques d'un revêtement est complexe. Les capacités thermophysiques d'un matériau sont caractérisées par les paramètres suivant :

- la conductivité thermique k ,
- la diffusivité thermique D ,
- la chaleur spécifique c_p ,
- l'émissivité e .

La conductivité, la diffusivité et la chaleur spécifique sont liées par la relation $D = \frac{k}{\rho c_p}$

Il existe deux type de méthodes de mesure : les méthodes statiques et dynamiques. Dans le cas statique, un flux thermique q est imposé. Il crée un gradient de température dans le matériau proportionnel à la conductivité. La mesure de la température permet donc d'accéder directement à k . C'est la méthode dite du "fil chaud". Le principal inconvénient de ce type de mesure est sa difficulté de mise en oeuvre.

Les méthodes dynamiques sont dites indirectes. La conductivité est calculée après mesure de la diffusivité, plus facile à déterminer, qui représente la capacité d'un échantillon à transmettre la chaleur plutôt qu'à l'absorber.

Flash laser [62]

Cette technique consiste à envoyer sur un échantillon d'épaisseur connue un flash laser de forte intensité, très court qui chauffe la surface. La température est mesurée sur la face opposée : la diffusivité thermique est inversement proportionnelle au temps mis par

l'impulsion de chaleur pour traverser l'échantillon. Dans le cas d'un massif revêtu, il faut utiliser une méthode inverse avec un modèle multicouche pour pouvoir déterminer la diffusivité du revêtement. Le principal défaut de cette technique est que sa sensibilité est insuffisante pour mesurer les propriétés d'un revêtement dont l'épaisseur est très faible devant celle de l'échantillon. Pour les dépôts minces, il est préférable d'utiliser des méthodes qui s'appliquent directement sur la surface revêtue.

Microscope thermique à sonde locale

Le principe du microscope thermique à sonde locale repose sur celui d'un microscope à force atomique (AFM) équipé d'une pointe-sonde thermique. Le fonctionnement de l'AFM est basé sur la détection des forces interatomiques s'exerçant entre une pointe associée à un microlevier de raideur fixée et la surface d'un échantillon (conducteur, semi-conducteur, isolant). Pour effectuer les mesures thermiques, la pointe classique de l'AFM est remplacée par une sonde thermique munie d'un fil très fin à son extrémité (cf figure 1.13). Les propriétés thermiques de la surface sont proportionnelles à l'intensité nécessaire pour maintenir la sonde à température constante lors du contact avec l'échantillon. La diffusivité est ainsi déterminée par méthode inverse (voir [56, 57]). Cette technique est bien adaptée aux revêtements fins. Par contre, une étude de sensibilité [36] a montré que

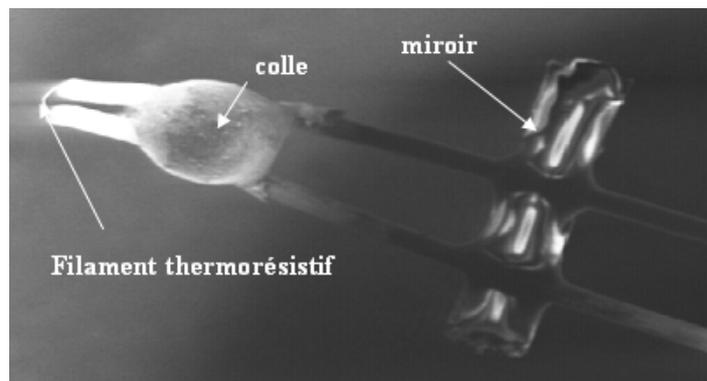


figure 1.13 - Image d'une pointe SThM obtenue par microscopie électronique à balayage [36]

la méthode est fiable pour les matériaux à faible conductivité thermique et beaucoup moins précise pour les revêtements métalliques, qui ont généralement une conductivité importante.

Microscope thermique à photorélectance

La microscopie thermique à photorélectance [92] a été développée au laboratoire d'optique physique de l'ESPCI. Cette technique permet une mesure locale de la diffusivité thermique à l'échelle de quelques micromètres. Elle est donc très bien adaptée à la détermination des propriétés thermiques de revêtements minces. Elle est décrite en détail en annexe A. Cette méthode est peu précise, avec une erreur comprise entre 10 et 25% suivant les mesures. Elle est également sensible à la nature du matériau testé, aux hétérogénéités et phases des matériaux métalliques à cause de la taille de la zone testée.

1.5 Bilan

Ce chapitre fait une étude non exhaustive des différents procédés ainsi que les types de dépôts et traitement utilisés pour traiter la surface des pièces mécaniques. Il met en perspective les propriétés mécaniques et thermiques des revêtements en fonction de leur microstructure et de la technique de dépôt. Tous ces paramètres influent sur la qualité et l'optimisation des traitements en fonction de l'application. Les méthodes de caractérisation n'étant pas toujours représentatives des conditions d'utilisation, le choix du revêtement pour les procédés d'injection n'est pas direct et nécessite d'être optimisé.

Plusieurs auteurs se sont intéressés aux propriétés des traitements sur des aciers de moule. Dobrzanski et al. [45, 46] ont étudié la résistance à l'usure et la tenue de revêtements TiN, CrN et TiN/(Ti,Al)N sur de l'acier X37 poli avec un $Ra = 9$ nm. Ces trois couches obtenues par PVD sont de bonnes candidates pour protéger la surface des moules et augmenter leur durée de vie grâce à leur grande dureté, leur stabilité chimique et leur bonne résistance à l'usure. Les auteurs concluent que la meilleure tenue au substrat est assurée par le Crn, suivi du TiN et du TiN/(Ti,Al)N. Néanmoins ; la qualité de surface de ce dernier est bien meilleure que celle des deux autres grâce notamment à l'absence de micro-gouttelettes sur la surface. Enfin, le TiN a la meilleure tenue à l'usure de tous les échantillons testé.

Ces résultats sont toutefois à prendre avec précaution puisque le banc de test d'usure et de mesure du coefficient de frottement est composé d'un disque revêtu et d'une bille en alliage d'aluminium. Le contact n'est donc pas du tout représentatif des conditions qui règnent dans un moule lors du passage du fluide.

De leur côté, Östürk et al.[105] ont traité un acier de moule par nitruration. La dureté de l'acier est augmentée de 600 à 2000 HV0.01 sur une épaisseur de 50 à 180 μm et sa résistance à la corrosion fortement améliorée. La méthode semble efficace pour protéger la surface, mais aucune mesure n'est donnée pour quantifier les apports de la technique sur le procédé ou la durée de vie des pièces.

Ces études sont souvent peu représentatives de la réalité du contact entre l'acier et le polymère. De plus, aucune analyse n'a été faite sur l'effet du dépôt sur l'écoulement ou les pièces injectées.

Enfin, le fabricant de revêtements BALZERS conseille l'utilisation de revêtements à base de CrN ou de TiN pour les procédés d'injection de matières plastiques. L'objectif est tout d'abord de protéger la surface du moule lors des opérations de nettoyage et de réduire le temps du cycle d'injection. Ici, aucune valeur d'épaisseur de revêtement ni de composition ne sont données. Toutefois, il semble que leur application apporte un gain de productivité et une plus grande durée de vie des inserts.

Il existe une multitude de techniques et de matériaux pouvant être utilisés pour revêtir les moules d'injection. Les couches minces sont de plus en plus utilisées pour des raisons environnementales et grâce au rapide développement des techniques de dépôt CVD et PVD. Il est désormais possible de contrôler finement l'épaisseur de la couche ainsi que ses propriétés mécaniques. Les couches peuvent être optimisées suivant l'application visée. Toutefois, cette optimisation demande une étude approfondie du rôle du revêtement. Pour cela, un modèle est nécessaire afin d'éviter des allers et retours entre dépôts et caractérisations expérimentales. Ce modèle doit pouvoir traiter les phénomènes thermoélastiques ainsi qu'un chargement quelconque sur la surface du solide. Le chapitre suivant a pour

CHAPITRE 1. ETUDE BIBLIOGRAPHIQUE : TECHNIQUES DE DÉPÔTS ET CARACTÉRISTIQUES DES REVÊTEMENTS

objet la mise en place d'un tel modèle dans le cadre de la mécanique des milieux continus et de la thermoélasticité.

milieux continus et de la thermoélasticité.

Chapitre 2

Modèle thermoélastique

2.1 Introduction

Le chapitre précédent est consacré à un état de l'art non exhaustif des revêtements . Il est clair que traitements et dépôts conduisent à des structures qui présentent, à différentes échelles, des évolutions de leurs caractéristiques microstructurales, physiques, chimiques en fonction notamment de la profondeur. Cette caractéristique se traduit par l'existence d'une interface revêtement/substrat et éventuellement revêtement/revêtement dont une classification a été développée au chapitre précédent. Quatre familles d'interfaces sont répertoriées. De façon schématique, une interface est soit une frontière brutale (famille 1) soit une zone où les propriétés évoluent graduellement (cas 2 à 4) (voir figure 2.1). A notre sens, cette ou ces zones de diffusion sont essentielles à la modélisation et la prédiction du comportement d'un système revêtement/substrat. Nous allons dans ce chapitre commencer par poser les problèmes thermique et mécanique dans ce contexte. Nous effectuerons ensuite une revue bibliographique des différents modèles de comportement développés et les méthodes numériques employées.

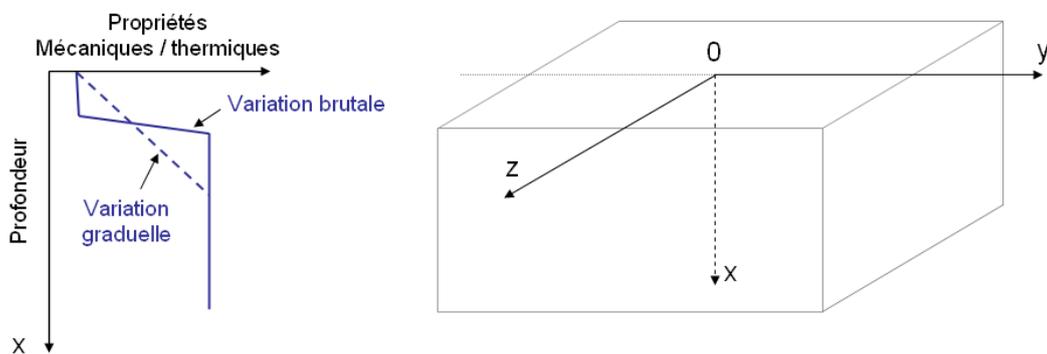


figure 2.1 - Repère et variation de propriétés

2.2 Modèle thermique

Il existe trois modes de transmission de la chaleur : la conduction, la convection et le rayonnement [85].

- La conduction est un transfert de chaleur dans les milieux au repos (solide, liquide ou gaz). C'est le seul mécanisme qui entre en jeu dans les solides opaques ou totalement transparents aux ondes thermiques. Le champ de température dans le massif est déterminé par la résolution des équations de la conduction.
- La convection est un transfert de chaleur dans les milieux liquides ou gazeux en mouvement. On distingue deux types de convection : la convection libre (fluide mis en mouvement par la différence de températures) et la convection forcée (mouvement du fluide imposé).
- Le rayonnement est la transmission de chaleur par ondes électromagnétiques.

La plupart des modèles présentés dans la littérature ne prend pas en compte les phénomènes de rayonnement, ceux-ci étant perceptibles, par rapport aux phénomènes de conduction, seulement à haute température. Par contre, la convection est souvent utilisée comme condition aux limites, soit sous forme de convection libre avec le milieu extérieur, soit sous forme de convection forcée.

2.2.1 Conduction thermique dans un solide à gradient de propriétés

L'équation de la conduction est obtenue en écrivant l'équilibre énergétique d'un volume élémentaire d'un milieu au repos dans un repère fixe. Sous sa forme la plus générale dans un solide avec des propriétés continues, elle s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_i(x) \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + g = \rho c_p \frac{dT}{dt} \quad (2.1)$$

avec g la chaleur produite par une source interne telle que les déformations plastiques, ρ la densité du matériau, c_p sa chaleur spécifique et k sa conductivité thermique. A l'échelle du revêtement, plusieurs hypothèses peuvent être formulées :

- prise en compte de phénomènes transitoires,
- repère galiléen (la dérivée totale $\frac{d}{dt}$ devient une dérivée partielle $\frac{\partial}{\partial t}$ puisque le repère est immobile),
- pas de source de chaleur interne ($g = 0$),
- variation des propriétés seulement dans la direction x .

La simplification de l'équation (2.1) en utilisant ces hypothèses conduit à :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + k(x) \left(\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) = \frac{k(x)}{D(x)} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (2.2)$$

avec D la diffusivité thermique du matériau définie telle que $D = \frac{k}{\rho C_p}$. Le second membre est nul dans le cas stationnaire.

2.2.2 Équation de la convection

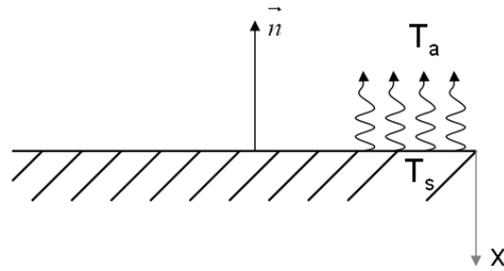
La convection est un phénomène complexe, nécessitant la résolution simultanée d'un problème de thermique et d'un problème de mécanique des fluides. La variation locale de la température d'un liquide induit une évolution de ses propriétés. La conséquence est soit la mise en mouvement du fluide (convection naturelle), soit l'échange de chaleur entre le fluide et les corps en contact dans le cas où le mouvement préexisterait (convection forcée). Ces deux phénomènes sont régis par les mêmes équations mais leurs effets d'un point de vue thermique sont très différents. Enfin, le mouvement du fluide provoque un cisaillement qui génère un flux thermique non négligeable.

Un système de sept équations à résoudre simultanément décrit la convection (équation de la chaleur, équation de continuité, équations d'équilibre et équations d'état). La convection peut aussi être considérée comme une condition aux limites à la surface d'un corps. Dans ce cas, l'échange de chaleur est approximé par un flux linéaire du type :

$$k \frac{\partial T}{\partial \vec{n}} + H(T_s - T_a) = 0 \quad (2.3)$$

avec

- T_a la température ambiante,
- T_s la température de la surface,
- H la conductance de paroi,
- \vec{n} la normale à la surface extérieure.



2.3 Mécanique des milieux continus

L'étude des contraintes dans un milieu élastique repose sur la modélisation mathématique du comportement de ce milieu soumis à diverses sollicitations en contraintes ou en déplacements.

Les relations décrites ici utilisent les **notations d'Einstein**. Les principales règles sont :

- un indice de sommation est appelé indice muet. Dans un monôme, il doit apparaître exactement deux fois ce qui évite d'écrire le signe de la somme (par exemple, $\varepsilon_{11} = \sum_{i=1}^n \varepsilon_{ii}$,
- la dérivée partielle suivant une direction correspondant à l'indice i est remplacée par une virgule avant cet indice. Par exemple, $\frac{\partial u}{\partial x_i}$ s'écrit $\partial_{i,u}$ ou plus simplement $u_{,i}$

Il convient de définir les grandeurs qui caractérisent l'état du milieu, de préciser les hypothèses qui cadrent la théorie de l'élasticité pour établir les équations de base, appelées équations de Lamé (équations d'équilibre exprimées en déplacement).

Le tenseur des contraintes s'écrit de la manière suivante :

$$[\sigma] = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \text{sym} & & \sigma_{zz} \end{pmatrix}$$

Ce tenseur peut être diagonalisé. Il comporte alors seulement trois termes σ_1 , σ_2 et σ_3 appelés contraintes principales. En chaque point, les trois directions principales peuvent aussi être déterminées.

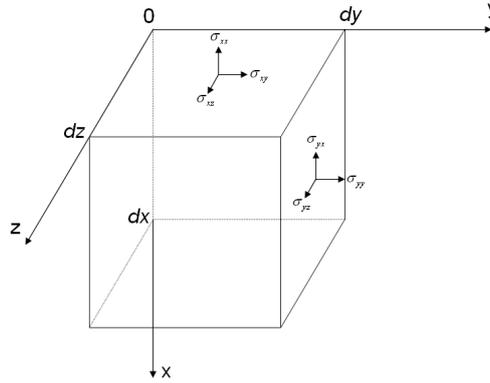


figure 2.2 - Contraintes dans un repère cartésien normé

2.3.1 Équations de Lamé dans un solide homogène

Soit :

- \underline{u} le vecteur des déplacements de coordonnées $\underline{u} = \{u_1 \ u_2 \ u_3\}$
- $[\varepsilon_{ij}]$ le tenseur des déformations. Ce tenseur du 2^{ème} ordre est symétrique et a donc 6 composantes u_{ij} . Il représente toutes les déformations homogènes.
- $[\sigma_{ij}]$ le tenseur des contraintes, symétrique d'ordre 2 à 6 composantes (cf figure 2.2).
- λ et μ les coefficients de Lamé, avec :

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad \text{et} \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (2.4)$$

Les équations de base de la MMC sont obtenues en écrivant l'équilibre d'un élément infiniment petit (figure 2.2) sous certaines hypothèses :

- Hypothèse 1 : Cas stationnaire : une formulation quasi-statique est adoptée. Les effets dynamiques (propagation d'ondes) ne sont pas pris en compte dans le modèle. La loi de conservation du moment (équations d'équilibre en contraintes) s'écrit alors :

$$\sigma_{ij,j} + f_i = 0 \quad i = 1, \dots, 3 \quad (2.5)$$

- Hypothèse 2 : Élasticité linéaire : les effets non-linéaires et les couplages ne sont pas pris en compte. Le comportement du matériau est alors représenté par la loi de Hooke :

$$\sigma_{ij} = \lambda\Theta\delta_{ij} + 2\mu\varepsilon_{ij} \quad (2.6)$$

avec

$$\Theta = \text{tr}(\varepsilon_{ij}) = \frac{\partial u_1}{\partial x} + \frac{\partial u_2}{\partial y} + \frac{\partial u_3}{\partial z}$$

- Hypothèse 3 : Petits déplacements : les déplacements, les déformations et les rotations sont supposés petits devant la taille du massif. Cette hypothèse très souvent utilisée en élasticité simplifie grandement les équations, les grands déplacements étant souvent synonymes d'effets non-linéaires. Le tenseur des déformations s'écrit à partir de la relation de Green-Lagrange :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \{u_{i,j} + u_{j,i}\} \quad i, j = 1, \dots, 3 \quad (2.7)$$

- Hypothèse 4 : forces internes : Les forces internes (f_i) dans le matériau sont négligées. La seule force interne est la gravité, qui, au regard de la taille du massif, est négligeable comparée aux autres forces mises en jeu. L'équation (2.5) s'écrit alors

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad i, j = 1, \dots, 3 \quad (2.8)$$

En remplaçant σ_{ij} par son expression (équation (2.6)) dans l'équation (2.5), on obtient les équations de Lamé, équations d'équilibre exprimées en déplacement [52, 90] :

$$(\lambda + \mu) \theta_{,i} + \mu \Delta u_i = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \mu \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} + (\lambda + \mu) \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 u_j}{\partial x_j \partial x_i} = 0 \quad (2.9)$$

L'avantage principal de cette formulation est d'obtenir seulement 3 équations et la solution est unique. La formulation en contraintes est plus simple mais nécessite de vérifier également les équations de compatibilité (Beltrami-Michel), soit 16 relations au total.

2.3.2 Équations de Lamé généralisées

Une hypothèse est implicitement contenue dans l'écriture des relations (2.9) : les propriétés sont supposées constantes dans le solide, les termes λ et μ sont indépendants de la position. Leur dérivée est également nulle selon ces 3 directions. Dans le cas considéré, les propriétés varient suivant l'épaisseur x du massif. Il faut donc réécrire les équations d'équilibre en intégrant cette variation.

En reportant dans (2.8) la loi de Hooke ((2.6)) nous obtenons :

$$\sigma_{ij} = \lambda \varepsilon_{ll} \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij} \quad (2.10)$$

Finalement, en reportant (2.10) dans les équations d'équilibre sans faire de simplification :

$$(\lambda u_{j,j})_{,i} + (\mu u_{i,j})_{,j} + (\mu u_{j,i})_{,j} = 0 \quad i, j = 1, \dots, 3 \quad (2.11)$$

Dans ces relations, les dérivées partielles s'appliquent également aux coefficients λ et μ qui sont alors des fonctions quelconques de x , y et z .

2.4 Thermoélasticité

2.4.1 Dilatation thermique

La dilatation dans une poutre (une seule dimension) est définie comme le rapport de l'allongement et de la longueur totale pour une variation unitaire de température. Le coefficient de dilatation thermique α est défini par la relation suivante :

$$\frac{d\ell}{\ell} = \alpha(T) dT \quad (2.12)$$

Pour les matériaux solides, la dilatation thermique est faible. On pose $\varepsilon_{th} = \Delta\ell/\ell_0 = \alpha(T - T_0)$, où T_0 est la température initiale, ℓ_0 la longueur initiale et $\Delta\ell$ la variation de longueur due à la température. Il existe une relation similaire en trois dimensions :

$$[\varepsilon_{th}] = \alpha(T - T_0) \mathbb{I} \quad (2.13)$$

où \mathbb{I} est le tenseur unité.

La variation de température est notée dans la suite du manuscrit T telle que $T = (T - T_0)$.

2.4.2 Équations de Lamé généralisées en thermoélasticité

Dans un matériau non contraint avec des bords libres, la variation de température n'entraîne pas de champ de contraintes dans le massif. Au contraire, si les conditions aux limites s'opposent au champ de déplacement, la dilatation provoque la génération de contraintes qui s'ajoutent au champ existant (les effets d'échauffement dus à la déformation sont négligés). La loi de Hooke (eq. 2.6) devient [73] :

$$[\sigma] = [C] : ([\varepsilon] - [\varepsilon_{th}]) \quad (2.14)$$

où $[C]$ est le tenseur de rigidité du quatrième ordre. Le nombre de coefficients à déterminer pour ce genre de tenseur est théoriquement de 81. Toutefois, la condition de symétrie des contraintes et des déformations ainsi que les hypothèses d'orthotropie et d'axisymétrie réduisent ce nombre à 5. En développant la notation tensorielle, la relation suivante, proche de celle de la MMC classique, est obtenue [99] :

$$\sigma_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij} + \lambda\theta\delta_{ij} - (3\lambda + 2\mu)\delta_{ij}\alpha T \quad i, j = 1, \dots, 3 \quad (2.15)$$

De la même manière qu'en mécanique classique, les équations de Lamé généralisées sont obtenues en reportant (2.10) dans les équations d'équilibre et en utilisant (2.15) :

$$(\lambda u_{j,j})_{,i} + (\mu u_{i,j})_{,j} + (\mu u_{j,i})_{,j} - ((3\lambda + 2\mu)\alpha T)_{,i} = 0 \quad i, j = 1, \dots, 3 \quad (2.16)$$

Les propriétés ne varient que dans la seule direction x (profondeur). Cette hypothèse est cohérente avec les conclusions tirées de l'étude bibliographique du premier chapitre sur les traitements de surface. Le système (2.16) devient alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left((\lambda + 2\mu) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial z} \right) \\ + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \left(\frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right) = \frac{\partial}{\partial x} ((3\lambda + 2\mu)\alpha T) \end{aligned} \quad (2.17a)$$

$$\begin{aligned} (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + \mu \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \\ (\lambda + \mu) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial y \partial z} \right) = (3\lambda + 2\mu)\alpha \frac{\partial T}{\partial y} \end{aligned} \quad (2.17b)$$

$$\begin{aligned} (\lambda + 2\mu) \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial z} + \mu \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \\ (\lambda + \mu) \left(\frac{\partial^2 v}{\partial y \partial z} \right) = (3\lambda + 2\mu)\alpha \frac{\partial T}{\partial z} \end{aligned} \quad (2.17c)$$

2.5 Conditions aux limites

D'un point de vue mathématique, les conditions aux limites d'un problème en thermoélasticité sont de deux types :

- conditions aux limites de type Neumann : dérivées imposées. Elles nécessitent un traitement particulier des phases de résolution du problème (flux, contraintes imposées).
- conditions aux limites de type Dirichlet : valeurs imposées. La valeur de l'inconnue est imposée (déplacement, température).

Les conditions de type Neumann sont exprimées et traitées différemment en thermique et en mécanique.

2.5.1 Thermique

Imposer une dérivée en thermique signifie imposer un flux en surface. En effet, le flux thermique s'écrit de la manière suivante :

$$\vec{Q} = -k \frac{\partial T}{\partial n} \vec{n} \quad (2.18)$$

avec : T la température, k la conductivité thermique et \vec{n} la normale extérieure à la surface.

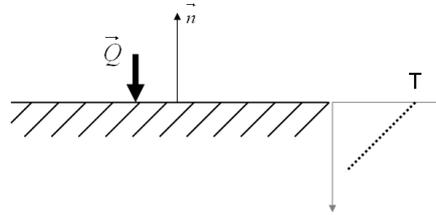


figure 2.3 - Flux à la surface d'un solide

L'équation (2.18) et la figure 2.3 montrent que lorsque le flux est négatif, la variation de température dans le matériau sera aussi négative (température plus importante en surface que dans la profondeur). Un flux négatif en surface correspond donc à une entrée d'énergie dans le massif.

Un flux thermique peut avoir une multitude de sources : rayonnement, convection d'un fluide sur la surface, échange de chaleur par contact, frottement,... Une température imposée est plus facile à traiter numériquement, mais est moins réaliste physiquement. Ce type de condition est utilisé si les bords du solide sont éloignés de la source de chaleur ou si le système modélisé a un circuit de refroidissement capable d'absorber rapidement une grande quantité d'énergie.

2.5.2 Mécanique

Les conditions aux limites mécaniques correspondent soit à un déplacement, soit à une contrainte normale ou tangentielle imposée sur différentes zones. Il existe trois degrés de

liberté en déplacement, il y a donc trois équations à résoudre simultanément pour déterminer les conditions aux limites. Les trois contraintes imposées sur la surface supérieure du

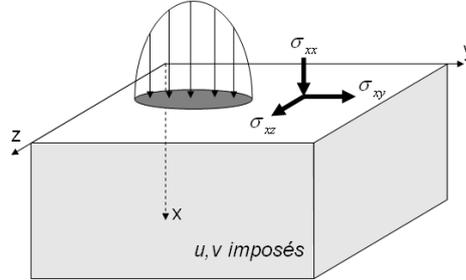


figure 2.4 - Contraintes à la surface

massif (normale suivant x) sont σ_{xx} , σ_{xy} et σ_{xz} (voir figure 2.4). σ_{xx} est appelée contrainte normale ou pression et σ_{xy} et σ_{xz} contraintes tangentes. Elles s'expriment à partir de la relation (2.10) :

$$\sigma_{ij} = \lambda (u_{i,i}) \delta_{ij} + \mu (u_{i,j} + u_{j,i}) - (3\lambda + 2\mu) \alpha T \delta_{ij} \quad i, j = 1, \dots, 3 \quad (2.19)$$

En utilisant l'hypothèse de variation des propriétés seulement suivant la profondeur x, le système (2.19) se simplifie et devient :

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - (3\lambda + 2\mu) \alpha T \\ \sigma_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\ \sigma_{xz} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) \end{cases} \quad (2.20)$$

Les relations (2.20), (2.17), (2.2) et (2.18) décrivent le comportement thermomécanique d'un solide soumis à un chargement mécanique et thermique. Suivant les hypothèses sur la géométrie du solide et les conditions aux limites, plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour résoudre ce système.

2.6 Méthodes de résolution

2.6.1 Solutions analytiques

Méthode des potentiels

La méthode des potentiels consiste à transformer un système d'équations en un système d'équations équivalent plus simple à résoudre. Les inconnues sont exprimées sous forme de fonctions harmoniques (appelées généralement potentiels de déplacement). Pour cela, une propriété fondamentale des équations de Lamé est utilisée : la biharmonicité des composants de l'état élastique, soit :

$$\Delta \Delta \{u\} = 0 \quad (2.21)$$

avec \underline{u} le vecteur des déplacements.

Saada [99] a montré que si les forces de volume dérivent d'un potentiel (et plus particulièrement sont nulles), toutes les fonctions de la théorie de l'élasticité sont elles aussi biharmoniques.

Dans les cas les plus généraux, cette méthode permet de déterminer une solution analytique au problème d'élasticité. Gatina [52] et Bettayeb [17] ont comparé différents potentiels proposés par différents auteurs tels que Papkovitch, Galerkin, Kelvin, Grodski [17] pour la résolution des équations de Lamé. Leur utilisation permet généralement de se ramener à une équation de Poisson ou de Laplace bien connue.

Dans le cas d'un massif revêtu, l'hypothèse de massif semi-infini n'est pas applicable. Il faut alors utiliser les fonctions de Green en deux dimensions et les potentiels de Papkovitch-Neuber en trois dimensions [30].

Plumet [90, 91] et Leroy [74, 75] ont résolu directement l'équation (2.21) alors que Gatina et Bettayeb ont utilisé les potentiels de Grodsky. Nogi et Kato [82] ont utilisé les potentiels de Papkovitch-Neuber pour formuler le problème de contact entre une surface rugueuse et un solide multicouche en trois dimensions.

Dans tous les cas, le massif multicouche est considéré comme une succession de couches avec des propriétés homogènes et liées entre elles par la continuité des déplacements et des températures aux frontières.

Analogie avec les ressorts : extension en trois dimensions

Leroy [74] a mis en place une méthode analytique simple pour calculer les contraintes à l'interface d'un massif semi-infini et d'une couche mince en 2D à partir des valeurs obtenues dans le cas d'un massif semi-infini non revêtu. Elle permet de calculer les contraintes quand l'épaisseur de la couche est inférieure à un dixième de la largeur de contact (cas d'un contact hertzien). Les calculs sont très rapides et permettent d'obtenir une première approximation des contraintes si le revêtement respecte les hypothèses (couche mince, adhérence parfaite entre le revêtement et le substrat). Ce modèle est basé sur une analogie avec des ressorts dont les raideurs sont égales aux modules d'Young E_r et E_s du revêtement et du substrat respectivement.

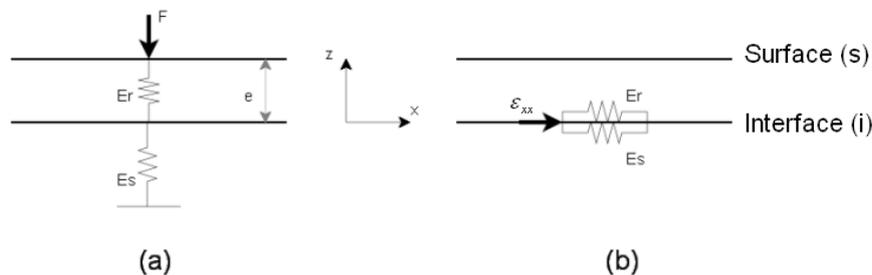


figure 2.5 - Analogie avec les ressorts

Les contraintes déterminées à l'interface sont σ_{zz} , σ_{xx} et σ_{yy} .

Calcul de la contrainte σ_{zz} :

Le comportement du matériau bicouche est assimilé à celui de deux ressorts en série soumis à une charge F (figure 2.5a). La charge est transmise intégralement d'une extrémité à l'autre du ressort. L'hypothèse de couche mince permet d'écrire $\sigma_{zz}^s \approx \sigma_{zz}^i$. L'augmentation de l'épaisseur du revêtement s'accompagne d'une diffusion de la charge appliquée et l'analogie avec les ressorts perd progressivement de sa pertinence pour être finalement trop éloignée.

Calcul de σ_{xx} et σ_{yy} :

Il y a continuité des déplacements horizontaux u_x et u_y entre les deux couches adhérentes. Le problème se limite à une analogie avec deux ressorts horizontaux connectés en parallèle et soumis à une déformation ε_{xx} ou ε_{yy} identique (figure 2.5b).

Les contraintes $\sigma_{xx,r}^i$ et $\sigma_{xx,s}^i$ (contraintes à l'interface dans le revêtement et dans le substrat) sont différentes si $E_r \neq E_s$ ou si $\nu_r \neq \nu_s$. Les déformations ε_{xx} et ε_{yy} sont supposées égales dans un massif revêtu et non-revêtu pour des épaisseurs inférieures à $0.1 \times a$, avec a la demi-largeur de la zone de contact.

Enfin, Leroy suppose que les contraintes $\sigma_{xx,s}^i$ et $\sigma_{yy,s}^i$ ont les mêmes valeurs que dans un massif non-revêtu. Il faut maintenant exprimer ε_{zz} en fonction des paramètres connus.

Loi de Hooke inverse :

$$\varepsilon_{zz} = \frac{1}{2\mu} \sigma_{zz} - \frac{1}{2\mu(3\lambda + 2\mu)} \text{tr}(\sigma_{ij})$$

soit :

$$\varepsilon_{zz} = \frac{\lambda + \mu}{\mu(3\lambda + 2\mu)} \sigma_{zz} - \frac{\lambda}{2\mu(3\lambda + 2\mu)} (\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) \quad (2.22)$$

Les expressions de σ_{xx} et σ_{yy} en fonction des déformations (équation (2.6)) sont introduites dans l'équation (2.22) et il vient :

$$\varepsilon_{zz} = A (\sigma_{zz} - \lambda (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})) \quad \text{avec } A = \frac{\lambda + \mu}{\mu\lambda + 2\mu^2 + \lambda^2} \quad (2.23)$$

Soit :

$$\varepsilon_{zz} = A (\sigma_{zz} - \lambda (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy})) \quad (2.24)$$

$$\sigma_{xx} = (\lambda + 2\mu) \varepsilon_{xx} + \lambda (\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.25)$$

$$\sigma_{yy} = (\lambda + 2\mu) \varepsilon_{yy} + \lambda (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{zz}) \quad (2.26)$$

Les variables ε_{xx} , ε_{yy} et σ_{zz} sont connues à l'interface. Ce système est résolu en remplaçant ε_{zz} par son expression (équation 2.24) dans les équations (2.25) et (2.26).

On obtient ainsi les valeurs des différences de contraintes $\Delta\sigma_{xx}$ et $\Delta\sigma_{yy}$ à l'interface substrat-revêtement avec $\Delta\sigma_{xx} = \sigma_{xx,r}^i - \sigma_{xx,s}^i$.

Bilan

Les méthodes analytiques telles que les méthodes basées sur les potentiels ou l'analogie avec les ressorts sont avantageuses en terme de temps de calcul. Les résultats sont immédiats. De plus, la solution est continue. Par contre, leur domaine d'application est restreint à cause des différentes hypothèses utilisées pour déterminer les solutions.

2.6.2 Méthodes semi-analytiques : transformations intégrales

Définition

Le principe de la transformation intégrale est de travailler non plus dans l'espace réel, mais dans l'espace transformé en diminuant le nombre d'inconnues. Les inconnues sont projetées sur une base orthogonale de l'espace fonctionnel et la résolution est conduite sur l'équation transformée. Cette opération a pour but de supprimer des dérivées ou de diminuer le nombre de variables et ainsi résoudre le problème plus facilement. Il existe plusieurs types de transformées intégrales : transformée de Laplace, de Fourier, en ondelettes, transformée discrète de Fourier, transformée en z ...

La formulation générale des transformations intégrales est la suivante :

$$F(\tau) = \int_a^b K(\tau, t)f(t)dt$$

avec :

- $K(\tau, t)$ le noyau,
- $F(\tau)$ la fonction projetée dans l'espace des τ ,
- $f(t)$ la fonction originale.

La résolution des équations différentielles avec cette méthode est résumée à l'aide du schéma de la figure 2.6.

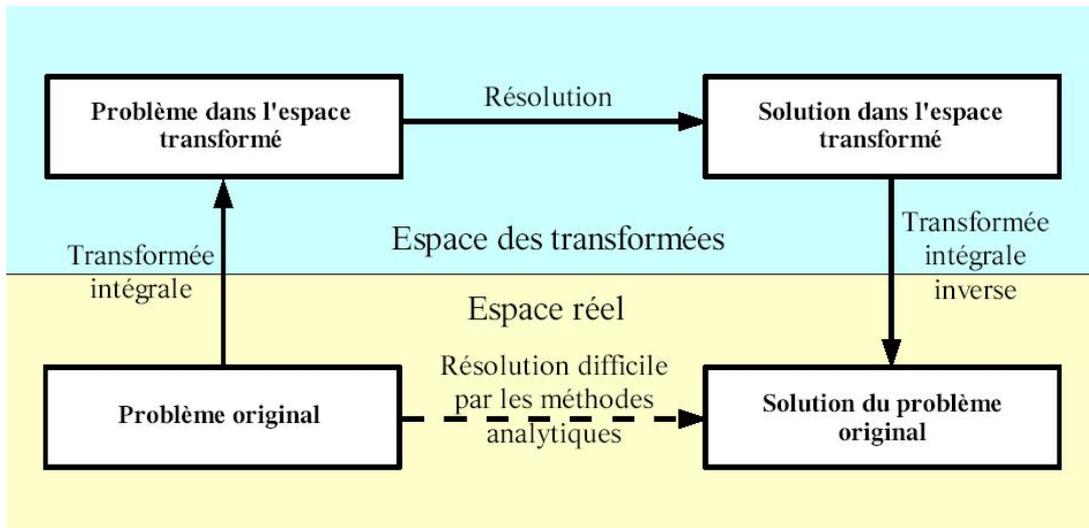


figure 2.6 - Principe de l'utilisation des transformées intégrales

Transformée de Fourier

Définition : La transformée de Fourier transforme une fonction dans le domaine temporel en une fonction dans le domaine des fréquences par la relation suivante (transformée continue) :

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-i\omega t}dt = \mathcal{F} |f(t)| \quad (2.27)$$

Il existe une transformation inverse qui permet de repasser du domaine fréquentiel au domaine temporel :

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega = \mathcal{F}^{-1} |F(\omega)| \quad (2.28)$$

L'avantage de la méthode des transformées de Fourier est le temps de calcul. Le nombre d'opérations à effectuer est d'ordre $N \log_2 N$, avec N le nombre total de points de discrétisation, si on utilise un algorithme de transformation rapide (FFT). A titre de comparaison, une résolution avec des méthodes itératives classiques (type Newton-Raphson) coûte N^2 voire N^3 opérations.

Transformation de Fourier rapide (FFT) : La FFT est l'un des quelques algorithmes qui ont provoqué une véritable révolution dans le champ technique lors de leur publication. Son utilisation ramène le calcul de la transformée de Fourier discrète de N^2 à $N \log_2 N$ opérations. Cette réduction de complexité suffit à faire passer d'impossible à facilement possible nombre de problèmes.

Pour accélérer le calcul, les nombreux algorithmes existants utilisent les propriétés de symétrie des fonctions trigonométriques. Pour une description complète, le lecteur peut se reporter à l'abondante littérature sur le sujet (par exemple [84]). Les algorithmes utilisant la FFT ont été utilisés dans les calculs de tribologie par Leroy [74] en 1989, Ju et Farris [68] en 1996 et de nombreux autres auteurs pour calculer le champ de pression dans un contact. Cependant, la FFT introduit une contrainte : le nombre de points de calcul doit être une puissance de 2.

Résolution du problème thermoélastique

Plumet et Leroy ont utilisé les transformées intégrales de Fourier en 2D et 3D pour réduire le problème à une seule variable (dans le cas 2D, une transformée est appliquée, en 3D, deux successivement). Il existe des solutions analytiques aux équations transformées dans l'espace des fréquences pour le cas thermoélastique 2D et le cas élastique 3D. Les inconnues dans l'espace réel sont ensuite déterminées par transformée inverse à l'aide de la transformée inverse rapide (FFT, cf 2.6.2). Le passage de l'espace réel à l'espace transformé est analytique. Par contre, le passage inverse est conduit à l'aide de techniques numériques. Cette méthode devient lourde si le nombre de couches est important, car il faut exprimer les conditions aux limites entre chaque couche. Pour pallier ce problème, Villechaise [112] a mis en place une méthode matricielle réutilisée pour un massif multicouche en deux dimensions par Leroy [74] puis en trois dimensions par Plumet [90]. L'utilisation de ces techniques devient délicate si les sollicitations sont variables dans le temps et non périodiques (régime transitoire). Leroy a utilisé les transformées de Laplace, mais les algorithmes de transformation inverse ne sont pas aussi efficaces que ceux utilisés pour la transformée de Fourier. En particulier, il faut des conditions aux limites variant linéairement.

Bilan

Les méthodes semi-analytiques présentent un bon compromis entre le temps nécessaire à la résolution et la complexité du problème.

Par contre, elles imposent un certain nombre d'hypothèses sur la géométrie . Les couches doivent être d'épaisseur constante, homogènes et isotropes. La prise en compte d'un gradient de propriétés est possible avec une loi de variation définie (type loi puissance ou exponentielle), mais nécessite la reformulation du modèle. Enfin, la géométrie du solide est imposée, soit parallélépipédique, soit cylindrique en utilisant les transformées de Hankel [10], équivalentes aux transformées de Fourier dans un repère axisymétrique, ou la méthode des potentiels [17].

2.6.3 Méthodes numériques : discrétisation des équations

Pour résoudre numériquement un problème, il faut diviser l'espace en mailles élémentaires dans lesquelles les équations sont résolues localement. La méthode de discrétisation la plus utilisée actuellement est la méthode des éléments finis. Elle s'adapte à n'importe quelle géométrie, la taille du maillage est modifiée en fonction du problème posé, des lois de comportement (élasticité, visco-, plasticité) peuvent être considérées. L'inconvénient principal de ce type de résolution est le temps de calcul. Dans le cas de géométries simples, la méthode des différences finies est plus simple à mettre en oeuvre et aussi efficace. Le domaine est maillé en rectangles de mêmes dimensions.

Les techniques de discrétisation sont utilisées pour écrire un problème continu sous la forme d'un système d'équations linéaires. La taille de ce système est directement proportionnelle à celle du maillage.

Méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis est très utilisée de nos jours. Il existe de nombreux logiciels qui permettent de résoudre les problèmes de thermoélasticité pour des solides de géométrie complexe. De nombreux ouvrages traitent de cette méthode. Nous n'en exposerons ici que les principes de base.

Cette méthode consiste à rechercher une solution approchée sous la forme d'un champ défini par morceaux sur des sous-domaines Ω_i du domaine de résolution Ω . Dans chaque sous-domaine, le champ est déterminé en un nombre fini de points appelés noeuds. Le champ local est interpolé entre les noeuds. Le sous-domaine muni de son interpolation est appelé élément. Des noeuds sont souvent utilisés aux frontières des éléments pour réduire le nombre d'inconnues (il y a des noeuds communs à plusieurs éléments) et assurer une continuité C_0 entre les éléments.

Une des particularités de cette technique est d'utiliser une formulation intégrale (appelée aussi formulation variationnelle ou formulation faible) des équations du problème et de ses conditions aux limites. Il a en effet été montré que

$$\int_{\Omega} \phi(x) h(x) dx = 0 \quad \forall \phi(x) \quad \Leftrightarrow \quad h(x) = 0 \quad \forall x \in \Omega \quad (2.29)$$

avec $\phi(x)$ une fonction quelconque, et $h(x) = 0$ le problème sous sa forme locale. Cette égalité est écrite pour chaque élément puis le système est assemblé pour tous les éléments. Cette formulation variationnelle peut être écrite à partir de la formulation locale ou en utilisant une approche physique, comme c'est le cas en mécanique où l'on utilise le théorème des puissances virtuelles pour obtenir la formulation faible du problème d'élasticité.

Discrétisation par différences finies

Nous traitons dans ce qui suit du cas bidimensionnel, plus facile à représenter, le cas tridimensionnel s'en déduisant en rajoutant simplement une dimension d'espace.

Soit un milieu plan sur lequel on a appliqué un maillage de pas Δx et Δy tel que représenté sur la figure 2.7.

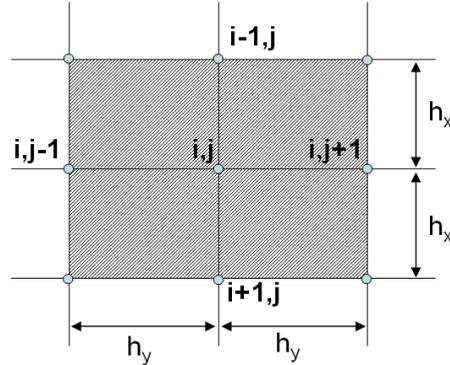


figure 2.7 - Discrétisation de l'espace

La discrétisation de l'équation de la thermique, sous sa forme la plus simple, $\Delta T = 0$, nécessite l'expression en chaque point (i,j) de la température et de ses dérivées partielles :

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}(i,j) = \frac{T_{i+1,j} + T_{i-1,j} - 2T_{i,j}}{h_x^2} + O(h_x^2) \quad (2.30a)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}(i,j) = \frac{T_{i,j+1} + T_{i,j-1} - 2T_{i,j}}{h_y^2} + O(h_y^2) \quad (2.30b)$$

L'équation de la thermique dans sa forme la plus simple s'écrit alors :

$$\Delta T = 0 \iff \frac{T_{i+1,j} + T_{i-1,j} - 2T_{i,j}}{h_x^2} + \frac{T_{i,j+1} + T_{i,j-1} - 2T_{i,j}}{h_y^2} = 0$$

De cette expression, la température au point (i,j) s'écrit alors, avec $h_x = h_y$:

$$T_{i,j} = \frac{T_{i-1,j} + T_{i+1,j} + T_{i,j-1} + T_{i,j+1}}{4} \quad (2.31)$$

Cet exemple simple permet de comprendre la méthode. Les dérivées dans les deux directions sont d'ordre 2, c'est-à-dire que l'erreur introduite par la discrétisation de l'équation est de l'ordre de (h^2) . Ces expressions sont obtenues à partir des formules de Taylor (décomposition de fonctions avec leurs dérivées) tronquées à l'ordre 2. Pour diminuer l'erreur de discrétisation, il faut diminuer le pas h , ce qui a pour effet d'augmenter le nombre de points de discrétisation et donc la taille du système à résoudre.

L'expression (2.31) est écrite en chaque point pour former un système d'équations linéaires. Celui-ci peut s'exprimer à l'aide de matrices sous une forme plus générale :

$$[A]^h \{T\}^h = \{f\}^h \quad (2.32)$$

où A est une matrice, T le vecteur des inconnues et f le second membre. Dans l'exemple précédent, $[A]$ représente l'opérateur laplacien (somme des dérivées secondes) Δ , et f est nul. ^h signifie que l'équation est approximée sur une grille de pas h . La solution dépend donc de la taille de la grille. Il existe différentes méthodes pour résoudre ce système. Les plus utilisées sont décrites dans le paragraphe suivant.

2.6.4 Méthodes numériques : résolution du système d'équations

Les méthodes de résolution du système d'équations sont décrites en détail par Ames [4], Venner [109] et Brandt [24]. Ces méthodes peuvent être séparées en deux catégories distinctes : résolution directe et résolution itérative.

La résolution directe consiste à inverser la matrice $[A]$ ($\{T\} = [A]^{-1}\{f\}$) en utilisant un algorithme de type Gauss. L'inversion d'une matrice est une opération très coûteuse en terme de temps de calcul. Ce type de résolution ne s'applique que pour des petits systèmes ou des systèmes linéaires.

Les méthodes itératives consistent à appliquer un algorithme de manière répétée. Ce genre de méthode peut utiliser les propriétés de la matrice $[A]$, souvent "creuse". Toutes les itérations commencent par une solution initiale qui est modifiée à chaque itération suivant certaines règles et qui doit converger vers la solution exacte. La vitesse de convergence est un critère important dans l'évaluation des différentes techniques de relaxation. Nous allons évoquer brièvement les techniques de relaxation les plus employées.

Relaxation de Jacobi

Pour expliquer la méthode nous allons prendre un exemple [109] avec une seule dimension. Celui-ci pourra être facilement étendu en 2 ou 3 dimensions. Soit un problème modèle dont la solution est connue analytiquement, l'équation de Poisson :

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = f(x)$$

Pour chaque point de la grille x_i , avec $i = 1, n-1$, on résout l'approximation discrète u_i de $u(x_i)$ avec

$$\frac{u_{i-1} - 2u_i + 2u_{i+1}}{h^2} = f_i$$

Posons \bar{u}_i la solution calculée à l'itération $k+1$ au point i et \tilde{u}_i la solution de l'itération k au point i . A chaque point, une nouvelle approximation \bar{u}_i de u_i (solution exacte) est calculée avec la relation suivante :

$$\bar{u}_i = \tilde{u}_i + \omega \delta_i \quad \text{avec} \quad \delta_i = -\frac{r_i h^2}{2} \tag{2.33}$$

où ω est le facteur de relaxation et r_i le résidu défini comme

$$r_i = f_i - \frac{\tilde{u}_{i-1} - 2\tilde{u}_i + \tilde{u}_{i+1}}{h^2}$$

Jacobi utilise les valeurs calculées durant l'itération k pour calculer la nouvelle valeur de \bar{u}_i à l'itération $k+1$. Cette méthode permet le calcul en parallèle des différents points du maillage. $\omega < 1$ correspond à une sous-relaxation et $\omega > 1$ à une sur-relaxation.

Relaxation de Gauss Seidel

La différence avec la méthode précédente est assez minime, mais a des conséquences importantes. Le calcul du résidu s'écrit maintenant :

$$r_i = f_i - \frac{\bar{u}_{i-1} - 2\tilde{u}_i + \tilde{u}_{i+1}}{h^2}$$

Au niveau du stockage, une seule matrice est nécessaire, alors qu'il en faut deux pour la relaxation de Jacobi. Dans le cas des problèmes d'élasticité et de thermique, la convergence de cette méthode est meilleure.

Vitesse de convergence

Le nombre d'opérations nécessaires pour résoudre le système d'équations avec ces méthodes varie de N^2 jusqu'à N^3 opérations pour les inversions directes de la matrice, c'est-à-dire que si le nombre de points est multiplié par deux dans chaque dimension, le temps de calcul est dans le meilleur des cas multiplié par 16 dans un système en deux dimensions et par 64 dans un système en trois dimensions (figure 2.8).

Les solveurs dits efficaces, dont le temps de calcul augmente proportionnellement au nombre de points de discrétisation (figure 2.8(b)) permettent de réduire l'effort de calcul. Un des moyens pour parvenir à cet objectif est l'utilisation des techniques multi-échelles. Le paragraphe suivant montre plus en détail la manière dont elles fonctionnent et pourquoi elles apportent un gain en temps de calcul. Ces méthodes deviennent incontournables quand le problème est trop grand (nombre d'inconnues important).

Solveurs efficaces

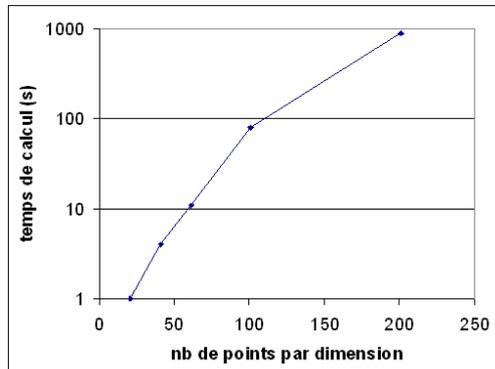
Les trois techniques les plus connues pour réduire le temps de calcul sont :

1. la transformée de Fourier rapide,
2. la transformée en ondelettes,
3. les méthodes multigrilles.

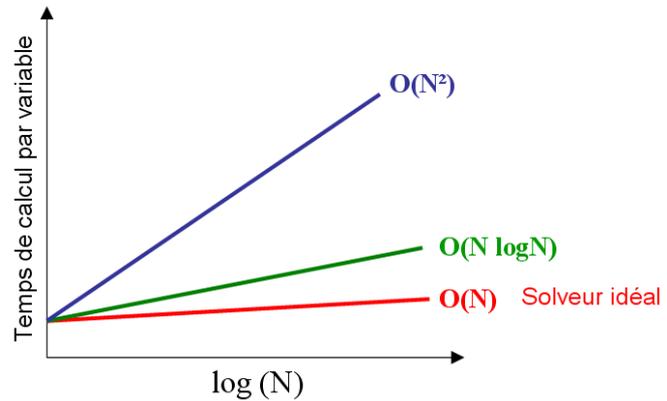
La première a été décrite dans le paragraphe 2.6.2. Les deux suivantes sont expliquées brièvement par la suite.

Transformée en ondelettes La théorie des ondelettes peut être vue comme une généralisation des transformées de Fourier. Elle est assez récente et en pleine évolution. Elle provient, comme la théorie de Fourier, du traitement du signal.

La transformation de Fourier a pour principal inconvénient de ne garder aucune indication sur le temps ou la longueur du signal. En effet, la principale hypothèse lorsqu'on utilise une transformée de Fourier est la stationnarité du signal durant la période d'observation T_0 . De ce fait, l'utilisation de la transformée de Fourier sur les cas transitoires est impossible. Il faut alors appliquer une transformation intégrale supplémentaire (transformée de Laplace) ou utiliser un schéma aux différences finies sur la variable temporelle. La théorie des ondelettes a généralisé les fonctions trigonométriques périodiques qui forment la base



(a) Temps de calcul avec une méthode de résolution classique. Système 2D



(b) Travail nécessaire pour résoudre le problème en fonction de la méthode

figure 2.8 - Evolution du temps de calcul avec le nombre de ddl

de Fourier [97] en utilisant des fonctions non-périodiques appelées ondelettes.

Comme pour les transformées de Fourier, il existe une transformée en ondelettes (continue ou discrète), une transformée inverse et une transformée rapide. Elles ont déjà été utilisées pour résoudre des équations différentielles et ont de multiples avantages [55] :

- l’effort de calcul varie linéairement avec le nombre de points : nombre d’opérations = N si on utilise la transformée rapide.
- la transformée en ondelettes est adaptée à la résolution multi-échelle en espace et en temps. Le maillage peut être raffiné localement en espace et en temps sans difficulté et sans obtenir de structures de matrices complexes.
- la puissance des ondelettes se manifeste dans les problèmes où l’on a des phénomènes se produisant à des échelles différentes.
- les opérateurs différentiels ont des matrices diagonales dans cette représentation (calcul matriciel beaucoup plus rapide et nécessitant moins de mémoire).

Techniques Multigrilles Les méthodes multigrilles ont été mises au point au début des années 80 par A. Brandt [23, 24]. Elles ont été adaptées à la tribologie par Lubrecht [78] puis Venner [109]. Aujourd’hui, elles sont beaucoup utilisées en mécanique des fluides mais très peu en élasticité. En effet, les problèmes d’élasticité sont souvent traités dans des solides de formes complexes qui nécessitent l’utilisation de la méthode des éléments finis ou des méthodes multigrilles algébriques [1].

Les méthodes multigrilles utilisent les propriétés des résolutions itératives sur plusieurs tailles de maillage pour accélérer la convergence de la méthode. On arrive ainsi à des temps d’ordre $O(N)$ qui permettent de traiter des systèmes de grande taille dans un temps raisonnable.

2.6.5 Choix de la méthode de résolution

La résolution par les méthodes semi-analytiques n’est pas possible, puisqu’il n’existe pas de solution analytique au problème thermoélastique 3D dans une couche d’épaisseur finie à gradient de propriétés. Les méthodes numériques permettent de trouver une solution

approchée du problème.

Méthode des éléments finis

La discrétisation puis la résolution du modèle par la méthode des éléments finis est possible dans ce cas. Cette méthode possède plusieurs atouts :

- adaptation à une géométrie quelconque,
 - facilité de mise en place avec les logiciels commerciaux existants,
 - traitement des variations de propriétés et des discontinuités intrinsèques à la méthode.
- Néanmoins, les temps de calcul associés à ce type de résolution sont trop importants pour permettre de mener des études paramétriques. Même en utilisant un maillage très fin dans le revêtement et plus grossier dans le reste du massif, le nombre de degrés de liberté et donc le temps de résolution deviennent rapidement excessifs.

Transformées intégrales

La résolution analytique des équations transformées n'est pas possible en thermoélasticité en trois dimensions car elles ne vérifient pas l'hypothèse de biharmonicité des déplacements. L'utilisation de cette technique comme l'ont fait Plumet [90] et Leroy [74, 75] n'est donc pas possible. De plus, elles ne permettent pas de prendre en considération la variation de propriétés dans la profondeur. Leur utilisation en deux dimensions avec une hypothèse de déformations planes n'est pas possible non plus dans le cas considéré.

Par contre, les équations transformées peuvent être résolues numériquement. Cette technique sera approfondie dans le cas élastique en trois dimensions. La méthode s'appuie sur l'utilisation des différences finies couplées aux techniques de FFT sur une couche élastique, non homogène et d'épaisseur constante.

Discrétisation par différences finies, techniques Multigrilles

L'autre solution retenue pour calculer les déplacements est la discrétisation des équations de l'élasticité sans appliquer de transformée intégrale. La résolution directe du système obtenu avec les différences finies par les méthodes classiques demande un effort de calcul important. Les techniques multigrilles sont utilisées pour accélérer la convergence de la résolution. Ces méthodes sont très bien adaptées à la résolution des équations elliptiques, telles que l'équation de la chaleur ou les équations de l'élasticité qui sont elliptiques par nature.

L'inconvénient de ces méthodes efficaces est qu'elles ne peuvent généralement pas être utilisées comme des "boîtes noires". Les singularités, les conditions aux limites particulières, la perte d'ellipticité sont des exemples de phénomènes qui dégradent très rapidement la vitesse de convergence. Il faut donc optimiser chaque phase du calcul pour retrouver le taux de convergence optimal.

2.7 Synthèse

Ce chapitre établit les différentes équations du problème thermoélastique et liste les différentes conditions aux limites. Notre objectif est de proposer un modèle s'insérant dans

le formalisme général de la mécanique des milieux continus en élasticité linéaire permettant de tenir compte d'une variation quelconque des propriétés dans toutes les directions et en particulier dans la profondeur afin de représenter au mieux le revêtement, le substrat et l'interface ou la zone de diffusion qui les sépare. Ce modèle doit permettre de tenir compte au mieux des variations de propriétés que l'on peut obtenir dans le domaine des traitements de surface, des procédés de diffusion où les gradients sont faibles mais l'épaisseur traitée importante, aux revêtements dont l'épaisseur est faible mais les gradients de propriétés très importants. Les méthodes permettant de résoudre le problème thermoélastique ne peuvent pas toutes être appliquées à ce modèle. Les méthodes purement analytiques telles que celle basée sur l'analogie avec les ressorts ou des potentiels (Papkovitch, Galerkin, Kelvin, ...) ne permettent pas de prendre en compte une forme quelconque de gradient de propriétés. Ce chapitre montre également que les méthodes semi-analytiques peuvent être adaptées à ce problème. Enfin, les méthodes numériques semblent les mieux adaptées, mais le temps de calcul prohibitif associé ne permet pas d'utiliser la méthode des éléments finis. Il faut alors se tourner vers les techniques efficaces mais plus complexes à mettre en oeuvre.

Chapitre 3

Résolution du problème thermoélastique

Ce chapitre est dédié à l'étude des différentes techniques mises en place pour traiter le problème à gradient de propriétés décrit dans le chapitre précédent et soumis à un chargement thermique et mécanique quelconque. Les méthodes analytiques sont souvent utilisées pour une première approximation. La résolution du problème est rapide et la solution couvre tout le domaine. Par contre leur domaine d'application est restreint car les hypothèses utilisées pour déterminer une solution analytique sont très restrictives. Les méthodes numériques permettent d'exploiter pleinement le modèle en limitant au minimum le champ d'application mais elles sont souvent gourmandes en temps de calcul. Enfin, les méthodes semi-analytiques permettent d'élargir le champ d'application des solutions analytiques en gardant un temps de calcul raisonnable.

Nous allons vous présenter deux modèles bâtis en utilisant des méthodes numériques différentes.

3.1 Modèle mécanique 3D : DF-FFT

L'utilisation classique des transformées intégrales n'est pas applicable dans le cas thermoélastique en trois dimensions. Comme il n'existe pas de solution analytique des équations transformées, elles sont résolues numériquement en les discrétisant par différences finies. La première étape consiste à déterminer l'expression des équations de Lamé généralisées dans l'espace des fréquences. Elles sont ensuite résolues numériquement dans ce même espace puis la solution est ramenée dans l'espace réel par une transformée de Fourier rapide (FFT). La méthode n'a été appliquée qu'en mécanique. Son utilisation en thermique et en thermomécanique est possible en suivant la même idée

3.1.1 Équations transformées

Deux transformées intégrales successives selon les directions y et z sont appliquées aux équations du problème thermoélastique ((2.2) et (2.17)). Le système résultant de ces transformations est résolu dans la direction x liée à la profondeur. Le retour dans l'espace réel est effectué par une transformation inverse. La transformée intégrale utilisée est la

transformée de Fourier (voir 2.6.2). Parmi les propriétés de cette transformation, on notera que :

- la transformée de la dérivée $\mathcal{F} \left\{ \frac{\partial f(\mathbf{y})}{\partial y^n} \right\}$ peut s'exprimer en fonction de la transformée de $f(\mathbf{y})$ par la relation

$$\overline{\frac{\partial^n f(\mathbf{y})}{\partial y^n}} = (i\omega_y)^n \bar{f}(\omega_y) \quad (3.1)$$

- la théorie de la transformée de Fourier peut être étendue aux fonctions de variables multiples.

Les équations transformées sont écrites en utilisant la relation (3.1). Elles deviennent alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left((\lambda + 2\mu) \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} [i\lambda (\omega_y \bar{V} + \omega_z \bar{W})] - \mu \bar{U} (\omega_y^2 + \omega_z^2) \\ + \mu \left[i\omega_y \frac{\partial \bar{V}}{\partial x} + i\omega_z \frac{\partial \bar{W}}{\partial x} \right] = \frac{\partial}{\partial x} ((3\lambda + 2\mu) \alpha \bar{T}) \end{aligned} \quad (3.2a)$$

$$\begin{aligned} -(\lambda + 2\mu) \omega_y^2 \bar{V} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \bar{V}}{\partial x} \right) + i\omega_y \frac{\partial}{\partial x} (\mu \bar{U}) + i\omega_y \lambda \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} - \mu \omega_z^2 \bar{V} - (\lambda + \mu) \omega_y \omega_z \bar{W} \\ = (3\lambda + 2\mu) \alpha i\omega_y \bar{T} \end{aligned} \quad (3.2b)$$

$$\begin{aligned} -(\lambda + 2\mu) \omega_z^2 \bar{W} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial \bar{W}}{\partial x} \right) + i\omega_z \frac{\partial}{\partial x} (\mu \bar{U}) + i\omega_z \lambda \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} - \mu \omega_y^2 \bar{W} - (\lambda + \mu) \omega_y \omega_z \bar{V} \\ = (3\lambda + 2\mu) \alpha i\omega_z \bar{T} \end{aligned} \quad (3.2c)$$

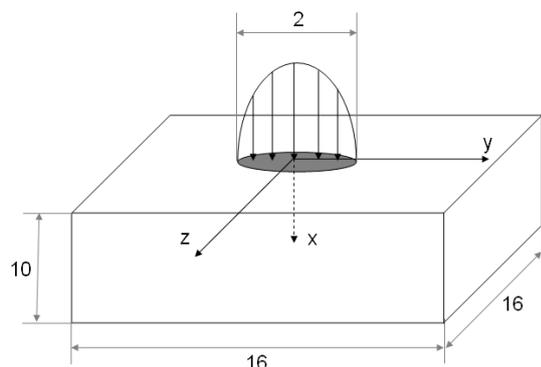
Les conditions aux limites (2.20) deviennent :

$$\begin{cases} \bar{\sigma}_{xx} = \lambda \left(\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + i\omega_y \bar{V} + i\omega_z \bar{W} \right) + 2\mu \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} - (3\lambda + 2\mu) \alpha \bar{T} \\ \bar{\sigma}_{xy} = \mu \left(i\omega_y \bar{U} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial x} \right) \\ \bar{\sigma}_{xz} = \mu \left(i\omega_z \bar{U} + \frac{\partial \bar{W}}{\partial x} \right) \end{cases} \quad (3.3)$$

3.1.2 Résolution

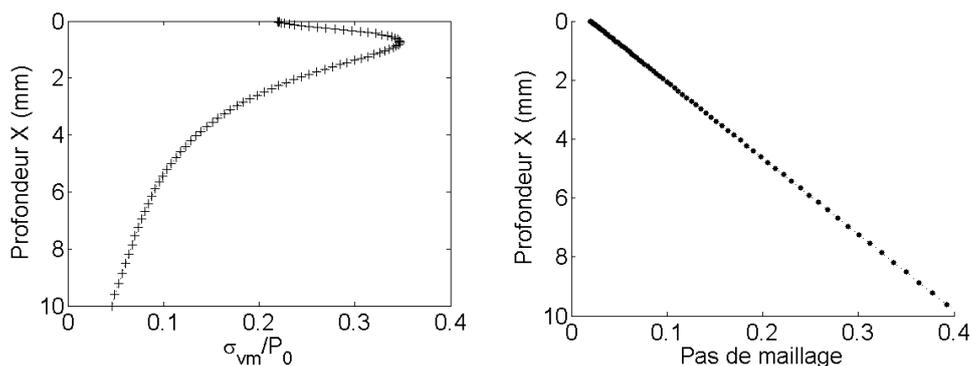
Ces équations ont été discrétisées par différences finies centrées dans le massif et par différences avant à la surface (conditions aux limites) du deuxième ordre dans la direction x .

Une discrétisation à pas variable pour raffiner le maillage sous la surface a été utilisé. La figure 3.1(a) montre l'évolution des contraintes de Von Mises dans un massif homogène soumis à une sollicitation de type contact hertzien (largeur de contact de 1 mm). 128 points sont utilisés dans les directions y et z et 80 dans la direction x .



$N_y = N_z = 128$ points
 $N_x = 80$ points de maillage
 pas variable (cf figure 3.1(b))
 Massif homogène :
 $E=200$ GPa, $\nu=0.3$
 Contact circulaire :
 $a = 1$ mm, $P_0 = 1$ MPa

Le problème est résolu en 9 minutes sur un ordinateur de bureau récent. Ce résultat montre clairement l'efficacité de la méthode qui couple les avantages des modèles semi-analytiques (temps de calcul, faible utilisation mémoire) et des méthodes numériques (variation quelconque des propriétés dans l'épaisseur). Toutefois, cette technique de ré-



(a) Contraintes de Von Mises dans un massif homogène au milieu du massif ($y=0$, profondeur $z=0$) (b) Évolution du pas de maillage dans la

figure 3.1 - Calcul élastique 3D avec la méthode DF-FFT

solution peut difficilement être étendue au cas où les propriétés varient dans plusieurs directions, le problème devant être résolu numériquement dans la direction où les propriétés ne sont pas constantes. Elle ne pourra pas non plus être utilisée si des phénomènes non linéaires sont introduits dans le problème. Enfin, le pas de maillage variable provoque un mauvais conditionnement de la matrice qui, associé à la variation de propriétés et aux nombres complexes introduits par les transformées intégrales, entraînent des difficultés numériques lors de la résolution du système et allongent d'autant le temps de calcul.

Ce mode de résolution est donc intéressant puisqu'il permet d'étendre le champ des méthodes semi-analytiques au problème élastique à gradient de propriété dans la profondeur. Le temps de calcul est inférieur aux méthodes numériques et la discrétisation à pas variable permet d'observer finement le comportement du revêtement et de l'interface. Par contre, ses possibilités d'évolution sont plus limitées que les méthodes numériques, de part l'utilisation des transformées de Fourier qui périodisent le problème et limitent la variation de propriété à une seule dimension.

Une résolution purement numérique est plus adaptée à ce type de problème pour prendre

en compte des conditions aux limites quelconques et offrir des possibilités d'évolution plus larges. Par contre, l'utilisation des méthodes multigrilles est indispensable pour garder des temps de calcul acceptables et discrétiser finement le revêtement et l'interface substrat/revêtement.

3.2 Modèles 2D et 3D DF-MG

3.2.1 Techniques Multigrilles

Principe

Soit le problème modèle continu :

$$\mathcal{L}u = f$$

avec \mathcal{L} un opérateur différentiel, f le second membre de l'équation et u la solution exacte du problème. On discrétise le problème par différences finies sur un maillage uniforme de pas h . Cette méthode permet de transformer des équations locales en un système d'équations linéaires. L'opérateur s'exprime alors sous sa forme matricielle \mathcal{L}^h . La solution et le second membre deviennent les vecteurs u^h et f^h . La solution exacte du problème discret est différente de la solution du problème continu. La différence entre les deux est l'erreur de discrétisation qui tend vers 0 quand le pas de discrétisation h tend vers 0. On obtient alors le système d'équations suivant qui peut être résolu avec des méthodes directes ou itératives :

$$\mathcal{L}^h u^h = f^h \quad (3.4)$$

où \mathcal{L}^h est une matrice, u^h le vecteur des inconnues et f^h le second membre.

Plusieurs maillages de tailles différentes sont utilisés et les équations sont discrétisées et résolues sur chacun d'entre eux. La méthode part du fait que les relaxations convergent lentement mais lissent l'erreur rapidement (cf figure 3.2). Une valeur initiale \tilde{u}^h est imposée comme solution. Après plusieurs relaxations, la solution a évolué vers sa valeur approchée \tilde{u}^h . Cette solution, différente de la solution exacte u^h du problème discret, comporte une erreur numérique notée e^h .

$$e^h = u^h - \tilde{u}^h \quad (3.5)$$

L'équation discrète (3.4) n'est donc pas résolue exactement. La différence entre ses deux membres définit le résidu r^h :

$$r^h = f^h - \mathcal{L}^h \tilde{u}^h \quad (3.6)$$

L'erreur numérique e^h peut être décomposée dans l'espace des fréquences. L'erreur globale est la superposition de hautes et de basses fréquences (figure 3.2). Si les relaxations sont effectuées sur une grille de pas h , les erreurs numériques de longueur d'onde proche de h sont rapidement atténuées, alors que les basses fréquences diminuent très lentement. Pour réduire plus rapidement les grandes longueurs d'onde, il faut relaxer le problème sur des grilles plus grossières, dont le pas de discrétisation est plus grand. Le problème peut être transféré sur la grille de niveau inférieur, dont le pas H est défini par $H = 2h$. Le problème prend alors la forme suivante :

$$\mathcal{L}^H u^H = f^H \quad (3.7)$$

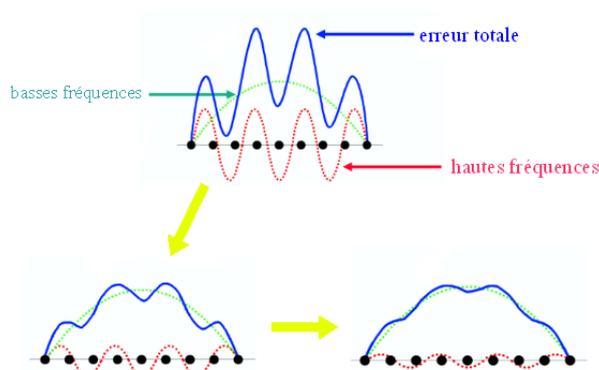


figure 3.2 - Réduction de l'erreur [109]

Les vecteurs f^H et u^H sont obtenus avec l'opérateur de restriction I_h^H qui permet de transférer les variables de la grille fine (pas h) vers la grille grossière (pas H). Quand le système est non-linéaire, on utilise la méthode FAS (Full Approximation Scheme) :

$$\hat{u}^H = I_h^H \tilde{u}^h + e^H \quad (3.8)$$

$$\hat{f}^H = \mathcal{L}^H(I_h^H \tilde{u}^h) + I_h^H r^h \quad (3.9)$$

Pour plus de détails sur les changements de grilles, et en particulier sur l'application de la méthode FAS (résolution des systèmes non-linéaires), le lecteur peut se reporter à [35] et [109].

Après quelques relaxations, la solution approchée \tilde{u}^H du problème discret (3.4) est obtenue sur la grille grossière. Elle peut alors être transférée vers la grille fine grâce à l'opérateur d'interpolation I_H^h (correction des variables sur la grille fine). Une nouvelle approximation \bar{u}^h est ainsi obtenue sur la grille fine :

$$\bar{u}^h = \tilde{u}^h + I_H^h(\tilde{u}^H - \hat{u}^H) \quad (3.10)$$

Le schéma (figure 3.3) résume la situation avec une résolution sur deux grilles.

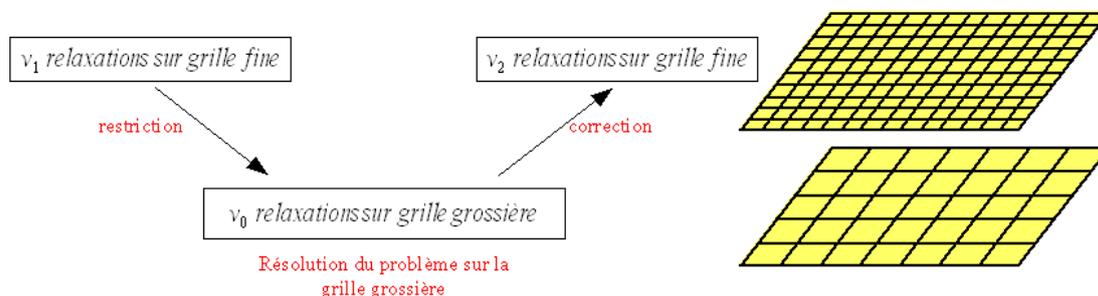


figure 3.3 - schéma de résolution sur 2 grilles

Opérateurs, structures et changements de grilles

Cycles Le paragraphe précédent a présenté la résolution d'un problème non-linéaire sur deux niveaux de grilles. Un V-cycle est défini comme le parcours entre les différents niveaux

au cours de la résolution (cf figure 3.4). Plusieurs V-cycles sont nécessaires pour réduire l'erreur de plusieurs ordres de grandeur et obtenir une solution satisfaisante. La résolution sur deux niveaux est possible et permet la réduction efficace des erreurs de longueur d'onde de l'ordre de h et de H , mais la réduction des longueurs d'ondes supérieures à H va nécessiter un nombre de cycles important.

Pour diminuer le coût de la résolution du problème (réduction des erreurs de toutes les longueurs d'onde), il faut utiliser des niveaux inférieurs. Ainsi, les grandes longueurs d'ondes sont réduites à moindre coût car :

- plus le nombre de points sur une grille est faible, plus le nombre de relaxations nécessaires à la résolution est faible. En utilisant des niveaux inférieurs, le nombre de relaxations nécessaires à la convergence est réduit,
- le coût de chacune des relaxations sur les grilles inférieures est plus faible (moins de points à parcourir).

Le changement de grille permet donc de réduire efficacement le temps de calcul, car les relaxations sont utilisées là où elles sont le plus efficace. Par contre, les opérations de restriction et de correction introduisent dans la solution des erreurs de longueur d'onde proche du pas du maillage. Après chaque opération de changement de grille, il est nécessaire d'effectuer une ou plusieurs relaxations. La figure 3.4 représente un V-cycle sur 4 niveaux.

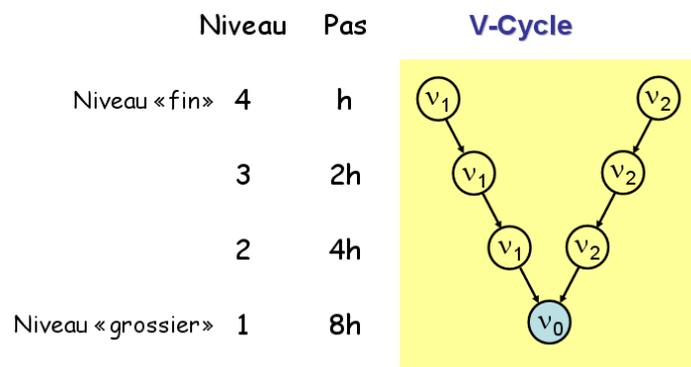


figure 3.4 - *V-cycle*

La phase descendante du cycle lisse les hautes fréquences de l'erreur alors que l'allure générale de la solution (basses fréquences) n'est pas encore obtenue. Le bénéfice de cette phase descendante est perdue lorsque l'on passe sur le niveau le plus grossier. Le problème peut être contourné en appliquant la technique FMG ("Full Multi-Grid"). Cette technique consiste à réduire d'abord les basses fréquences sur les maillages grossiers, puis, lorsque la solution est convergée, à interpoler ce résultat sur une grille plus fine et effectuer plusieurs V-cycles à partir de ce niveau. On répète le schéma jusqu'à avoir atteint le niveau le plus élevé (figure 3.5).

En assurant la convergence de la forme générale de la solution, la technique FMG améliore la stabilité de la résolution par rapport à la technique V-cycles. De plus, en utilisant moins de relaxations sur les grilles les plus fines (qui sont les plus coûteuses), elle permet de diminuer le temps de calcul. La complexité de l'algorithme classique est $O(N)\log(\epsilon)$, avec N le nombre de variables, et ϵ la précision demandée. En utilisant la technique FMG, elle

devient $O(N)$. Néanmoins, l'interpolation entre chaque série de V-cycle (voir figure 3.5) doit être d'un ordre supérieur à celui du schéma numérique utilisé.

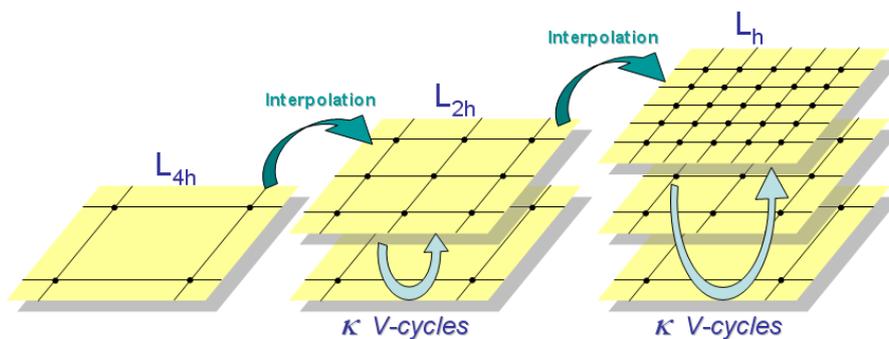


figure 3.5 - Représentation graphique du FMG sur trois niveaux

Opérateurs de changement de grille : Les opérateurs de changement de grille I_H^h et I_h^H sont utilisés respectivement pour les interpolations et les restrictions dans les V-cycles. Le premier est I_h^H . L'objectif est de passer d'une grille de pas h à une grille de pas $2h$. Il y a deux types de restrictions :

1. l'injection : c'est le plus simple des opérateurs. Tous les points de la grille grossière coïncident avec des points de la grille fine. On se contente d'affecter les valeurs des points coïncidant aux points de la grille grossière (figure 3.6). Les autres sont ignorés. Le transfert est direct (et donc rapide), mais la qualité de l'information transmise est de moins bonne qualité qu'avec les autres méthodes.
2. la restriction pondérée : cet opérateur est plus complexe (nécessite des calculs). Il consiste à affecter à un point de la grille grossière une moyenne pondérée de sa valeur et de celles des points qui l'entourent.

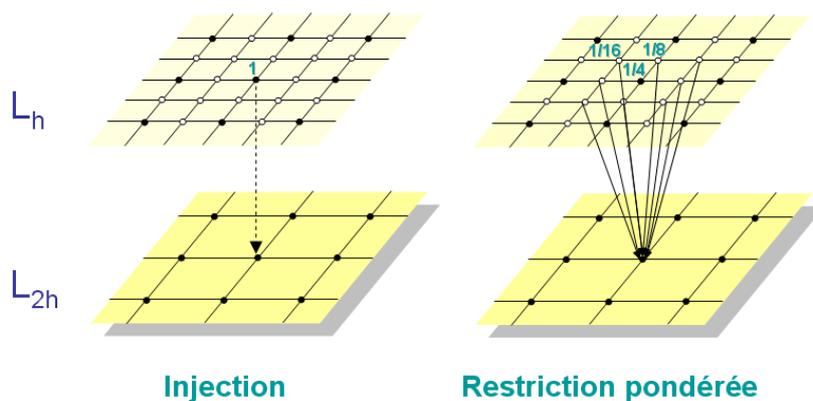


figure 3.6 - Représentation graphique des opérateurs de restriction

En tout point de la grille, l'injection s'écrit :

$$u_{I,J}^H = [I_h^H u^h]_{I,J} = u_{2I,2J}^h$$

Soit sous forme matricielle :

$$I_h^H = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

L'opérateur de restriction pondérée est plus complexe :

$$u_{I,J}^H = [I_h^H u^h]_{I,J} = \frac{1}{16} (u_{2I+1,2J+1}^h + u_{2I+1,2J-1}^h + u_{2I-1,2J+1}^h + u_{2I-1,2J-1}^h + 2u_{2I+1,2J}^h + 2u_{2I-1,2J}^h + 2u_{2I,2J+1}^h + 2u_{2I,2J-1}^h + 4u_{2I,2J}^h)$$

Sous forme matricielle, cet opérateur s'écrit :

$$I_h^H = \frac{1}{16} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

L'opérateur I_H^h est utilisé pour interpoler les valeurs d'une grille grossière de pas H vers une grille plus fine de pas $h = H/2$. Une interpolation linéaire (voir figure 3.7) est suffisante dans la majorité des cas. La représentation matricielle de cet opérateur est la suivante :

$$I_H^h = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

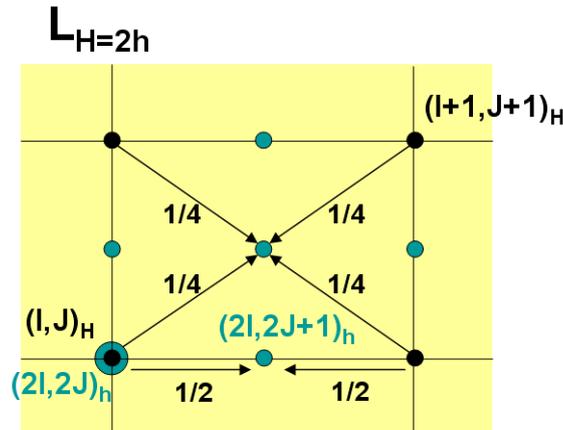


figure 3.7 - Opérateur d'interpolation

3.2.2 Raffinement local de maillage

Principe

L'objectif du raffinement local de maillage est de faire les calculs sur un maillage fin uniquement où cela est nécessaire. Dans le cas du massif revêtu, seule la zone immédiatement sous la surface englobant le ou les revêtement(s) et l'interface revêtement/substrat requiert une grande finesse. Cette technique est également nécessaire pour obtenir un comportement de type massif semi-infini (hypothèse très souvent reprise pour la validation). La taille du solide doit être grande devant la taille du chargement mais un maillage fin n'est pas nécessaire loin de la zone chargée.

Les techniques multi-échelles sont bien adaptées à ce genre de méthode. Il s'agit donc de pré-définir des grilles de différents niveaux sur des domaines géométriques hiérarchiques. L'avantage évident est un gain en temps de calcul et en espace mémoire.

La figure 3.8(a) montre le principe de la méthode. Le niveau Ω^h est limité à une zone res-

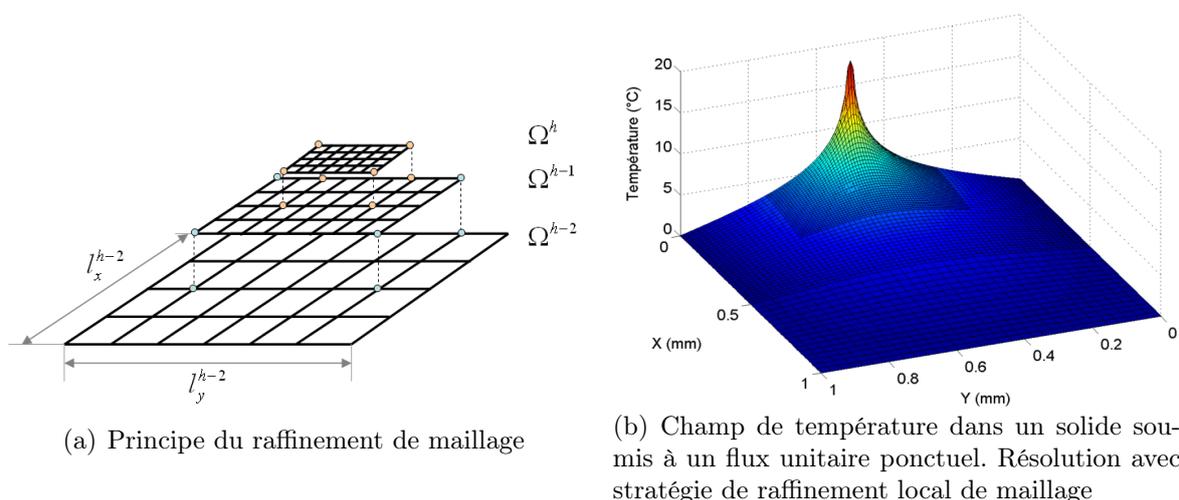


figure 3.8 - Raffinement local de maillage

treinte du domaine de calcul. Ses limites sont interpolées puis transférées depuis le niveau inférieur. Aucune modification n'est nécessaire pour adapter le FAS au raffinement local de maillage. Le résidu r^h sur le niveau Ω^h est calculé seulement sur la zone du domaine de calcul couverte. Sur les zones non couvertes de Ω^{h-1} , le résidu est nul. En d'autres termes, la correction de la grille Ω^{h-1} est seulement prise en compte où Ω^h existe.

Pour plus de renseignements, le lecteur peut se reporter à [109] et [7].

La figure 3.8(b) montre le champ de température dans un solide ($k = 46 \text{ W/mK}$) soumis à un chargement unitaire ponctuel au centre ($y = 0.5 \text{ mm}$). La grille finale ressemble à une grille à pas de maillage variable tout en gardant la stabilité et la vitesse de convergence d'une grille équadistante.

Validation

Afin de quantifier l'erreur introduite par le raffinement local de maillage, un test est réalisé. Il consiste à réaliser le même calcul avec quatre maillages différents et de calculer

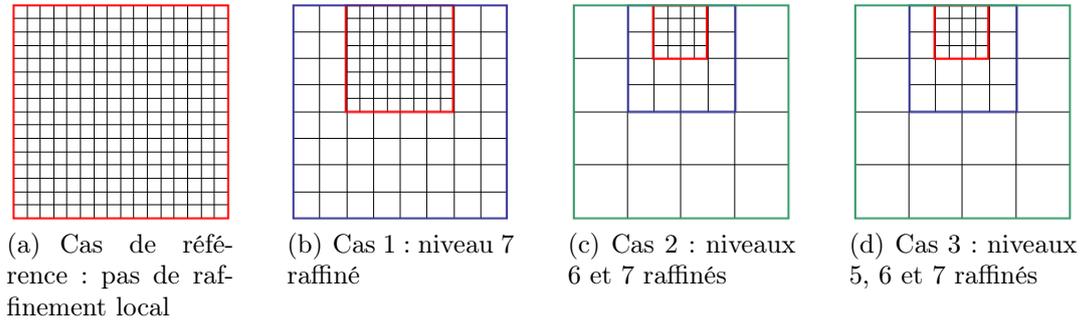


figure 3.9 - Comparaison de 4 cas de raffinement local. Résolution du problème thermique avec un chargement ponctuel unitaire à la surface dans un solide de 1×1 mm. 7 niveaux de maillage

la différence sur la solution obtenue. Le cas choisi est un solide carré de 1 mm en acier soumis à un chargement thermique unitaire ponctuel. Les quatre maillages sont représentés sur la figure 3.9. Le premier est le cas de référence. Le maillage fin couvre tout le domaine de calcul. Les trois autres cas sont de plus en plus raffinés. L'erreur utilisée pour comparer les résultats est la norme infinie définie comme :

$$\|u_{\text{ref}} - u_{\text{app}}\|_{\infty} = \left| \frac{u_{\text{ref}} - u_{\text{app}}}{u_{\text{ref}}} \right|$$

avec u_{ref} la solution du cas de référence et u_{app} la solution du cas considéré. Les résultats sont répertoriés dans le tableau 3.1. T_{cpu} est le rapport entre le temps de calcul du cas de référence sur le temps de calcul du cas considéré. Ces résultats montrent que le temps

	T_{cpu}	$\ u_{\text{ref}} - u_{\text{app}}\ _{\infty}$
Cas 1	0.37	$3.9 \cdot 10^{-4}$
Cas 2	0.12	$4.5 \cdot 10^{-4}$
Cas 3	0.043	$8.13 \cdot 10^{-4}$

TAB. 3.1 - Variation du temps de calcul et erreur pour chacun des cas

de résolution est divisé par 20 dans le cas le plus raffiné, alors que l'erreur introduite est négligeable. Le raffinement local de maillage apporte donc une efficacité supplémentaire au modèle DF-MG tout en affectant peu la précision des résultats. La dimension des différentes grilles est définie à priori avant le début du calcul. Le raffinement peut être automatisé au cours du calcul en utilisant un indicateur d'erreur. Nous nous contenterons de la détermination à priori, le raffinement automatique étant assez délicat à mettre en place.

Le modèle DF-MG avec raffinement local a été implémenté. Nous allons maintenant étudier les difficultés inhérentes à notre problème (anisotropie du matériau, épaisseur de la zone à gradient de propriétés, influence des conditions aux limites) sur la vitesse de convergence. Ces études sont présentées sans raffinement local, mais les conclusions sont les mêmes.

3.2.3 Taux de convergence théorique

L'utilisation de techniques multigrilles améliore l'efficacité des méthodes itératives classiques. Il s'agit ici de mettre l'accent sur la vitesse de convergence obtenue dans un cas idéal et de comparer cette valeur en fonction de différents paramètres. Cette analyse met en évidence les difficultés générées par l'anisotropie du matériau.

Principe

Dès l'invention des techniques multigrilles, les auteurs ont cherché à déterminer le taux de convergence optimal. Pour un processus itératif avec un facteur de convergence d'erreur μ , l'erreur e^n après n itérations vérifie :

$$|e^n| \leq \mu^n |e^0| \quad (3.11)$$

e^0 étant l'erreur à la première itération du processus de résolution. L'idée est de déterminer le nombre n d'itérations nécessaires pour atteindre une précision demandée. Le facteur de convergence montre l'évolution de l'erreur à chaque itération. Plus il est faible, plus la méthode est efficace.

μ se détermine de deux façons différentes :

- il s'agit de construire les matrices A (équation (2.32)) et d'en déduire la matrice d'itération \mathcal{M} telle que $\bar{e}^h = \mathcal{M}\tilde{e}^h$ avec \tilde{e} l'erreur à l'itération $n-1$ et \bar{e} l'erreur à l'itération n . Pour que le processus converge, il faut que la plus grande des valeurs propres de cette matrice soit inférieure à 1. Le résultat est démontré pour deux résolutions itératives en une dimension de types Jacobi et Gauss Seidel dans [28] et [109]. En général, le calcul des valeurs propres est très complexe.
- Brandt [25] a développé une méthode consistant à analyser l'effet d'une relaxation sur les composantes de la transformée de Fourier de l'erreur : c'est l'analyse du mode local. Cette technique permet de déterminer assez simplement le gain de vitesse entre un calcul multigrilles et un calcul monogridle. C'est cette méthode qui va être décrite et utilisée par la suite.

Analyse du mode local (*Local Mode Analysis*)

L'analyse est menée en considérant deux niveaux de grilles Ω^h (niveau fin) et Ω^H niveau grossier avec $H = 2h$. L'objectif est de quantifier la réduction théorique de l'erreur. Les hypothèses utilisées pour mener cette analyse sont les suivantes :

1. le problème est résolu exactement sur la grille grossière,
2. l'effet des interpolations et des restrictions est négligé.

Sur chaque grille, la longueur d'onde de la fréquence maximale correspond à un pas de maillage. Les composants ayant une fréquence $|\theta| \leq \pi/2$ sont connus sur la grille fine (Ω^h) puisque représentés exactement sur la grille inférieure (Ω^H) grâce à l'hypothèse 1. La réduction de l'erreur obtenue dans un cycle est donc donnée sur la grille fine par les composants hautes fréquences, c'est-à-dire ceux qui ne sont pas résolus sur la grille grossière.

Posons $\mu(|\theta|)$ le facteur de convergence en fonction de la fréquence. Ce facteur correspond à la diminution d'amplitude des composantes de l'erreur dans l'espace de Fourier, soit :

$$\mu(\theta) = \left| \frac{\bar{A}(\theta)}{\tilde{A}(\theta)} \right| \quad (3.12)$$

avec :

$$\tilde{e}_i = \sum_{0 < |\theta| < \pi} \tilde{A}(\theta) e^{i\theta i} \quad \text{et} \quad \bar{e}_i = \sum_{0 < |\theta| < \pi} \bar{A}(\theta) e^{i\theta i} \quad (3.13)$$

Ce type d'analyse étant local, il n'est pas nécessaire de prendre en compte les conditions aux limites (elles influencent la solution, pas l'erreur loin des bords).

A partir de ces définitions, le facteur de convergence asymptotique $\bar{\mu}$ s'écrit :

$$\bar{\mu} = \max_{\frac{\pi}{2} \leq |\theta| \leq \pi} \mu(|\theta|) \quad \text{avec} \quad |\bar{\theta}| = \max(\theta_i) \quad (3.14)$$

Il correspond au facteur de convergence maximal sur la zone non résolue. C'est donc cette valeur qui va déterminer le taux de convergence théorique de la méthode. Sur la grille fine (l'objectif), le problème est relaxé $\nu_1 + \nu_2$ fois (voir figure 3.4). L'effet d'un cycle de correction est donné par le facteur μ_c défini comme $\mu_c = \bar{\mu}^{(\nu_1 + \nu_2)}$. Ce facteur est une approximation du taux de convergence théorique et surtout un indicateur de son évolution en fonction des paramètres de la méthode. En effet, les hypothèses formulées plus haut ne permettent pas d'atteindre ce facteur, puisque le problème n'est pas résolu exactement sur la grille grossière et que les opérations de restriction et d'interpolation introduisent une erreur haute fréquence.

Convergence du problème thermo-élastique

Le problème est relaxé sur chaque niveau avec la technique de Gauss-Seidel. Le problème thermique stationnaire dans un massif homogène s'écrit de la manière suivante :

$$\Delta T = 0 \quad (3.15)$$

L'étude est réalisée dans le solide sans tenir compte des conditions aux limites. Seules les grandes lignes de l'analyse sont présentées ici. Pour plus de détails, le lecteur peut se reporter à [109].

Soit :

$$\bar{e}_{ij} = \tilde{e}_{ij} - \omega \delta_{ij} \quad (3.16)$$

avec

$$\bar{e}_{ij} = T_{ij} - \bar{T}_{ij} \quad \text{et} \quad \tilde{e}_{ij} = T_{ij} - \tilde{T}_{ij} \quad (3.17)$$

$$\delta_{ij} = \frac{1}{a_{ij}} r_{ij} \quad (3.18)$$

a_{ij} est le terme diagonal de la matrice issue de la discrétisation et r_{ij} le résidu du problème avec $r = \mathcal{L}u - f$. La forme discrétisée de l'équation (3.15) est écrite dans la section 2.6.3. Avec la méthode de Gauss-Seidel, cette relation devient :

$$\frac{\tilde{T}_{i+1,j} + \bar{T}_{i-1,j} - 2\bar{T}_{i,j}}{h^2} + \frac{\tilde{T}_{i,j+1} + \bar{T}_{i,j-1} - 2\bar{T}_{i,j}}{h^2} = 0 \quad (3.19)$$

En introduisant les expressions (3.17) dans cette relation, et en prenant $\omega = 1$, il vient :

$$\bar{e}_{ij} = \frac{1}{4} (\tilde{e}_{i+1,j} + \tilde{e}_{i,j+1} + \bar{e}_{i-1,j} + \bar{e}_{i,j-1}) \quad (3.20)$$

Cette relation exprime l'évolution de l'erreur suite à une relaxation de type Gauss-Seidel. Pour analyser son influence sur les composantes fréquentielles de l'erreur, on utilise les relations (3.13). Finalement, le facteur de convergence est déterminé en introduisant (3.13) dans (3.12), soit :

$$\mu(\theta) = \left| \frac{e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}}{4 - e^{-i\theta_1} - e^{i\theta_2}} \right| \quad (3.21)$$

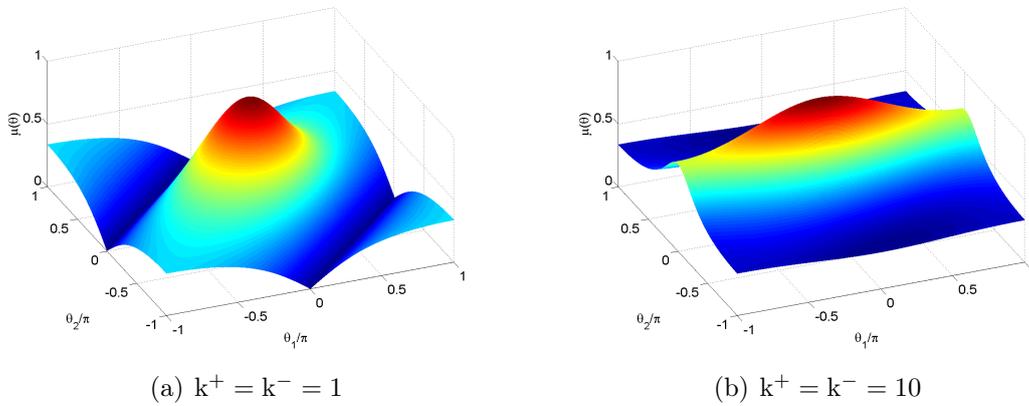


figure 3.10 - *Facteur de convergence du problème thermique en fonction de la variation des propriétés dans la profondeur*

La même méthode peut être appliquée au problème thermique et au problème élastique dans un massif non-homogène. Dans ce cas, l'équation de conduction thermique dans le solide devient :

$$k_i \frac{\tilde{T}_{i,j+1} + \bar{T}_{i,j-1} - 2\tilde{T}_{i,j}}{h^2} + \frac{k_{i+1/2}\tilde{T}_{i+1,j} + k_{i-1/2}\bar{T}_{i-1,j} - (k_{i+1/2} + k_{i-1/2})\bar{T}_{i,j}}{h^2} = 0 \quad (3.22)$$

avec $k_{i\pm 1/2} = \frac{1}{1/k_{i\pm 1} + 1/k_i}$

Le facteur de convergence du modèle thermique s'écrit :

$$\mu(\theta) = \left| \frac{k^+ e^{i\theta_1} + e^{i\theta_2}}{k^+ + (2 - e^{i\theta_2}) + k^- (1 - e^{i\theta_1})} \right| \quad (3.23)$$

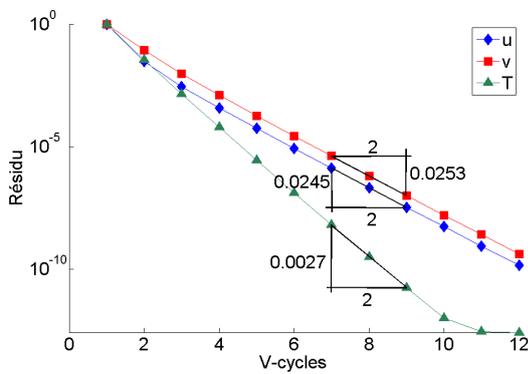
avec $k^+ = k_{i+1/2}/k_i$ et $k^- = k_{i-1/2}/k_i$.

Les figures 3.10(a) et 3.10(b) montrent l'évolution du facteur de convergence dans un massif homogène ($k^+ = k^- = 1$) et dans un massif avec une forte variation de propriétés ($k^+ = k^- = 10$). La seconde figure montre qu'une direction privilégiée apparaît. Le facteur de convergence augmente fortement dans la zone $|\theta| \in [\pi/2, \pi]$ et son maximum passe de 0.5 à 0.84. La convergence de la méthode se dégrade lorsque la variation de propriétés

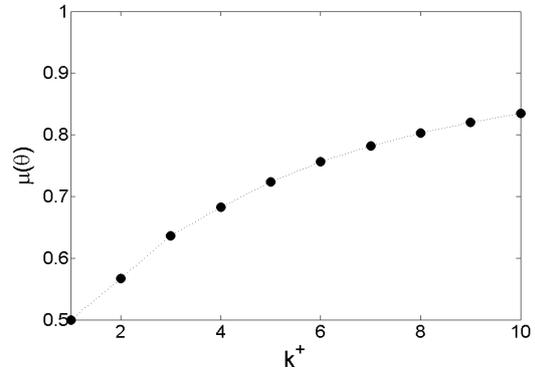
est importante. Néanmoins, le taux reste acceptable, même pour un rapport 10 dans la variation de propriétés. La figure 3.11(a) montre l'évolution du résidu sur le niveau le plus fin pour chaque variable dans un calcul 2D thermoélastique. Ce résidu est un indicateur de l'erreur entre la solution exacte et la solution calculée. Il est déterminé pour chaque niveau comme suit :

$$r^h = \sum_{i,j} \frac{L^h u^h(i,j) - f^h(i,j)}{N_x^h N_y^h} \quad (3.24)$$

Les taux de convergence calculés sont de 0.0511 pour le problème thermique et 0.16 pour le problème élastique dans un massif en acier ($E = 200$ GPa, $\nu=0.3$, $k = 45$ W/mK, $\alpha=12.10^{-6}$) en utilisant sept niveaux et des conditions aux limites de type Dirichlet.



(a) Convergence modèle 2D



(b) Influence du rapport des propriétés sur le taux de convergence théorique, modèle thermique

figure 3.11 - Convergence du problème thermo-élastique 2D

3.2.4 Conditions aux limites

Les conditions aux limites du problème ont été décrites au paragraphe 2.5. Les conditions de type Dirichlet n'affectent pas la vitesse de convergence. Par contre, dans le cas des conditions de type Neumann, la convergence des méthodes multigrilles se dégrade. La figure 3.12 montre l'évolution du résidu lors de la résolution du problème thermique.

Considérons le cas des conditions aux limites thermiques (voir section 2.5). Une condition de type Neumann en $x=0$ s'écrit $\partial u / \partial x|_{x=0} = \eta_0$. Cette relation doit être discrétisée, pour être résolue en $x=0$ à chaque relaxation à l'aide d'un schéma aux différences centrées, qui nécessite d'introduire un point virtuel en $x = -h$ ($i = -1$, cf figure 3.13), ou en utilisant un schéma aux différences avant utilisant les points $i = 0, 1$ et 2 . Dans les deux cas, l'erreur de discrétisation est d'ordre 2 ($O(h^2)$).

L'objectif est de conserver le niveau de convergence pour conserver l'efficacité des techniques multigrilles avec les deux types de conditions aux limites. Pour cela, deux critères doivent être satisfaits :

- les conditions aux limites doivent être consistantes sur toutes les grilles, c'est-à-dire que le problème résolu doit être le même sur chaque niveau pour assurer l'efficacité des corrections.
- elles ne doivent pas introduire d'erreur importante localement.

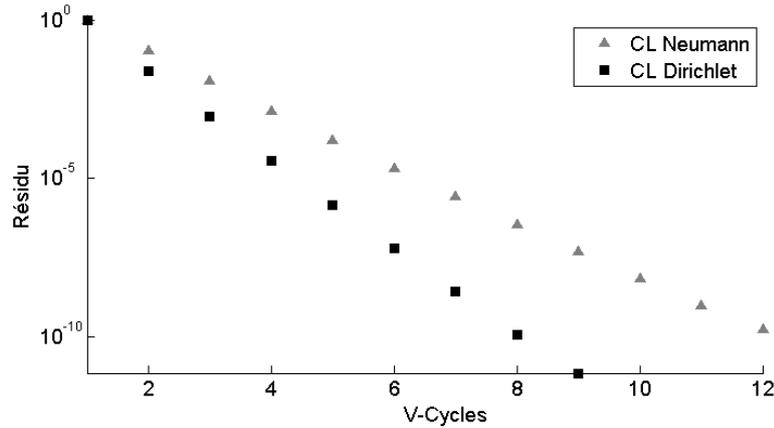


figure 3.12 - Influence des conditions aux limites sur la convergence

L'utilisation d'un schéma différent entre les points intérieurs et la limite (schéma aux différences centrées pour les points intérieurs, schémas aux différences avants sur les bords) introduit une erreur et donc contrarie la deuxième condition. Cette difficulté peut être évitée par l'introduction d'un point virtuel (voir figure 3.13). Au cours de la résolution, $u_{-1} = u_1 - 2h\eta_0$ est utilisé au point $i = 0$ avec η_0 la dérivée de T à la surface (imposée par le flux). Cette modification très simple permet de retrouver la convergence optimale avec des conditions aux limites de type Neumann en utilisant le schéma aux différences avants à la limite. Les équations en $i=0$ et $i=1$ sont résolues en même temps (résolution par bloc) afin de lisser l'erreur introduite par la condition aux limites. Le schéma de résolution est décrit en annexe D.

Très efficace pour le problème thermique, cette technique donne des résultats mitigés

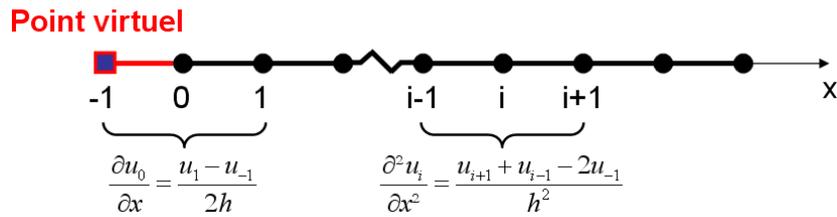


figure 3.13 - extension de la grille avec un point virtuel, conditions aux limites type Neumann

avec les équations de l'élasticité.

La deuxième méthode consiste à résoudre le problème aux limites puis le problème sur les points intérieurs. Pour retrouver la convergence optimale, Brandt et al. [26] ont mis au point un algorithme pour traiter les conditions aux limites de type équation intégrale en gardant l'efficacité des techniques Multigrilles. Il est présenté sur la figure 3.14

3.2.5 Détérioration de la convergence

Une des clés du taux de convergence des techniques multigrilles est la consistance du problème sur les différents niveaux. L'opérateur \mathcal{L}^H sur les grilles grossières doit approximer

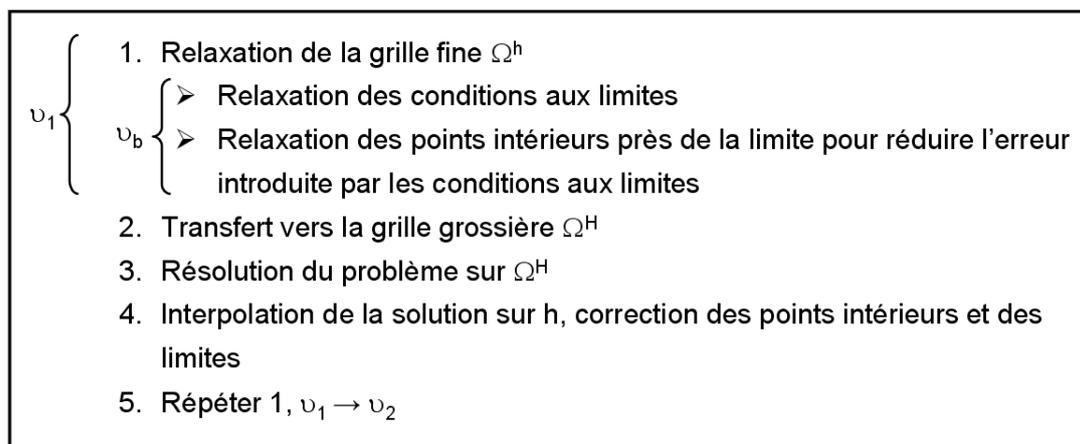


figure 3.14 - Résolution des conditions aux limites, d'après [26]

le mieux possible \mathcal{L}^h sur la grille fine. L'anisotropie due à la variation de propriétés dans le matériau dégrade rapidement le taux de convergence de la méthode pour deux raisons :

- autour de la frontière entre le revêtement et le substrat, les équations perdent leurs propriétés d'ellipticité. Plus le gradient est important, plus la résolution est difficile.
- lorsque la frontière est située près de la surface libre, c'est-à-dire pour les épaisseurs de revêtement faibles, il devient numériquement difficile d'approximer correctement le revêtement sur les niveaux grossiers.

Nous allons illustrer ces deux points dans les paragraphes suivants. Le problème de référence est un chargement hertzien, avec une pression maximale de 200 MPa et une demi-largeur de contact de 0.1 mm, appliqué sur la surface libre d'un solide élastique revêtu de dimension 3×3 mm et encasté sur ses trois autres faces (**cas test 1**).

Nous nous intéressons ici seulement aux propriétés des équations de l'élasticité. Les effets thermiques ne sont donc pas pris en compte. La zone de transition entre le dépôt et le substrat a l'épaisseur d'un pas de maillage. C'est le cas le plus difficile à traiter numériquement, le gradient de propriétés étant le plus important. Enfin, le massif est maillé avec une grille régulière de 512×512 points sur le niveau fin, couvrant tout le domaine de calcul (pas de raffinement local) et utilisant 7 niveaux (8×8 points sur le niveau 1).

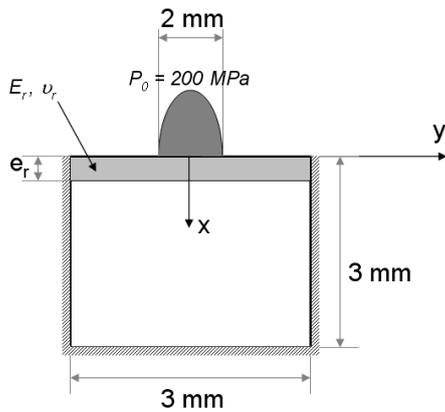
Interaction surface-interface

Le modèle utilisé pour étudier l'influence de l'épaisseur du revêtement est un modèle en deux dimensions avec une hypothèse de contraintes planes.

Le module d'Young du revêtement utilisé dans cette étude est six fois plus grand que celui du substrat ($E_r = 200\text{GPa}$, $E_s = 1200\text{GPa}$, $\nu_r = \nu_s = 0.3$), soit $E_r/E_s = 6$. e_r varie de $10\mu\text{m}$ (2 points sur la grille fine) à 1 mm (150 points).

La figure 3.15(b) montre l'évolution de la convergence de la méthode en fonction de l'épaisseur de revêtement. Le taux de convergence se dégrade quand l'interface se rapproche de la surface du massif, réduisant le nombre de points de discrétisation dans le revêtement.

CHAPITRE 3. RÉOLUTION DU PROBLÈME THERMOÉLASTIQUE



Cas test 1

Substrat : $E = 200 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3$

Revêtement :

Épaisseur du revêtement : $0.1 < e_r < 0.2 \text{ mm}$

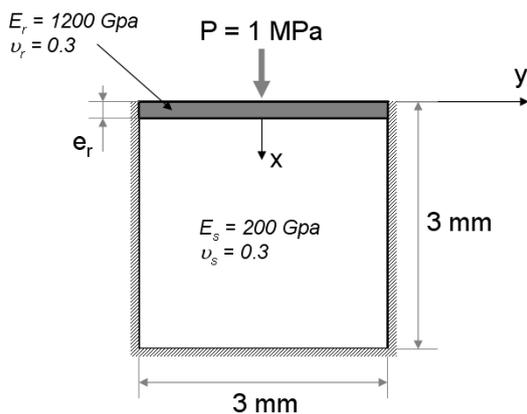
$200 < E_r < 1200 \text{ GPa}$, $\nu_r = 0.3$

Chargement hertzien : $a = 1 \text{ mm}$, $P_0 = 200 \text{ MPa}$

Dimensions : $3 \times 3 \text{ mm}$

Maillage : 7 niveaux

Résolution : $\nu_1=5$, $\nu_2=5$, $\nu_0=30$



Cas test 2

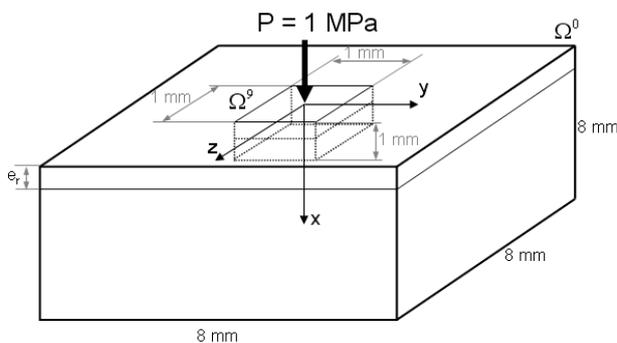
Épaisseur du revêtement : $e_r = 20 \mu\text{m}$

Chargement ponctuel unitaire

Dimensions : $3 \times 3 \text{ mm}$

Maillage : 7 niveaux

Résolution : $\nu_1=5$, $\nu_2=5$, $\nu_0=30$



Cas test 3

Chargement ponctuel unitaire

Dimensions : $8 \times 8 \times 8 \text{ mm}$

Maillage : 9 niveaux, raffinement local

Dimensions du niveau 9 = $1 \times 1 \times 1 \text{ mm}$

Résolution : $\nu_1=5$, $\nu_2=5$, $\nu_0=30$

substrat : $E = 200 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3$

Revêtement : $200 < E_r < 1000 \text{ GPa}$, $e_r = 40$
ou $80 \mu\text{m}$

Perte de couplage

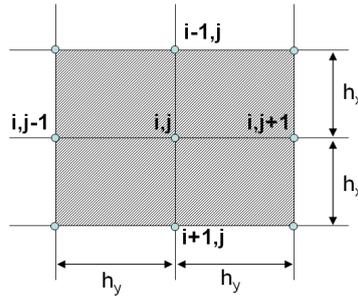
La seconde source de dégradation provient de la perte de couplage des équations de Lamé quand le saut de propriétés autour de l'interface augmente. Pour comprendre ce phénomène, il faut regarder le motif des relations.

L'équation (3.25), montre le motif de la première équation de l'élasticité (cf équations (2.11)). Il représente le poids de chaque point de maillage lors de la résolution des équations autour du point relaxé. Si les propriétés sont constantes dans l'épaisseur, les valeurs $Q_{i-1,j}$ et $Q_{i+1,j}$ sont égales. Par contre, elles se différencient quand les propriétés sont différentes entre les points $i-1$ et $i+1$.

$$\frac{1}{h^2} \begin{bmatrix} \mu_{i,j-1} & - (Q_{i+1,j} + Q_{i-1,j} + 2\mu_{i,j}) & \mu_{i,j+1} \\ & Q_{i+1,j} & \\ & Q_{i-1,j} & \end{bmatrix} \quad (3.25)$$

avec $Q = \lambda + 2\mu$.

Ce phénomène est amplifié par la présence du terme $\frac{1}{h^2}$. La diminution de h entraîne

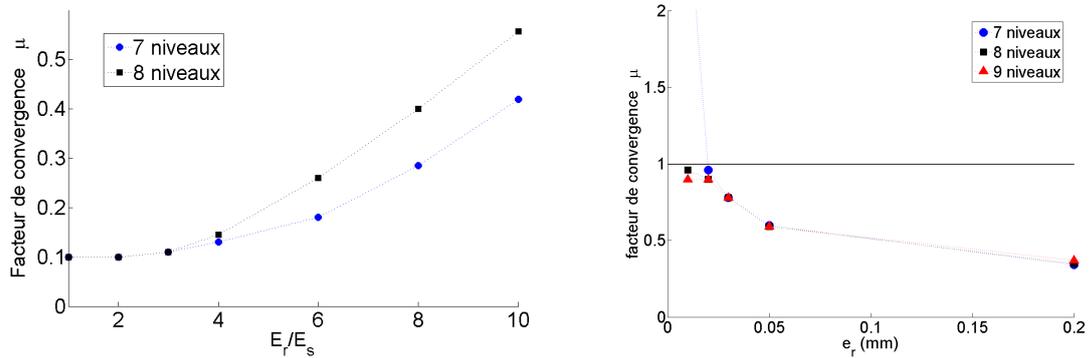


une perte de couplage d'autant plus importante que h tend vers 0. La figure 3.15(a) met clairement en évidence ces points. Le système modèle est le même que dans le paragraphe précédent (**cas test 1**). L'épaisseur de la couche est de 0.1 mm pour supprimer les effets de l'interaction entre l'interface et la surface. Pour rappel, le facteur de convergence μ est le rapport du résidu au cycle $n+1$ sur le résidu au cycle n ; plus il est faible, meilleure est la convergence. S'il dépasse 1, la méthode diverge.

Pour retrouver la convergence optimale, des techniques comme la relaxation par ligne peuvent être utilisées. Toutefois, un rapport 10 des modules d'Young entre le revêtement et le substrat couvre l'essentiel des systèmes existant en tribologie. Il n'est donc pas nécessaire d'utiliser la relaxation par ligne pour les cas qui nous concernent.

3.2.6 Schémas de restriction et propriétés du matériau

La perte de couplage et l'interaction entre le revêtement et le substrat sont les deux causes de la perte de vitesse de convergence des techniques multigrilles observée lors de la résolution du problème thermoélastique dans un solide revêtu. La solution implémentée afin de retrouver un taux de convergence optimal quand le revêtement est très fin est l'interpolation des propriétés depuis le maillage fin vers les niveaux où le maillage est plus grossier.



(a) Influence du rapport E_r/E_s sur le facteur de convergence

(b) Taux de convergence sur le niveau fin en fonction de l'épaisseur du revêtement et du nombre de niveaux de résolution

figure 3.15 - Évolution du taux de convergence

Amélioration de la convergence

Le test utilise ici un solide revêtu de 3×3 mm. L'épaisseur du revêtement est de $20 \mu\text{m}$. Son module d'Young est six fois plus élevé que celui du substrat (**cas test 2**). La figure 3.16(a) montre la valeur du paramètre λ (premier coefficient de Lamé) sur différents niveaux. Sans interpolation, il ne dépend que de la coordonnée à laquelle il est déterminé. Avec interpolation, il prend une valeur "moyenne" sur la maille, afin de tenir compte des évolutions de propriétés sur les niveaux ayant un maillage plus fin. Le saut de propriétés à l'interface s'en trouve lissé. Ce lissage a deux conséquences sur la résolution numérique :

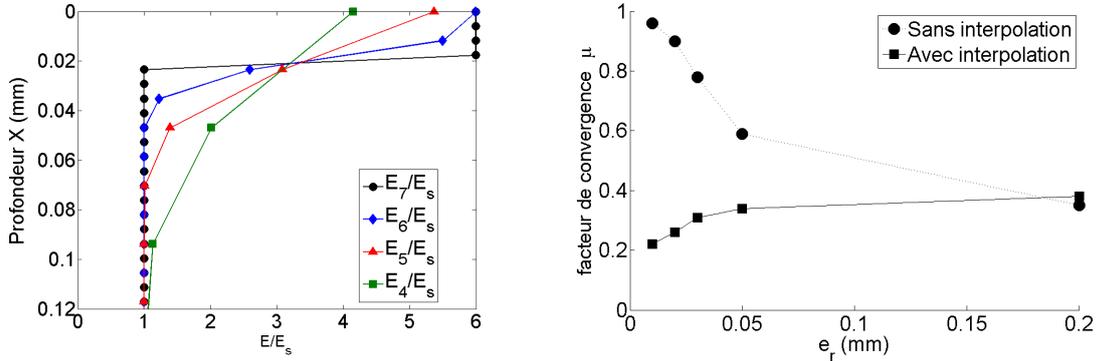
1. le saut est atténué sur les niveaux où les valeurs sont interpolées,
2. les propriétés du revêtement, qui ne sont pas visibles sur un maillage grossier, le deviennent avec cette technique d'interpolation. Le problème est donc mieux approximé sur les niveaux inférieurs et la correction s'en trouve améliorée.

Le premier schéma utilisé est le full weighting (voir 3.2.1). Il s'agit d'une restriction d'ordre 2. L'effet sur les propriétés de convergence de la méthode est présenté sur la figure 3.16(b). L'interpolation des propriétés améliore la vitesse de convergence de la méthode qui retrouve son niveau optimal.

Effet des différents schémas

Plusieurs schémas peuvent être introduits pour améliorer la convergence de la méthode de résolution. Dans ce paragraphe, les résultats présentés ont été établis avec le modèle en trois dimensions (**cas test 3**). L'épaisseur du revêtement est soit 40 soit $80 \mu\text{m}$. Le module d'Young du substrat est 200 GPa et son coefficient de Poisson $\nu=0.3$. Le rapport $r = E_r/E_s$ varie entre 1 et 5.

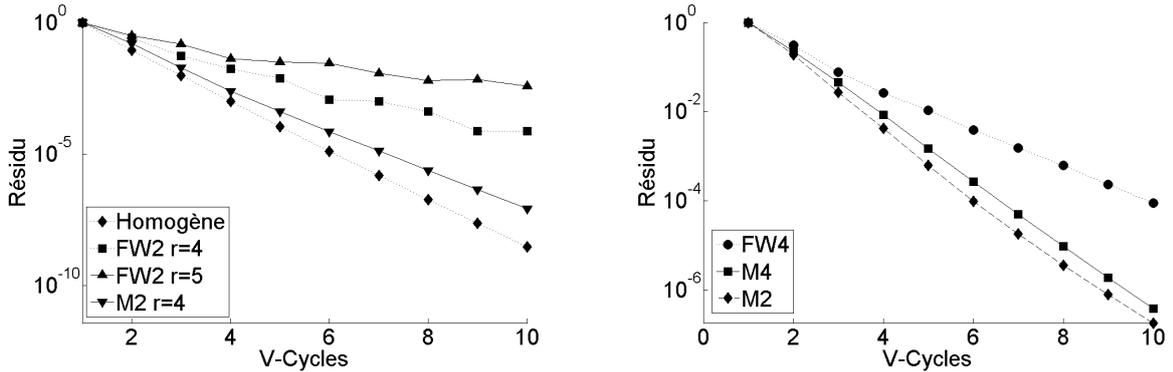
La figure 3.17(a) montre l'évolution du résidu en fonction du nombre de V-cycles lors de la résolution du problème élastique 3D dans un massif de dimension $8 \times 8 \times 8$ mm en acier ($E_s = 200 \text{ GPa}$, $\nu_s=0.3$) chargé ponctuellement au centre. Le maillage utilise 9 niveaux, avec 5 points dans chaque direction sur le niveau le plus grossier et 128 sur le niveau fin (avec raffinement local autour de la zone de chargement). Le revêtement utilisé pour cette



(a) Valeur du paramètre λ sur différents niveaux

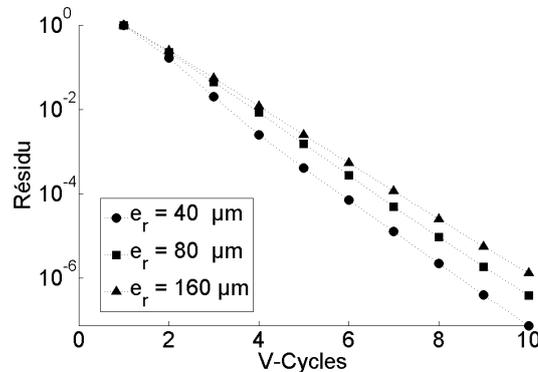
(b) Taux de convergence sur le niveau fin en fonction de l'épaisseur du revêtement avec et sans interpolation des propriétés. Calcul sur 8 niveaux, interpolation avec Full Weighting ordre 2

figure 3.16 - Interpolation des propriétés sur les niveaux inférieurs



(a) Evolution du résidu sur le niveau fin avec les schémas FW2 (Full Weighting d'ordre 2) et M2 (moyenne pondérée d'ordre 2), $e_r = 40 \mu\text{m}$

(b) Evolution du résidu sur le niveau fin en fonction du schéma de restriction (FW4 : Full Weighting d'ordre 4, M4 : moyenne pondérée d'ordre 4), M2 : moyenne pondérée d'ordre 2), $r=4$, $e_r=80\mu\text{m}$



(c) Evolution du résidu sur le niveau fin en fonction de l'épaisseur de la couche, $r=4$, schéma d'interpolation M4, $e_r = 80 \mu\text{m}$

figure 3.17 - Schéma de restriction d'ordre 4

étude a le même coefficient de Poisson que le substrat, un module d'Young qui varie de 200 GPa ($r = E_r/E_s=1$) à 1000 GPa ($r=5$) et une épaisseur de 40 μm .

Deux schémas ont été testés pour ce cas : le schéma de Full Weighting classique d'ordre 2 (noté FW2 sur la figure 3.17(a)) et une moyenne pondérée à l'ordre 2 notée M2. Les motifs de ces schémas s'écrivent :

$$\text{Full Weighting d'ordre 2 : } \frac{1}{4} |1 \ 2 \ 1| \quad (3.26)$$

$$\text{Moyenne d'ordre 2 : } \frac{1}{10} |1 \ 2 \ 4 \ 2 \ 1| \quad (3.27)$$

Le motif (3.27) ramène la convergence à son taux optimal lorsque le rapport des propriétés est égal à 4 ou 5.

Les figures 3.17(a), 3.17(b) et 3.17(c) montrent l'influence d'un schéma d'ordre 4 par rapport aux schémas d'ordre 2 cités précédemment. Ils s'écrivent de la manière suivante :

$$\text{Full Weighting d'ordre 4 : } \frac{1}{32} |-1 \ 0 \ 9 \ 16 \ 9 \ 0 \ -1| \quad (3.28)$$

$$\text{Moyenne d'ordre 4 : } \frac{1}{22} |1 \ 2 \ 4 \ 8 \ 4 \ 2 \ 1| \quad (3.29)$$

Les moyennes pondérées d'ordre 4 ou 2 sont plus efficaces que le Full Weighting. Par contre, dans ce cas-là, l'utilisation d'un ordre 4 n'apporte pas une efficacité supplémentaire. L'expérience a montré que son utilisation devient intéressante dans les cas les plus sévères, lorsque le rapport des modules d'Young est supérieur à 5 avec des pas de maillages de l'ordre du micromètre.

L'interpolation permet de retrouver un ordre de convergence optimal avec un gradient de propriétés important dans le solide. Le schéma d'ordre 4 étant le plus stable, il est utilisé pour les cas présentés dans cette étude.

La méthode présentée dans ce chapitre permet de retrouver un niveau de convergence optimal avec un saut de propriété d'un ordre de grandeur. Lorsque ce rapport est supérieur à 10, la convergence se dégrade, même en utilisant des schémas d'ordre plus élevés. Alcouffe et al. [3] ont présenté une méthode qui permet d'utiliser les techniques multigrilles avec différents schémas itératifs et des discontinuités de plusieurs ordres de grandeur. Cette technique est plus efficace que la restriction des propriétés sur les niveaux les plus grossiers mais demande un travail numérique plus important. Leur implémentation n'est donc pas nécessaire si la discontinuité reste faible.

3.3 Validation

Les résultats obtenus avec le modèle à gradient de propriétés utilisant les techniques multigrilles sont comparés avec des données issues de la littérature. La première étape consiste à utiliser des modèles analytiques simples afin de valider les calculs élastiques. Le modèle est appliqué dans le cas d'un contact bille plan (théorie de Hertz) dont la solution analytique est connue dans un massif homogène. Ce calcul permet de valider le modèle pour des cas purement élastiques sans variation de propriétés.

Ensuite, le logiciel ABAQUS est utilisé pour valider les calculs thermoélastiques dans un massif homogène avec la comparaison successive des champs de température et de déplacements. Enfin, le modèle DF-FFT, développé dans le cadre de ce travail, est utilisé pour valider le calcul élastique 3D dans un massif revêtu et celui de Leroy [74] pour valider le calcul thermoélastique 2D.

3.3.1 Théorie de Hertz

La théorie de Hertz décrit le champ de pression à la surface d'un massif plan en contact avec un cylindre (problème 2D, hypothèse de déformations planes) ou une ellipse (problème 3D). Avec ce champ de pression, il est possible de déterminer analytiquement les contraintes dans le massif.

Le champ de pression en deux dimensions est elliptique :

$$P(y) = \begin{cases} P_h \sqrt{1 - \left(\frac{y}{a}\right)^2} & \text{si } |y| < a \\ 0 & \text{si } |y| > a \end{cases} \quad (3.30)$$

Pour valider les calculs, il est courant d'utiliser la contrainte équivalente de Von Mises, calculée à partir du tenseur des contraintes. Il existe plusieurs versions suivant le domaine d'application. Hills [63] et Johnson [67] utilisent une relation basée sur le second invariant du tenseur :

$$J_2 = \frac{1}{6} [(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + \sigma_{xy}^2] \quad (3.31)$$

et

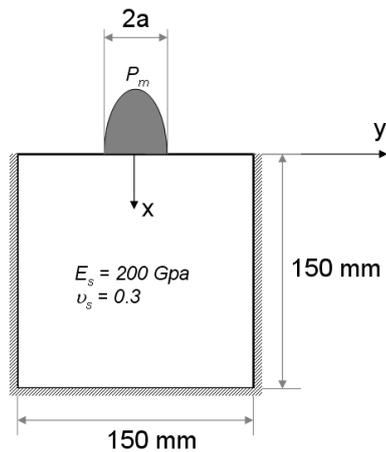
$$\sigma_{vm} = \sqrt{J_2} \quad (3.32)$$

Une étude paramétrique a été menée avec différentes largeurs de contact et différentes valeurs de la pression maximale.

Les résultats obtenus avec le modèle DF-MG sont répertoriés dans le tableau 3.2. La profondeur théorique du maximum de la contrainte de Von Mises donnée par la théorie de Hertz est $x_{\max}/a = 0.7$. Le maximum de la contrainte est $\sigma_{vm}^{\max}/P_m = 0.322$.

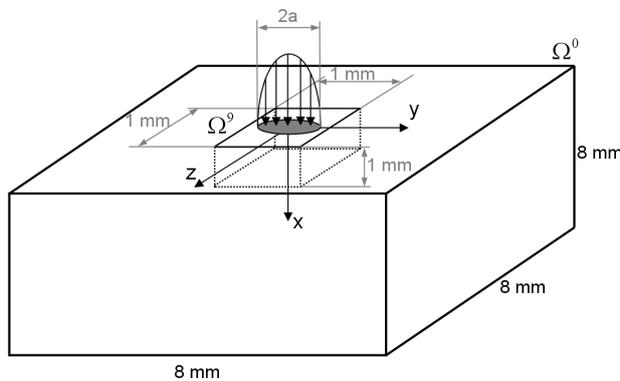
L'erreur entre la valeur théorique et la valeur calculée est d'environ 2.5% sur le maximum de la contrainte de Von Mises et de 0.4 % sur sa position. Cette étude valide le calcul 2D avec hypothèse de déformations planes pour un massif homogène.

Une étude en trois dimensions avec un contact sphère plan a également été menée. La théorie donne une position du maximum des contraintes de Von Mises situé à $x_{\max}/a=0.48$ et une valeur $\sigma_{vm}^{\max}/P_m = 0.36$. Le massif utilisé est en acier de dimensions $8 \times 8 \times 8$ mm. Le maillage est constitué de neuf niveaux raffinés localement. Le niveau le plus fin couvre



Validation contact hertzien 2D

Hypothèse de massif semi-infini : Largeur du solide $> 20a$
 Chargement Hertzien
 Dimensions : 150×150 mm
 Maillage : 10 niveaux
 4×4 points sur le niveau 1



Validation contact hertzien 3D

Hypothèse de massif semi-infini : Largeur du solide $> 20a$
 Chargement Hertzien
 Dimensions du solide : $8 \times 8 \times 8$ mm
 Maillage : 9 niveaux
 Dimensions du niveau 9 : $1 \times 1 \times 1$ mm
 4×4 points sur le niveau 1

une zone de $1 \times 1 \times 1$ mm autour de la zone de contact. Les résultats de cette étude sont répertoriés dans le tableau 3.3. L'erreur est au maximum de 2.2% (cette erreur tend à diminuer sur un maillage plus fin) sur la position et environ 1% sur la valeur, soit une différence similaire à celle rencontrée en deux dimensions.

Ces deux études montrent une bonne corrélation entre la théorie de Hertz et les résultats numériques, validant ainsi le calcul élastique en deux et trois dimensions dans un massif homogène.

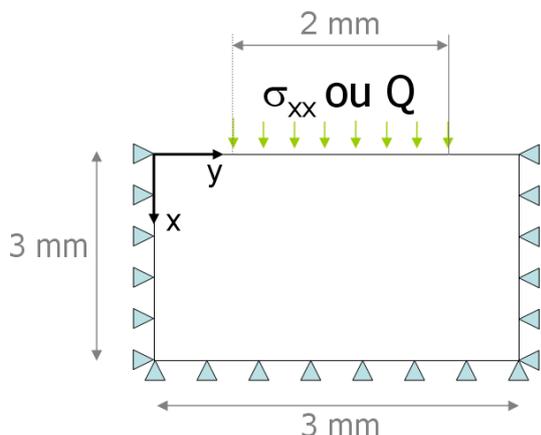
a(mm)	P_m (MPa)	x_{\max}/a	σ_{vm}^{\max}/P_m
5.4	61.8	0.708	0.322
8.2	94.8	0.702	0.328
10.85	124.7	0.702	0.332
13.1	150.6	0.699	0.335
15	171.7	0.696	0.337
16.3	187.25	0.692	0.339
17.12	196.8	0.693	0.34
17.4	200	0.690	0.34
moyenne		0.697	0.33

TAB. 3.2 - *Position et valeur du maximum de la contrainte de Von Mises en fonction de la largeur du contact et de la pression maximale*

a(mm)	P_0	x_{\max}	σ_{vm}^{\max}/P_0	x_{\max}/a
0.15	1318.1	0.0703	0.3544	0.47
0.15	1000	0.0703	0.3545	0.469
0.1	1000	0.0469	0.3503	0.469
0.2	1000	0.0938	0.3558	0.469
0.27	1318.1	0.1296	0.3567	0.48
moyenne			0.3543	0.472

TAB. 3.3 - *Position et valeur du maximum des contraintes de Von Mises dans le cas élastique 3D*

3.3.2 Calculs éléments finis



Validation calcul éléments finis 2D

Chargement constant sur 2 mm
 Dimensions du solide : 3×3 mm
 $k=46 \text{ W/mK}$, $E = 200 \text{ GPa}$, $\alpha = 12 \cdot 10^{-6}$

Maillage DF-MG :
 6 niveaux, pas de raffinement local
 4×4 points sur le niveau 1

Maillage EF :
 2500 éléments CPE4T

Le logiciel commercial ABAQUS a été utilisé pour comparer les résultats de calcul issus des différentes méthodes de discrétisation et de résolution en deux dimensions. Le problème modèle utilisé ici est un solide 2D en acier ($k=46 \text{ W/m}^2/\text{°C}$, $\rho=7800 \text{ kg/m}^3$, $c_p = 460 \text{ J/kg/K}$, $E = 2.10^{11}$) de dimensions $L = 1 = 3$ et chargé avec un flux thermique sur une partie de sa surface libre ($x=0$). La résolution mécanique utilise une hypothèse de déformations planes. Les résultats comparés sont la température, les déplacements et les contraintes à la surface.

Calcul thermique

Dans le cas thermique, le massif est maillé avec les éléments CPE4T (*4-node plane strain thermally coupled quadrilateral, bilinear displacement and temperature*). Le maillage est constitué de 50×50 éléments. La source est un flux constant réparti sur 42 éléments au centre du massif. Les valeurs données dans le tableau (3.4) sont les maxima de température pour différentes valeurs de densité de flux Q (flux imposé à la surface par unité de surface en W/m^2). L'erreur est la différence entre les deux valeurs divisée par la température calculée avec ABAQUS. Les valeurs données dans ce tableau montrent que l'erreur entre

$Q \text{ (W/mm}^2\text{)}$	$T(\text{°C}) \text{ ABAQUS}$	$T(\text{°C}) \text{ DF-MG(2D)}$	erreur (%)
6	719.4	719.96	$6.3 \cdot 10^{-2}$
5	575.5	575.97	7.10^{-2}
4	431.7	431.98	$6.5 \cdot 10^{-2}$
3	287.8	287.98	$6.5 \cdot 10^{-2}$

TAB. 3.4 - Erreur sur le maximum de température

le calcul du solveur multigrilles et ABAQUS est à peu près constante, inférieure à 0.1%. Le calcul thermique stationnaire est correct.

Calcul mécanique

Le problème défini au paragraphe précédent est utilisé. Le flux thermique est remplacé par un chargement mécanique (pression uniforme de 50 MPa sur 2 mm). Les résultats sont répertoriés dans le tableau (3.5). La même discrétisation est également employée. Les comparaisons portent sur le champ de déplacement à la surface. Le maximum du

	ABAQUS	Solveur	erreur(%)
u	1.30310^{-2}	1.3010^{-2}	0.2
v	2.51510^{-3}	2.6110^{-3}	3.6

TAB. 3.5 - Erreur sur les déplacements (%)

déplacement selon x u est proche de celui obtenu à l'aide d'ABAQUS. Des différences apparaissent vers les bords du domaine. En effet, u_{\max} se trouve au centre du massif (du chargement), donc loin des limites, alors que le déplacement v_{\max} est obtenu aux bords de la zone de chargement. La différence de traitement des limites entre notre solveur et ABAQUS peut donc entraîner cette différence dans les valeurs.

Quand le chargement recouvre toute la surface, l'erreur entre les maxima tombe à 0.12% pour v_{\max} et reste à 0.2 % pour u_{\max} . Ceci tend à prouver que le traitement des limites a une grande importance dans le résultat.

Les figures (figure 3.18,figure 3.19) comparent les deux solveurs. Ces deux courbes montrent

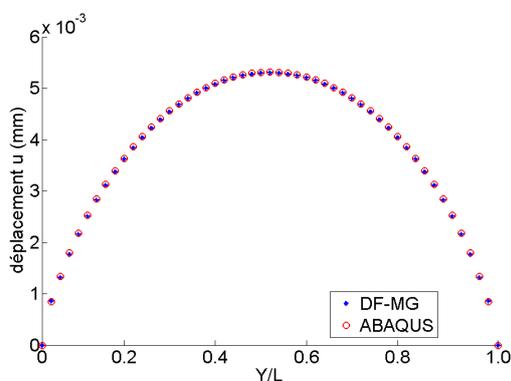


figure 3.18 - Déplacement en surface suivant x

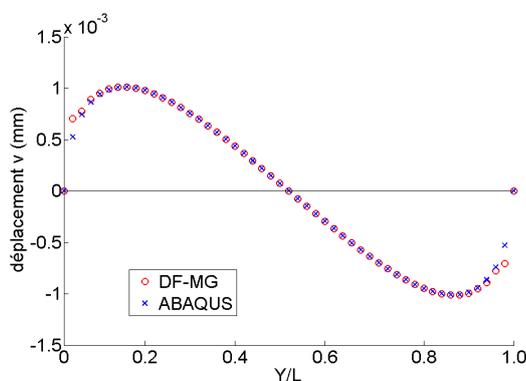


figure 3.19 - Déplacement en surface suivant y

que les résultats sont très similaires.

Calcul thermo-mécanique

Comparons maintenant les valeurs des déplacements dus au gradient de température dans le matériau avec le modèle thermique utilisé dans le paragraphe précédent. Les valeurs sont regroupées dans le tableau (3.6). L'erreur sur la déformation est plus importante avec un chargement de 500 W/m². Il semblerait que les limites du modèle soient atteintes avec cette température.

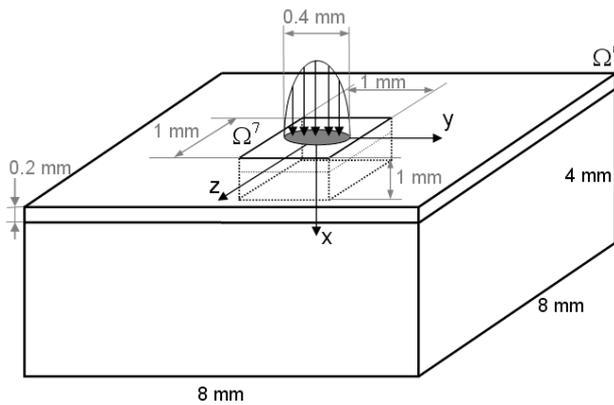
Ces résultats valident le comportement "massif isotrope" en thermomécanique.

Q (W/mm ²)	u (%)	v (%)
5	4.2	1.0
4	0.4	0.4
3	0.2	0.4
2	0.2	0.4

TAB. 3.6 - Erreur sur les déplacements maximum

3.3.3 Modèles multicouches

Calcul élastique 3D



Validation calcul DF-FFT 3D

Chargement hertzien :

$P_0 = 1 \text{ GPa}$, $a = 0.2 \text{ mm}$

Dimensions du solide : $8 \times 8 \times 4 \text{ mm}$

Substrat : $E = 200 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3$

Revêtement : $E = 600 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3$

Maillage DF-MG :

7 niveaux, raffinement local

niveau 7 : $1 \times 1 \times 1 \text{ mm}$

$4 \times 8 \times 8$ points sur niveau 1

Maillage DF-FFT :

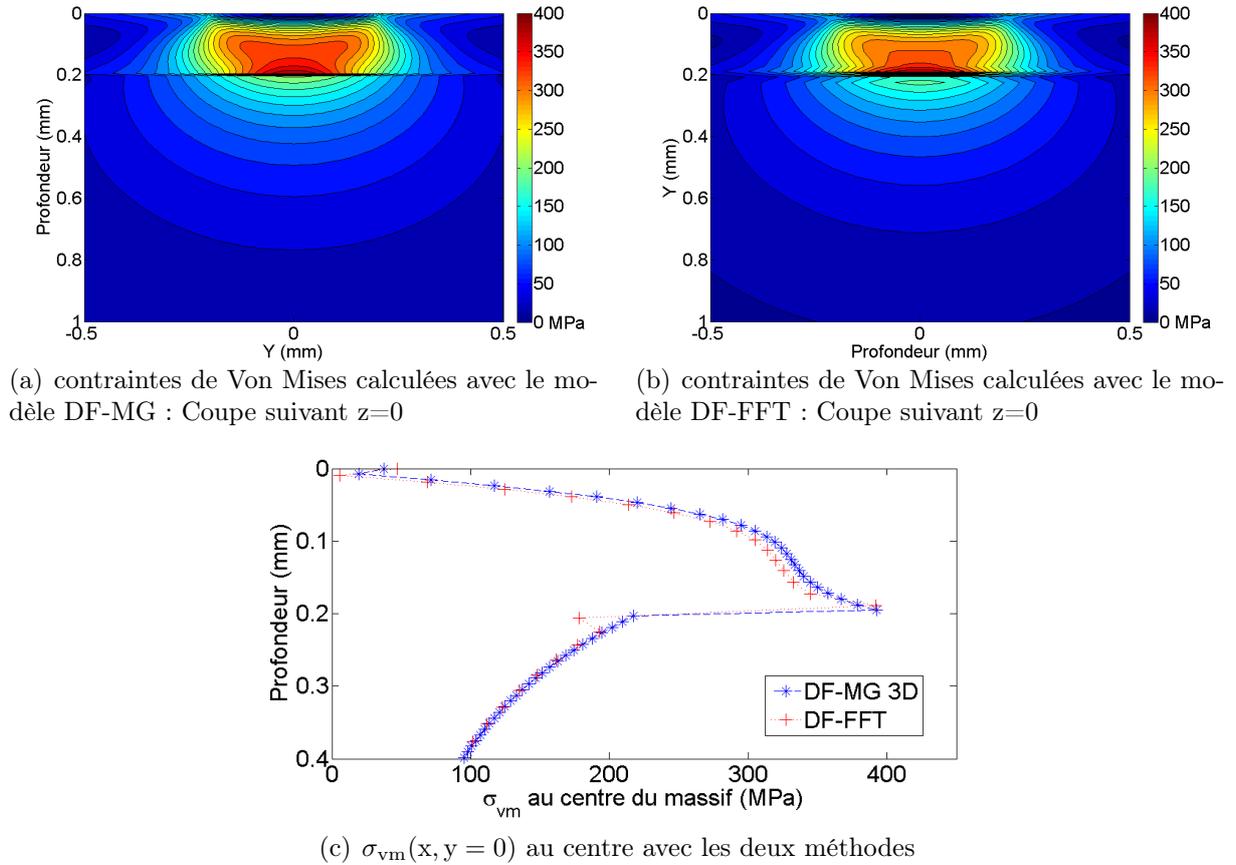
$60 \times 128 \times 128$ (TF suivant y et z)

Les résultats du solveur élastique à gradient de propriétés sont comparés au modèle DF-FFT présenté au paragraphe 3.1. Le problème retenu est un solide en acier avec un revêtement de 0.2 mm de module d'Young $E_r = 600 \text{ GPa}$ et un coefficient de Poisson $\nu_r = 0.3$. L'interface est brutale (un pas de maillage) afin de tester le cas le plus défavorable numériquement comme énoncé au chapitre 2. Le solide est chargé par un champ de pression elliptique ($a = 0.2 \text{ mm}$ et $P_0 = 1000 \text{ MPa}$) appliqué au centre.

Ce calcul est effectué avec 7 niveaux en utilisant le raffinement local ($160 \times 160 \times 160$ points sur le maillage le plus fin) en 25 minutes sur un PC de bureau (PIV 2.66 GHz). Le calcul avec le modèle semi-analytique est effectué avec 128×128 fréquences dans le domaine de Fourier et 70 points dans la profondeur avec variation du pas de maillage en 6 minutes sur le même PC.

Les figures 3.20(a), 3.20(b) et 3.20(c) montrent le champ de contrainte de Von Mises dans une coupe suivant $z=0$. Le maximum se trouve au niveau de l'interface.

La figure 3.20(c) montre que le maximum est le même avec les deux méthodes de résolution. Par contre, la répartition des contraintes dans le revêtement est légèrement différente (erreur maximale entre les deux solutions : 3.2%). Cette différence peut être attribuée à la singularité autour de l'interface dans le solveur utilisant les transformées intégrales.


 figure 3.20 - Contraintes de Von Mises au centre du massif $z=0$

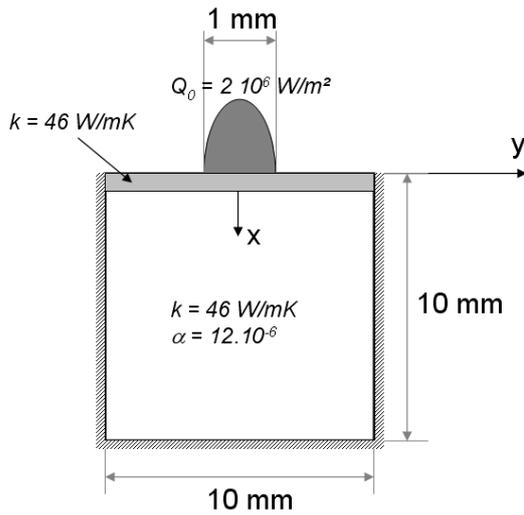
Calcul thermoélastique 2D

La comparaison en thermoélasticité pour un massif revêtu est faite en utilisant le modèle de Leroy [74]. Le solide est un massif semi-infini (solide de grande dimension par rapport à la zone de chargement). Les propriétés du revêtement et du substrat sont celles de l'acier ($E = 200$ GPa, $\nu = 0.3$, $k = 46$ W/mK, $\alpha = 12 \cdot 10^{-6}$), sauf le coefficient de dilatation α qui varie dans le revêtement. L'épaisseur de la couche est de $10 \mu\text{m}$ et la largeur de la source de chaleur elliptique est 1 mm avec un flux maximum de $2 \cdot 10^6$ W/m². Les figures 3.21(a) et 3.21(b) montrent une bonne corrélation entre les résultats du code semi-analytique de Leroy et les contraintes calculées avec DF-MG utilisant une résolution numérique.

Bilan

Différents tests de validation du modèle DF-MG ont été réalisés. Les résultats de calculs ont été comparés avec ceux issus de modèles de comportement de solides soit homogènes soit revêtus avec des revêtements à propriétés constantes. Ces modèles reposent sur différentes méthodes numériques (analytique, transformée intégrale, éléments finis). Les chargements considérés étaient thermiques (flux imposé), mécaniques (pression imposée) ou thermomécaniques.

Des travaux précédents [90, 74] ont montré que dans le cas de revêtements minces, c'est-à-dire pour un rapport e_r/a (avec a demi-largeur de contact et e_r l'épaisseur du revêtement)

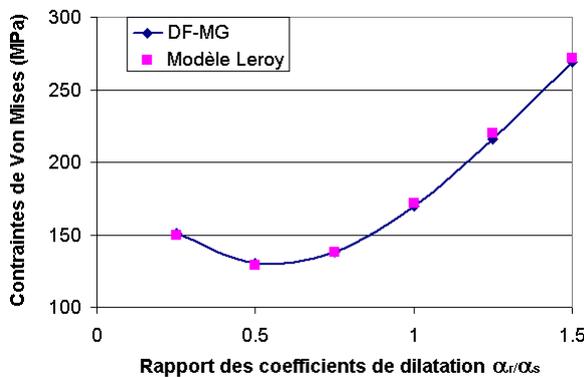


Validation calcul thermoélastique 2D

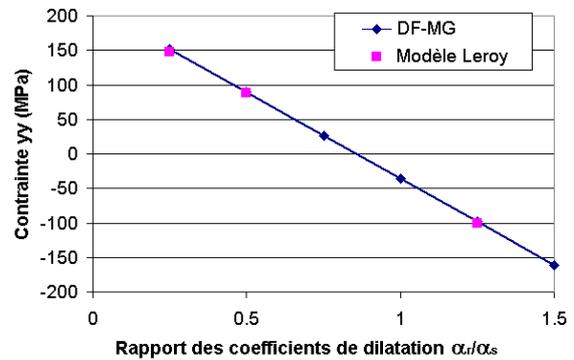
Chargement thermique elliptique :
 $Q_0 = 2 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$, $a = 0.5 \text{ mm}$

Dimensions du solide : $10 \times 10 \text{ mm}$
 Substrat : $k=46 \text{ W/mK}$, $\alpha= 12 \cdot 10^{-6}$

Maillage DF-MG :
 9 niveaux, pas de raffinement local



(a) Contraintes de Von Mises maximum en surface du revêtement



(b) contraintes de traction σ_{yy} maximum en surface du revêtement

figure 3.21 - Comparaison des contraintes maximum en surface entre le modèle multi-grille et le modèle de Leroy [74] dans un massif semi-infini revêtu

inférieur à 10, le champ de pression (intensité et dimension) d'un problème de contact était inchangé dans le cas revêtu par rapport à celui calculé sans tenir compte de la présence du revêtement. Il nous a semblé néanmoins utile d'intégrer dans notre modèle la possibilité de déterminer le champ de pression pour des calculs à charge imposée, ce qui nécessite la résolution du problème de contact.

3.4 Résolution du problème de contact normal

La résolution d'un problème de contact consiste à écrire les équations et les conditions qui font que dans la zone de contact (inconnue a priori), les surfaces des solides sont mises en conformité. La démarche est composée de deux étapes :

1. résolution du problème direct : il s'agit de déterminer la déformation de la surface d'un milieu soumis à une force unitaire en un point de sa surface.
2. résolution du problème inverse : traitement des conditions de contact. On écrit qu'il n'y a pas interpénétration des solides dans la zone de contact et que la pression est nulle en dehors.

Dans le cas d'un comportement linéaire, le principe de superposition de l'élasticité linéaire permet d'écrire le champ de déplacement à la surface des solides en contact comme le produit de convolution des coefficients d'influences (solution du problème soumis à un chargement unitaire) avec le champ de pression :

$$u_{ij} = \sum_{k,l=1}^{N_y, N_z} a_{ijkl} \cdot P_{kl} \quad (3.33)$$

avec u le champ de déplacement à la surface, a la matrice des coefficient d'influence (ordre 4) et P le champ de pression à la surface.

Si les comportements non-linéaires sont pris en compte, le principe de superposition n'est plus valable. Dans ce cas, il faut utiliser des méthodes plus coûteuses pour déterminer le champ de pression.

Dans le cadre de ce travail, les phénomènes non-linéaires ne sont pas pris en compte. Nous nous intéresserons donc seulement aux méthodes linéaires.

Les solutions analytiques ne s'appliquant pas au cas de contact avec un massif multicouche, il faut utiliser une méthode numérique itérative. La résolution numérique du contact impose une discrétisation de la zone de contact potentielle en surfaces élémentaires. Le champ de pression doit être approximé sur chaque élément. Ce type d'approximation peut être fait de différentes manières (voir [67], p145). Généralement, la pression est choisie constante sur chaque élément (champ constant par morceaux, figure 3.22).

Pour déterminer le champ de pression normale satisfaisant les conditions aux limites, deux approches différentes ont été utilisées [67] :

- la méthode directe, avec inversion de la matrice du système. Cette méthode satisfait exactement les conditions aux limites,
- les méthodes variationnelles pour lesquelles les champs de pression sont déterminés par minimisation d'une énergie convenablement choisie.

La méthode directe est très coûteuse en temps de calcul. Elle a été appliquée par Bentson et Johnson [16] en 1967. En 1972 Fischer et Duvault et al. ont montré que la zone de contact et le champ de déplacement à la surface sont ceux qui minimisent l'énergie de déformation du système. En 1978, Kalker développe un algorithme basé sur ce principe de minimisation. Il va ensuite être amélioré principalement par Kalker [69, 70, 71] et Villechaise [112]. Les algorithmes n'utilisent plus la minimisation de l'énergie mais une méthode itérative qui permet de déterminer le champ de pression et la taille de la zone de contact lisse ou rugueux en deux ou trois dimensions. Pour une étude plus approfondie, le lecteur peut se reporter à [90].

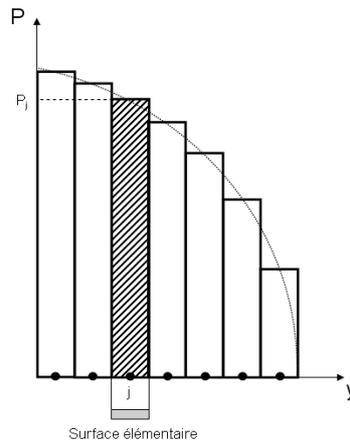


figure 3.22 - *Discretisation du champ de pression*

Méthode du gradient conjugué

En 1997, Nogi et Kato [82] ont utilisé la méthode du gradient conjugué (GC) pour déterminer la zone en contact et y calculer la pression. Le principe est d'utiliser plusieurs itérations sur la pression pour trouver les points dans la zone de contact et limiter le calcul à cette zone. La différence entre les stratégies adoptées par Kalker et utilisées par Plumet [90] et la méthode du gradient conjugué vient des équations résolues pour calculer la zone de contact. Pour contourner le problème de la taille de la zone de calcul, le champ de pression est calculé dans l'espace réel, mais seulement dans la zone de contact (par hypothèse où $p > 0$) avec l'expression suivante :

$$f(x_i, y_i) = \Delta_x \Delta_y \times \sum_{(x_{i'}, y_{j'}) \in \Omega_c} K_f(x_i - x_{i'}, y_j - y_{j'}) p(x_{i'}, y_{j'}) \quad (3.34)$$

Quand un point ne satisfait pas l'hypothèse de contact (pression positive), il sort de la zone de contact et la pression est recalculée dans la nouvelle zone, jusqu'à satisfaction des inégalités sur la pression et les déplacements. On itère ensuite sur la somme des pressions qui doit être égale à la charge appliquée. Si cette égalité n'est pas vérifiée, il faut recalculer sur toute la zone de calcul. Dans ce cas, la résolution du produit de convolution sur Ω est faite avec une FFT (voir 2.6.2).

3.4.1 Résolution du contact normal avec le modèle numérique

Les méthodes présentées jusqu'ici utilisent les coefficients d'influences calculés analytiquement. Ces coefficients représentent le déplacement provoqué par un chargement unitaire sur le solide en contact.

Ces coefficients peuvent être obtenus numériquement. La figure 3.23(a) montre les coefficients d'influence calculés avec le modèle DF-MG et les valeurs théoriques. Les valeurs sont très proches, et les coefficients issus du calcul numérique permettent de résoudre le problème de contact.

La figure 3.23(b) montre les coefficients calculés par le modèle DF-MG en trois dimensions. Là encore, les valeurs sont très proches des résultats analytiques. Ces coefficients

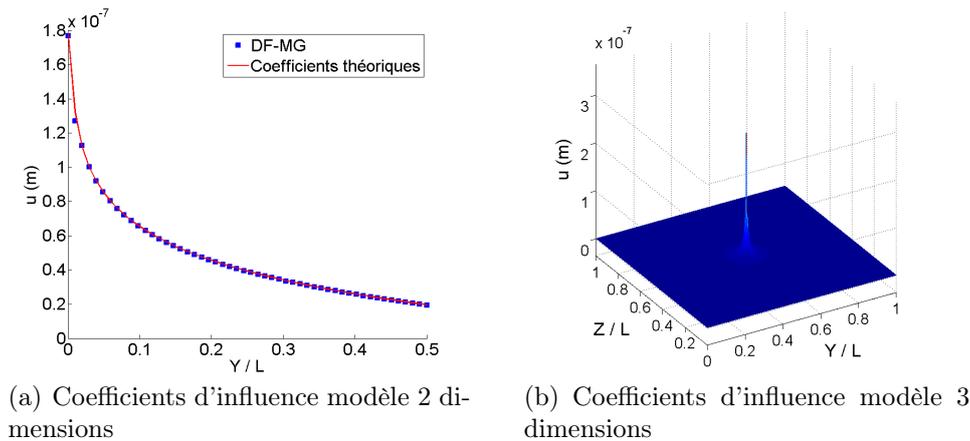


figure 3.23 - Coefficients d'influence sur un solide homogène ($E = 200 \text{ GPa}$, $\nu = 0.3$).

peuvent donc être utilisés dans un algorithme du type Gradient Conjugué présenté dans le paragraphe précédent. L'avantage de cette méthode est que les coefficients sont déterminés pour des massifs homogènes ou des massifs revêtus avec ou sans gradient de propriétés.

3.5 Synthèse

L'objectif de ce chapitre était de décrire le modèle thermoélastique à gradient de propriétés. Pour cela, les équations de l'élasticité (équations de Lamé) et de la thermique ont été discrétisées par la méthode des différences finies.

Cette discrétisation a été préférée à la méthode des éléments finis de par sa plus grande simplicité et également parce qu'elle permet l'utilisation de techniques numériques avancées. Ces méthodes de résolution, auxquelles appartiennent les techniques multigrilles, permettent de réduire le temps de calcul en accélérant la convergence des méthodes itératives classiques. L'inconvénient est qu'elles ne peuvent pas être utilisées comme des "boîtes noires" et doivent être optimisées pour garder une vitesse de résolution optimale. Ceci nécessite l'utilisation de relaxations locales, d'un traitement spécifique des conditions aux limites et l'interpolation des propriétés sur tous les niveaux pour prendre en compte le revêtement sur les maillages plus grossiers. Ces traitements spécifiques ont permis de rendre le solveur plus robuste dans les cas sévères, c'est-à-dire quand les gradients de propriétés sont importants.

Une méthode de raffinement local a également été implémentée. Elle permet de concentrer l'effort de calcul autour du revêtement et de l'interface tout en diminuant le temps de calcul nécessaire à la résolution du problème. La stratégie de raffinement est définie a priori. Son automatiser est possible mais nécessite un investissement important. Enfin, le modèle a été validé avec des résultats analytiques et numériques issus respectivement de la théorie de Hertz et du logiciel ABAQUS. Le solveur permet de traiter un grand nombre de cas sur une géométrie simple avec un chargement thermomécanique quelconque en un temps relativement court. Un algorithme de résolution du problème de contact entre deux solides a également été implémenté afin de permettre le traitement de problèmes à géométrie et charge imposée.

La figure 3.24 montre les données nécessaires et les résultats fournis par le modèle établi

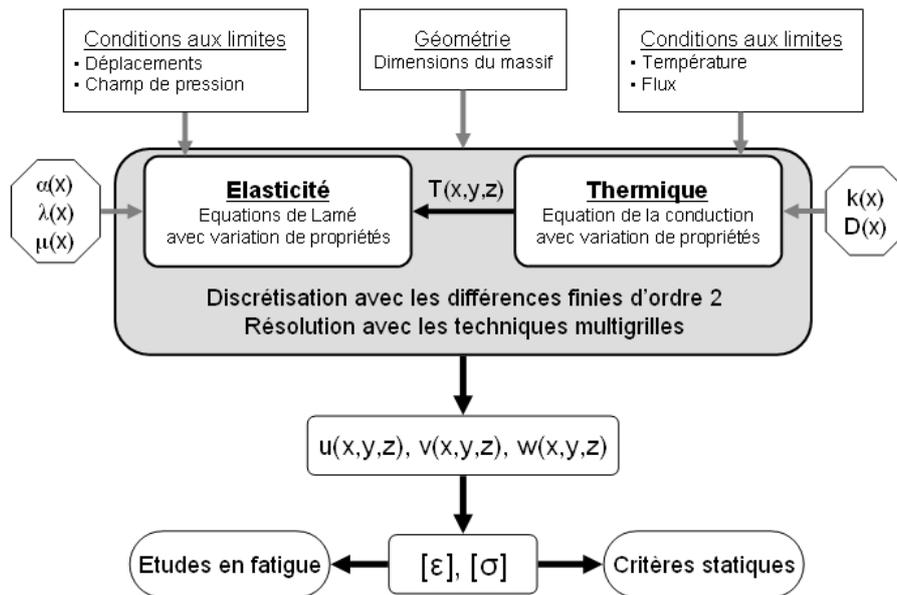


figure 3.24 - Etapes de résolution et d'exploitation des résultats

dans ce chapitre. La principale difficulté réside dans la mesure de la variation des propriétés mécaniques et thermiques dans la profondeur. Ces données vont varier suivant l'épaisseur, la composition et la méthode de dépôt du revêtement. Chaque traitement a donc des propriétés différentes. L'exploitation des résultats demande également de connaître les caractéristiques en résistance du matériau et de l'interface.

Chapitre 4

Étude des revêtements

4.1 Introduction

Le modèle construit dans le chapitre précédent permet de mener des études paramétriques intensives grâce à sa rapidité d'exécution. De nombreux problèmes, et en particulier ceux relatifs à la compréhension de la dégradation des revêtements, peuvent être traités avec la théorie de l'élasticité. La plus grosse difficulté vient le plus souvent du temps de calcul relatif à la finesse de maillage nécessaire à la résolution de ce type de simulation avec des couches minces.

Ce chapitre est consacré à l'étude des revêtements et de leurs caractéristiques. Les calculs de contraintes et de déformations ont été utilisés pour l'analyse du comportement du système multicouches. Nous allons notamment nous intéresser à des cas réels pour lesquels nous disposons de résultats expérimentaux. Des critères simples permettent de prédire les sites de formation de fissures dans une couche polymère. Ce même modèle permet également de comprendre et prédire les contraintes résiduelles issues de l'élaboration du revêtement. Ces contraintes interviennent dans la résistance du système à la fatigue.

4.2 Couches polymères

L'étude décrite ici concerne l'apparition de fissures dans un massif PMMA (de l'anglais *PolyMethyl MethAcrylate*) revêtu de PS soumis à un essai de rayure. Une publication récente [33] a montré qu'un massif polymère revêtu pouvait se fissurer lors d'un essai de rayure sans apparition de plasticité. Un réseau de fissures régulièrement espacées est créé à l'arrière du contact dans le sillon de l'indenteur (cf figure 4.1). Ce type d'endommagement est visible sous certaines conditions de contact : le niveau de déformation (a/R : rapport de la demi-largeur de contact sur le rayon de l'indenteur sphérique) doit être inférieur à 0.1 et la charge assez faible pour rester dans le domaine élastique. Les propriétés des matériaux utilisés sont listées dans le tableau 4.1 avec $\sigma_{y\text{ comp}}$ la contrainte limite de plasticité en compression du matériau et $\sigma_{y\text{ trac}}$ (MPa) la contrainte limite en traction et σ_c la limite à la rupture. Les propriétés des deux matériaux sont assez proches, sauf en ce qui concerne le coefficient de Poisson. Les indenteurs utilisés lors des essais sont en verre. Ils peuvent être considérés comme rigides par rapport au massif polymère, revêtu ou non. L'objectif est de comprendre la formation de ces fissures et de montrer l'effet du coefficient de frottement réel entre l'indenteur et le polymère (à opposer au coefficient de frottement apparent,

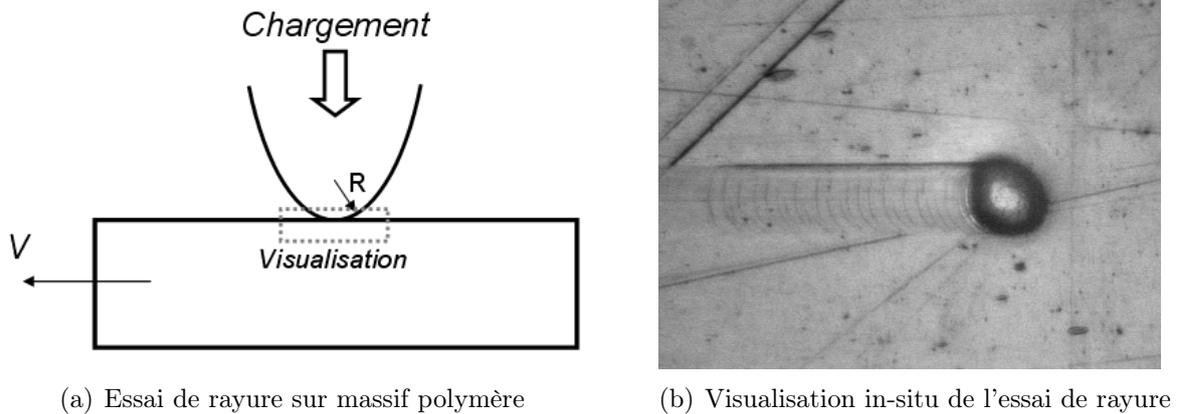


figure 4.1 - Apparition de fissures lors d'un essai de rayure sur PMMA [43]

	E (GPa)	ν	$\sigma_{y \text{ comp}}$ (MPa)	$\sigma_{y \text{ trac}}$ (MPa)	σ_c (MPa)
PMMA	3.3	0.4	136	105	100
PS	3	0.35	105	80	55

TAB. 4.1 - propriétés des polymères. Vitesse de sollicitation $10\mu\text{m/s}$

dont une composante provient de la résistance induite par la formation d'un bourrelet à l'avant du contact).

Les paramètres utilisés sont les suivants :

- contact type hertzien bille/plan (contact circulaire, champ de pression elliptique),
- rayon de l'indenteur : 2 mm,
- charge normale : 5 N,
- module d'Young équivalent : 7857 MPa.

La théorie de Hertz permet de déterminer les conditions de contact : demi largeur de contact $a = 0.124$ mm et pression au centre $p_h = 156$ MPa dans le cas du PMMA non revêtu. Le rapport de déformation (rapport de la demi-largeur de contact et le rayon de l'indenteur sphérique) est 0.062 et la contrainte de traction maximale au bord du contact $\sigma_{xx}^m = 2\mu P_0 = 62$ MPa. Le comportement se trouve donc à la limite de la zone élastique et la zone plastique.

4.2.1 Critères spécifiques aux couches polymères

Les critères utilisés pour les aciers ne peuvent pas être appliqués directement aux couches polymères. Des phénomènes tels que la pression hydrostatique doivent être pris en compte. Demirci [43] utilise le critère de Von Mises modifié et le critère d'Oxbourough et Bowden. Il existe également un critère en cisaillement maximum qui permet de localiser les sites préférentiels d'endommagement. Ces critères sont détaillés par la suite.

Critère de Von Mises modifié

Un critère de plasticité définit les conditions critiques que doit satisfaire le tenseur des contraintes. Pour la plupart des métaux, le critère de Von Mises est satisfaisant. Pour un

matériau vérifiant la loi de Hooke, le critère de Von Mises s'applique si la déformation plastique se produit lorsque l'énergie élastique de distorsion atteint une valeur critique (interprétation de Hencky). Dans ce cas, l'écoulement plastique a lieu lorsque la relation suivante est vérifiée :

$$\sqrt{\frac{1}{6} [(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2]} = \tau_y \quad (4.1)$$

Avec τ_y la valeur limite d'écoulement du matériau.

Des études ont montré que le critère de Von Mises ne peut s'appliquer aux polymères car ils ont un comportement qui dépend fortement de la pression hydrostatique ($\sigma_h = (\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)/3$, avec σ_1 , σ_2 et σ_3 les contraintes principales exprimées en chaque point du massif).

Bowden [22] a proposé une modification de ce critère en considérant une dépendance linéaire des contraintes critiques en fonction de σ_h . Le critère de Von Mises modifié s'écrit :

$$\tau_{oct} - \mu_0 \sigma_h \leq \tau_{octo} \quad (4.2)$$

avec

$$\tau_{oct} = \frac{1}{3} \sqrt{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2}$$

le second invariant du tenseur des contraintes. τ_{octo} est une caractéristique intrinsèque du matériau et représente la contrainte octaédrale critique à la limite élastique. μ_0 est une constante appelée coefficient de sensibilité à la pression hydrostatique. Pour déterminer ces constantes, il existe des méthodes expérimentales basées sur plusieurs tests de traction/compression et cisaillement [93].

Critère en cisaillement maximum ou critère de Tresca

Ce critère postule que la déformation plastique débute lorsque le cisaillement maximum atteint un seuil caractéristique du matériau soit :

$$\tau_{max} = |\sigma_1 - \sigma_2| \leq \tau_{lim} \quad (4.3)$$

Critère d'endommagement

C'est un critère en déformation principale qui tient compte de l'influence de la contrainte hydrostatique. Il a été défini par Oxbourough et Bowden et utilisé par Demirci [43] pour prédire l'apparition de craquelures dans le polymère. Le critère s'écrit de la manière suivante :

$$\varepsilon_1 - \frac{A}{P_h} - B \geq 0 \quad (4.4)$$

A et B sont des paramètres du matériau dépendant de la vitesse de déformation et de la température. Pour le PMMA, Gearing et Anand [53] donnent les valeurs $A = 0.3359$ MPa et $B = 0.0195$.

4.2.2 Étude en deux dimensions

Les coefficients d'influence sont calculés numériquement par un chargement unitaire ponctuel au centre d'un solide revêtu (cf méthode présentée au paragraphe 3.4.1) de dimension $3 \times 3 \times 1.5\text{mm}$. Un raffinement local de maillage est défini sur une zone centrée autour de la zone potentielle de contact. Le calcul est mené avec 9 niveaux ($L_9 = l_9 = 0.3\text{mm}$, $h_9 = 0.1\text{mm}$ et $L_8 = l_8 = 0.4\text{ mm}$, $h_8 = 0.15\text{ mm}$, soit un pas de maillage de $1.46\mu\text{m}$). Les paramètres de contact valent respectivement dans les cas non revêtu et revêtu :

$$\text{vêtu : } \begin{cases} a_0 = 124.1\mu\text{m} & , P_0 = 156\text{ MPa} \\ a_0 = 124.5\mu\text{m} & , P_0^r = 154\text{ MPa} \end{cases}$$

Cette diminution de la pression et légère augmentation de la demi-largeur de contact sont dus au module d'Young de la couche PS légèrement plus compliant que celui du PMMA. Toutefois, les variations sont faibles, ce qui est en accord avec l'hypothèse des couches minces : la présence du revêtement a très peu d'influence sur la répartition des pressions dans le contact si le rapport épaisseur de la couche sur demi-largeur du contact est inférieur à 10 [74].

Pour rester dans des les hypothèses de massif semi-infini (largeur du massif supérieure à dix fois la largeur de contact), le substrat de PMMA est un carré de $4 \times 2\text{ mm}$ de côté. Ce modèle permet d'étudier l'influence du revêtement sur la répartition des contraintes dans le massif. Le maillage est composé de 9 niveaux, avec 8×4 points sur le premier niveau. Le raffinement local de maillage permet de restreindre le dernier niveau à $0.6 \times 0.3\text{ mm}$.

Les isovaleurs des contraintes σ_I , $\sigma_{\text{vm}}^{\text{mod}}$ et τ_{max} dans le massif avec et sans revêtement et un coefficient de frottement de 0.2 sont tracées sur la figure 4.2. Le coefficient de frottement est introduit dans le modèle par les contraintes de cisaillement à la surface telles que $\sigma_{xy} = \mu \sigma_{xx}$, avec μ le coefficient de frottement. L'effet de la couche de PS est visible sur les contraintes de Von Mises et le taux de cisaillement : le substrat est moins sollicité.

La figure 4.3(a) montre l'évolution du maximum des contraintes de Von Mises dans ce massif en fonction du coefficient de frottement. Deux zones se dessinent sur cette courbe :

1. quand le coefficient de frottement est inférieur à 0.20, la valeur maximale reste constante et se trouve sous la surface du massif, mais en est d'autant plus proche que le coefficient de frottement est important. Dans le cas revêtu, elle se trouve à l'interface revêtement-substrat (cisaillement) ou dans le massif (Von Mises). C'est dans cette partie que le rapport contraintes à l'interface sur pression de chargement est le plus important.
2. quand le coefficient de frottement f est supérieur à 0.20, le maximum se trouve à la surface dans les deux cas et sa valeur augmente linéairement avec f .

La figure 4.2(d) montre qu'il y a deux maxima locaux dans le cas revêtu : un à l'avant du contact ($y = 0.125$) et l'autre à l'arrière ($y = -0.125$). Quand f est inférieur à 0.2, le maximum se trouve à l'avant. Quand il est supérieur à 0.2, la valeur à l'avant reste constante et la valeur à l'arrière augmente.

Les figures 4.2(e) et 4.2(f) montrent l'effet du revêtement sur les contraintes de cisaillement. Le maximum se trouve à l'arrière du contact quand le massif n'est pas revêtu. La couche de PS provoque une diminution des contraintes dans le massif de PMMA, mais la

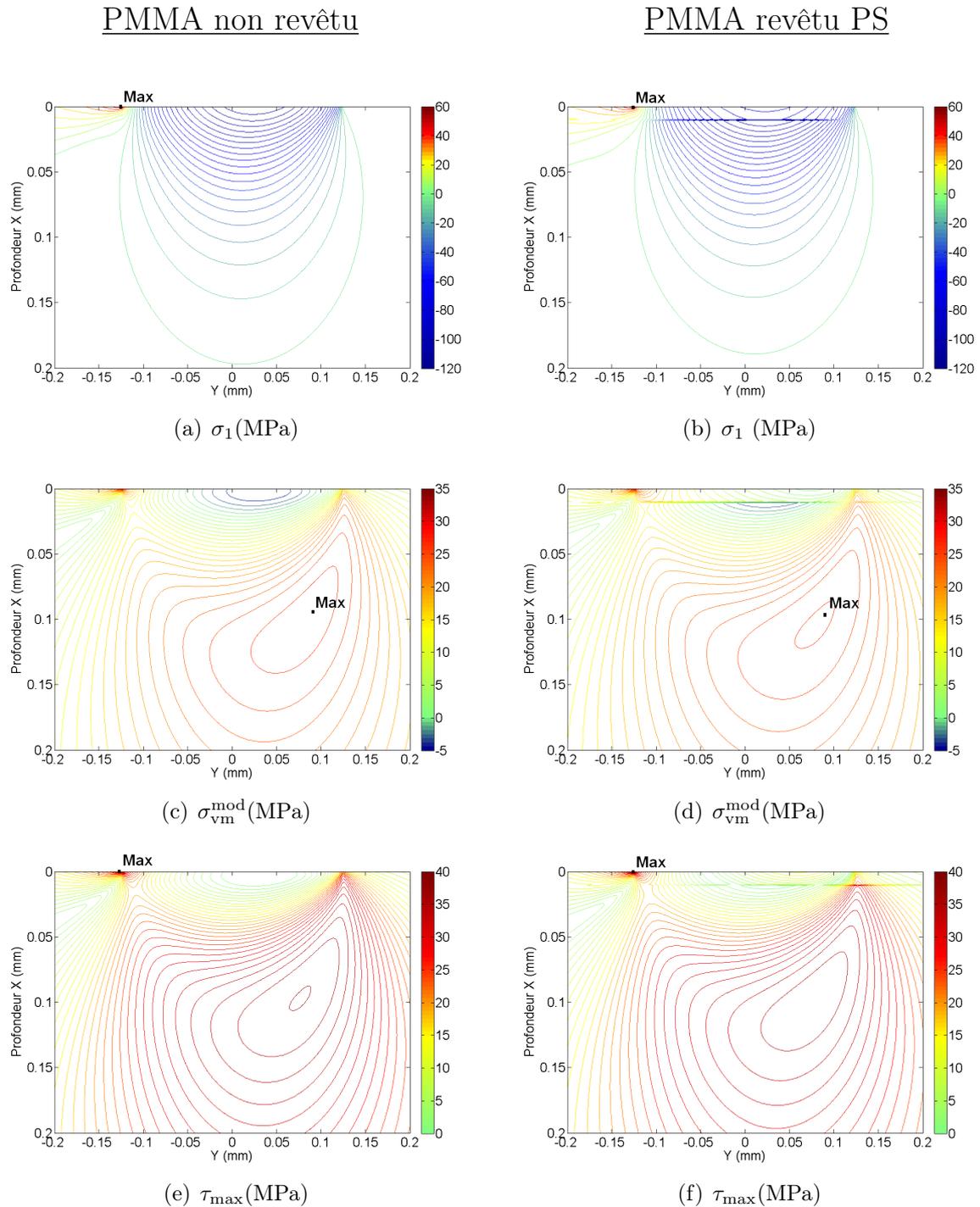
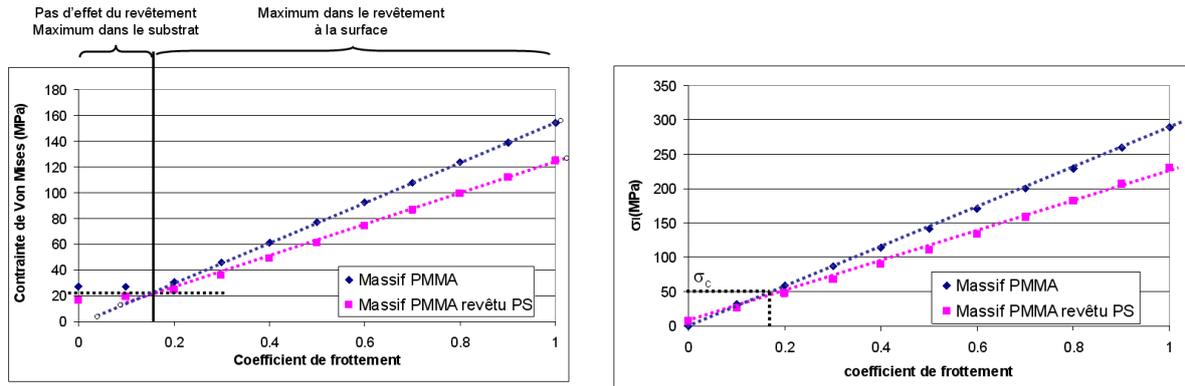


figure 4.2 - Répartition des contraintes dans un massif PMMA soumis à un chargement hertzien et glissant avec un coefficient de frottement $f = 0.2$, $L = 4 \text{ mm}$, $l = 2 \text{ mm}$, $e = 10 \mu\text{m}$



(a) Evolution du maximum des contraintes de Von Mises (b) Evolution du maximum de la contrainte principale σ_1

figure 4.3 - *Contraintes maximales dans un massif PMMA avec ou sans revêtement en fonction du coefficient de frottement - Étude en deux dimensions*

valeur à l'arrière du contact augmente.

L'évolution de l'amplitude du maximum de la contrainte principale σ_1 est représenté sur la figure 4.3(b). L'analyse de cette courbe ainsi que des figures 4.2(a) et 4.2(b) montre que :

1. le maximum se trouve toujours à la surface et à l'arrière du contact,
2. la limite à rupture du PS est atteinte pour $f \approx 0.15$. Au-dessus de cette valeur, et avec le chargement défini plus haut, il y a risque de fissuration de la couche.

Quand $f > 0.2$, les trois critères montrent un maximum à l'arrière et à la surface du massif. Par contre, la zone "critique" avec risque de plastification (contrainte équivalente de Von Mises supérieure à la limite de plasticité) s'étale et pénètre dans la zone de contact.

Cette étude montre donc que le risque est maximum à l'arrière du contact. La comparaison des courbes des contraintes de Von Mises et de la contrainte principale σ_1 montre que la couche de PS se fissure avant apparition de la plasticité. Ces risques augmentent proportionnellement avec le coefficient de frottement.

Par contre les calculs en deux dimensions ne peuvent pas expliquer la forme des fissures. Pour comprendre ce point, une étude en trois dimensions est nécessaire.

4.2.3 Étude en trois dimensions

Chateauminois et al. [33] ont montré que les fissures se formaient à partir du bord du contact vers l'arrière quand la rayure reste dans la zone élastique, c'est-à-dire qu'il y a recouvrance totale de la géométrie initiale après le passage de l'indenteur.

La figure 4.4 montre le rapport des contraintes principales sur la limite en traction de la couche de PS. La ligne indiquée 1 sur la figure 4.4(a) montre la zone où la contrainte principale dépasse la limite de rupture du revêtement à l'arrière du contact. Le domaine

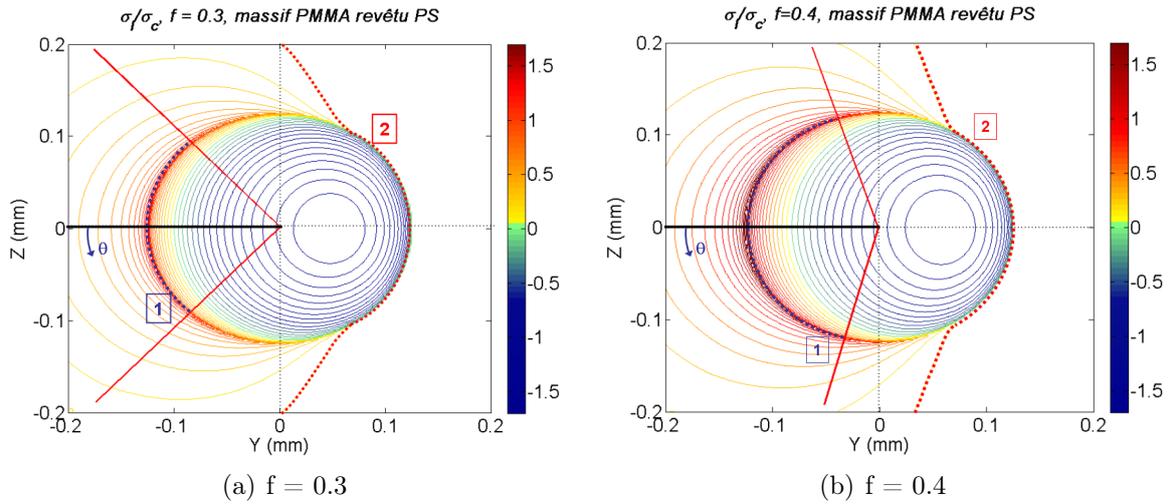


figure 4.4 - contrainte principale en surface et zones potentielles de rupture

angulaire formé par cette ligne (1) augmente avec l'augmentation du coefficient de frottement (cf figure 4.4(b)). La forme en arc de cercle de la variation de σ_1 vers l'extérieur du contact observée sur les réseaux de fissure en régime élastique est semblable à celle représentée sur les figures 4.4(a) et 4.4(b).

La ligne rouge indiquée 2 montre la ligne où la contrainte principale est nulle. Elle montre également que la zone avant du contact subit de forts gradients de contraintes puisque l'on passe d'une contrainte positive à une contrainte négative en quelques micromètres. La forme de cette ligne est semblable aux fissures observées dans le cas de rayures "plastiques".

Les figures 4.5(a) et 4.5(b) montrent les variations de la contrainte de Von Mises modi-

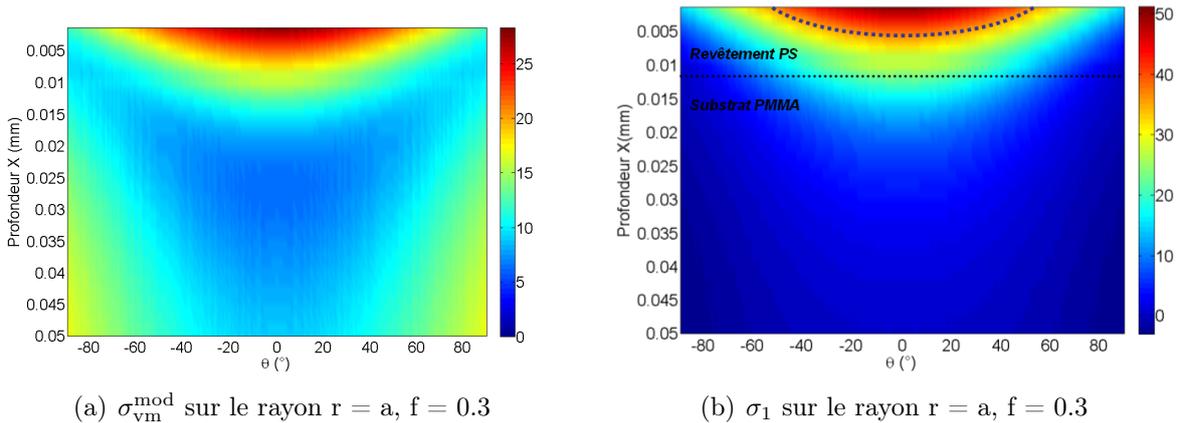


figure 4.5 - contrainte sur le rayon $r = a$ (0.125 mm)

fiée et de la première contrainte principale σ_1 sur le rayon $r = a$ dans la profondeur. $\theta=0$ correspond à $z=0$ et $y = a$; $\theta=90$ à $z = 0$ et $y = 0$. Les contraintes sont maximales à la surface du massif et dans le revêtement. Elles diminuent ensuite dans la profondeur. L'effet de la pression hydrostatique est visible sur la figure 4.5(a) : le substrat est très peu sollicité suivant le critère de Von Mises sous la zone la plus chargée dans le revêtement. Le risque de dégradation dans le substrat au sens de Von Mises se situe donc sur les bords

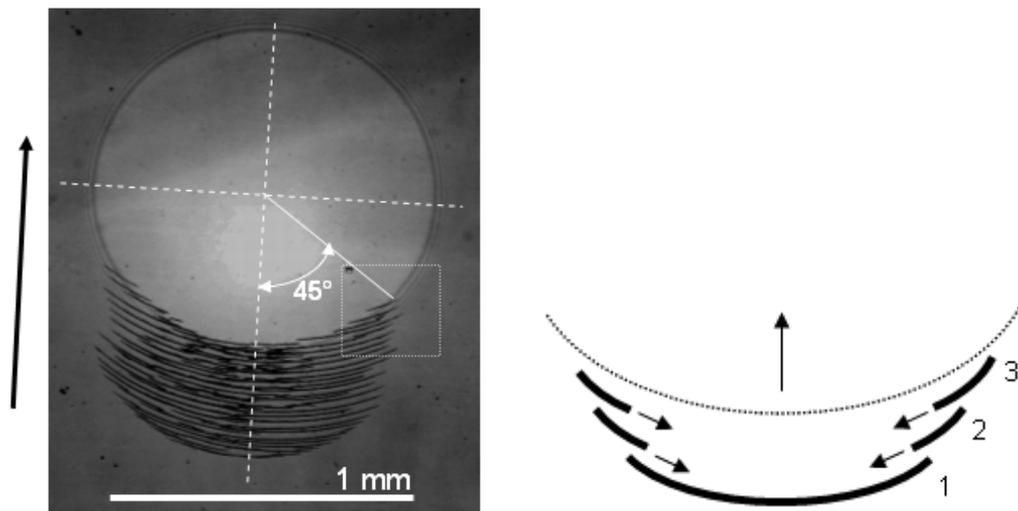
du contact et non à l'arrière comme c'est le cas avec les contraintes principales. Cette particularité n'est pas visible avec la première contrainte principale. La zone où la rupture risque de se produire (cd figure 4.5(b)) se situe à l'arrière du contact. La profondeur endommagée est la plus importante au centre et se propage suivant une ellipse vers les bords.

4.2.4 Résultats expérimentaux

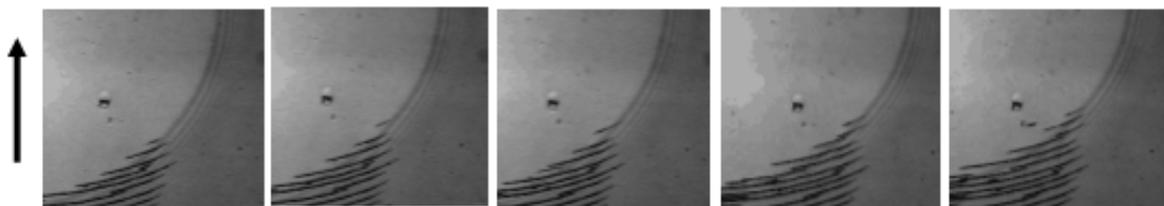
Essais

D'autres essais de rayure ont été menés par Chateauminois et al. [33] avec une pointe large en verre de rayon 9.3 mm sur un revêtement PS de $70 \mu\text{m}$ et un substrat de PMMA. Les caractéristiques des essais de glissement sont les suivants :

- rapport $a/h = 7$,
- rapport $a/R = 0.051$
- vitesse de glissement : 0.01 mm/s ,



(a) Contact lentille-massif PMMA revêtu PS (b) Mécanisme de formation des fissures



(c) Grossissement autour de la zone de formation des fissures

figure 4.6 - *Contact entre une lentille de verre et le massif PMMA revêtu PS soumis à un test de glissement. $R = 9.3 \text{ mm}$, $V = 0.01 \text{ mm/s}$ [33]*

Les conditions de chargement sont purement élastiques. La figure 4.6(a) montre la formation de fissures à l'arrière de la zone de contact sous l'effet de contraintes de traction selon un phénomène de rupture fragile. Des simulations en deux dimensions dans un massif fissuré permettent d'expliquer la formation de ce réseau régulier de fissures. Les auteurs ont

montré que la première fissure (cf figure 4.6(b), étape 1) se formait à l'arrière du contact dans la zone la plus contrainte faisant baisser la sollicitation subie par le matériau. Les autres fissures se forment ensuite à partir des bords du contact et se propagent vers le centre du contact. Par contre, la profondeur de la fissure est inconnue. L'objectif ici est de voir si la couche est rompue sur toute l'épaisseur ou seulement sur une partie comme le laisse penser la figure 4.5(b).

Simulation

La première étape consiste à déterminer le champ de pression et la largeur de la zone de contact. Sur un massif de PS, la théorie de Hertz donne, pour une charge $W = 50.8$ N des valeurs de P_{\max} et a de 109 MPa et $472\mu\text{m}$ respectivement.

Le rapport a/h étant de 7, l'hypothèse de couche mince ne peut pas être appliquée dans ce cas car la modification de la zone de contact par le revêtement n'est pas négligeable. Dans le cas revêtu, les paramètres du contact ont été calculés à l'aide de notre modèle et valent $P_{\max} = 117$ MPa et $a = 455\mu\text{m}$ avec un indenteur supposé rigide. Ces données sont utilisées pour les simulations suivantes.

Les calculs sont menés sur un massif de largeur 20 mm et d'épaisseur 10 mm. 9 niveaux sont utilisés avec $4 \times 8 \times 8$ point sur la première grille. Le dernier niveau est restreint sur un domaine de taille $1.2 \times 1.2 \times 0.4$ mm soit $155 \times 155 \times 50$ points de maillage. Le calcul sur un PC de bureau (PIV 2.66) dure environ 25 minutes.

La figure 4.7(a) montre la valeur de la contrainte principale dans la profondeur du massif sur le rayon de contact. La profondeur de la zone où la contrainte principale est supérieure à la limite à rupture lors du passage de la lentille correspond environ à la moitié de l'épaisseur de la couche. En dessous, les contraintes sont inférieures à la limite à rupture du matériau. La figure 4.7(b) montre ces contraintes à la surface. La zone où la traction est supérieure à la limite du matériau fait un angle d'environ 50° . Cette valeur est proche de celle mesurée expérimentalement (cf figure 4.6(a)). Le paragraphe précédent a montré que cet angle augmentait avec le coefficient de frottement. Une valeur de 0.3 semble tout à fait convenable pour ce type de contact. Enfin, la figure 4.7(c) représente l'évolution de la première contrainte principale dans l'épaisseur suivant une coupe en $z = 0$. La discontinuité entre la couche de PS et le substrat de PMMA apparaît. Une hypothèse de variation brutale a été retenue puisque la couche est déposée par voie solvant avec une couche de copolymère de 40 à 50 nm d'épaisseur. La zone de transition entre les deux matériaux est donc très fine.

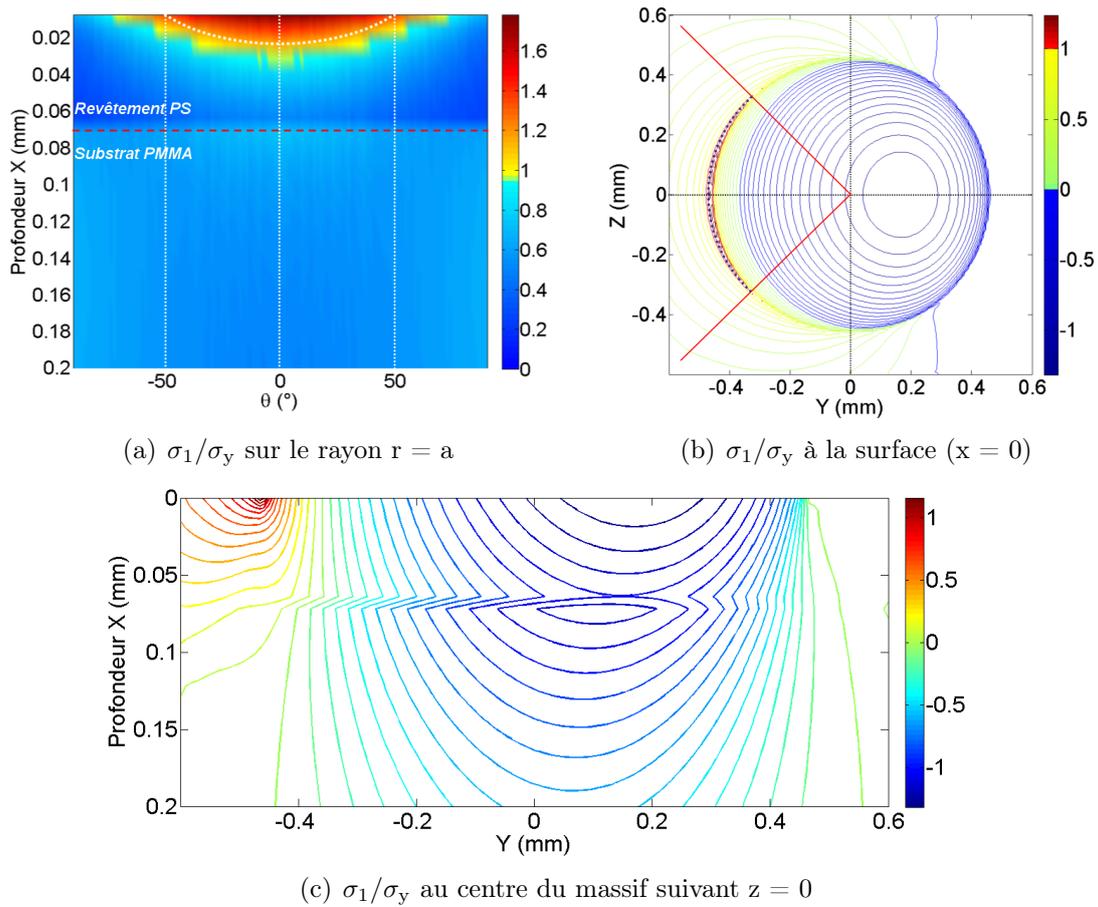


figure 4.7 - Simulation du contact entre une lentille de verre supposée indéformable et le massif PMMA revêtu PS soumis à un test de glissement. $R = 9.3$ mm, glissement total, $f = 0.3$ [33]. Première contrainte principale divisée par la limite à rupture en traction du PS : $\sigma_y = 55$ MPa

4.3 Effet du gradient de propriétés sur les contraintes résiduelles

4.3.1 Description du problème

L'objet de cette partie est l'étude des contraintes résiduelles dans un revêtement de diamant sur un substrat en alliage de titane (TA6V). Une couche de $3 \mu\text{m}$ est déposée à 600°C sur un substrat de 7 mm d'épaisseur et 16 mm de diamètre. Pendant l'opération, le substrat est posé sur un support dans l'enceinte de dépôt.

Les contraintes résiduelles dans la couche de diamant sont essentiellement d'origine thermique (voir 1.3.3) et sont imposées par le substrat lors du retour à la température ambiante à la fin du procédé de dépôt. Des mesures par spectrométrie RAMAN permettent de déterminer ces contraintes [95, 58]. Le calcul théorique des contraintes par la loi de Hooke (cf 1.3.3) prévoit des contraintes de compression parallèles à la surface de l'échantillon de l'ordre de 6 GPa . Les mesures mettent en évidence des contraintes résiduelles de tension perpendiculairement à la surface d'un ordre de grandeur beaucoup plus faible, quelques centaines de MPa. L'objectif des simulations est d'aider à comprendre l'origine de ces contraintes, que les théories classiques ne peuvent pas expliquer.

4.3.2 Données sur les matériaux

La couche de diamant est déposée sur une interphase de carbure de titane (TiC, cf figure 4.8) créée par diffusion sur TA6V. La variation de propriétés va donc se faire graduellement entre le diamant et l'alliage de titane. Les propriétés des trois matériaux sont données dans le tableau 4.2 [44, 38].

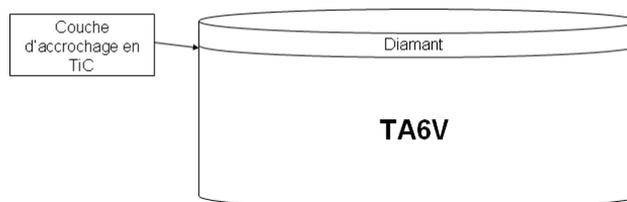


figure 4.8 - *Echantillon*

matériau	E(GPa)	ν	α
Diamant polycristallin	1050	0.1	$0.8 \cdot 10^{-6}$
TA6V	110	0.36	$9.5 \cdot 10^{-6}$
TiC	460	0.17	?

TAB. 4.2 - *propriétés des matériaux de l'échantillon revêtu*

Les épaisseurs apparentes des couches sont les suivantes :

- épaisseur de la couche de diamant : $3 \mu\text{m}$
- épaisseur de la couche de TiC : 250 nm
- épaisseur du disque en TA6V : 7 mm .

4.3.3 Revêtement isotrope, interface abrupte

Le modèle thermoélastique décrit au chapitre précédent a été modifié pour tenir compte des surfaces libres et de la géométrie de l'échantillon. Toutefois, le modèle utilisé est en deux dimensions avec une hypothèse de déformations planes, ce qui est assez loin de la réalité puisque l'échantillon a une géométrie axisymétrique. Il s'agit essentiellement ici d'obtenir des ordres de grandeur du champ de contraintes résiduelles. Dans un premier temps, trois faces du solide sont supposées libres (cf 4.9(a)) et la base du solide est encastré : tous les déplacements sont bloqués. Le massif revêtu passe de $+600^{\circ}\text{C}$ à 0°C .

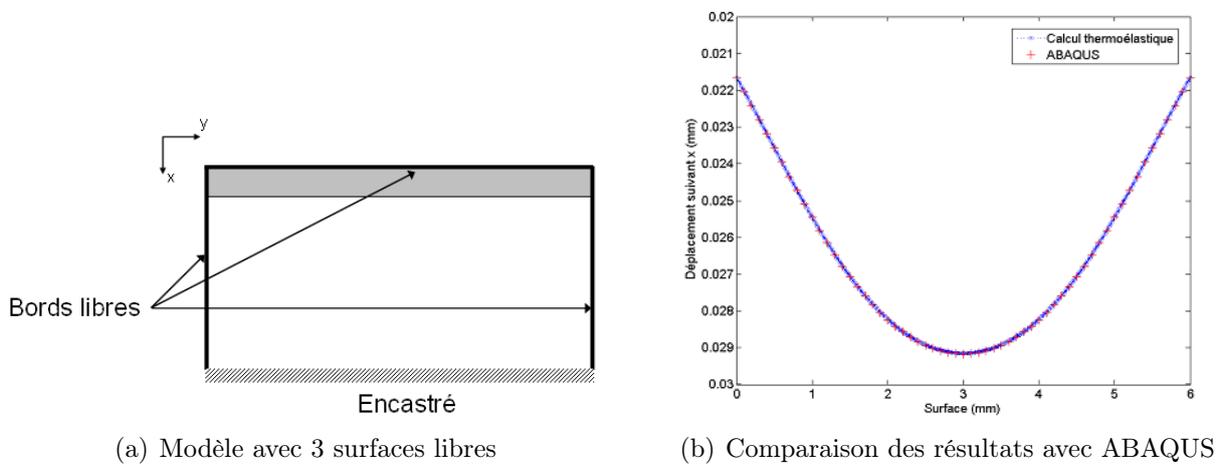


figure 4.9 - Modèle avec trois surfaces libres soumis à une variation de température

Les calculs sont effectués en statique, c'est-à-dire à l'état d'équilibre. Le premier calcul, effectué avec un massif en TA6V, a été également conduit avec un modèle éléments finis construit avec ABAQUS pour valider le modèle (cf figure 4.9(b)).

Dans les cas avec revêtement, les conclusions sont les suivantes :

- le revêtement n'influence pas la dilatation du massif. Il subit donc les déformations imposées par le substrat.
- il y a des contraintes de compression très élevées dans la couche de diamant suivant la direction parallèle à la surface. L'amplitude est un peu plus élevée que celle mesurée (7 GPa au lieu de 6 mesurés). Cette différence peut être attribuée à l'hypothèse de déformations planes et aux conditions aux limites du modèle : l'encastrement n'est pas adapté pour modéliser le comportement du massif qui ne peut pas se dilater librement.
- avec une variation brutale de propriétés, les contraintes σ_{xx} et σ_{xy} sont nulles dans le revêtement et dans le substrat.

Afin d'améliorer la qualité du modèle, les conditions aux limites ont été modifiées en utilisant une relation de symétrie (cf 4.3.3). Cette relation permet au massif de se dilater dans toutes les directions sans imposer de déformations supplémentaires. Les contraintes σ_{yy} diminuent légèrement dans la couche, sans toutefois atteindre les valeurs obtenues expérimentalement.

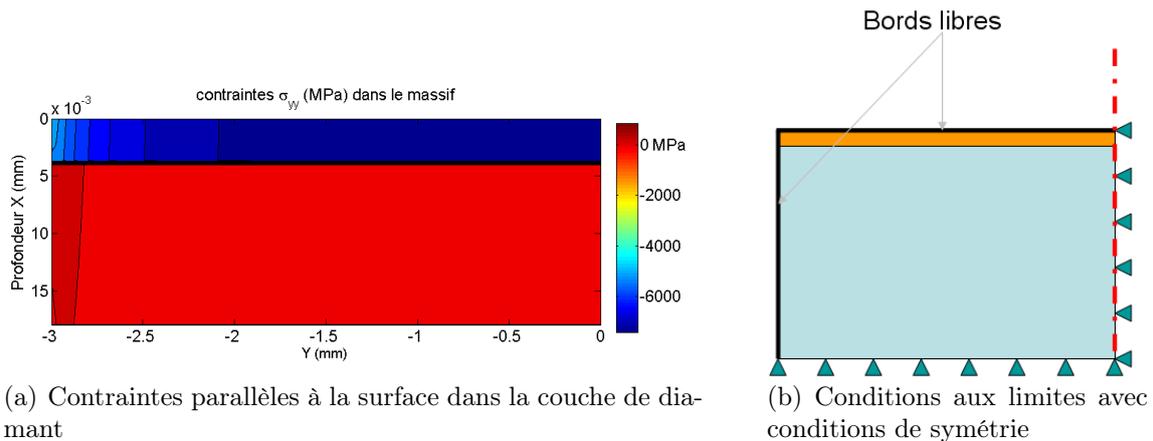


figure 4.10 - Modèle avec deux surfaces et une condition de symétrie

4.3.4 Revêtement à gradient de propriétés, interface diffuse

Le paragraphe précédent a montré que les contraintes dans un revêtement homogène sur un substrat homogène étaient nulles dans la direction perpendiculaire à la surface. Les revêtements de diamant ne sont pas composés d'une seule couche homogène. Leur structure évolue avec la profondeur [37] : le procédé de diffusion utilisé pour développer la couche d'accrochage crée un gradient de propriétés dans le substrat. Ensuite, la couche TiC sert de base au revêtement de diamant : cette couche n'est pas homogène, puisque le carbone de la couche supérieure va diffuser dans la couche d'accrochage. Enfin, les propriétés du carbone vont varier d'une configuration sp^2 vers une configuration sp^3 dans le diamant. Là non plus, les propriétés ne sont pas homogènes [48] (cf figure 4.11). Tous ces indices montrent que les propriétés mécaniques et thermiques ne sont pas constantes dans l'épaisseur. Elles varient entre celles du substrat et celle du diamant polycristallin.

Pour représenter cette variation plusieurs modèles sont utilisés : un modèle avec trois

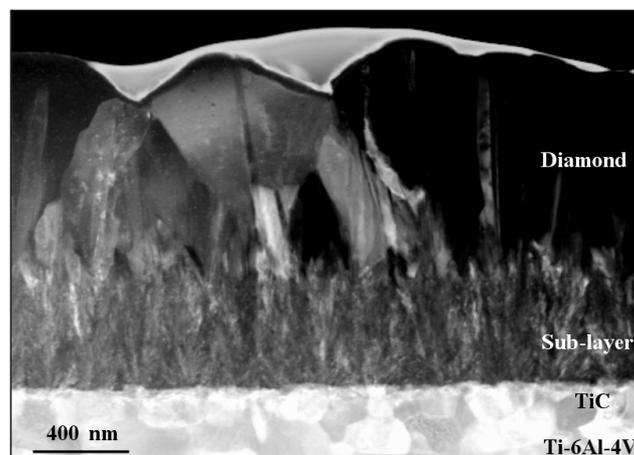


figure 4.11 - Microstructure d'une couche de diamant sur un substrat de TA6V
©L.Vandenbulcke

couches et un autre utilisant une variation linéaire des propriétés mécaniques E , α et ν entre le revêtement et le substrat (cf figure 4.12(a) et 4.12(b)) :

- la modélisation avec trois couches ne change pas le résultat : dans la direction parallèle à la surface (σ_{yy}), la valeur maximale ne change pas, et dans la direction perpendiculaire (σ_{xx}), leur valeur est nulle.
- l'introduction d'un gradient de propriétés change le comportement des contraintes σ_{xx} . Elles varient entre -25 et +25 MPa dans la zone de gradient (cf figure 4.13(b)).

Ce résultat est intéressant puisqu'il donne un début de réponse au problème posé. En effet, cette variation de 50 MPa est inférieure à ce qui a été mesuré expérimentalement, mais la variation de propriétés peut aussi se traduire par des contraintes d'origine structurale (cf chapitre 2, contraintes résiduelles). Les pics de contraintes sur la figure 4.13(b) peuvent avoir plusieurs origines. La première est numérique. La variation de propriétés entraîne des instabilités dans le processus de résolution. Toutefois, le modèle a été validé et les instabilités sont bien maîtrisées. De plus, les cas à saut de propriétés ne montrent aucune oscillation d'origine numérique. La seconde origine est le couplage des effets thermiques et mécaniques. Les variables de Lamé, et en particulier μ montrent une variation semblable à celle des contraintes. Ces effets de couplage sont étudiés plus en détail dans le dernier chapitre sur l'application injection.

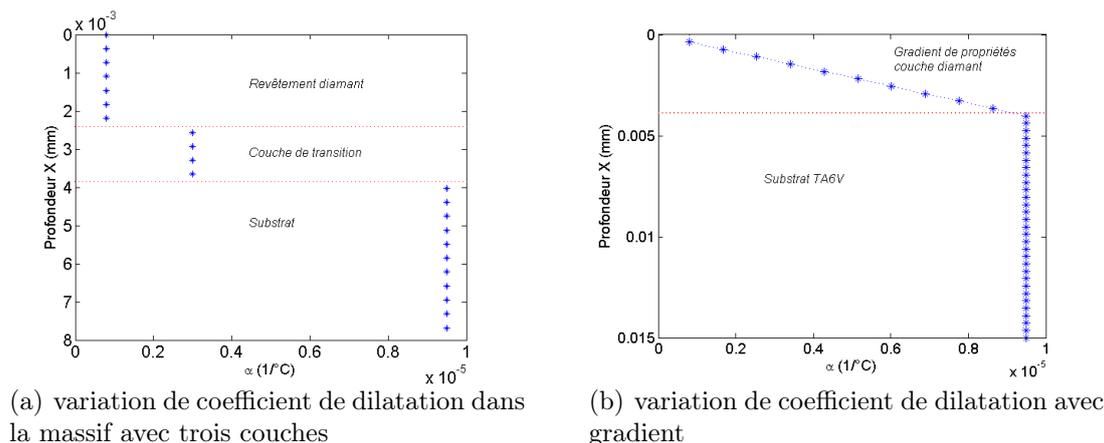


figure 4.12 - gradients de propriétés dans l'épaisseur du revêtement

4.3.5 Conclusions

Le modèle thermomécanique présenté dans le chapitre 3 permet de calculer les contraintes résiduelles d'origine thermique dans un revêtement à partir du cycle de température auquel il est soumis lors de son élaboration. L'introduction d'un bord libre et d'une condition de symétrie permet de se rapprocher des conditions expérimentales. Toutefois, la géométrie de l'échantillon est encore assez éloignée du modèle 2D qui utilise une hypothèse de déformations planes. Ceci explique en partie que les contraintes calculées surestiment la valeur expérimentale. Toutefois, ces calculs montrent que le gradient de propriétés introduit des contraintes de traction et de compression dans la direction perpendiculaire à la surface du massif sans atteindre les valeurs relevées expérimentalement. Ces valeurs doivent aussi avoir une origine structurale.

Cette hypothèse de variation de propriété permet également de se rapprocher de la réalité

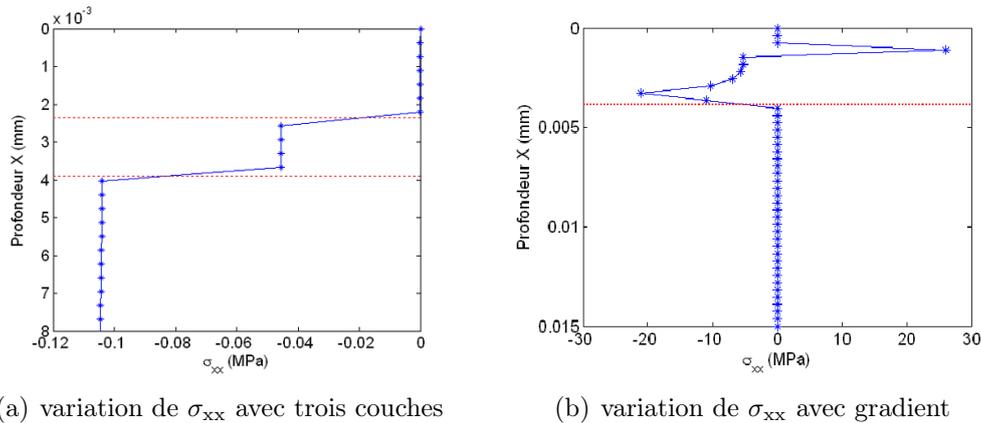


figure 4.13 - Variation des contraintes perpendiculaires à la surface dans un massif avec 3 couches et avec gradient de propriétés dans l'épaisseur

physique du matériau dont la structure évolue dans l'épaisseur entre le TA6V (substrat) et le diamant polycristallin (revêtement).

4.4 Bilan

Ce chapitre présente trois études sur les revêtements. La première concerne la fissuration d'une couche de PS sur un substrat PMMA. Cette rupture du film intervient dans le domaine élastique. Les calculs ont montré que la première contrainte principale dépasse la limite à la rupture sur un arc situé sur le bord arrière de la zone de contact. Cet arc est d'autant plus large que le coefficient de frottement entre l'indenteur et le polymère est grand. Il a également été montré que le revêtement rompt sur environ la moitié de son épaisseur. Ces données peuvent être utilisées par la suite pour simuler le champ de contrainte dans le massif fissuré.

La seconde partie de ce chapitre était consacrée aux contraintes résiduelles dans une couche de diamant polycristallin sur un substrat en titane. Ces contraintes sont principalement parallèles à la surface, mais des mesures sur spectromètre RAMAN laissent penser qu'il y a également une composante normale d'environ 100 MPa. La simulation classique utilisant deux couches (revêtement et substrat) ou plus, avec des propriétés constantes, ne permet pas d'expliquer ce phénomène. Par contre, l'introduction d'un gradient de propriétés dans l'épaisseur du revêtement fait apparaître des contraintes perpendiculaires à l'interface. La forme de cette variation reste à définir, mais l'observation d'une coupe montre que la structure de la couche n'est pas homogène.

Chapitre 5

Application aux moules d'injection

5.1 Introduction

Les fabricants et les utilisateurs de pièces plastiques injectées sont de plus en plus exigeant sur la qualité des surfaces. Les défauts de surface provoquent le rejet des pièces. Ces défauts ont de nombreuses origines, parmi lesquelles la thermique du moule, le frottement entre le polymère et l'acier ou des défauts de surface provenant des nettoyages réguliers obligatoires afin d'éviter l'encrassement du moule. Pour les trois principaux partenaires industriels de ce projet, VALEO éclairage, L'OREAL et ESSILOR, cette situation se traduit par des taux de rebuts moyens pour défauts d'aspects variant de 7 à 15%, soit un coût total direct de plus de 60 M€/an. Les propriétés attendues du revêtement sont donc de limiter l'apparition de rayures et de diminuer la réactivité de la surface avec la matière fondue (collage, oxydation, ...) afin de réduire la fréquence d'entretien.

Le processus de choix d'un revêtement ou d'un traitement de surface est une tâche longue et complexe. Il faut dans un premier temps déterminer les fonctions attendues puis en déduire les propriétés de la couche. Il faut également s'assurer que le choix est compatible avec les sollicitations imposées au système. Le modèle développé dans les chapitres précédents peut être utilisé pour accélérer le processus de sélection et apporter des réponses sur les modifications nécessaires afin d'optimiser les propriétés de la couche en fonction des sollicitations.

Trois revêtements ont été sélectionnés par le fabricant HEF en fonction des spécifications et de mesures expérimentales :

- TiN (Nitrure de Titane),
- CrN (Nitrure de Chrome),
- DLC (*Diamond Like Carbon*)

5.2 Présentation du problème

La détérioration de l'état de surface des inserts du moule provoque une dégradation de l'aspect et du niveau de qualité des pièces moulées. Ces exigences d'aspect ont évolué plus vite que les connaissances techniques et scientifiques. La qualité d'aspect dépend donc fortement de la surface du moule. Leurs performances et leur durée d'utilisation peuvent être améliorées par un traitement de surface. Malheureusement, la qualité obtenue par les différentes solutions existantes n'est pas satisfaisante. Les couches minces testées au cours

de ce projet doivent permettre d'atteindre les critères de qualité requis.

Les études existantes sont essentiellement centrées sur l'écoulement du polymère sur une surface en acier. Le moule est alors vu comme une condition aux limites avec une température constante et une vitesse nulle à la paroi. L'approche proposée ici a comme objectif l'analyse du comportement du moule. Cette fois, c'est le polymère qui est vu comme une condition aux limites (flux thermique, champ de pression normale et tangentielle). Une des difficultés est la quantification de ces valeurs. Ainsi, le transfert thermique dépend des conditions d'injection, de la rugosité de surface, des conditions d'adhésion surface/matière ...

Ces phénomènes complexes seront ici pris en compte via une description phénoménologique. Un paramètre d'échange "global" nous permettra de simplifier le problème.

5.3 Injection des thermoplastiques

5.3.1 Présentation du procédé

Le procédé d'injection permet la fabrication de pièces de formes complexes en grandes séries. La presse à injecter comprend une unité de fermeture et une unité de plastification (respectivement figure 5.1 et figure 5.2), dans laquelle est fixée le moule. Dans le cas des polymères thermoplastiques, le moule est régulé en température afin de figer le plus rapidement possible la matière injectée. Le cycle d'injection est un processus discontinu

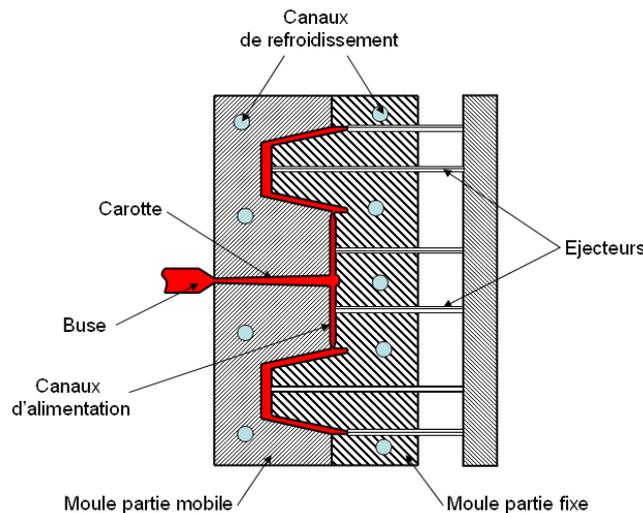


figure 5.1 - Représentation schématique d'un moule d'injection

qui se déroule en 4 phases :

1. **plastification** : le polymère est fondu dans un dispositif de plastification : l'extrudeuse (cf figure 5.2). Sa principale fonction est de fondre la matière qui se présente sous forme de granulés et de la mettre sous pression. Elle est généralement composée d'une vis de diamètre variable dans laquelle le polymère va se trouver cisailé et chauffé afin d'homogénéiser et de fondre la matière plastique à injecter. L'extrudeuse est complétée par un système de clapets (nez de vis) pour devenir une pompe

doseuse à fonctionnement cyclique. Le recul de la vis, synchronisé avec sa rotation, permet le stockage du volume de liquide nécessaire à la pièce.

2. **remplissage** : le polymère fondu est injecté, généralement à débit imposé, dans le moule par la vis qui se comporte comme le piston d'une pompe dont la vitesse de translation régule le débit. Cette phase est très courte : elle ne dure que quelques secondes.
3. **compactage-maintien** : une fois la cavité remplie, une pression est maintenue jusqu'au figeage de la matière dans le moule pour compenser la variation de volume spécifique (retrait) au cours du refroidissement par un nouvel apport de matière. L'objectif est également de plaquer le polymère sur la surface pour éviter l'apparition de défauts de surface. Cette phase dure généralement quelques dizaines de secondes.
4. **éjection** : une fois le seuil d'injection figé, la pression diminue à l'intérieur de la cavité. Le moule est alors ouvert, la pièce est éjectée de l'empreinte par des éjecteurs et finit de refroidir à l'air libre. Pendant ce temps, la plastification d'une nouvelle dose de polymère commence et le moule se referme.

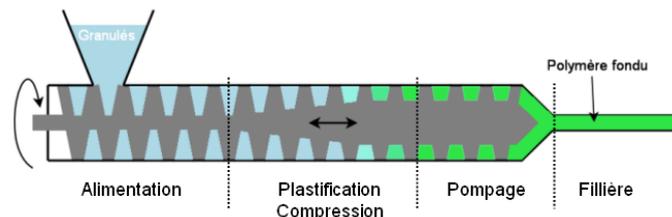


figure 5.2 - Schéma d'une filière d'extrusion [2]

5.3.2 Propriétés des polymères

Thermique

La famille des polymères comporte un grand nombre de matériaux aux propriétés très différentes. Néanmoins, une propriété commune est leur très faible conductivité thermique, environ 1000 fois plus faible que celle du cuivre. A titre d'exemple, il faut 10s pour qu'un refroidissement superficiel atteigne la profondeur de 1 mm. Cette propriété explique la faible épaisseur des pièces plastiques injectées.

De plus, le polymère est injecté à l'état fondu, c'est-à-dire à une température supérieure à sa température de transition vitreuse T_c pour les amorphes et à sa température de fusion pour les semi-cristallins. Au cours du refroidissement, il va changer de phase et la faible conductivité thermique entraîne de forts gradients de températures. Il va donc se former une "peau" en surface. Cette couche solide a des propriétés mécaniques différentes du polymère fondu, notamment pour le frottement à la paroi.

Ce gradient de température provoque un gradient dans les propriétés rhéologiques et thermiques du polymère. Le système ici est donc particulièrement complexe à résoudre, surtout si on s'intéresse à l'interface avec le moule : la nature du polymère en contact avec la surface est difficile à déterminer.

Rhéologie

Les polymères fondus ont une viscosité comprise entre 10^2 et 10^4 Pa.s. Par comparaison, l'eau a une viscosité d'environ 10^{-6} Pa.s. Cette viscosité varie également de façon importante en fonction du taux de cisaillement (5.3(a)), de la température et de la vitesse de déformation (cf 5.3(b)). Les polymères solides ont eux aussi un comportement visco-

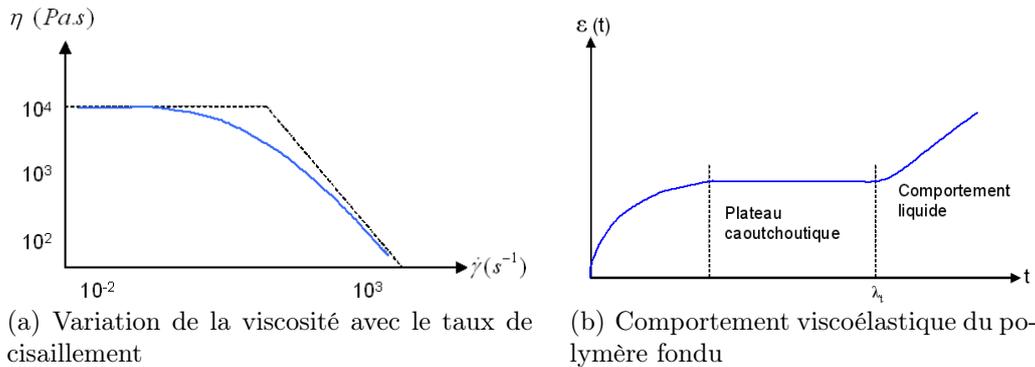


figure 5.3 - *Rhéologie des polymères*

élastique. A vitesse de déformation élevée ou à faible température, le comportement est plutôt élastique. Par contre, le comportement sera plutôt visqueux dans le cas inverse. Le comportement d'un polymère sera donc représenté par la loi de Hooke pour un comportement élastique et par la loi de Newton lorsque son comportement sera celui d'un fluide newtonien en fonction de la température et la vitesse de déformation.

Choix des polymères

Pour mener à bien l'étude des défauts, trois polymères ont été choisis en fonction des utilisations des partenaires industriels :

- le PBT (Polybutylène terephthalate) : généralement utilisé comme un isolant dans les composants électriques et électroniques. C'est un thermoplastique semi-cristallin appartenant à la famille des polyesters. Ce polymère est résistant aux solvants et a de bonnes propriétés mécaniques et thermiques.
- PC (polycarbonate) : thermoplastique disposant d'excellentes propriétés mécaniques et d'une résistance thermique permettant une utilisation jusqu'à 120°C . Il possède une très bonne transparence qui en fait le candidat idéal pour les verres de lunettes et les optiques des phares. Enfin, il possède une très bonne résistance aux chocs.
- SAN/ABS : c'est un mélange de SAN (styrène-acrylonitrile) et d'ABS (acrylonitrile butadiène styrène). Ils appartiennent tous les deux à la famille du polystyrène (PS) et sont très appréciés dans l'industrie pour leur résistance et leur légèreté.

Le tableau 5.1 récapitule les ordres de grandeur des propriétés mécaniques et thermiques de ces trois matériaux.

5.3.3 Écoulement du polymère dans le moule

L'étude de l'écoulement du polymère dans l'empreinte du moule regroupe énormément de phénomènes. Pendant l'injection, le phénomène est non isotherme. La vitesse du fluide le

Paramètres	PC	PBT	ABS
Densité (kg/m ³)	1.210 ³	1.17-1.54 .10 ³	1.02-1.21 .10 ³
σ_e (MPa)	70	30-105	29.6-65
E (GPa)	2.4	1.5-5.2	1.79-3.2
Conductivité thermique k (W/m/K)	0.21	0.16-0.25	0.128-0.19
Point de fusion (°C)	230	220-250	250
Coefficient d'expansion thermique ($\mu\text{m}/\text{m}/^\circ\text{C}$)	65	140	65-150

TAB. 5.1 - *Propriétés des polymères injectés*

long des parois est souvent considérée nulle [2]. Il se forme une gaine froide de matière solide qui amène la partie centrale de la veine à s'expanser pour remplir la section et continuer à s'écouler. Le débit de polymère fondu se fait principalement entre ces gaines. La figure 5.4 montre l'évolution de la vitesse et de la température du polymère lors de l'écoulement dans l'empreinte. La forte variation de température s'explique par la mauvaise conductivité thermique des polymères et la durée très courte de cette phase du cycle. Les variations de vitesse sont importantes. De plus, le cisaillement près de la paroi provoque un échauffement local du fluide.

Au cours de la phase suivante de compactage, le débit dans la cavité est relativement faible. La vitesse d'écoulement varie peu entre le centre et les parois. La pièce se solidifie au cours de la phase de refroidissement. Dès que ses propriétés mécaniques permettent de procéder à l'éjection sans altérer la pièce, celle-ci est éjectée et refroidit à l'air libre.

Cette présentation rapide montre que la physique et par conséquent la modélisation de

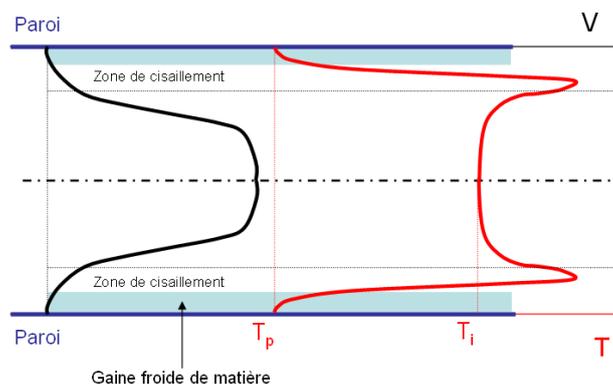


figure 5.4 - *Vitesse et température du polymère lors de l'écoulement pendant la phase d'injection, d'après [32]*

l'écoulement du polymère au cours du cycle dans la cavité est très complexe et nécessite de prendre en compte les changements d'état, les phénomènes de cisaillement, de rhéologie non-newtonienne, ... Cette complexité rend impossible l'intégration de ces phénomènes dans le modèle pour calculer le chargement sur la surface du moule.

Le polymère restant une condition aux limites sur la surface. Il est représenté par des champs de contraintes normales et tangentielles et un flux thermique à la surface.

5.3.4 Conditions à l'interface moule-polymère

Le paragraphe précédent a montré que l'écoulement du polymère dans la cavité est un phénomène très complexe. Les simulations existantes utilisent des hypothèses acceptables pour calculer l'évolution du fluide au cours temps, mais éloignées des phénomènes physiques qui se produisent à l'interface entre le polymère et la surface. Pour étudier les phénomènes thermiques et mécaniques dans le moule, des conditions aux limites simplifiées sont utilisées pour simuler l'écoulement du polymère.

Transfert thermique : résistance de contact

De nombreuses études ont déjà été menées sur le transfert de chaleur entre les surfaces du polymère et du moule. Les travaux de Massé & Al. [79], Delaunay & Al. [41, 42] et Bendada & Al [15] sont centrés sur l'analyse de la résistance thermique du contact moule-polymère pendant la phase de refroidissement de la pièce. Massé & Al. se sont intéressés à l'état du polymère pendant cette phase. Ils reprennent les travaux de Delaunay qui a analysé la nature du contact à l'interface moule/polymère.

Les logiciels commerciaux considèrent le contact moule/polymère comme parfait (température du moule = température du polymère à l'interface). En réalité ce contact ne s'effectue qu'au niveau des rugosités de surface. Une partie du flux de chaleur converge vers les zones de contact, créant une résistance thermique de contact. L'autre partie du flux traverse l'interface à travers le milieu interstitiel rempli de gaz, mauvais conducteur de chaleur. Ces deux résistances créent une résistance globale appelée **TCR** (*Thermal Contact Resistance*) qui varie en fonction de la rugosité du moule, de la nature du polymère, de la contrainte normale (pression dans le moule) et du cycle de moulage.

Bendada & Al. ainsi que Delaunay & Al. ont calculé cette résistance de contact à l'aide de méthodes inverses. La technique de Bendada semble plus efficace. Il a mesuré la température de surface du polymère avec une technique de pyrométrie optique [14] (la mesure par thermocouple est impossible puisque les instruments perturbent l'écoulement et le refroidissement du polymère (effet de ventilateur)). Il a ensuite calculé le flux thermique et la température de surface du moule grâce à deux ensembles de thermocouples. L'idée de Delaunay & Al. est très proche, sauf qu'ils utilisent une autre méthode inverse pour calculer la température de surface du polymère à la place de la mesure optique.

Une fois le flux et les températures de surface déterminés, il est possible de calculer la résistance de contact avec la relation suivante :

$$\text{TCR} = \frac{T_{\text{sm}} - T_{\text{sp}}}{\phi} \quad (5.1)$$

Avec T_{sm} et T_{sp} les températures à la surface du polymère et à la surface du moule. Les deux auteurs arrivent aux mêmes conclusions : la TCR dépend des conditions qui règnent dans le moule et augmente quand la pression diminue. Ils ont aussi remarqué que quand la pression tombe à 0 (pression atmosphérique), la TCR augmente brusquement. Ceci s'explique par le décollement de la pièce. Il se crée alors une poche de gaz entre la pièce et le moule (perte de contact) qui détériore fortement la transmission de chaleur. Delaunay & Al. ont également montré que le flux qui est porté du centre de la pièce vers l'interface ne peut plus s'échapper et réchauffe la surface de la pièce (jusqu'à 15°C dans leurs conditions d'essais). Pendant le même temps, le moule reçoit moins de chaleur et se

refroidit plus rapidement.

Massé & Al. [79] sont allés plus loin dans l'étude de la TCR en étudiant l'influence des conditions de fonctionnement et des différents paramètres. Ils ont remarqué que la rugosité du moule avait une influence sur le détachement et le refroidissement de la pièce, à cause des phénomènes de succion et du piégeage de gaz entre les rugosités (leur forme influence aussi le transfert de chaleur). La pression appliquée pour compenser le retrait (compac-

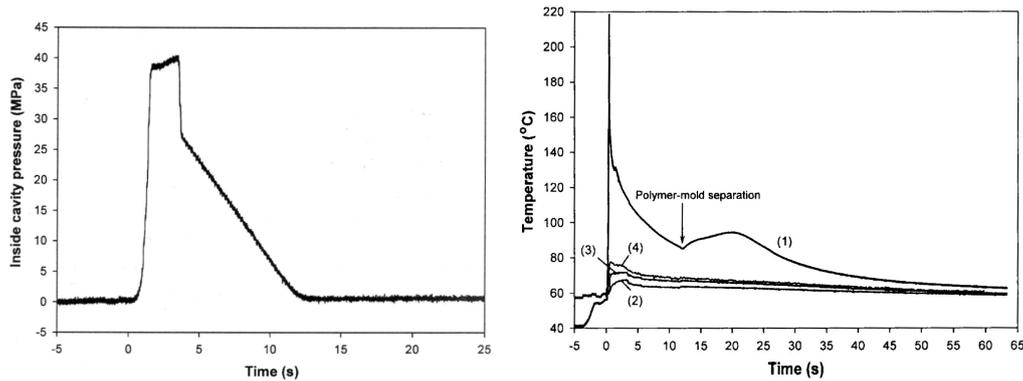


figure 5.5 - variation de la pression et de la température à la surface du polymère [15]

tage) a également une grande importance. Elle entraîne une modification des conditions de contact : la pression conditionne le refroidissement. Elle peut varier de 100 MPa jusqu'à la pression atmosphérique entre la fin de l'injection et la fin du refroidissement. Les deux paramètres importants sont donc la pression et la rugosité du moule. Massé en déduit une loi empirique [79] :

$$TCR(t) = R_0 e^{-P(t)/P_0} \quad (5.2)$$

R_0 et P_0 sont fonction de la rugosité et doivent être déterminés pour chaque couple polymère/métal. $TCR(t)$ dépend aussi de la conductivité du matériau. Enfin, cette loi a été vérifiée seulement dans le cas des polymères amorphes.

Massé & Al. ont étudié l'influence d'un revêtement isolant sur la résistance de contact (voir figure 5.6) Des méthodes statistiques existent pour déterminer le taux de contact

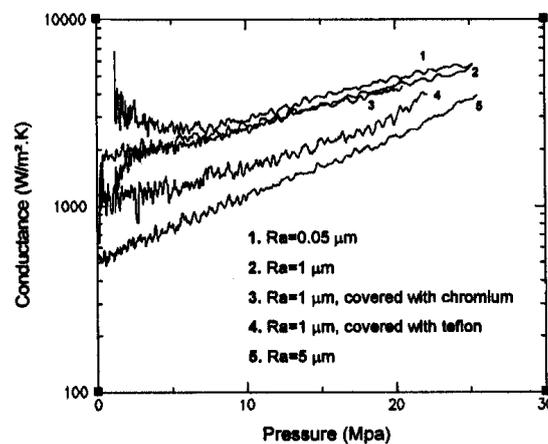


figure 5.6 - Variation de la TCR en fonction de la rugosité et de la pression [79]

entre une surface rugueuse et un plan, mais elles ne s'appliquent qu'aux métaux. Cette résistance de contact a déjà été utilisée dans le domaine de la lubrification par Bos [21]. La transposition est difficile à faire pour les polymères pendant l'injection, parce que la surface de contact est difficile à spécifier, surtout si il y a du glissement (caractère transitoire du processus).

Cette étude bibliographique permet de tirer des conclusions pour modéliser simplement le phénomène d'échange thermique à l'interface polymère/moule :

- le coefficient de transfert varie dans le temps,
- il dépend du couple polymère injecté./matériau de surface du moule,
- des études sont nécessaires pour déterminer le flux qui traverse l'interface

Contact mécanique moule-polymère

Il existe très peu d'études sur le contact mécanique entre le moule et le polymère. Il semble toutefois qu'il y ait un glissement entre la peau du fluide et la surface et donc une force tangentielle due au frottement. Le coefficient de frottement entre ces deux matériaux est difficile à mesurer. Des études sont en cours au LaMCoS en collaboration avec le LR2P. L'action du polymère sur la surface du massif est simplifiée. Cependant, au cours de la phase d'injection du cycle, le polymère épouse la surface du moule. Son action mécanique sera modélisée de façon simplifiée par l'application d'un champ de pression et de traction uniforme variable dans le temps.

5.4 Modèle de cycle d'injection

La première partie de ce chapitre a montré que l'écoulement du polymère dans le moule est un processus complexe. Afin de simplifier le problème nous faisons l'hypothèse que le polymère exerce des efforts uniformes sur la surface et échange avec celle-ci. Les contraintes tangentielles sont calculées avec un coefficient de frottement. Des données expérimentales issues d'essais sur un moule plaque sont utilisés pour définir les conditions aux limites thermiques et les contraintes normales afin de déterminer les paramètres du modèle.

5.4.1 Décomposition du cycle

Le cycle est décomposé en trois étapes correspondants aux étapes du processus (cf 5.3) :

1. injection
2. compactage / refroidissement
3. éjection

La figure 5.7 décrit le champ de pression et le flux thermique à la surface au cours du cycle. Pendant la phase d'injection (cf figure 5.7(a)), le chargement s'étale sur la surface. Le flux thermique est calculé à chaque pas de temps en effectuant la différence entre la température de surface et la température loin du bords. La zone non recouverte est supposée isolée (flux nul imposé à la surface). Le champ de pression s'applique sur la zone où le polymère est présent. Il augmente linéairement durant le cycle à partir d'une valeur nulle au début de la phase d'injection jusqu'à la valeur de maintien.

Pendant la phase de compactage - refroidissement (figure 5.7(b)), le chargement s'étale sur toute la surface. Le flux thermique est calculé de la même manière que lors de la phase précédente. La pression appliquée est constante mais décroît de la valeur de pression de maintien jusqu'à zéro à la fin de la phase.

Pendant l'éjection (figure 5.7(c)), la surface du moule subit une pression normale non plus en compression mais en traction. Cette traction doit contrebalancer les forces d'adhérence de la pièce plastique éjectée. L'échange thermique se calcule de la même manière qu'au cours des phases précédentes, mais H correspond au coefficient d'échange entre la surface et l'air et T_∞ à la température ambiante de la pièce. Les figures 5.8(a) et 5.8(b) montrent les mesures de température et de pression dans l'empreinte du moule au cours de l'injection du PolyCarbonate. Les durées des différentes phases sont :

- injection : 2 s,
- compactage : 5 s,
- refroidissement : 21 s.

Ces temps dépendent du polymère injecté, du moule, de la complexité de la pièces, Le cas test utilisé pour la suite est l'injection d'une plaque de PBT de 2 mm d'épaisseur utilisée dans le cadre du projet MASTHER pour caractériser les défauts de surface.

5.4.2 Coefficient d'échange thermique

Le polymère est vu par le moule comme une source de chaleur qui avance sur sa surface avec une résistance thermique de contact (TCR) qui conditionne les échanges thermiques entre les deux corps. Cette résistance dépend de plusieurs paramètres et est souvent

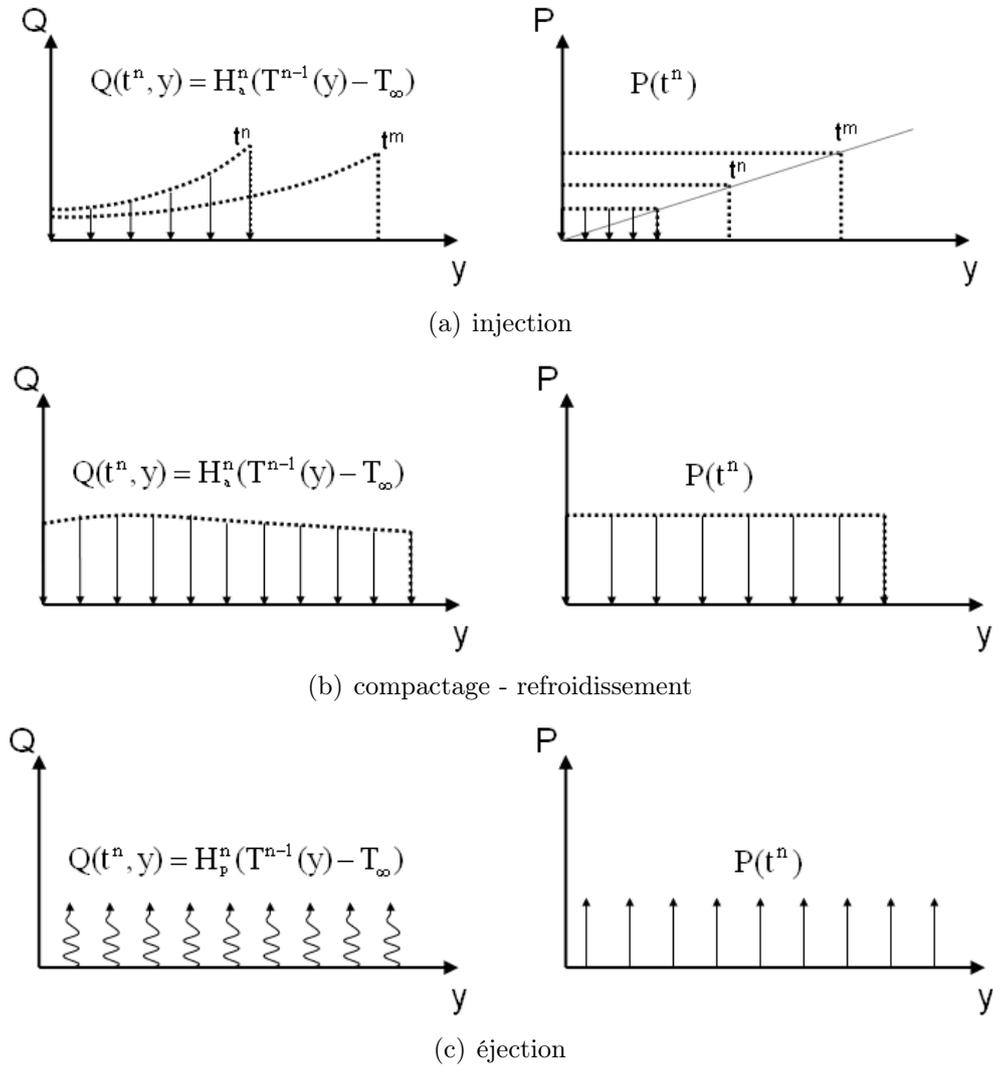


figure 5.7 - Modélisation de la pression (P) et flux thermique (Q) à la surface du moule au cours du cycle d'injection

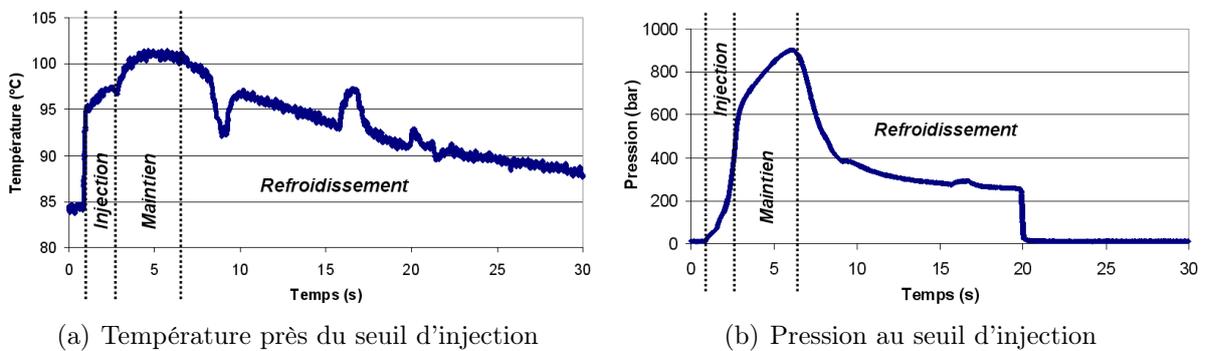


figure 5.8 - Pression et température dans la cavité au cours du cycle d'injection du PC sur un moule acier non revêtu. Décomposition du cycle.

déterminée expérimentalement.

Le modèle de cycle utilisé ici est simplifié. Un coefficient d'échange thermique H_a est introduit pour calculer le flux à la surface. Il est défini de la manière suivante :

$$Q_s \equiv H_a(T_s - T_\infty) \quad (5.3)$$

avec Q_s le flux à la surface au temps t_n (avec n l'indice du pas de temps), T_s la température au temps t_{n-1} et T_∞ la température loin de la surface, c'est-à-dire dans le polymère. T_∞ est fixée à la température d'injection.

Le coefficient H_a caractérise la transmission de chaleur entre le polymère et la moule. La

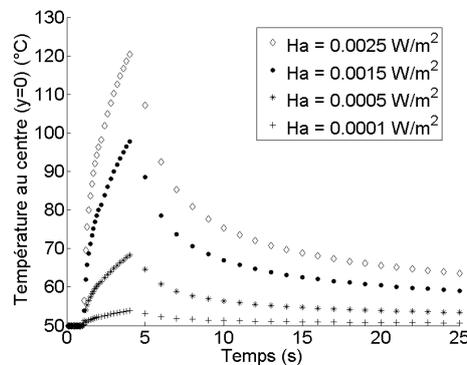
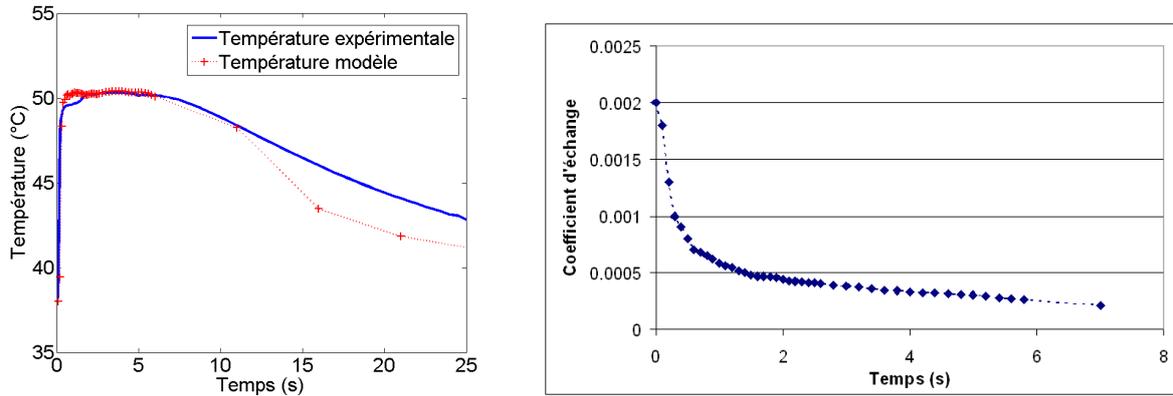


figure 5.9 - Evolution de la température au centre du massif ($y=0$) en fonction de la valeur du coefficient d'échange thermique (coefficient constant au cours du cycle)

figure 5.9 montre l'évolution de température durant le cycle d'injection en considérant un coefficient constant. La comparaison avec la courbe 5.8(a) n'est pas en bon accord. Il est nécessaire de considérer un coefficient H_a variable au cours du temps. Ce constat s'explique par l'évolution des conditions d'échange thermique entre le moule et le polymère au cours du temps. Sa valeur est déterminée par comparaison avec les données expérimentales issues des essais sur moule plaque. La figure 5.10(b) montre l'évolution du coefficient d'échange optimisé par rapport aux données expérimentales. L'évolution de température à la surface est représentée sur la figure 5.10(a). Le coefficient est pris nul quand $t > 7$ secondes. Après cette valeur, la température de la surface diminue lentement par conduction vers les canaux de refroidissement. La pièce se détache peu à peu du moule et un film d'air se forme entre les deux surfaces. La transmission de chaleur est presque nulle. La figure 5.10(a) montre que la différence de température entre les données expérimentales et le modèle utilisant l'hypothèse de surface isolée est faible. Ce constat confirme que les échanges ont principalement lieu au cours de l'injection et pendant la phase de compactage.

Nous pouvons maintenant simuler le chargement correspondant à l'injection. Pour simuler le comportement du moule revêtu, il est également nécessaire de connaître les propriétés mécaniques et thermiques des revêtements.



(a) Comparaison de la température à la surface au seuil d'injection

(b) Evolution du coefficient H_a au cours du cycle

figure 5.10 - Détermination du coefficient d'échange thermique entre le polymère et la surface du moule par comparaison avec les mesures expérimentales sur moule plaque. Plaque 2 mm PBT. M. Chailly, Pôle de plasturgie de l'INSA de Lyon, LR2P.

5.5 Propriétés des revêtements

La simulation de la variation de contraintes dans le massif au cours du cycle d'injection est menée avec le modèle développé dans les chapitres précédents. Il nécessite les paramètres mécaniques et thermiques des différentes couches qui composent le massif. Ces propriétés dépendent du mode de déposition, de l'épaisseur et de la composition du matériau.

5.5.1 Traitements retenus

Trois revêtements ont été retenus suite à diverses études sur leur interaction avec le polymère chaud (essais de mouillabilité) et de leurs propriétés. Ce sont les couches de TiN, CrN et DLC. les dépôts de TiN et CrN sont réalisés par PVD avec pulvérisation cathodique magnétron réactive dans l'argon et l'azote. Le DLC est réalisé en PACVD avec un hydrocarbure comme précurseur gazeux.

De nombreuses publications traitent de ces revêtements et de leurs propriétés. Le tableau 5.2 présente quelques valeurs relevées dans la littérature. Les propriétés mécaniques et thermiques des couches varient énormément suivant les auteurs. De plus, le terme DLC englobe une famille de revêtements. Suivant ses composants et la quantité d'hydrogène qu'il contient, ses propriétés varient entre celles des polymères et du diamant. Il est difficile de déterminer les valeurs correspondant aux couches retenues pour les moules d'injection à partir de ce tableau. Face à ces valeurs et leurs variations, nous avons élaboré un banc d'essai très simple afin de caractériser les revêtements utilisés dans ce projet.

5.5.2 Caractérisation mécanique d'une couche mince

Les propriétés mécaniques d'une couche de quelques micromètres sont très difficile à mesurer et à dissocier de celles du substrat. La nano-indentation donne une mesure de dureté

Revêtement	E (GPa)	k (W/m/K)	ν	$\alpha(10^{-6})$	$\rho(\text{kg}/\text{m}^3)$	source
TiN	600	19.26	0.25	9.4	5220	[65]
CrN	230/400	-	0.2			
TiN	251	23.1	0.191	9.35	5400	[39]
CrN	400			2.30	6120	
TiO ₂	205			9.0	4250	
TiN	250/490	30		9.4		[108]
CrN	400			2.6		
DLC-Si e=1.3 μm	153					[48]
DLC-Si e=1.8 μm	141					
DLC-Si e=8.4 μm	144					
DLC-W	238					
DLC-Cr e=0.5 μm	180					
DLC-Cr e=3.4 μm	139					
DLC-Cr e=3.2 μm	120					

TAB. 5.2 - Paramètres matériau de différents types de revêtement

et de module d'Young à la surface de la couche. Par contre, cette techniques est lourde à mettre en place et relativement coûteuse. La méthode que nous avons utilisée ici est basée sur le décalage de fréquence du premier mode de vibration d'une poutre revêtue par rapport à son équivalente non revêtue.

méthode du mode vibratoire en flexion

Une poutre mise en flexion puis lâchée oscille autour de sa position d'équilibre selon son premier mode fondamental. L'analyse fréquentielle du mouvement permet de déterminer la fréquence de ce mode qui dépend des propriétés mécaniques (Module d'Young et coefficient de Poisson) et de la géométrie de l'échantillon.

Quand un film mince est déposé sur la poutre, sa rigidité en flexion et donc sa fréquence propre changent. En mesurant ce décalage, il est possible de calculer les propriétés du film. Pour cela, l'ensemble revêtement/substrat est homogénéisé selon le principe de la poutre équivalente (cf figure 5.11) que l'on considère comme un matériau homogène. Ce principe est applicable pour des configurations où les épaisseurs des éprouvettes et les déplacements sont petits. Il existe deux modes opératoires : un montage pseudo libre-

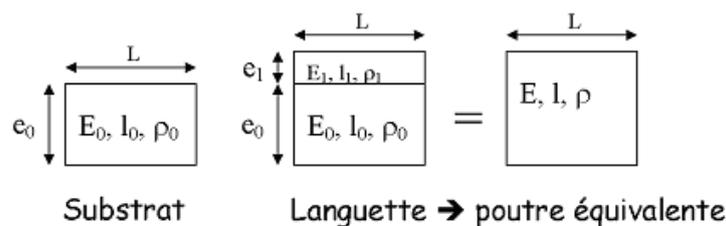


figure 5.11 - Principe des poutres équivalentes

libre ou le montage encastré. La géométrie retenue est une poutre encastrée-libre pour des raisons de facilité de montage (voir figure 5.12(a)). Les fréquences et les déformées

théoriques des modes de flexion sont obtenus en résolvant l'équation suivante :

$$1 + \cos(\beta L) \cosh(\beta L) = 0 \quad (5.4)$$

Les solutions de cette équation sont :

$$\omega_n = \frac{X_n^2}{L^2} \sqrt{\frac{EI}{\rho S}} \quad (5.5)$$

avec $\omega_n = 2\pi f_n$ les pulsations propres du système, E le module d'Young de la poutre équivalente, I son inertie de section en flexion (fonction de la géométrie), ρ la masse volumique et S l'aire de la section. En utilisant le principe des poutres équivalentes et les relations (5.5), le module d'Young de la couche s'exprime en fonction des paramètres géométriques et des propriétés du substrat :

$$E_1 = \left[\frac{e_0^3(A-1)}{e_1(4e_1^2 + 6e_1e_0 + 3e_0^2)} \right] \quad \text{avec} \quad A = \frac{\rho_0e_0 + \rho_1e_1}{\rho_0(e_0 + e_1)} \quad (5.6)$$

Afin d'utiliser cette méthode, il faut connaître avec précision :

- le module d'Young du substrat,
- les masses volumiques du substrat et du revêtement,
- les dimensions de l'éprouvette.

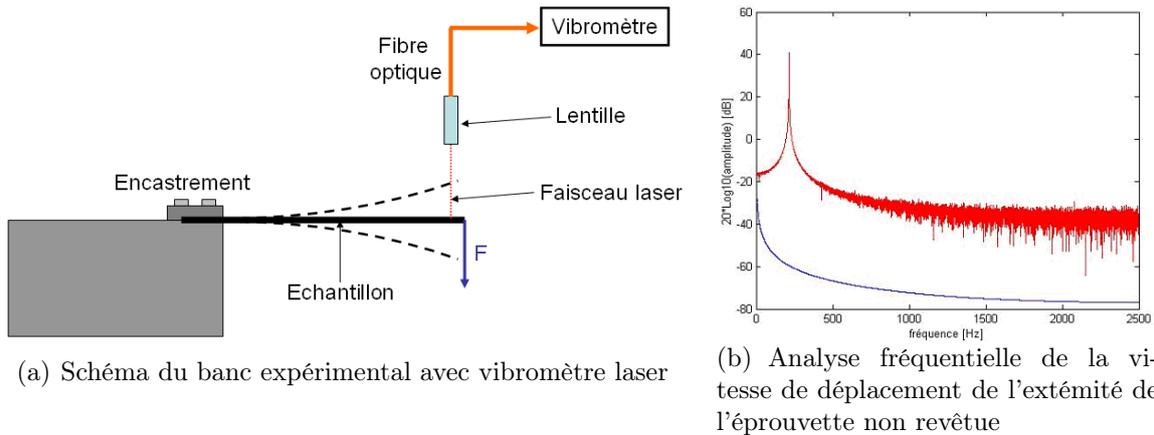


figure 5.12 - *Mesure de la fréquence du premier mode fondamental en flexion de l'échantillon*

Les dimensions des échantillons utilisés pour la mesure sont les suivantes :

- longueur : 50 mm
- largeur : 5 mm
- épaisseur : 0.5 mm
- matériau : acier 304L amagnétique (module d'Young 195 GPa)

Pilloz [88] a montré qu'un rapport largeur/épaisseur supérieur à 10 était nécessaire pour que les résultats soient acceptables (erreur inférieure à 5%). Enfin, la porosité du matériau doit être assez faible pour ne pas amortir les vibrations et fausser les mesures. Le substrat et les revêtements métalliques utilisés sont assez compacts pour vérifier cette hypothèse. Plusieurs séries de mesures ont été nécessaires pour mettre au point un protocole fiable et valider le principe du banc de mesure. Ces différents tests ainsi que les résultats intermédiaires sont répertoriés en annexe.

Protocole expérimental

L'excitation de l'échantillon est faite par impulsion sur l'extrémité de la poutre. La forme de cette excitation n'a aucune influence sur le résultat final.

Par contre, la géométrie de l'éprouvette et la mesure de l'épaisseur du revêtement sont très influentes sur le résultat. Le protocole issu de différents essais est le suivant :

1. tester les échantillons en vibration pour déterminer la fréquence du premier mode en flexion du substrat non revêtu,
2. déposition du revêtement. Une des hypothèses du calcul est que le procédé de dépôt ne modifie pas les propriétés mécaniques et géométriques de l'éprouvette.
3. mesure des propriétés du revêtement par décalage de la fréquence du premier mode de vibration de l'éprouvette en utilisant les données recueillies en 1.
4. si possible, détraiter les éprouvettes pour s'assurer que le procédé de dépôt n'a pas modifier la fréquence du substrat.

Propriétés mécaniques des revêtements

Afin d'avoir une donnée avec laquelle les résultats peuvent être comparés, des tests de nano-indentation ont été réalisés sur un échantillon de chaque revêtement. Ces tests ont été fait par la société CSM Instruments (commande ESSILOR 13/04/2006, voir annexe ...). Les résultats des deux méthodes sont répertoriés dans le tableau 5.3 et comparés sur la figure 5.13. Les revêtements des éprouvettes TiN 1 et TiN 2 ont été réalisés avec le même procédés sur deux substrats différents.

Méthode	TiN 1 (GPa)	TiN 2 (GPa)	CrN (GPa)	DLC (GPa)
Méthode vibratoire	432	451	308	/
Nanoindentation	438.3		344.6	196.3

TAB. 5.3 - *Module d'Young des revêtements de TiN, CrN et DLC mesurés par la méthode vibratoire et par Nanoindentation.*

A la vue des différentes incertitudes de mesure (voir annexe B), l'erreur globale est estimée à 20%. Des tests sur un plus grand nombre d'échantillons sont nécessaires pour pouvoir quantifier l'incertitude globale sur la mesure du décalage de la fréquence du premier mode en flexion.

Les valeurs obtenues sont proches des mesures de nano-indentation (voir figure 5.13). L'avantage de cette méthode est qu'elle est rapide et simple à mettre en oeuvre. Les valeurs retenues pour la suite sont donc : $E_{\text{TiN}} = 441$ GPa, $E_{\text{CrN}} = 308$ GPa et $E_{\text{DLC}} = 196$ GPa. Le module d'Young du revêtement de DLC utilisé dans cette application est très proche de celui de l'acier.

5.5.3 Caractérisation thermique des revêtements

Les différentes techniques de mesure des propriétés thermiques des couches minces ont été présentées dans le premier chapitre. La difficulté est de mesurer les propriétés du revêtement sur quelques microns en les dissociant de celles du revêtement. Les propriétés

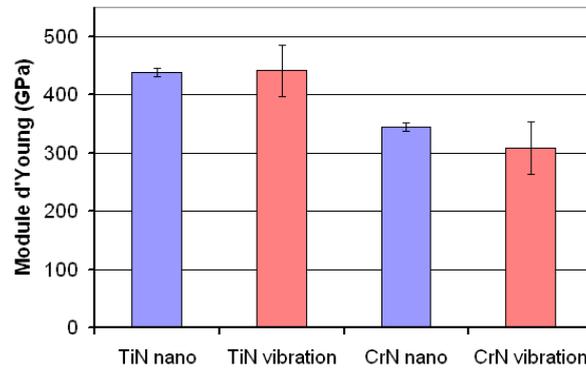


figure 5.13 - *comparaison des modules d'Young mesurés par méthode vibratoire et par nanoindentation, voir annexes B et C*

thermiques des revêtements, conductivité et diffusivité, sont mesurées en utilisant un microscope à photoreflectance. La méthode est expliquée en annexe A. Ce banc de mesure e été mis en place au laboratoire d'optique physique de l'ESPCI.

La mesure de variation de réflectance à la surface de l'échantillon chauffé par un faisceau pompe modulé permet de déterminer les propriétés thermiques du matériau sur une épaisseur d'environ un micron (la taille de la zone testée dépend de la fréquence de modulation). L'utilisation d'un modèle analytique permet de déterminer la diffusivité en comparant les variations d'amplitude et de phase du signal relevées par la photodiode et calculées par le modèle en fonction de la distance entre le faisceau pompe et le faisceau sonde. Les trois revêtements de CrN, TiN et DLC ont été mesurés ainsi que le substrat nu (acier Z38CDV5). Les courbes de module et de phase sont disponibles en annexe A.2.

Caractérisation du substrat

Trois fréquences de modulation sont utilisées pour caractériser l'acier : 100, 50 et 10 kHz. Les courbes de phase présentent des variations de pente. L'application du modèle inverse est donc assez approximative. Cette variation est probablement due à la microstructure hétérogène du matériau. La figure figure A.4 montre la structure de l'acier utilisé comme substrat après une attaque chimique. La taille des grains se situe entre 15 et 30 μm , taille soupçonnée à partir des mesures de diffusivité. Des inclusions de carbures et des précipités apparaissent également sur cette observation. Il est donc difficile d'effectuer une mesure locale des propriétés thermiques de l'acier à cause de son hétérogénéité.

Les courbes permettent tout de même de déterminer une valeur approximative. La conductivité thermique retenue pour le substrat est $k_{\text{acier}} = 20 \pm 5 \text{W/mK}$.

Caractérisation des revêtements

Les mesures sur le CrN montrent les mêmes ruptures de pente que dans le cas de l'acier. La structure du revêtement semble également être responsable de cette dispersion. La valeur retenue pour le CrN est $k_{\text{CrN}} = 15 \pm 5 \text{W/mK}$.

Enfin, le TiN montre une structure plus homogène que les deux autres matériaux. Les valeurs théoriques et expérimentales sont plus proches. Les mesures aux basses fréquences

donnent une valeur autour de 25 W/mK. Des essais à 300 kHz ont permis d'affiner ces données. La valeur retenue pour la couche de TiN est donc $k_{\text{TiN}} = 22 \pm 2 \text{ W/mK}$.

5.6 Étude de la tenue du revêtement

Le modèle développé dans les chapitres précédents permet de simuler l'évolution des contraintes et de la température dans un massif revêtu soumis à un chargement thermo-mécanique. L'application injection nécessite de prendre en compte un grand domaine pour représenter la partie du moule en contact avec le polymère. Par contre, les épaisseurs des revêtements retenus sont faibles, comprises entre 1.7 et 3.5 μm . Le pas de maillage doit donc être inférieur à 1 μm afin de calculer le champ de contrainte dans le revêtement. L'objectif est de comprendre l'influence des propriétés des matériaux qui ne peuvent pas être mesurés et de déterminer le traitement le plus approprié du point de vue tenue mécanique.

5.6.1 Étude globale : modèle principal

Le modèle principal utilisé pour mener l'étude paramétrique utilise 14 niveaux de maillage. La technique de raffinement local est mise en oeuvre autour de la zone de chargement et du revêtement. Le niveau le plus fin couvre une zone de 100.2 mm \times 10 μm , soit environ 4 millions d'inconnues sur ce niveau. Le maillage le plus grossier (niveau 1) couvre une zone de 160 \times 40 mm. Les conditions aux limites sont éloignées de l'empreinte afin d'éviter les effets de bords, en particulier dans le calcul de température. Si la condition de température imposée est très proche du flux en surface, il apparaît de forts gradient thermiques et donc des contraintes mécaniques importantes dues à cette proximité. Le problème est résolu

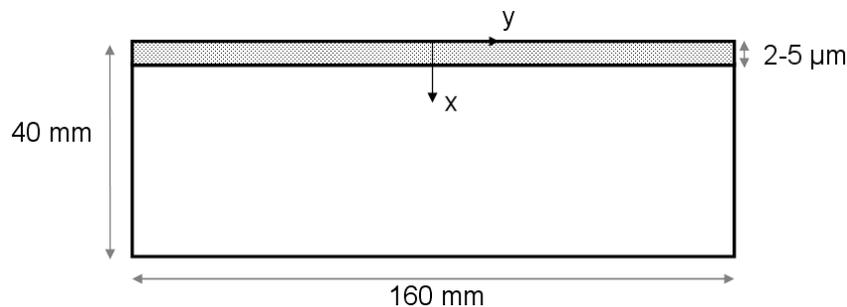


figure 5.14 - Dimensions du solide revêtu

sur 55 pas de temps variables suivant les quatre phases. Le schéma de résolution temporel implicite permet d'utiliser un pas de temps très long (plusieurs secondes durant la phase de refroidissement). Le calcul du champ de température puis des déplacements et des contraintes nécessite environ 3/4 heure par pas de temps sur un PC de bureau.

Étude paramétrique

Le tableau 5.4 recense les valeurs des différents paramètres thermomécaniques des couches CrN et TiN et du substrat en acier Z38. La couche de DLC n'est pas retenue dans cette étude car des essais ont montré que le polymère collait sur le revêtement.

Le module d'Young, la conductivité thermique et la diffusivité thermique ont été mesurés. Les valeurs du coefficient de dilatation relevées dans la littérature sont assez cohérente. Ces trois paramètres sont donc supposés connus. L'étude porte sur l'influence du coefficient de Poisson (ν_r), de l'épaisseur de la couche (e_r) et du coefficient de frottement polymère/revêtement (μ). Les paramètres du chargement sont les suivants :

	E (GPa)	ν	k (W/mm/K))	D (mm ² /s)	e (μ m)	α	μ /polymère
substrat	195	0.3	0.047	13	$4 \cdot 10^4$	$12 \cdot 10^{-6}$	0.2-0.4
CrN	307	?	0.015	3.5	3.2	$7.4 \cdot 10^{-6}$?
TiN	438	?	0.025	7.7	3.4	$2.6 \cdot 10^{-6}$?

TAB. 5.4 - Paramètres des revêtements et du substrat

- phase d'injection : durée 2.6 s, pas de temps 0.1 s
- phase de compactage : durée 3.5 s, pas de temps 0.2 s, pression 60 MPa
- phase de refroidissement : durée 60 s, pas de temps 5 s.
- $T_\infty = 250^\circ\text{C}$
- température de régulation du moule : 50°C

La pression évolue linéairement pendant la phase d'injection jusqu'à la pression de maintien et reste constante pendant cette phase. Durant la phase de refroidissement, elle diminue linéairement jusqu'à 0 et la surface est supposée isolée thermiquement.

Les variations des trois paramètres testés pour les deux revêtements au cours de l'étude sont répertoriées dans le tableau 5.5.

ν_r	μ	e(μ m)
0.2	2.5	0
0.25	3.5	0.1
0.3	5	0.25
		0.4

TAB. 5.5 - Etude paramétrique

La gamme de variation des paramètres correspond à l'intervalle des valeurs relevées dans la littérature pour le coefficient de Poisson et le coefficient de frottement. Les épaisseurs ont été choisies arbitrairement afin d'étudier l'influence de ce paramètre.

Premières conclusions

Lors de cette étude, certains résultats ne sont pas modifiés de manière significative par la présence du revêtement.

La figure figure 5.15 montre l'évolution du maximum de la température à la surface avec une couche de TiN ou sans revêtement. Les deux courbes se superposent. Le revêtement n'a donc aucune influence sur la température dans le massif pour les trois épaisseurs considérées. La même conclusion est établie pour les contraintes σ_{xx} (perpendiculaires à la surface) dans la couche.

L'hypothèse de couche mince permet de retrouver ces conclusions. Leroy [74] a montré que lorsque le rapport épaisseur du chargement sur demi largeur de contact était inférieur à 1/10, la charge normale était entièrement transmise à la surface à l'interface (voir analogie ressorts). Dans les simulations d'injection, ce rapport est de l'ordre de $5 \cdot 10^{-5}$.

D'un point de vue thermique, la couche est trop fine pour se comporter comme une barrière thermique. De la même manière que pour le chargement normal, le flux de chaleur est

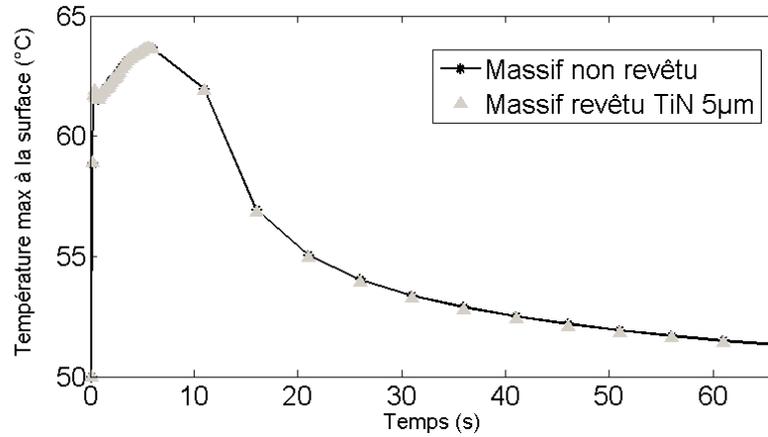


figure 5.15 - Evolution du maximum de la température à la surface au cours de la simulation de cycle d'injection avec et sans revêtement.

entièrement transmis de la surface à l'interface. Les revêtements ne modifient donc pas le comportement thermique du moule.

Influence de l'épaisseur

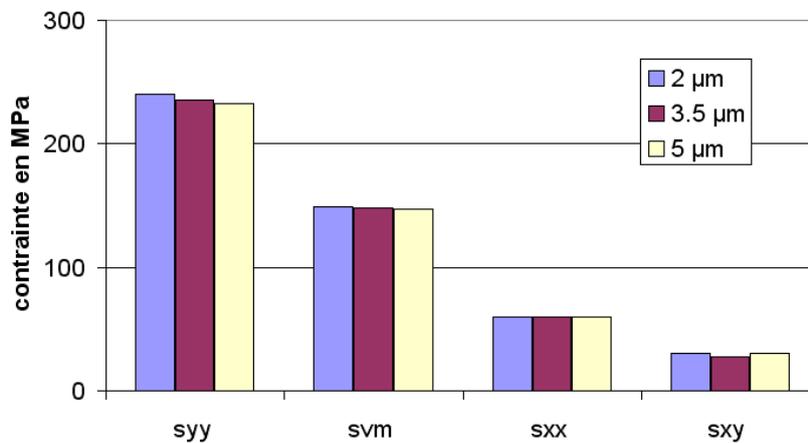


figure 5.16 - Contraintes maximales dans le revêtement de CrN au cours de la simulation du cycle d'injection en fonction de l'épaisseur du revêtement, $\mu = 0.25$, $\nu = 0.25$

La figure 5.16 montre le maximum des contraintes dans le revêtement de CrN en fonction de l'épaisseur de la couche. La contrainte σ_{xx} a la même valeur dans les trois cas. L'hypothèse de film mince est vérifiée dans les trois cas. Les autres contraintes montrent un comportement similaire. La différence maximale est de 7% sur les contraintes σ_{yy} . L'épaisseur n'est pas un paramètre significatif si l'on reste dans l'hypothèse des couches minces. Elle n'influe pas sur le risque de détérioration de la couche au cours du cycle.

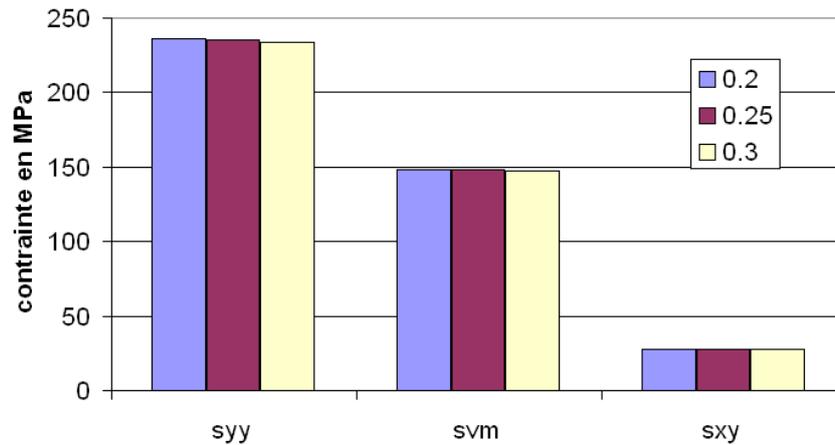


figure 5.17 - Contraintes maximales dans le revêtement de CrN au cours de la simulation du cycle d'injection en fonction du coefficient de Poisson du revêtement, $\mu = 0.25$, $e_r = 5 \mu m$

Influence du coefficient de Poisson

Le coefficient de poisson du revêtement a également peu d'influence sur les contraintes dans la couche (cf figure 5.17). Son influence est au maximum de 7,5% sur la valeur maximale des contraintes. Cette conclusion peut également être attribuée à l'épaisseur de la couche. L'épaisseur est trop faible pour que l'effet du coefficient de poisson (création de déformations dans les directions perpendiculaires à la déformation principale) crée des contraintes importantes dans le revêtement.

Influence du coefficient de frottement

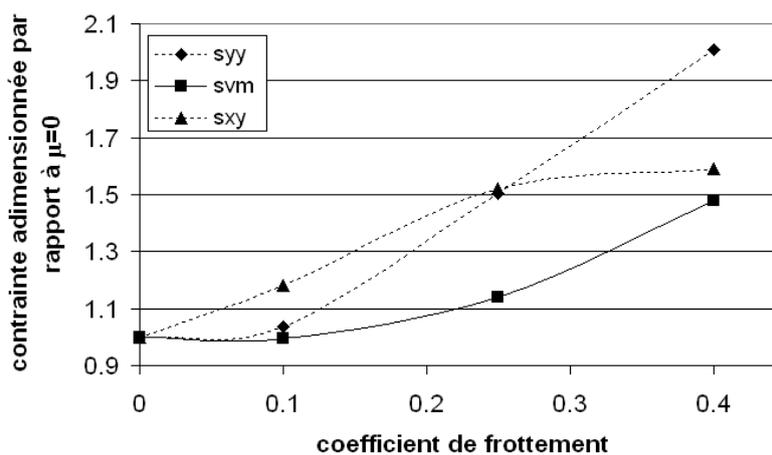


figure 5.18 - Contraintes maximales dans le revêtement de CrN au cours de la simulation du cycle d'injection en fonction du coefficient de frottement

Le coefficient de frottement est le paramètre le plus important dans cette étude. La figure figure 5.18 montre l'évolution du maximum des contraintes dans le revêtement en fonction de ce coefficient. Entre $\mu = 0$ et $\mu = 0.4$, la contrainte σ_{yy} est multipliée par deux et la

contrainte de Von Mises par 1.5. Son influence n'est donc pas négligeable. Par contre les contraintes imposées par le frottement sont basées sur l'hypothèse que la vitesse du polymère à la paroi est non nulle et qu'il y a glissement (hypothèse réaliste à la fin de l'injection et pendant la phase de compactage).

Conclusion

Cette première étape de l'étude paramétrique permet de dégager plusieurs conclusions :

- le revêtement ne modifie pas le comportement thermique moule. La température du massif n'est pas affectée par la présence de la couche.
- les contraintes normales appliquées à la surface sont transmises l'interface,
- le coefficient de Poisson n'a pas d'effet sur les contraintes.

Ces trois conclusions se retrouvent dans l'hypothèse de couche mince déjà mise en place par Leroy [74] et Plumet[90] qui est parfaitement valide pour cette application.

- Le coefficient de frottement est le paramètre le plus influent de cette étude.

Le revêtement agit comme une condition aux limites de massif. Ses propriétés thermiques et mécaniques de volume n'ont aucune influence sur le comportement global du massif qu'il protège.

L'étude globale montre que seules les propriétés physiques et chimiques de la couche peuvent modifier le processus d'injection et l'écoulement du polymère dans l'empreinte. Par contre les propriétés de volume vont influencer les contraintes internes à la couche et donc les risques d'endommagement.

5.6.2 Étude locale : utilisation d'un modèle simplifié

Le paragraphe précédent mène une étude globale sur l'influence du revêtement sur le comportement global du système. Ici, l'objectif est de regarder et comprendre l'évolution des contraintes dans la couche pour choisir la plus appropriée en fonction des sollicitations.

Modèle global

Trois points d'étude représentatifs des différents phénomènes mis en jeu au cours de l'injection sont positionnés à la surface du solide (cf figure 5.19) :

- au centre du massif ($y = 0$ mm), B,
- au premier quart de la longueur de la zone chargée ($y = -L/4$), A,
- au dernier quart de la longueur de la zone chargée ($y = L/4$), C.

Les courbes des contraintes de cisaillement, non représentées ici, montrent que ces contraintes sont pratiquement nulles en l'absence de frottement, c'est-à-dire soit pendant la phase de refroidissement soit quand le coefficient de frottement est nul. Dans le cas contraire, elles sont directement proportionnelles à la valeur imposée en surface (soit le coefficient de frottement fois les contraintes normales). Le chargement normal est quant à lui transmis de la surface à l'interface sans être modifié. Les contraintes σ_{xx} dans la couche sont donc celles imposées à la surface. Les propriétés des couches ont une influence faible sur les contraintes normales et de cisaillement dans le matériau.

Les courbes de variation des contraintes σ_{yy} et σ_{vm} sont présentées sur la figure 5.20 et la figure 5.21 respectivement. Le système revêtement/substrat est sollicité en compression durant la phase d'injection (figure 5.20(a)), aussi bien pour le TiN, le CrN que le substrat

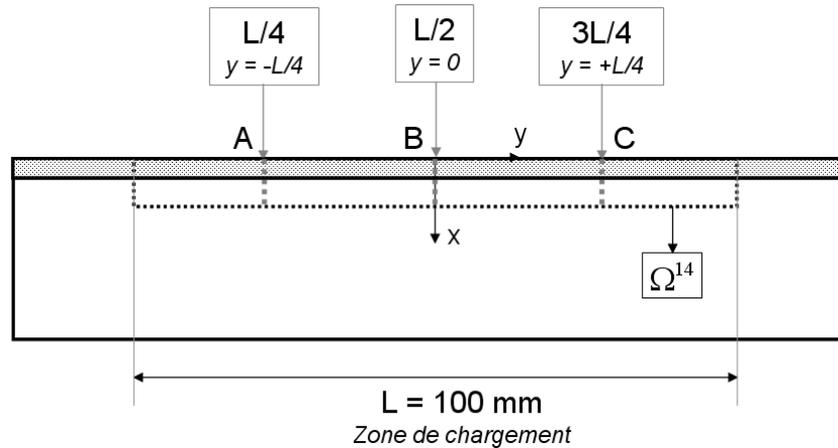


figure 5.19 - Position des points d'étude

non revêtu. Le TiN subit la compression la plus forte. Cet état se maintient jusqu'à la fin de la phase de compactage. Néanmoins les valeurs sont plus faibles en intensité. Cela s'explique par un fort gradient de température durant l'écoulement de polymère. Ensuite, la température continue d'augmenter, mais moins rapidement et surtout uniformément sur toute la surface du massif.

En ce qui concerne les contraintes de Von Mises, une tendance inverse est obtenue : les contraintes sont globalement plus élevées à la fin de la phase de compactage que pendant la phase d'injection.

La seconde remarque issue de ces courbes est que les contraintes dans le substrat sont indépendantes de la nature du revêtement. Ceci rejoint les conclusions de la première partie de cette étude.

Enfin, il apparaît que les contraintes dans la couche varient énormément suivant le revêtement. Le revêtement CrN est moins contraint que le TiN mais surtout que l'acier nu. Pourtant son module d'Young est supérieur à celui de l'acier mais son coefficient de dilatation plus faible. Le TiN est par contre plus contraint que le substrat.

Ni la variation de module d'Young ni la variation du coefficient de dilatation n'expliquent ces résultats.

Afin de mieux appréhender ce comportement et distinguer les influences respectives des paramètres mécaniques et thermiques, nous allons procéder à une étude simplifiée avec un modèle plus simple et plus rapide pour mener une étude paramétrique plus large.

Modèle simplifié

L'objectif est de comprendre le comportement d'un massif revêtu d'une couche mince sous chargement thermomécanique. Pour cela, un modèle plus léger et rapide est mis en place sur la base des résultats de Leroy[74]. Il a en effet montré qu'il existe un minimum des contraintes de Von Mises en fonction du rapport des coefficients de dilatation du substrat et du revêtement. Ce minimum est obtenu pour un rapport de $\alpha_r/\alpha_s = 0.5$ sur le cas considéré (voir chapitre 3, validation, cas thermoélastique 2D).

Les dimensions du solide étudié sont 2×4 mm. Le chargement est de type Hertzien (champ de pression normale elliptique, flux thermique elliptique également) et la résolution est

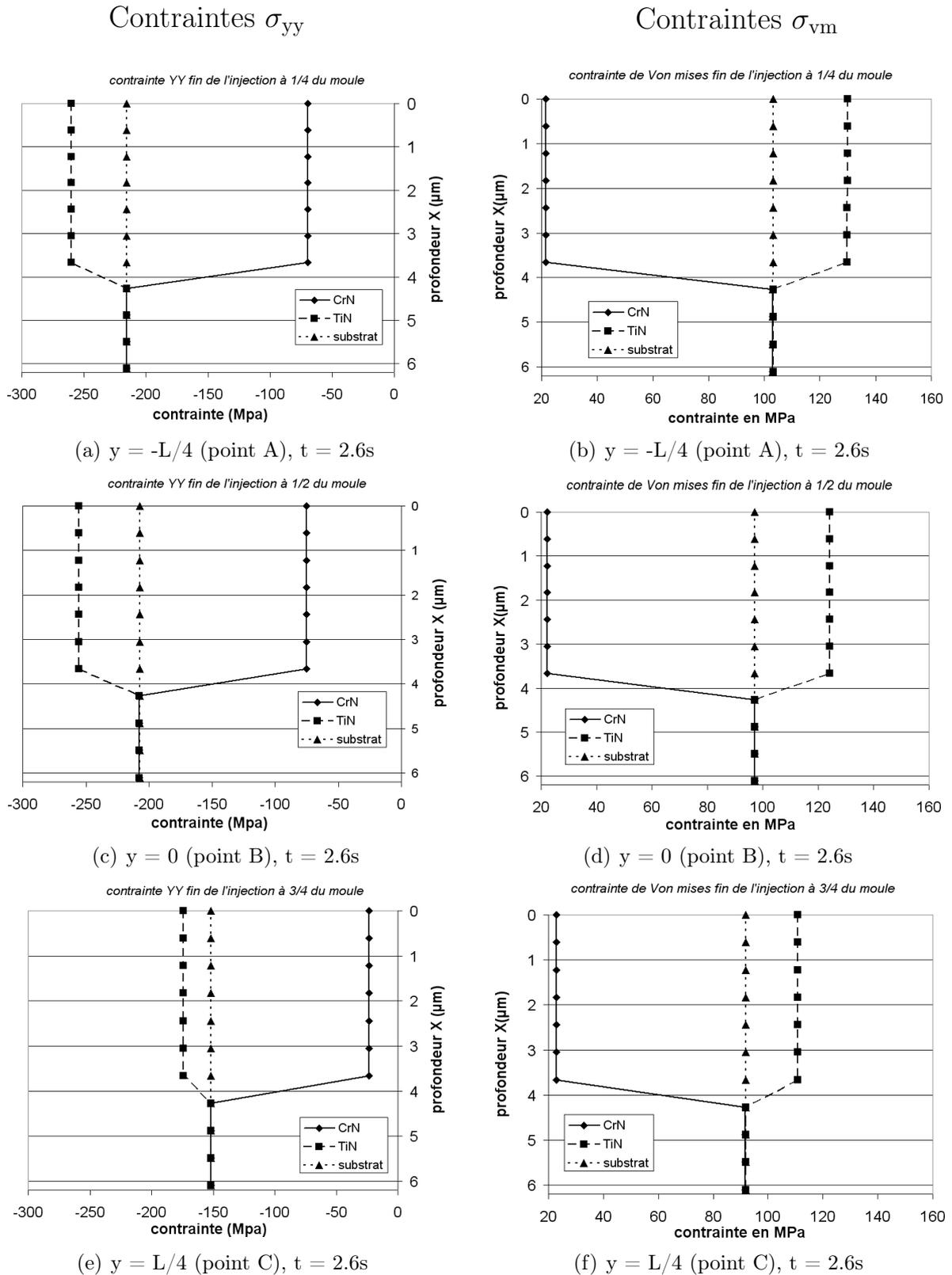


figure 5.20 - Contraintes dans le revêtement pour les trois points d'étude à la fin de la phase d'injection

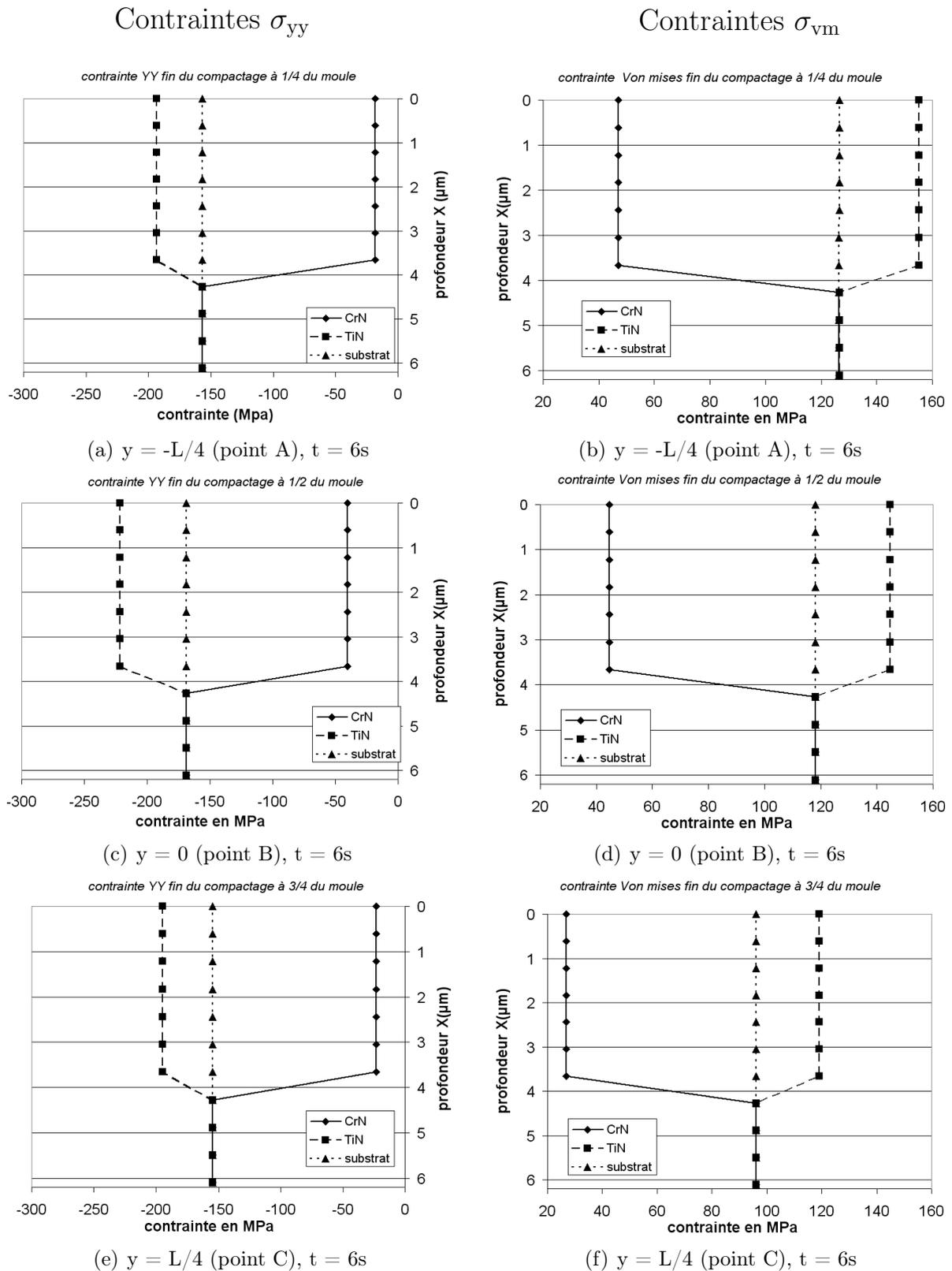


figure 5.21 - Contraintes dans le revêtement pour les trois points d'étude à la fin du compactage

statique. La demi largeur de contact est $125\mu\text{m}$ et l'épaisseur du revêtement est $10\mu\text{m}$. L'hypothèse de couche mince est bien vérifiée. Le maillage utilise 10 niveaux, avec 4×8 points sur le premier niveau. Le dernier niveau couvre $400\times 200\mu\text{m}$. Le temps nécessaire à la résolution du problème thermoélastique est environ 40s sur un PC de bureau. Ce modèle permet de tester les différents paramètres dans une large gamme très rapidement.

1^{ère} étape : chargement thermique - chargement mécanique nul

L'hypothèse émise pour expliquer la différence de contraintes entre les revêtements de TiN et CrN et l'acier nu est un couplage entre les effets du module d'Young et du coefficient de dilatation du revêtement. La figure 5.22 montre la valeur maximale de la contrainte

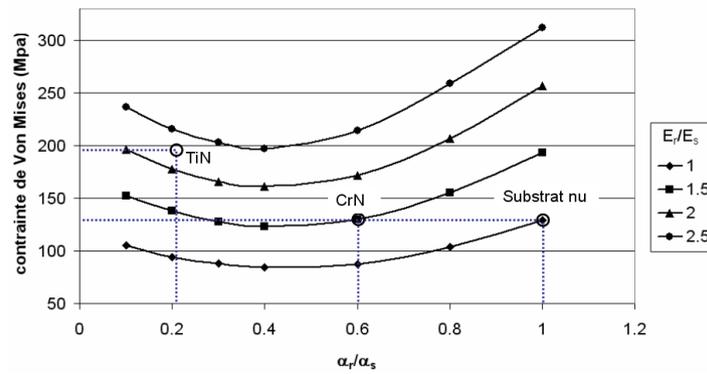


figure 5.22 - *Contrainte de Von Mises en fonction du rapport des coefficients de dilatation et du rapport des modules d'Young. Chargement mécanique nul.*

de Von Mises dans le revêtement en fonction du rapport α_r/α_s et du rapport E_r/E_s . Les variations de contraintes ont une forme concave. Plus le rapport E_r/E_s augmente, plus le domaine de variation de α_r/α_s pour lequel la courbe passe par le minimum se rétrécit. La position de ce minimum se décale vers des ratios α_r/α_s plus faibles. Les coordonnées des deux revêtements de CrN et de TiN sont comparées avec le substrat nu. Ce graphique fournit un premier élément de réponse. La contrainte dans le TiN est supérieure à la contrainte dans la couche de CrN ou dans le substrat non-revêtu qui sont égales. La contrainte de Von Mises n'est donc pas proportionnelle au module d'Young ou au coefficient de dilatation.

Leroy [74] donne la relation qui permet de calculer les contraintes latérales de traction à la surface de la couche en fonction des propriétés du système et des contraintes dans le substrat :

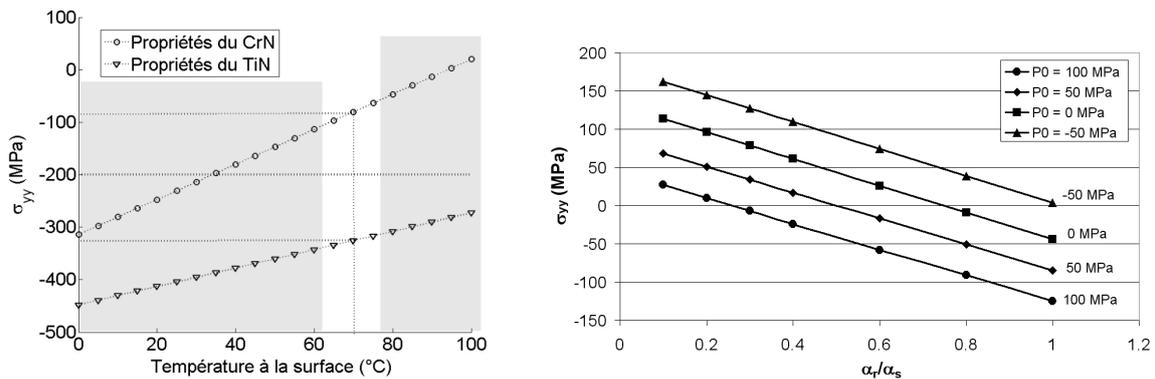
$$\sigma_{yy}^r = \frac{E_r}{E_s} \left[\sigma_{yy}^s - \frac{E_s \alpha_s T}{1 - \nu_s} \left(\frac{\alpha_r}{\alpha_s} - 1 \right) \right] \quad (5.7)$$

La contrainte relevée lors des simulations dans le moule d'injection est environ -200 MPa à la fin de la phase d'injection. Les rapports de module d'Young et de coefficient de dilatation sont également connus. En reportant ces valeurs dans la relation (5.7), la contrainte est définie par une relation linéaire avec la température à la surface de la couche. Pour les deux cas considérés, il vient :

$$\begin{cases} \text{CrN} : \sigma_{yy}^r = 3.34T - 314 \text{ MPa} \\ \text{TiN} : \sigma_{yy}^r = 1.75T - 448 \text{ MPa} \end{cases} \quad (5.8)$$

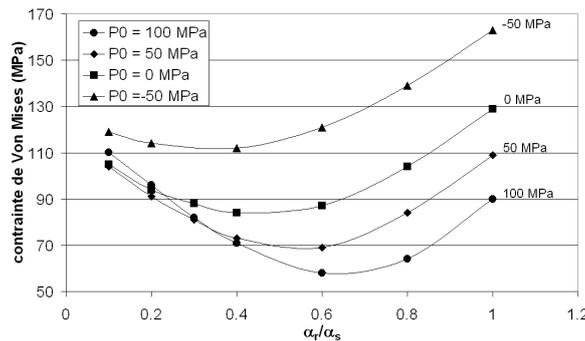
La variation des contraintes est représentée sur la figure 5.23(a). La température en surface du moule lors de la simulation est environ 70°C. Avec ces valeurs, les contraintes calculées avec les relations (5.8) sont $\sigma_{yy}^r = -90$ MPa pour le CrN et $\sigma_{yy}^r = -320$ MPa. Ces données confirment que le revêtement de CrN est moins contraint que le substrat ou la couche de TiN.

Ce modèle simple ainsi que les relations analytiques issues de l'hypothèse de couche



(a) Variation de la contrainte σ_{yy} en fonction de la température dans les deux revêtements.

(b) Influence de la charge sur les contraintes σ_{yy} , $E_r/E_s = 1$



(c) Influence de la charge sur les contraintes σ_{vm} , $E_r/E_s = 1$

figure 5.23 - Variation des contraintes dans le revêtement en fonction du chargement et de la température

mince permettent d'expliquer quantitativement la dépendance entre le ratio des propriétés mécaniques et thermiques sur le comportement thermomécanique.

Jusqu'à présent, ce modèle simplifié n'a pas pris en compte le chargement mécanique.

2^{ème} étape : chargement thermique - chargement mécanique

Il s'agit d'ajouter les effets mécaniques. Nous rappelons que les conditions aux limites mécaniques correspondent à un chargement hertzien, local, appliqué sur une demi-largeur de contact $a = 125 \mu\text{m}$.

Son effet est présenté sur les figures 5.23(b) et 5.23(c). Quand le chargement augmente, les contraintes de compression augmentent et les contraintes de Von Mises diminuent. Le couplage entre les paramètres thermomécaniques du revêtement et du substrat, des effets de la température responsables des contraintes de compression sous la zone de contact et du chargement mécanique expliquent que le revêtement de CrN soit moins

contraint pendant le cycle d'injection. Enfin, les figures 5.23(b) et 5.23(c) montrent que de la traction à la surface crée des contraintes latérales de traction dans la couche et augmente les contraintes de Von Mises. Le risque de fissuration est donc plus important si le polymère adhère à la surface lors de l'éjection de la pièce.

Choix d'un revêtement

Le paragraphe précédent a mis en avant les nombreux paramètres qui font varier les contraintes dans un revêtement mince soumis à un chargement mécanique. Les deux propriétés de volume les plus influentes sont le rapport des modules d'Young et le rapport des coefficients de dilatation. Suivant l'importance du chargement thermique par rapport au chargement mécanique, un type de revêtement sera plus ou moins intéressant.

La figure 5.24(a) montre une carte du maximum des contraintes de Von Mises dans un revêtement sur un substrat acier soumis à un chargement Hertzien thermomécanique. Les calculs ont été menés avec le modèle simplifié utilisé au paragraphe précédent. La température maximale atteinte au centre du contact dans ce cas est 49°C. Les points correspondent aux coordonnées du CrN, TiN et substrat nu. Le TiN est beaucoup plus contraint que le CrN et le substrat. Il n'y a pas de transposition directe avec les résultats obtenus dans le moule d'injection car plusieurs phénomènes ne sont pas pris en compte ici avec le modèle simplifié :

- Le moule est régulé à 50°C, ce qui provoque des contraintes de compression dans l'ensemble du massif.
- L'élévation de température locale au centre du contact avec le modèle simplifié est plus importante que dans le moule. Le gradient thermique est plus élevé, et donc son effet sur les contraintes dans le revêtement différent.

Ces cartes de contraintes sont toutefois intéressantes. Elles montrent l'effet du chargement, du module d'Young et du coefficient de dilatation sur les sollicitations subies par le revêtement. L'effet du chargement sur le risque de détérioration est visible en comparant les figures 5.24(a) et 5.24(b). Dans le cas chargé, la zone "acceptable" est plus large que quand les sollicitations mécaniques sont nulles. L'effet est encore plus visible en regardant les contraintes latérales (cf figures 5.25(a) et 5.25(a)). Il y a une zone de traction et une zone de compression. La frontière entre ces deux parties va se translater en fonction du chargement mécanique sur la surface, à chargement thermique constant.

Suivant les sollicitations subies, le risque de fissuration des couches de CrN ou de TiN va être différent.

5.7 Synthèse

Ce chapitre fait la synthèse des études menées dans le cadre de l'application sur les moules d'injection. une simulation simplifiée du cycle d'injection a été proposée à partir de l'utilisation d'un paramètre d'échange thermique global à l'interface et un coefficient de frottement. Ce paramètre thermique phénoménologique permet d'imposer un champ de température à la surface proche de celui mesuré dans l'application injection.

Le modèle ayant besoin des propriétés thermiques et mécaniques des revêtements, deux méthodes expérimentales ont été utilisées pour caractériser les différentes couches du pro-

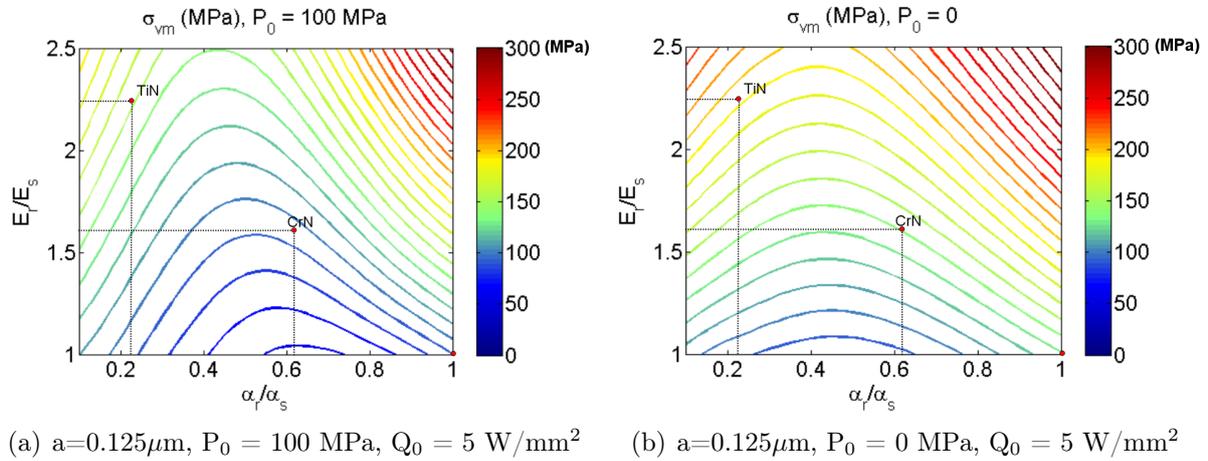


figure 5.24 - Carte du maximum des contraintes Von Mises dans un massif acier revêtu sous chargement Hertzien thermo-mécanique pour deux niveaux de pression mécanique

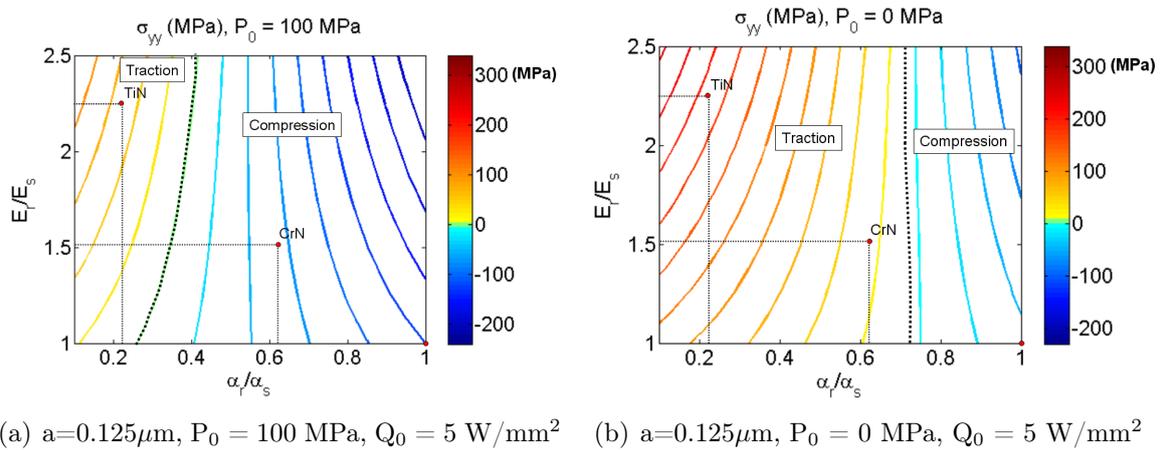


figure 5.25 - Cartes du maximum des contraintes latérales dans un massif acier revêtu sous chargement Hertzien thermo-mécanique pour deux niveaux de pression mécanique

jet.

La première, en collaboration avec le laboratoire d'optique physique de l'ESPCI, est la microscopie optique à photoreflectance. Cette technique permet de mesurer la diffusivité d'un matériau sur une épaisseur de l'ordre du micromètre et est de ce fait bien adaptée aux applications couches minces. Par contre, cette précision pose des difficultés quand à l'homogénéité des résultats avec la structure du matériau.

La seconde est une méthode de mesure du module d'Young des couches minces développée dans le cadre de ce travail et présentée au paragraphe 5.5.2. Elle utilise la théorie des poutres équivalentes et le décalage de la fréquence du premier mode de flexion dû à la modification de la rigidité en flexion d'un échantillon par le revêtement. Les avantages de cette technique est un faible coût comparé aux mesures de nano-indentation et sa relative facilité de mise oeuvre, d'un point de vue théorique et pratique. Elle a été validée par des mesures de module par nano-indentation. L'effet des différents paramètres a également été étudié afin de quantifier l'erreur de mesure et d'améliorer le système pour réduire les incertitudes.

Enfin, la dernière partie de ce chapitre est consacrée à l'études des revêtements de CrN et de TiN sous sollicitations thermomécaniques. Une étude globale et une étude locale ont été menées. L'objectif de la première était de déterminer l'influence des différentes propriétés du revêtement (thermiques, mécaniques, physiques). La seconde devait permettre de quantifier les contraintes subies par les différentes couches et de choisir la plus adaptée.

L'étude globale a montré que les couches minces (épaisseur comprise entre 2 et 5 μm) n'avaient aucune influence sur la thermique du moule et la température à la surface. Le procédé d'injection n'est donc pas modifié, d'un point de vue thermique, par la présence du revêtement. Les sollicitations mécaniques subies par le moule ne sont pas modifiées non plus. La contrainte normale σ_{yy} à la surface est directement transmise à l'interface. L'étude local a par contre montré que la couche de CrN était moins sollicitée que le TiN et le substrat non revêtu dans cette application. Cet état s'explique par un couplage entre les propriétés mécaniques, thermiques et le chargement. Le choix du revêtement le mieux adapté doit donc se faire en tenant compte de ces paramètres. uplage entre les propriétés mécaniques, thermiques et le chargement. Le choix du revêtement le mieux adapté doit donc se faire en tenant compte de ces paramètres.

Conclusion générale

Le choix et l'optimisation d'un revêtement d'une pièce mécanique est une procédure longue et complexe. Les techniques de dépôt et les matériaux disponibles étant de plus en plus nombreux et perfectionnés, les choix proposés à l'utilisateur sont multiples. Les procédures d'optimisation, souvent expérimentales et basées sur des considérations empiriques, deviennent de plus en plus lourdes et coûteuses. Dans le cas des moules d'injection des thermoplastiques, des normes industrielles et esthétiques sur les pièces injectées de plus en plus sévères entraînent un taux de rebut important, notamment à cause de la présence de défauts sur la surface du moule. L'objectif du traitement de surface est avant tout de protéger la surface pour augmenter la durée de vie et diminuer la fréquence d'entretien des moules.

L'utilisation d'un modèle numérique permet de tester de nombreuses configurations afin de cerner au mieux les propriétés mécaniques, thermiques et géométriques de la couche la mieux adaptée aux sollicitations subies par le système revêtement/substrat.

Ces dernières années, les modèles basés sur la méthode des éléments finis se sont développés. Ils permettent de simuler le comportement d'un solide revêtu sous diverses sollicitations et de prendre en compte des comportements non-linéaires tels que la plasticité ou la visco-plasticité des couches. L'inconvénient de ce type de simulation est le temps de calcul associé au nombre d'éléments nécessaires pour représenter correctement des couches de quelques micromètres d'épaisseur.

Outils et résultats

Ce travail a été consacré à la mise au point et à l'exploitation d'un module d'analyse du comportement thermoélastique d'un solide aux propriétés hétérogènes sous sollicitations quelconques. La réalisation d'un tel modèle est justifié par la diversité des traitements de surface. L'étude bibliographique a montré que suivant l'application, la profondeur affectée par le traitement varie de quelques micromètres au millimètre. La variation de propriétés peut être soit brutale dans le cas d'un dépôt sans diffusion ou très diffuse dans le cas des procédés de diffusion tel que la nitruration. Les interfaces sont classées en quatre grandes familles :

- l'interface abrupte,
- l'interface composée,
- l'interface diffusion,
- l'interface pseudo-diffusion.

Plus l'interpénétration des composants des différentes couches est importante, plus l'interface est résistante. Ce type de comportement est donc recherché. Ce constat confirme

que la prise en compte des gradients de propriétés à l'interface est également un élément important dans le développement du modèle.

Ce développement constitue une part importante de ce travail. En effet, l'objectif était de mettre en place une formulation en trois dimensions qui englobe à la fois les couches minces et épaisses ainsi que les traitements par diffusion.

Le modèle thermique est basé sur les équations de la conduction dans un solide et le modèle élastique sur les équations de Lamé généralisées (équations d'équilibre en déplacement dans un solide hétérogène isotrope). Le problème est résolu à l'aide d'une discrétisation aux différences finies du deuxième ordre des équations. Le système linéaire en résultant est traité à l'aide de la méthode itérative de Gauss-Seidel couplée avec les techniques Multigrilles et le raffinement local du maillage. L'utilisation des méthodes numériques avancées est obligatoire sur ce type de problème pour garder un temps de calcul raisonnable, les systèmes résultant de la discrétisation d'un solide revêtu avec une couche mince comptent souvent plusieurs millions de degrés de liberté.

L'adaptation des méthodes multiéchelles au cas d'un solide revêtu n'est pas directe. Deux difficultés sont apparues lors du développement de la méthode :

- l'anisotropie du matériau dégrade la convergence globale à cause d'une perte d'ellipticité des équations,
- les couches minces ne sont pas visible sur les maillages les plus grossiers. Le pas étant supérieur à l'épaisseur du revêtement, les corrections apportées par les niveaux inférieurs ne correspondent pas au problème des niveaux supérieurs. La convergence se dégrade donc très rapidement, d'autant plus que l'interface est proche de la surface.

La première a été contournée par l'utilisation de méthodes de relaxation spécifiques. La seconde a été résolue grâce à l'interpolation des propriétés sur les différents maillages. Cette solution relativement simple permet de retrouver le taux de convergence optimal, même avec des variations de propriété importantes.

Une méthode de résolution combinant les transformées de Fourier pour deux dimensions et une discrétisation aux différences finies sur la troisième dimension a également été utilisée pour résoudre le problème élastique. Le principal avantage de cette technique est sa rapidité d'exécution grâce à l'utilisation des algorithmes de FFT et sa simplicité de mise en oeuvre. Toutefois, les équations peuvent être transformées seulement dans les directions où les propriétés sont constantes.

Les modèles ont été validés à partir de la littérature et d'un logiciel éléments finis commercial. La corrélation avec des calculs thermiques et thermomécaniques est très bonne.

Ce modèle s'applique à de nombreux domaines. Le quatrième chapitre est dédié à deux études. La première concerne l'influence d'un gradient de propriétés sur les contraintes résiduelles d'origine thermique dans un massif en titane revêtu avec une couche de diamant. Les calculs ont montré que les contraintes sont principalement latérales, mais que l'apparition de contraintes résiduelles normales à l'interface relevées expérimentalement étaient en partie dues à la variation des propriétés mécaniques et thermiques dans la couche.

La seconde concerne la fissuration du PMMA revêtu avec du PS. Une publication récente a mis en avant la rupture fragile du revêtement sans apparition de plasticité lors d'un essai de frottement avec une lentille. Les calculs dans le massif revêtu ont confirmé que les contraintes dépassaient localement la limite élastique sur une profondeur égale à la moitié

de l'épaisseur du revêtement. Ces sollicitations locales provoquent l'apparition d'un réseau de fissures à l'arrière du contact.

Le comportement d'un moule lors de l'injection du polymère a été analysé dans le dernier chapitre. Un modèle de contact moule/polymère simplifié a été mis en place. En effet, l'écoulement du fluide dans la cavité est un phénomène très complexe à cause des propriétés spécifiques des thermoplastiques et du changement de phase lors du procédé. Le contact est représenté dans les simulations comme un flux thermique de longueur et d'intensité variable à la surface du solide revêtu. Ce flux est calculé grâce à un paramètre d'échange déterminé à partir des essais menés sur moule plaque instrumenté. Un cycle type simplifié a pu être mis en place.

Une étude quantitative nécessite également de connaître les propriétés le plus précisément possible les propriétés thermiques et mécaniques des différents revêtements et du substrat. Ces caractérisations ont été faites grâce à l'utilisation de deux techniques :

- la microscopie thermique à photoreflectance mesure la diffusivité d'un matériau sur une profondeur de l'ordre du micromètre. Cette technique est très bien adaptée pour les couches minces.
- la détermination du module d'Young par la mesure du décalage en fréquence d'un substrat seul et un substrat revêtu. Un banc d'essai a été mis en place, optimisé puis validé pour caractériser les couches de CrN, TiN et DLC. Ce type de mesure a l'avantage d'être simple, rapide à mettre en place et surtout de fournir une valeur moyenne indépendante de l'état de surface ou de la structure des matériaux.

L'étude du comportement du revêtement lors du cycle d'injection a été menée en deux étapes : une étude globale afin de déterminer l'influence des différentes propriétés du revêtement (thermiques, mécaniques, physiques) sur le procédé et une étude locale centrée sur le champ de contraintes dans le revêtement.

La première a mis en évidence que ce type de couche ne modifie pas la thermique du solide. La température de surface est la même avec ou sans revêtement. Elle a également montré que le coefficient de Poisson n'influence pas le champ de contraintes. Ces paramètres ont pu être écartés de l'étude. La principale conclusion est que le revêtement se comporte principalement comme une condition à la limite du solide. Il modifie son coefficient de frottement et ses propriétés physico-chimiques de surface mais pas le comportement du moule au cours du cycle.

La seconde a montré que le CrN est plus adapté à ce type d'application que le TiN. Les sollicitations subies en terme de contraintes sont inférieures dans le CrN grâce notamment à un couplage des propriétés thermiques, mécaniques et du chargement. Ce couplage a fait l'objet d'une étude plus approfondie avec un modèle simplifié qui a permis de comprendre les différents phénomènes mis en jeu avec des sollicitations thermomécaniques. Même sans prendre en compte les effets non-linéaires, les phénomènes thermiques et élastiques sont complexes et couplés. Il n'est pas envisageable de présenter les résultats sous forme d'abaques car le nombre de cas de figure est élevé et la superposition de certaines variations de paramètres peut conduire à des effets imprévisibles.

Conséquences industrielles

Cette étude permet de tirer plusieurs conclusions quant au choix d'un traitement de surface :

1. Procédé d'injection : le revêtement ne modifie pas la thermique des moules d'injection. Cette conclusion était présente lors des différents essais menés dans le cadre de ce projet mais aussi lors des expériences précédentes. Les effets mécaniques sur l'écoulement sont indirects et relativement faibles : une modification du coefficient de frottement peut modifier la vitesse de glissement à l'interface.
2. Endommagement de la surface : les revêtements les plus adaptés au procédé sont le CrN et le TiN. Le CrN est moins contraint et donc son endommagement plus faible. Par contre sa résistance à la rayure est généralement plus faible que le TiN. Le choix dépend donc des conditions d'utilisation des pièces (petite ou grande série, fréquence de nettoyage).
3. Développement des revêtements : les différentes études ont montré qu'une interface graduée est plus résistante qu'une interface abrupte. Le profil du champ de contrainte suit globalement la variation des propriétés dans la profondeur. L'utilisation de couches à gradient de propriétés a donc deux avantages :
 - éliminer le saut de contrainte à l'interface et donc les sollicitations et les risques de délamination ou de fissuration,
 - favoriser l'adhérence du revêtement avec une interface du type diffusion ou pseudo-diffusion plus résistante que les autres.

Ce dernier est déjà exploré et utilisé de manière consciente ou non. La plupart des procédés de dépôt forment une zone de diffusion sous la couche. L'interface, qui est souvent considérée comme une frontière physique, est plutôt une zone d'adaptation entre les composants du substrat et du traitement.

Perspectives

Ce travail a permis de mettre en place un modèle thermoélastique en trois dimensions à gradient de propriétés. La résolution à l'aide des méthodes Multigrilles élargit le champ des possibilités en matière de raffinement de maillage et d'épaisseur de zones traitées. Les principales difficultés liées au gradient de propriétés ont été résolues.

Le modèle existant peut être utilisé pour mener des études sur l'influence d'un gradient de propriétés dans diverses applications, impliquant un revêtement ou non. Il peut également être complétée par l'étude des phénomènes non linéaires :

- variation des propriétés avec la température : la structure de la méthode qui calcule le champ de température avant les déplacements permet d'étendre facilement le modèle dans cette direction. Cette dépendance introduit simplement une variation supplémentaire des propriétés inconnue au départ de la simulation.
- prise en compte de la plasticité : ce phénomène est plus complexe. En effet, il faut déterminer la zone plastifiée et la transférer sur les différents maillages utilisés. La frontière étant inconnue a priori et mobile au cours de la résolution, des techniques spécifiques restent à développer pour transférer l'état de contrainte d'un maillage à l'autre.

CONCLUSION GENERALE

– couplage des phénomènes thermiques et mécaniques : la dilatation du solide provoque une modification de la répartition des températures. Ce couplage est négligeable quand les déformations sont faibles mais ne l'est plus à haute température. Toutefois, le modèle élastique n'est valide que lorsque les déformations sont petites devant la taille du solide. Enfin, ces études théoriques ne pourront être exploitées efficacement que si les revêtements sont caractérisés mécaniquement et thermiquement. Deux méthodes ont été utilisées au cours de ce travail pour déterminer le module d'Young et la diffusivité. Le banc développé donne des résultats convaincants mais l'incertitude sur les mesures reste difficile à déterminer. Des études complémentaires sont nécessaires pour en apprécier les limites. Des efforts importants restent aussi à apporter pour caractériser les limites de résistance de l'interface (fissuration, adhérence, fatigue, ...). Les propriétés de surface doivent également être caractérisées. L'application sur moule d'injection a montré que le revêtement est vu comme une condition limite du moule : il modifie les propriétés pour augmenter la résistance aux diverses sollicitations. Pour comprendre son influence sur le procédé, il est nécessaire de mieux comprendre les interactions entre la surface et le polymère.

Bibliographie

- [1] M.F. ADAMS, Algebraic multigrid methods for constrained linear systems with applications to contact problems in solid mechanics. *Numer. Linear Algebra Appl.*, 2000, vol. 11, n°2-3, pp. 141 – 153.
- [2] J.F. AGASSANT, P. AVENAS, J.P. SERGENT, B. VERGNES et M. VINCENT, *La mise en forme des matières plastiques*. Paris : Lavoisier, Tex Doc, ISBN 2-7430-0016-3, 1995.
- [3] R.E. ALCOUFFE, A. BRANDT, J.E. DENDY et J.W. PAINTER, The Multigrid Method for the Diffusion Equation with Strongly Discontinuous Coefficients. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 1981, vol. 2, n°4, pp. 430 – 453.
- [4] W.F. AMES, *Non Linear Partial Differential Equations in Engineering*. Mathematics in Science and Engineering, Vol 18, 1965.
- [5] S. AUDISIO, M. CAILLET, A. GALERIE et H. MAZILLE, *Revêtements et traitements de surface*. Lausanne : Presses polytechniques et Universitaires Romandes, ISBN 2-88074-405-9, 1999.
- [6] B. AUDOIN, Non-destructive evaluation of composite materials with ultrasonic waves generated and detected by laser. *Ultrasonics*, 2002, vol. 40, pp. 735 – 740.
- [7] D. BAI et A. BRANDT, Local Mesh Refinement Multilevel Techniques. *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, 1987, vol. 8, pp. 109 – 134.
- [8] M. BAI, K. KATO, N. UMEHARA et Y. MIYAKE, Nanoindentation and FEM study of the effect of internal stress on micro nano mechanical property of thin CN_x films. *Thin Solid Films*, 2000, vol. 377-378, pp. 138 – 147.
- [9] BALZERS. « <http://www.balzers.fr/> », consulté le 17 janvier 2006.
- [10] E. BARTHEL, A. PERRIOT, A. CHATEAUMINOIS et C.H. FRETIGNY, Elastic contact to nearly incompressible coatings - Stiffness enhancement and elastic pie-up. *arXiv :cond-mat*, 2006, vol. cond-mat/0605401, disponible sur : http://arxiv.org/PS_cache/cond-mat/pdf/0605/0605401.pdf (Consulte le 4/09/2006).
- [11] C. BAUDRY. *Contribution à la modélisation instationnaire et tridimensionnelle du comportement dynamique de l'arc dans une torche de projection plasma*. Thèse de doctorat, Université de Limoges, 2003.
- [12] S. BAUVAIS. *Etude de l'influence de la porosité sur les propriétés électriques de dépôts réalisés par projection plasma*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2003.
- [13] P. BENABEN, Chromage. *Techniques de l'ingénieur*, 2006, vol. M 1615, pp. 30.

- [14] A. BENDADA, K. COLE, M. LAMONTAGNE et Y. SIMARD, A hollow waveguide infrared thermometer for polymer temperature measurement during injection moulding. *Journal of Optics*, 2003, vol. A 5, pp. 464 – 470.
- [15] A. BENDADA, A. DERDOURI, M. LAMONTAGNE et Y. SIMARD, Analysis of thermal contact resistance between polymer and mold in injection molding. *Applied Thermal Engineering*, 2004, vol. 24, pp. 2029 – 2040.
- [16] R.H. BENTALL et R.R. JOHNSON, Slip in the rolling contact of two dissimilar elastic rollers. *Int. Jour. of Mechanical Sciences*, 1967, vol. 9, pp. 989.
- [17] A. BETTAYEB. *Contribution à l'étude du comportement de secteurs circulaires revêtus, élastiques et viscoélastiques : Développement d'un modèle analytique 2D et 3D*. Thèse de doctorat, Université de Poitiers, 1994.
- [18] K. BEWIGOLA. In International Conference on METALLURGICAL COATINGS et Thin FILMS, editors, *Tribological Coatings at Faunhofer IST*. Fraunhofer Institute for Surface Engineering and Thin Films, 2000.
- [19] A. BILLARD et F. PERRY, Pulvérisation cathodique magnétron. *Techniques de l'ingénieur*, 2006, vol. M 1654, pp. 17.
- [20] Li. BINCHENG, L. POTTIER, J.P. ROGER et D. FOURNIER, Thermal characterization of thin superconducting films by modulated thermorefectance microscopy. *Thin Solid Films*, 1999, vol. 352, pp. 91 – 96.
- [21] J. BOS. *Frictional heating of tribological contacts*. Thèse de doctorat, University of Twente, The Netherland, ISBN 90-9008920-9, 1995.
- [22] P.B. BOWDEN et S. RAHA, The plastic yield behavior of PMMA. *J. Mat. Sci.*, 1968, vol. 3, pp. 183 – 190.
- [23] A. BRANDT, Multilevel Adaptative Solution to Boundary Value Problems. *Mathematics of Computation*, 1977, vol. 31, pp. 333 – 390.
- [24] A. BRANDT, *Multigrid Techniques : 1984 Guide with Applications to Fluid Dynamics*. BOHN : Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung, (GMD studien vol 85), 1984.
- [25] A. BRANDT, « Rigorous Local Mode Analysis of Multigrid ». In *in Prelim. Proc. 4th Copper Mountain Conference on MultiGrid Methods*. Copper Mountain, Colorado, 1990.
- [26] A. BRANDT, M. ISRAELI, I. YAVNEH et A. SIEGEL, Multigrid Solution of an Elliptic Boundary-Value Problem with Integral Constraints. *SIAM J. Sci. Comput.*, 2000, vol. 21, No. 4, pp. 1357 – 1369.
- [27] G. BÉRANGER et H. MAZILLE, Approche scientifique des surfaces. Caractérisation et propriétés. *Techniques de l'ingénieur*, 2006, vol. M1425, pp. 21.
- [28] W.L. BRIGGS, *A Multigrid Tutorial*. <http://www.llnl.gov/CASC/people/henson/mgtut/welcome.html>, consulté le 11 avril 2006.
- [29] S.J. BULL, Topical Review : Nanoindentation of coatings. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 2005, vol. 38, pp. R393 – R413.
- [30] B. BUSHAN et W. PENY, Contact mechanics of multilayered rough surfaces. *Appl. Mech. Rev.*, 2002, vol. 55, pp. 435 – 480.

-
- [31] CETIM, *Traitements de surface : 2000*. Veille technologique. Senlis : CETIM, ISBN 2-85400-516-3, 2001.
- [32] M. CHATAIN et A. DOBRACZYNSKI, Injection des thermoplastiques : les moules. *Techniques de l'ingénieur*, 2006, vol. A 3 680, pp. 36.
- [33] A. CHATEAUMINOIS, M.C. BAIETTO-DUBOURG, C. GAUTHIER et R. SHIRRER, In situ analysis of the fragmentation of polystyrene films within sliding contacts. *Tribology International*, 2005, vol. 38, pp. 931 – 942.
- [34] C.C. CHIU et Y. LIOU, Residual stresses and stress-induced cracks in coated components. *Thin Solid Films*, 1995, vol. 268, pp. 91 – 97.
- [35] B. DAMIENS. *Modélisation de la lubrification sous-alimentée dans les contacts EHD elliptiques*. Thèse de doctorat, INSA Lyon, 2003.
- [36] L. DAVID. Etude des propriétés thermiques des matériaux sous irradiation en fonction de la température. Mémoire de DEA, Université Blaise Pascal de Clermont-Ferrand, 2002.
- [37] M.I. DE BARROS, D. RATS, L. VANDENBULCKE et G. FARGES, Influence of internal diffusion Barriers on carbon diffusion in pure titanium and Ti-6Al-4V during diamond deposition. *Diamond and Related Materials*, 1999, vol. 8, pp. 1022 – 1032.
- [38] M.I. DE BARROS, L. VANDENBULCKE, Chinsky L., D. RATS et J. VON STEBUT, Smooth fine-grained diamond coatings on titanium alloy for mechanical applications. *Diamond and Related Materials*, 2001, vol. 10, pp. 337 – 341.
- [39] Montes de OCA VALERO J.A.. *Élaboration de carbure et de nitrure de titane par des procédés chimiques et physiques en phase vapeur : caractérisation de la microstructure*. Thèse de doctorat, Université Bordeau I, 2002.
- [40] Société Française de THERMIQUE, *Livre blanc : La recherche en thermique, enjeux et perspectives en 2005 version 3*. Vandoeuivre : société française de thermique, 2005.
- [41] D. DELAUNAY, P.H LE BOT, R. FULCHIRON, J.F. LUYE et G. REGNIER, Nature of Contact Between Polymer and Mold in Injection Molding. Part I : Influence of a Non-Perfect Thermal Contact. *Polymer Engineering and Science*, 2000, vol. 40 n°7, pp. 1682 – 1691.
- [42] D. DELAUNAY, P.H LE BOT, R. FULCHIRON, J.F. LUYE et G. REGNIER, Nature of Contact Between Polymer and Mold in Injection Molding. Part I : Influence of Mold Deflection on Pressure History and Shrinkage. *Polymer Engineering and Science*, 2000, vol. 40 n°7, pp. 1692 – 1700.
- [43] I. DEMIRCI. *Mécanique de l'endommagement par rayure de polymères*. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur, Strasbourg, 2004.
- [44] P. DJEMIA, C. DUGAUTHIER, T. CHAUVEAU, E. DOGHECHE, M.I. DE BARROS et L. VANDENBULCKE, Mechanical properties of diamond films : a comparative study of polycrystalline and smooth fine-grained diamonds by Brillouin light scattering. *J. Appl. Physics*, 2001, vol. 90 n°8, pp. 3771 – 3779.
- [45] L.A. DOBRZANSKI, M. POLOK et M. ADAMIAK, Structure and properties of wear resistance PVD coatings deposited onto X37CrMoV5-11 type hot work steel. *Journal of Materials Processing Technology*, 2005, vol. 164-165, pp. 843 – 849.

- [46] L.A. DOBRZANSKI, M. POLOK, P. PANJAN, S. BUGLIOSI et M. ADAMIAK, Improvement of wear resistance of hot steel by PVD coatings deposition. *Journal of Materials Processing Technology*, 2004, vol. 155-156, pp. 1995 – 2001.
- [47] F. DURUT, P. BENABEN, B. FOREST et J. RIEU, Influence of Temperature on the Microstructure and Properties of Chromium Electrodeposits. *Metal Finishing*, March 1998, pages 52 – 60.
- [48] J. FONTAINE. *Elaboration, caractérisation et tribologie de couches minces DLC pour la lubrification des mécanismes spatiaux*. Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lyon, 2000.
- [49] S.V. FORTUNA, Y.P. SHARKEEV, A.J. PERRY, J.N. MATOSSIAN et I.A. SHULEPOV, Microstructural features of wear-resistant titanium nitride coatings deposited by different methods. *Thin Solid Films*, 2000, vol. 377-378, pp. 512 – 517.
- [50] C. FRIEDRICH, G. BERG, E. BROSZEIT et C. BERGER, Measurement of the hardness of hard coatings using a force indentation function. *Thin Solid Films*, 2000, vol. 377-378, pp. 512 – 517.
- [51] A. GALERIE, *Traitements de surfaces en phase vapeur*. Mécanique et ingénierie des matériaux, PARIS : Lavoisier, ISBN 2-7462-0420-7, 2002.
- [52] J.C. GATINA. *Contact de corps élastiques. Effets tangentiels et normaux : formulation et résolution des problèmes inverse et direct*. Thèse de doctorat, INSA de Lyon, 1987.
- [53] B.P. GEARING et L. ANAN, On modeling the deformation and fracture response of glassy polymers due to shear-yielding and crazing. *International Journal of Solids and Structures*, 2004, vol. 41, pp. 3125–3150.
- [54] D. GHIGLIONE, C. LEROUX et C. TOURNIER, Nitruration, nitrocarburation et dérivés. *Techniques de l'ingénieur*, 2006, vol. M 1227, pp. 44.
- [55] S. GOEDECKER, *Wavelet and their applications for the solution of partial differential equations in physics*. Lausanne : Presses polytechniques et Universitaires Romandes (Cahiers de Physique, 4), ISBN 2-88074-398-2, 2000.
- [56] S. GOMES, N. TRANNOY, F. DEPASSE et P. GROSSEL, AC scanning thermal microscopy : Tip-sample interaction and buried defects modelling. *Int. J. Therm. Sci.*, 2000, vol. 39, pp. 526 – 531.
- [57] S. GOMES, N. TRANNOY, P. GROSSEL, C. BAINIER et D CHARRAULT, DC scanning thermal microscopy : characterisation and interpretation of the measurement. *Int. J. Therm. Sci.*, 2001, vol. 40, pp. 949 – 958.
- [58] P. GOUDEAU, L. VANDENBULCKE, C. MET, M.I. DE BARROS, P. ANDREAZZA, D. THIAUDIERE et M. GAILHANOU, X-Ray diffraction analysis of residual stresses in smooth fined-grain diamond coatings deposited on TA6V alloys. *Surface and Coatings Technology*, 2005, vol. 200, pp. 170 – 173.
- [59] G.W. GOWARD, Progress in coatings for gas turbine and airfoils. *Surface and Coatings Technology*, 1998, vol. 108-109, pp. 73 – 7.
- [60] M.A. GULER et F. ERDOGAN, Contact mechanics of graded coatings. *International Journal of Solids and Structures*, 2004, vol. 41, pp. 3865 – 3889.

- [61] M.A. GULER et F. ERDOGAN, Contact mechanics of two deformable elastic solids with graded coatings. *Mechanics of Materials*, 2006, vol. 38, pp. 633 – 647.
- [62] B. HAY, J.R. FILTZ et J.C. BATSALE, Mesure de la diffusivité thermique par la méthode flash. *Techniques de l'ingénieur*, 2004, vol. R 2995, pp. 12.
- [63] D.A. HILLS, D. NOVELL et A. SACKFIELD, *Mechanics of elastic contacts*. Boston : Butterworth-Heinmann Ltd, ISBN 0-7506-0540-5, 1993.
- [64] H. HOLLECK, Multilayer PVD Coatings for Wear Protection. *Surface and Coatings Technology*, 1995, vol. 76-77, pp. 328 – 336.
- [65] H. ICHIMURA et I. ANDO, Mechanical Properties of Arc-evaporated CrN Coatings : Part I - Nanoindentation Hardness and Elastic Modulus. *Surface and Coatings Technology*, 2001, vol. 145, pp. 88 – 93.
- [66] C. JACQ. *Limite d'endurance et durée de vie en fatigue de roulement du 32CrMoV13 nitruré en présence d'indentations*. Thèse de doctorat, INSA-LYON, 2001.
- [67] R.R. JOHNSON, *Contact Mechanics*. Cambridge : Cambridge University Press, 1985.
- [68] Y. JU et T.N. FARRIS, Spectral analysis of two dimensional contact problems. *Journal of Tribology, Trans. ASME*, 1996, vol. 118, pp. 320 – 328.
- [69] J.J. KALKER. *On the rolling contact of two elastic bodies in the presence of dry friction*. Thèse de doctorat, Delft University of Technology, The Netherland, 1967.
- [70] J.J. KALKER, *The contact between wheel and rail*. Delft University of Technology, Report of the Department of mathematics and informatics, 1982.
- [71] J.J. KALKER, *Three dimensional elastic bodies in rolling contact*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1990.
- [72] P. KARVANKOVA, M.G.J. VEPREK-HEIJMAN, D. AZINOVIC et S. VEPREK, Properties of superhard nc-TiN/a-BN and nc-TiN/a-BN/a-TiB₂ nanocomposite coatings prepared by plasma induced chemical vapor deposition. *Surface and Coatings Technology*, 2006, vol. 200, pp. 2978 – 2989.
- [73] J. LEMAITRE et J.L. CHABOCHE, *Mécanique des matériaux solides*. Paris : DUNOD, ISBN 2-04-18618-2, 1988.
- [74] J.M. LEROY. *Modélisation thermoélastique des revêtements de surface utilisés dans les contacts non lubrifiés*. Thèse de doctorat, INSA-LYON, 1989.
- [75] J.M. LEROY, A. FLOQUET et B. VILLECHAISE, Thermomechanical behavior of multilayered media : theory. *Journal of Tribology, Trans. ASME*, 1989, vol. 111, pp. 538 – 544.
- [76] V. LINSS, N. SCHWARZER, T. CHUDOBA, M. KARNIYCHUK et F. RICHTER, Mechanical properties of a graded B-C-N sputtered coating with varying Young's modulus : deposition, theoretical modelling and nanoindentation. *SCT*, 2005, vol. 195, pp. 287 – 297.
- [77] J.L LOUBET, J.M. GEORGES, O. MARCHESINI et G. MEILLE, Vickers Indentation Curves of Magnesium Oxide (MgO). *Journal of Tribology, Trans. ASME*, 1984, vol. 103, pp. 43 – 48.
- [78] A.A LUBRECHT. *The numerical solution of the Elastohydrodynamically lubricated line- and point contact problem, using Multigrid techniques*. Thèse de doctorat, University of Twente, The Netherlands, 1987.

- [79] H. MASSÉ, E. ARQUIS, D. DELAUNAY, S. QUILLET et P.H LE BOT, Heat transfer with mechanically driven thermal contact resistance at the polymer-mold interface in injection molding of polymers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2004, vol. 47, pp. 2015 – 2027.
- [80] D.M. MATTOX, *Handbook of Physical Vapor Deposition (PVD) Processing*. Park Ridge, NJ : Noyes Publication, ISBN 0-8155-1422-0, 1998.
- [81] A. NIEDERHOFER, P. NESLADIK, H.D. MÄNNLING, K. MOTO, S. VEPREK et M. JILEK, Structural properties, internal stresses and thermal stability of superhard nanocomposite coatings reaching the hardness of diamond. *Surface and Coatings Technology*, 1999, vol. 120-121, pp. 173 – 178.
- [82] T. NOGI et T. KATO, Hard surface layer on the limit of elastic contact : Part1 : analysis using a Real Surface Model. *Journal of Tribology, Trans. ASME*, 1997, vol. 119, pp. 493 – 500.
- [83] W.C. OLIVER et G.M. PHARR, An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments. *Journal of Material Research*, 1992, vol. 7, pp. 1564 – 1583.
- [84] E. ORAN BRIGHAM, *The fast Fourier Transform*. Englewood Cliffs : Prentice-Hall, Inc., 1974.
- [85] M.N. OZISIK, *Heat Conduction*. New York : John Wiley and Sons, ISBN 0-471-05481-X, 1976.
- [86] L. PAWLOWSKI, *Dépôts physiques : Techniques, microstructure et propriétés*. Lausanne : Presses polytechniques et Universitaires Romandes, ISBN 2-88074-529-2, 2003.
- [87] H.O. PIERSON, *Handbook of chemical vapor deposition*. New York : Noyes publication, ISBN 0-8155-1432-8, 1999.
- [88] M. PILLOZ. *Revêtements laser multicouches multimatériaux : maîtrise des traitements et des contraintes résiduelles*. Thèse de doctorat, INSA-LYON, 1990.
- [89] K. PLAMANN, D. FOURNIER, B.C. FORGET et A.C. BOCCARA, Microscopic measurements of the local heat conduction in polycrystalline diamond films. *Diamond and Related Materials*, 1996, vol. 5, pp. 699 – 705.
- [90] S. PLUMET. *Modélisation d'un milieu multicouche 3D sous sollicitation de contact*. Thèse de doctorat, INSA-LYON, 1998.
- [91] S. PLUMET et M.C. BAIETTO-DUBOURG, A 3D model for a multilayered body loaded normally and tangentially against a rigid Body : Application to specific coatings. *Journal of Tribology, Trans. ASME*, 1998, vol. 120, n°4, pp. 668 – 676.
- [92] L. POTTIER, Micrometer scale visualization of thermal waves by photorefectance microscopy. *Appl.Phys. Lett.*, 1994, vol. 64(13), pp. 1618 – 1619.
- [93] R. QUINSON. *Caractérisation et modélisation de la déformation non élastique des polymères amorphes à l'état solide*. Thèse de doctorat, INSA de Lyon, 1995.
- [94] N.X. RANDALL, G. FAVARO et C.H. FRANKEL, The effect of intrinsic parameters on the critical load as measured with the scratch test method. *Surface and Coatings Technology*, 2000, vol. 137, pp. 146 – 151.

-
- [95] D. RATS, L. BIMBAULT, L. VANDENBULCKE, R. HERBIN et K.F. BADAWI, Residual stresses analysis in diamond layers deposited on various substrates. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 1985, vol. 383, pp. 159 – 164.
- [96] F. REVERDY et B. AUDOIN, Synthèse de fronts plans par déplacement d'une source laser. *C.R. Acad. Sci. Paris*, 1999, vol. T. 327, n° II b, pp. 1021 – 1028.
- [97] A.M. REZA. « From Fourier Transform to Wavelet Transform ». Technical Report, Milwaukee : University of Wisconsin Milwaukee, 1999.
- [98] D.S. RICKERBY, G. ECKOLD, K.T. SCOTT et I.M. BUCKLY-GOLDER, The inter-relationship between internal stress, processing parameters and microstructure of physically vapor deposited and thermally sprayed coatings. *Thin Solid Films*, 1987, vol. 154, pp. 125 – 141.
- [99] A.S. SAADA, *Elasticity : Theory and Applications*. Malabar, Fla. : Robert E. Krieger publishing company, inc., 1983.
- [100] P. SCAFIDI. *Etude de la stabilité mécanique de films de passivation destinés à la microélectronique*. Thèse de doctorat, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1992.
- [101] E. SCHÄFFER et G. KLEER, Mechanical behavior of (Ti,Al)N coatings exposed to elevated temperatures and an oxydative environment. *Surface and Coatings Technology*, 2000, vol. 133-134, pp. 215 – 219.
- [102] N. SCHWARZER, Coating design due to analytical modelling of mechanical contact problems on multilayer systems. *Surface and Coatings Technology*, 2000, vol. 133-134, pp. 397 – 402.
- [103] H.M. SHODJA et A. GHAREMANINEJAD, An FMG coated elastic solid under thermomechanical loading : a two dimensional linear elastic approach. *Surface and Coatings Technology*, 2006, vol. 200, pp. 4050 – 4064.
- [104] G.G. STONEY, The tension of mettalic film deposited by electrolysis. *Proc. Roy. Soc.*, 1909, vol. A82, pp. 172 – 175.
- [105] O. ÖSTÜRK, O. ORMUS et D.L. WILLIAMSON, Microstructural, mechanical, and corrosion characterisation of plasma-nitrided plastic injection mould steel. *Surface and Coatings Technology*, 2005, vol. 196, pp. 341 – 348.
- [106] Traitements Composites Poudres et Process TCPP. « [http ://www.tcpp.fr/](http://www.tcpp.fr/) », consulté le 30 juin 2006.
- [107] J. TORRES-GONZALEZ et P. BENABEN, Study of the Influence of Electrolyte Chemical Composition on the Properties of Chromium electrodeposits - Microstructure, Crystallographic Texture, Residual Stress and Microhardness. *Metal Finishing*, June 2003, pages 107 – 116.
- [108] M. VAN STAPPEN, B. MALLIET et M. KERKHOFS, *Revêtements de surface résistant à l'usure, déposés sur des outils par des techniques de déposition sous vide, Rapport OPO2*. CRIF, Bruxelles, Belgium, 1992.
- [109] C.H. VENNER et A.A LUBRECHT, *MultiLevel Methods in Lubrication*. Amsterdam : Elsevier, ISBN 0-444-50503-2, 2000.
- [110] S. VEPREK, Invited critical review. *Journal of Vacuum Technology*, 1999, vol. A17(5), pp. 2401 – 2420.

BIBLIOGRAPHIE

- [111] S. VEPREK et M. JILEK, Super- and ultrahard nanocomposite coatings : generic concept for their preparation, properties and industrial application. *VACUUM, Surface Engineering, Surface Instrumentation and Vacuum Technology*, 2002, vol. 67, pp. 443 – 449.
- [112] B. VILLECHAISE. *Mécanique des contacts : élasticité et rupture*. Thèse de doctorat, INSA de Lyon et Univ. Lyon I, 1985.
- [113] P.J. WITHERS et H.K.D.H. BHADESHIA, Residual stresses Part 1 : measurement techniques. *Mater. Sci. Technol.*, 2001, vol. 17, pp. 355 – 365.

Annexe A

Microscopie à photoréfectance

Ce chapitre présente plus en détail un outil de mesure des propriétés thermiques de couches minces : le microscope thermique à photoréfectance. Cet outil a été développé au laboratoire d'optique physique de l'ESPCI Paris [92]. Il permet de mesurer les propriétés locales d'un matériau à l'échelle du micromètre [20, 89]. Il est donc adapté pour déterminer les propriétés des revêtements minces là où d'autres méthodes sont inefficaces.

A.1 Description de l'outil

A.1.1 Principe du montage

Cette technique est basée sur les ondes thermiques provoquées par un faisceau modulé en intensité venant chauffer la surface de l'échantillon à caractériser. Un laser Ar^+ , dont l'intensité est modulée, est couplée avec un microscope optique focalisé sur la surface de l'échantillon (voir figure A.1). La modulation en fréquence s'étend généralement de 10 kHz à quelques MHz. La lumière du laser est partiellement absorbée à la surface et chauffe l'échantillon périodiquement, excitant une onde thermique dans le matériau. La position du spot chauffant peut être modifiée à la surface en changeant l'inclinaison du miroir.

Pour détecter l'onde thermique, un laser sonde, non modulé (670 nm), est focalisé au centre du champ visuel. Après réflexion sur la surface de l'échantillon, le faisceau sonde est séparé du faisceau d'excitation. Son intensité est mesurée avec un photodétecteur rapide.

Pour la plupart des matériaux, la réflectivité R est fonction de la température. Le faisceau sonde réfléchi porte donc une modulation provoquée par le flux thermique dans l'échantillon. Il peut donc servir de détecteur local. Pour déterminer la diffusivité thermique du matériau, la surface est balayée avec le faisceau sonde et le signal est évalué en fonction de la distance r séparant les deux faisceaux.

A.1.2 Ondes thermiques, modèle

Dans le régime modulé, l'équation fondamentale de la thermique peut être vue comme une équation définissant une onde thermique. En une dimension, elle peut s'écrire :

$$T(t) = \frac{Q}{r} e^{-r/\mu} \cos\left(\omega r - \frac{r}{\mu}\right) \quad (\text{A.1})$$

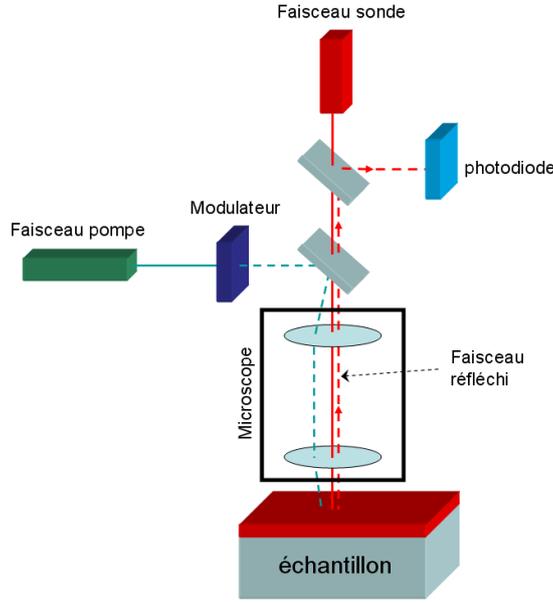


figure A.1 - Principe du montage

qui peut s'écrire sous forme complexe :

$$T(t) = \frac{Q}{r} e^{-\sigma r} \quad (\text{A.2})$$

avec $\sigma = \sqrt{\frac{j\omega}{D}}$, soit, en prenant $\omega = 2\pi f$ la pulsation d'excitation et $\mu = \sqrt{\frac{D}{\pi f}}$:

$$\sigma = \frac{1+j}{\mu}$$

La température peut alors s'écrire au point r en fonction des paramètres μ et r :

$$T = \underbrace{\frac{Q}{r} e^{-\frac{r}{\mu}}}_{\text{Module}} \cdot \underbrace{e^{-j\frac{r}{\mu}}}_{\text{Argument}} \quad (\text{A.3})$$

La figure A.2 montre l'évolution de l'amplitude et de la phase de la température en fonction de la distance avec le point d'excitation de l'onde thermique. On voit que l'onde s'amortit rapidement avec une pente de $1/\mu$. Cette courbe peut donc être utilisée pour mesurer la diffusivité thermique du matériau. Le tracé de la phase permet de comparer les courbes plus facilement puisqu'elle varie linéairement avec la distance.

Le concept d'onde thermique permet d'appliquer un certain nombre de notions de la théorie des transmissions. Un milieu thermiquement conducteur est caractérisé par une impédance Z avec

$$Z = \frac{T}{Q} = \frac{1}{k\sigma_0} \quad \text{et} \quad \sigma_0 = \sqrt{\frac{j\omega}{D}}$$

Une couche peut être représentée de façon matricielle (voir [74]) par :

$$\begin{pmatrix} T(z) \\ Q(z) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} \cosh(\sigma_0 l) & Z \sinh(\sigma_0 l) \\ \frac{1}{Z} \sinh(\sigma_0 l) & \cosh(\sigma_0 l) \end{bmatrix}}_{[A]} \begin{pmatrix} T(z+1) \\ Q(z+1) \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

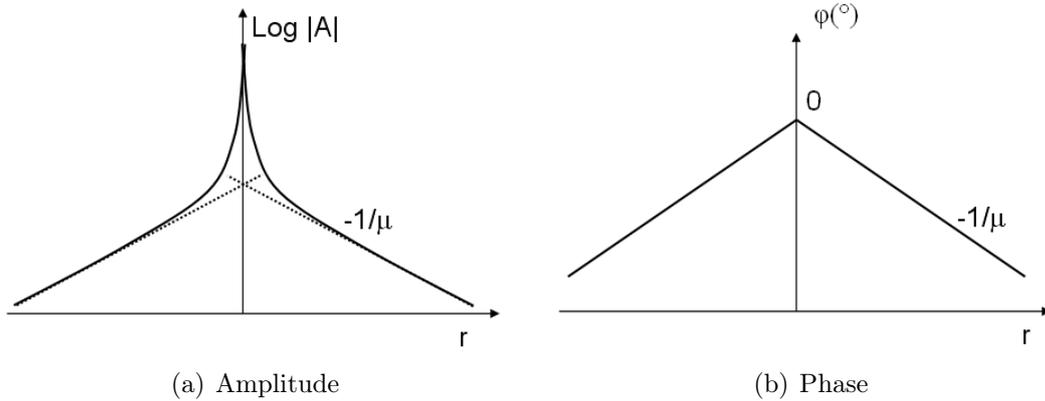


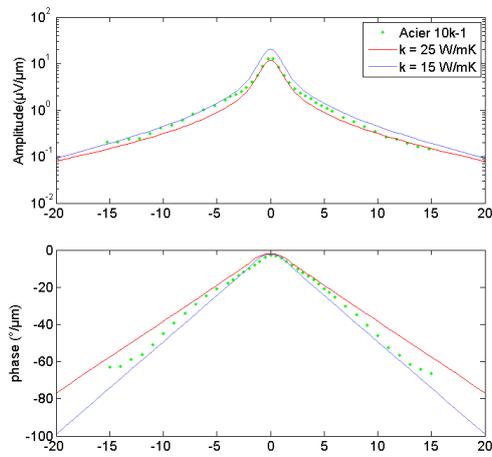
figure A.2 - Evolution de l'amplitude et de la phase de la température en fonction de la distance avec excitation en un point.

Quand l'échantillon est exposé à un flux thermique modulé périodiquement, $q(0, \omega) = q_0 e^{j\omega t}$, la température de surface qui en résulte $T(0, \omega)$ peut être calculée par l'impédance d'entrée $W_e = \frac{A_{21}}{A_{11}}$ et $T(0, \omega) = q(0, \omega) W_e(\omega)$.

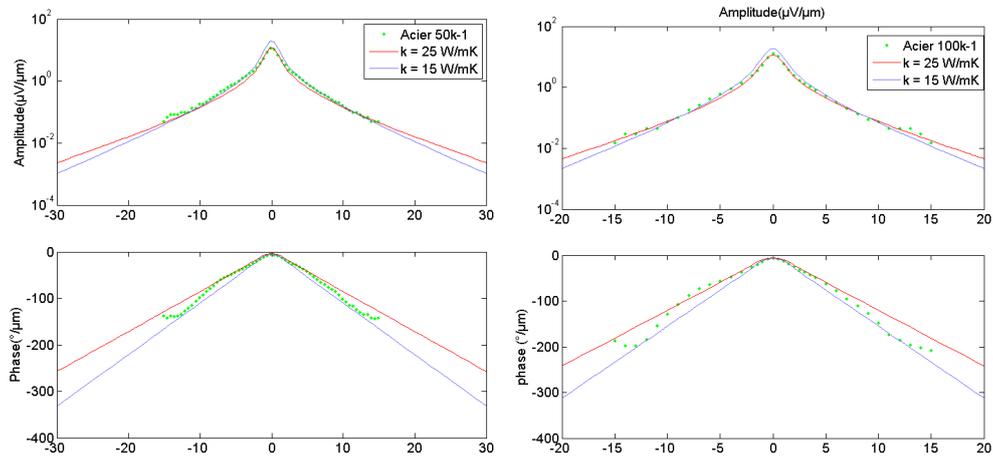
Avec une géométrie 3D, cette configuration reste applicable si on travaille dans l'espace de Hankel (équivalent de la transformée de Fourier pour des problèmes en coordonnées sphériques) avec la constante de propagation $\sigma = \sqrt{\sigma_0 + \lambda^2}$ ($\lambda =$ fréquence spatiale). Comme pour les transformées de Fourier, le produit de convolution devient un produit simple dans l'espace de Hankel. Pour déterminer le champ de température provoqué par le laser modulé, il faut convoluer le champ de température provoqué par une excitation ponctuelle avec la distribution gaussienne de flux du faisceau pompe. Cette opération permet de déterminer la température à la surface de l'échantillon. La diffusivité thermique de la couche est déterminée par une méthode inverse, en comparant les mesures aux résultats donnés par le modèle.

A.2 Mesures des propriétés des revêtements

Les courbes de phase et d'amplitude des mesures effectuées sur l'acier et l'acier revêtu TiN, CrN et DLC sont présentées dans ce paragraphe



(a) 10 kHz



(b) 50 kHz

(c) 100 kHz

figure A.3 - *Mesure des propriétés de l'acier*



figure A.4 - *Microstructure de l'acier*

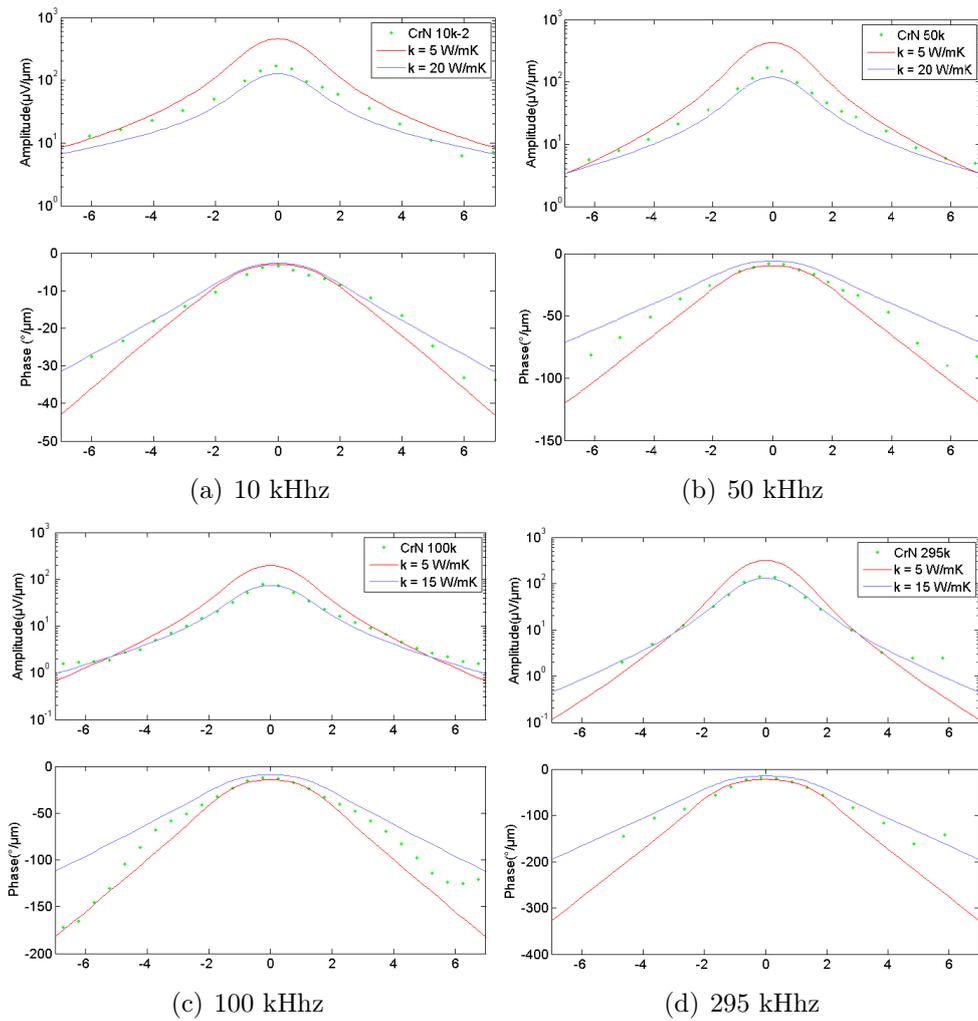


figure A.5 - *Mesure des propriétés du revêtement de CrN*

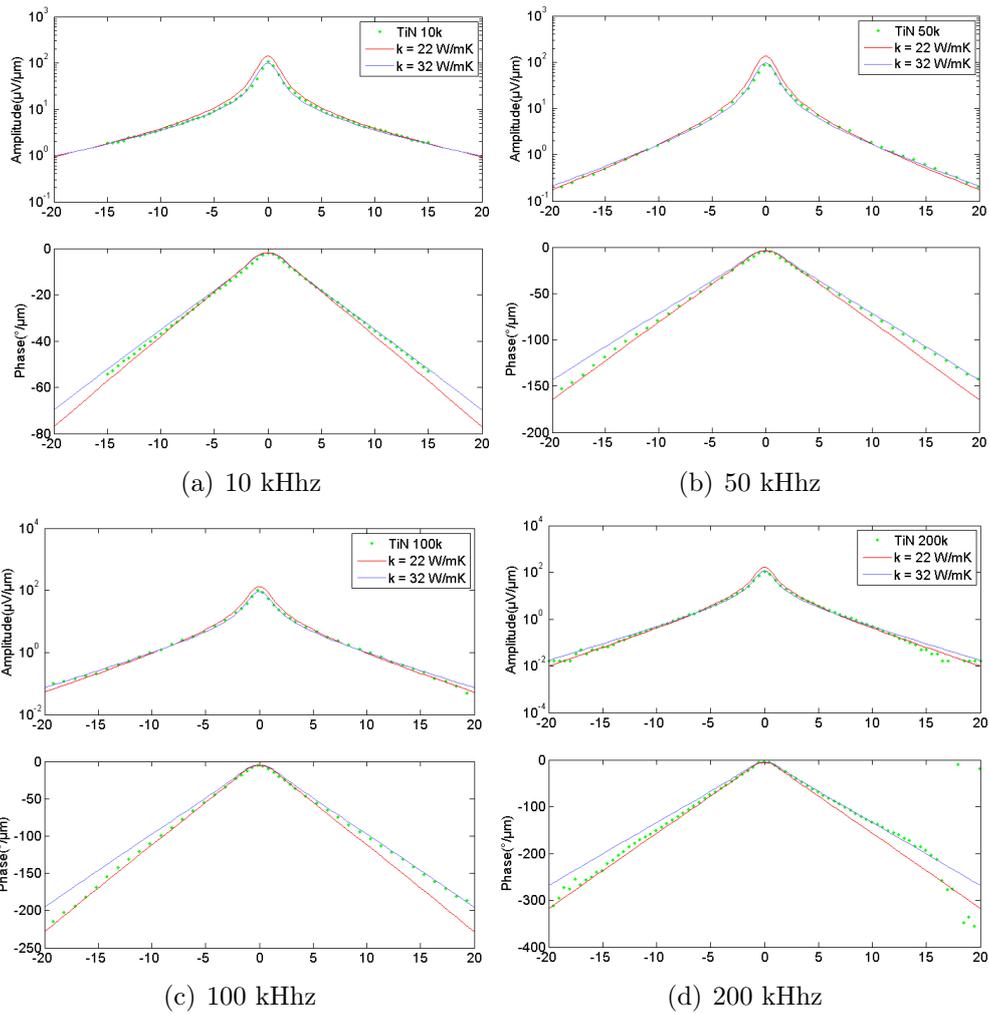


figure A.6 - Mesure des propriétés du revêtement de TiN

Annexe B

Banc de mesure des propriétés mécaniques d'une couche mince : description et validation

L'objectif de ce banc est de mesurer le plus simplement possible le module d'Young d'une couche mince. La méthode vibratoire est adaptée à ce genre d'essais. Elle donne une valeur globale et s'affranchit des propriétés de la surface de l'échantillon.

Le banc d'essais a été mis en place au LaMCoS puis validé par différents tests. Des essais de sensibilité ont également été menés afin de quantifier l'erreur de mesure et plusieurs protocoles ont été testés afin de parvenir à une mesure proche des données de la littérature.

B.1 Description

Le banc est constitué d'un bloc massif d'acier sur lequel repose le dispositif d'encastrement de la languette (cf figure B.1). La taille et le poids du support permettent d'éviter tout mouvement du dispositif et l'apparition de fréquences parasites lors de l'acquisition. Le maintien de l'éprouvette est réalisé sur une longueur d'environ 6 mm à l'aide de deux vis pour réaliser l'encastrement. De plus, il dispose d'une cale permettant d'avoir, pour

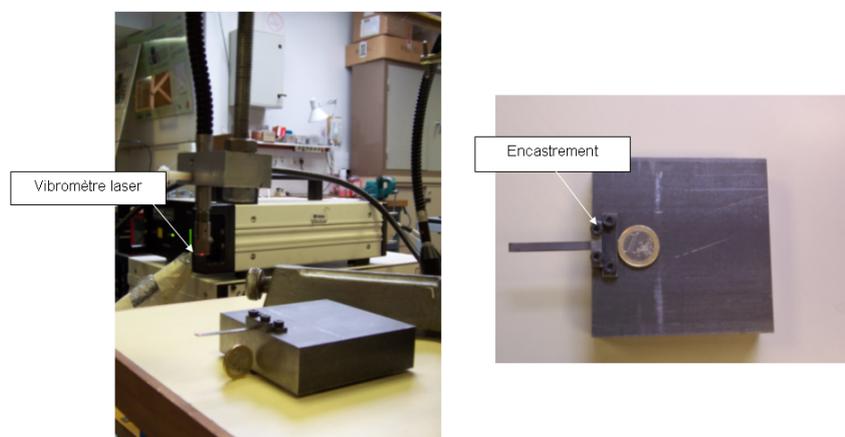


figure B.1 - Banc de mesure du module d'Young de couches minces

toutes les languettes, la même longueur libre. L'excitation de l'échantillon est effectuée par une simple impulsion du doigt en bout de lamelle. Les appareils servant à la manipulation sont :

- un dispositif d'encastrement,
- un vibromètre laser,
- un ordinateur permettant l'acquisition des amplitudes et la réalisation du post-traitement des données.

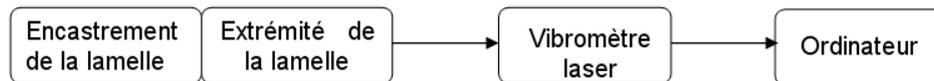


figure B.2 - Chaîne de mesure

Traitement des données :

La vitesse de déplacement de l'extrémité de la languette est acquise à l'aide d'un vibromètre laser. Les données sont ensuite traitées par une transformée de Fourier pour mesurer la fréquence de résonance de l'échantillon.

B.2 Validation

Une série de tests a été menée afin de déterminer l'influence du serrage de l'encastrement, de l'erreur sur le positionnement de l'échantillon et du niveau du signal recueilli. Les conclusions sont les suivantes :

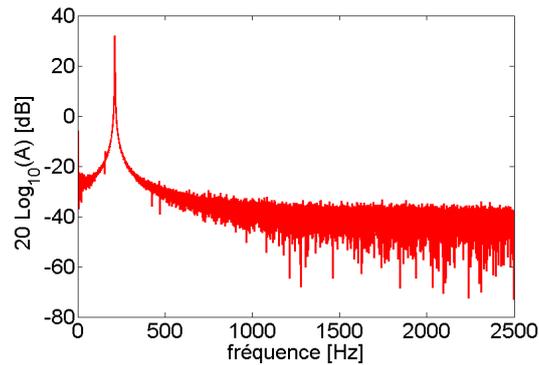
- l'impulsion donnée sur la languette n'influence pas la fréquence mesurée.
- les vis de l'encastrement sont serrées avec un clé dynamométrique. Un couple supérieur à 2 Nm est nécessaire pour éliminer l'influence de ce paramètre.
- l'intensité du signal recueilli par le vibromètre laser n'influence pas la mesure de la fréquence du mode fondamental.
- les mesures avec montage et démontage de l'encastrement en utilisant le même échantillon sont reproductibles. Le tableau B.1 présente les résultats de 10 mesures avec montage et démontage de l'encastrement par différents utilisateurs. La série de mesures a donné un écart type inférieur à un Hertz. Cette valeur correspond à moins de 0,5% d'erreur relative ce qui met en évidence la reproductibilité de la mesure.

B.3 Essais

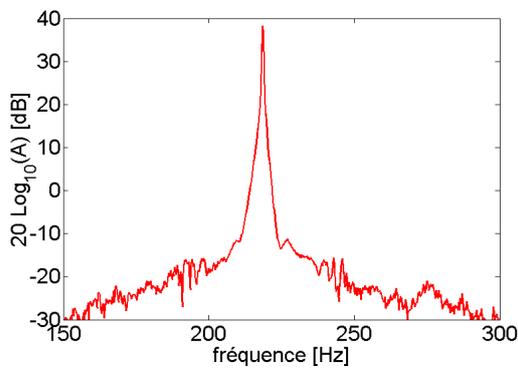
B.3.1 Éprouvettes

Nous avons à notre disposition un ensemble d'éprouvettes revêtues et non-revêtues. Elles ont été fournies par HEF R&D qui a réalisé les dépôts. L'échantillon test est constitué de 10 languettes :

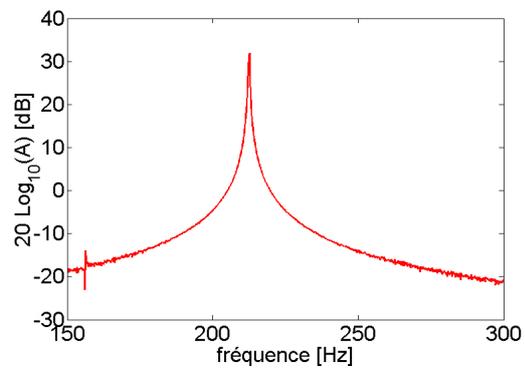
- 1 languette de substrat non revêtue en acier 304L de module d'Young $E_s = 195$ GPa,
- 3 languettes en acier 304L revêtues de DLC,



(a) Analyse fréquentielle de la réponse d'une languette non revêtue



(b) Mode fondamental en flexion d'une languette revêtue TiN (TIN 2)



(c) Mode fondamental en flexion du substrat non revêtu

figure B.3 - Analyse fréquentielle : comparaison du spectre de la languette de référence et d'une languette revêtue TiN

- 3 languettes en acier 304L revêtues de CrN,
- 3 languettes en acier 304L revêtues de TiN.

La géométries des languettes fournies par HEF est la suivante :

- longueur 50 mm,
- largeur 5mm,
- épaisseur 0,5mm.

Les épaisseurs des revêtements sont :

- TiN : 3.5 μm
- CrN : 3.2 μm
- DLC : 1.7 μm

La mesure de l'épaisseur a une précision de plus ou moins 0,1 à 0,2 μm . Elle a été déterminée par abrasion sphérique du revêtement (calotest). Cette technique consiste à mettre en contact une bille mise en rotation avec l'éprouvette revêtue. Une usure abrasive de la couche se produit alors avec l'obtention d'une calotte sphérique qui débouche dans le substrat. L'épaisseur du film est calculée après mesure du diamètre de la calotte.

essai	fréquence mesurée
1	215.5
2	215.25
3	214.8
4	215
5	216.25
6	215.75
7	213.7
8	215.2
9	215.5
10	214
Moyenne	215.1
Ecart type	0.73

TAB. B.1 - Tests de reproductibilité du montage avec un échantillon revêtu DLC

B.3.2 Premier protocole

Description

Chaque languette est testée dix fois afin d'obtenir des résultats représentatifs et exploitables. L'encastrement est desserré et serré et la languette est retournée entre chaque mesure afin de s'affranchir au maximum de l'influence du montage. La fréquence du premier mode en flexion de l'échantillon non revêtu est la référence de l'étude et la base pour les calculs des modules d'Young des revêtements.

La fréquence de vibration de chacune des languettes revêtues est mesurée dix fois par analyse du spectre de la vitesse de l'extrémité libre et le module d'Young du revêtement calculé avec la relation (5.6).

Résultats

Les modules d'Young des revêtements des neuf languettes revêtues sont répertoriés dans le tableau B.2.

	TiN 1	TiN 2	TiN 3	Moyenne TiN
E_{TiN} (GPa)	440	628	723	597
	CrN 1	CrN 2	CrN 3	Moyenne CrN
E_{CrN} (GPa)	679	591	609	626
	DLC 1	DLC 2	DLC 3	Moyenne DLC
E_{DLC} (GPa)	1010	1300	883	1060

TAB. B.2 - Modules d'Young des trois revêtements mesurés avec le protocole 1

Les résultats sont relativement dispersés pour un seul type de revêtement entre chaque languette 1-2-3. Nous avons donc recherché quelles en étaient les causes. De nombreux tests

ayant été fait sur le banc d'essai lui-même, nous nous sommes orientés sur les échantillons. Une variation de la géométrie entre la languette de référence et les languettes revêtues a pu être observée.

De ce fait, nous nous sommes orientés sur des voies de recherche qui sont :

- l'influence de l'épaisseur du revêtement sur le module d'Young calculé,
- l'influence de l'écart de géométrie entre le substrat de référence et les languettes revêtues.

Analyse de l'influence de la géométrie de la languette

Deux paramètres de la languette influent sur le module d'Young calculé :

- l'épaisseur du revêtement : une incertitude de 10% sur l'épaisseur du revêtement peut influencer de 10% le résultat obtenu. L'épaisseur est donc un paramètre très sensible. Son contrôle et sa validité déterminent la justesse des modules d'Young. La précision de mesure de l'épaisseur donnée par HEF R&D implique une incertitude de l'ordre de 20% pour le revêtement de DLC d'épaisseur 1,3 microns, tandis que les épaisseurs des revêtements CrN et TiN impliquent une erreur sur la détermination des modules d'Young de l'ordre de 10% parce qu'ils sont plus épais. Ceci permet d'expliquer que les résultats obtenus pour les DLC sont largement au-dessus de la littérature, alors que les résultats des TiN et CrN s'en approchent.
- écart de géométrie : la géométrie de référence est celle de la languette non-revêtue. Les longueurs des échantillons ont été mesurés et une variation de géométrie d'environ 2% est observée, ce qui représente une erreur sur le module d'Young calculé de 3%. Cette valeur est négligeable par rapport aux autres incertitudes. Par contre, un écart de 10% sur l'épaisseur de l'éprouvette a été mesuré. Cette valeur intervenant au cube dans la relation (5.6), elle n'est pas négligeable. L'incertitude sur la géométrie est donc un paramètre important qu'il n'est pas possible d'ignorer car les écarts entre le substrat de référence et les échantillons revêtus sont trop importants.

La solution utilisée pour contourner ce problème est la mesure de la fréquence du premier mode de flexion pour chaque languette avant dépôt. De cette manière, les incertitudes sur la géométrie du substrat sont éliminées. Seul reste l'erreur sur la mesure de l'épaisseur du revêtement.

B.3.3 Deuxième protocole

Le premier protocole a montré l'importance de l'écart de géométrie entre l'éprouvette de référence et l'éprouvette testée. Il est nécessaire de mesurer le mode fondamental de tous les substrats avant dépôt. Pour cela, deux languettes revêtues avec du CrN et deux languettes revêtues avec du TiN ont été détraitées. Il n'a pas été possible de détraiter les DLC à cause du procédé dont la température dépasse 600°C. Ceci permet de s'affranchir de l'influence d'une différence de géométrie entre le substrat de référence et la languette revêtue.

Les éprouvettes détraitées ont été testées pour chaque revêtement et les fréquences propres déterminées. Les nouveaux modules d'Young calculés sont répertoriés dans le tableau B.3.

L'échantillon CrN 2 ayant été dégradé, la fréquence mesurée n'est pas prise en compte.

	TiN 1	TiN 2	Moyenne TiN
E_{TiN} (GPa)	432	451	441
	CrN 1	CrN 2	Moyenne CrN
E_{CrN} (GPa)	308	238	308

TAB. B.3 - *Modules d'Young des trois revêtements mesurés avec le protocole 2*

Ces valeurs sont proches de celles relevées dans la littérature. Elles ont également été comparées à des mesures de nano-indentation (cf annexe C)

B.3.4 Discussion sur les résultats

Plusieurs paramètres entrent en jeu dans l'application de ce dispositif expérimental :

- la géométrie des languettes,
- l'épaisseur du revêtement,
- la modification des propriétés ou de la géométrie du substrat pendant le dépôt,
- le processus de détraitement.

géométrie des languettes : Il est nécessaire d'utiliser le substrat réel comme référence. La fréquence du premier mode est déterminée directement sur l'éprouvette qui est revêtue. Une très légère variation de la géométrie (épaisseur, longueur libre) a des conséquences importantes sur la valeur du module. Le fait d'utiliser le même substrat au lieu d'un substrat de référence fait disparaître l'incertitude sur la géométrie.

épaisseur du revêtement : L'épaisseur est un paramètre qui intervient au cube dans les relations utilisées pour calculer le module d'Young (cf eq(5.6)) et de ce fait influence grandement les résultats. C'est le paramètre le plus influent sur l'erreur des résultats obtenus. Il est donc très important de connaître sa valeur pour chaque dépôt ainsi que sa précision pour quantifier la validité des modules d'Young déterminés.

influence du processus du dépôt sur les caractéristiques du substrat : Dans les tests effectués sur les couches de DLC, les valeurs calculées sont toujours très au-dessus des valeurs de la littérature. Il se peut que le processus de dépôt, qui monte plus haut en température que pour les revêtements de TiN et de CrN, modifie la géométrie ou les propriétés mécaniques des languettes fines.

influence du processus du détraitement sur les caractéristiques du substrat : Lors des détraitements des revêtements TiN, la forme de la languette a varié à cause de la relaxation des contraintes.

Ces observations nous permettent d'estimer l'erreur globale de mesure à 20%. Des essais complémentaires sont nécessaires pour affiner cette valeur et obtenir des résultats plus

ANNEXE B. BANC DE MESURE DES PROPRIÉTÉS MÉCANIQUES D'UNE
COUCHE MINCE : DESCRIPTION ET VALIDATION

fiables à partir du second protocole.

Annexe C

Rapport de mesures des propriétés mécaniques des revêtements par nano-indentation

//// Rapport d'analyse A06-058

- > Méthode : Nano Hardness Testeur (NHT)**

- > Echantillons : 3 lamelles métalliques revêtues TiN, CrN, DLC**

- > Client : ESSILOR / INSA Lyon**

- > Rédacteur : Guillaume Berthout**

- > Date : 13 avril 2006**

//// Introduction

Trois échantillons revêtus ont été fournis afin de déterminer la dureté et le module élastique de la couche.

Cinq tests ont été réalisés sur chaque échantillon en utilisant le Nano Hardness Testeur (NHT) de CSM Instruments, dont les spécifications sont rappelées en annexe 1. Le NHT est particulièrement adapté à la mesure de la dureté et du module élastique pour des couches présentant des épaisseurs de quelques micromètres et moins. L'instrument assure le contrôle asservi de la charge appliquée ainsi que la mesure de la profondeur de pénétration dans le matériau tout en minimisant l'influence du substrat lors de la mesure. La plupart des matériaux peuvent être analysés à l'aide du NHT : matériaux mous, durs, fragiles ou ductiles.

La dureté ainsi que le module sont déterminés à partir de la technique d'indentation instrumentée décrite en annexe 2.

//// Description des échantillons

> Echantillon 1

Substrat : acier
Dépôt : TiN
Épaisseur : 1 à 3 um

> Echantillon 2

Substrat : acier
Dépôt : CrN
Épaisseur : 1 à 3 um

> Echantillon 3

Substrat : acier
Dépôt : DLC
Épaisseur : 1 à 3 um

//// Conditions de test et paramètres

> Informations générales

Atmosphère : Air
Température : 22°C
Hygrométrie : 50%

> Paramètres de test

Les paramètres d'indentations suivants sont appliqués pour la réalisation de 5 indentations sur chaque échantillon :

Type d'indenteur : Berkovich
Vitesse d'approche : 2000 nm/min
Type de charge : Linéaire
Vitesse de charge : 40 mN/min
Force maximale : 20 mN
Pause à charge maximale : 30 s
Vitesse de décharge : 40 mN/min

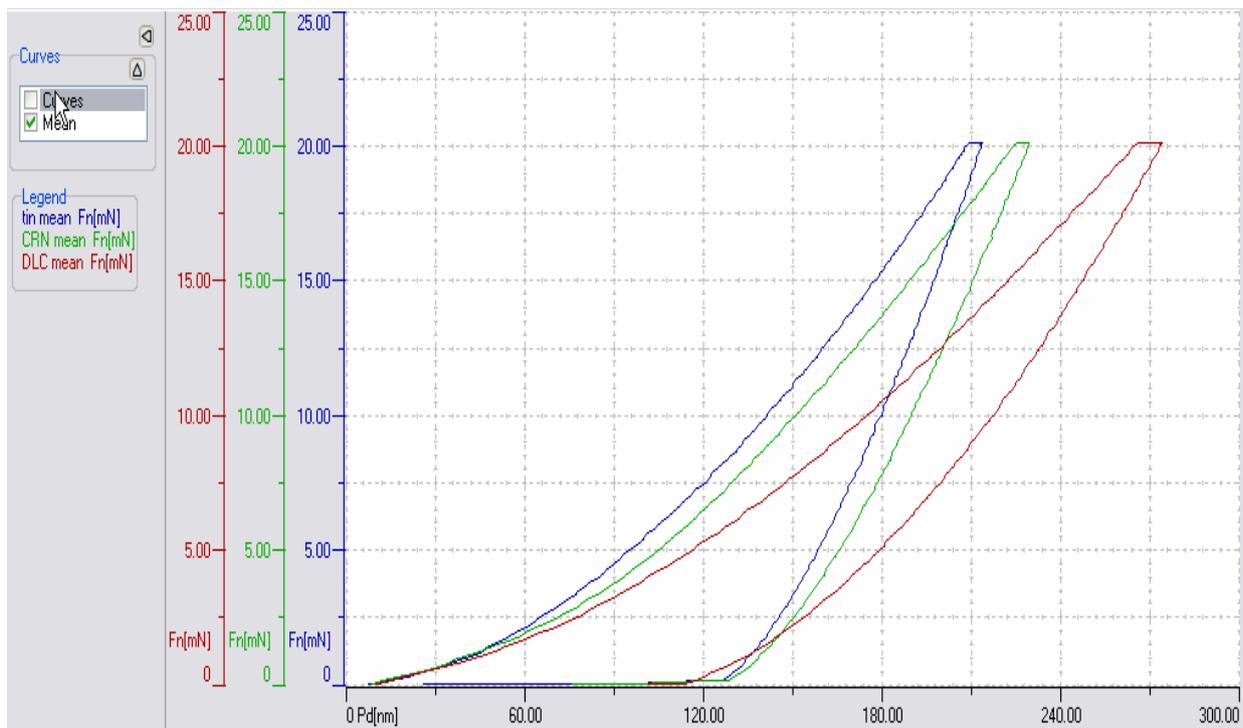
//// Résultats

Tous les résultats sont obtenus avec la méthode « Oliver & Pharr », décrite en annexe 2 et en appliquant un coefficient de Poisson théorique de 0.25 pour la couche de TiN et 0.2 pour la couche de DLC et CrN, dans la détermination du module élastique.

> Courbes de charge en fonction de la profondeur de pénétration

Les courbes charge / profondeur de pénétration suivantes présentent une moyenne sur plusieurs indentations.

Légende : — TiN — CrN — DLC



> Tableaux de résultats

Dureté H_{IT}

		TIN	CRN	DLC
Hit (O&P) [MPa]	Data : 1	29703	26450	18725
	Data : 2	26348	24471	20779
	Data : 3	26969	24865	20740
	Data : 4	26229	24808	19887
	Data : 5	27280	24663	19577
	Mean	27306	25052	19942
	Std Dev	1260	713	769

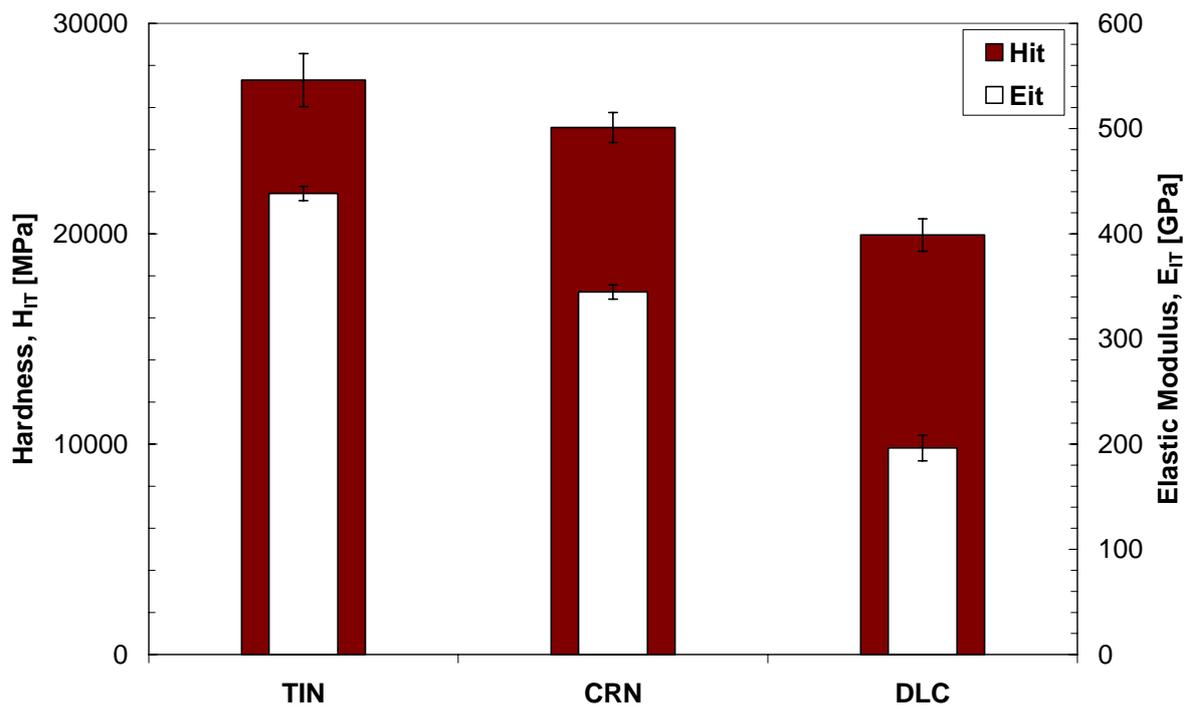
Dureté Vickers HV_{IT}

		TIN	CRN	DLC
HV (O&P) [Vickers]	Data : 1	2750.8	2449.6	1734.1
	Data : 2	2440.1	2266.2	1924.4
	Data : 3	2497.6	2302.7	1920.8
	Data : 4	2429.1	2297.5	1841.7
	Data : 5	2526.4	2284.1	1813.1
	Mean	2528.8	2320.0	1846.8
	Std Dev	116.7	66.0	71.2

Module élastique E_{IT}

		TIN	CRN	DLC
Eit (O&P) [GPa]	Data : 1	428.3	341.1	218.2
	Data : 2	433.2	340.0	198.0
	Data : 3	446.1	357.5	194.9
	Data : 4	439.2	339.0	182.0
	Data : 5	444.7	345.4	188.6
	Mean	438.3	344.6	196.3
	Std Dev	6.8	6.8	12.2

> Graphes comparatifs

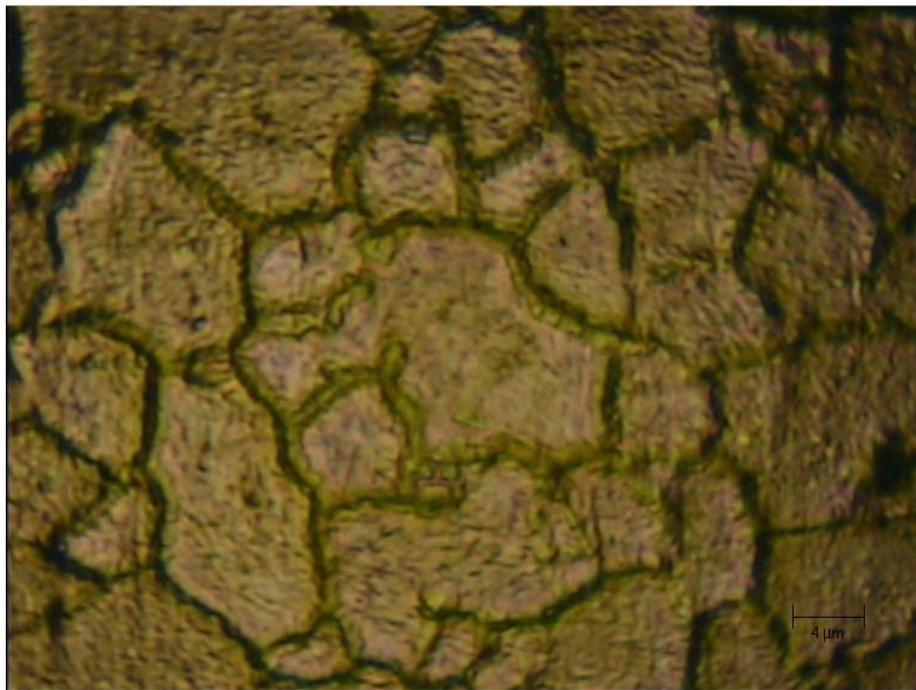


//// Commentaires

Cinq indentations ont été réalisées sur chaque échantillon en utilisant le Nano Hardness Testeur. Grâce à la technique d'indentation instrumentée utilisée par cet équipement, la profondeur de pénétration maximale de l'indentation a été maîtrisée afin de limiter l'influence du substrat.

A titre d'indication la valeur de dureté sur le substrat non revêtu est d'environ 220 HV et de module d'Young 60 GPa.

Les premiers essais ont été conduits sur le TiN. Une grande dispersion dans les résultats a été au début constatée, les valeurs de dureté Vickers fluctuant par exemple entre 1900 et 3200 HV. L'observation microscopique a indiqué la présence en surface d'un dépôt morcelé. Des plaques entourées de crevasses relativement profondes ont pu être observées par AFM. La profondeur de ces crevasses avoisine les 400 nm.

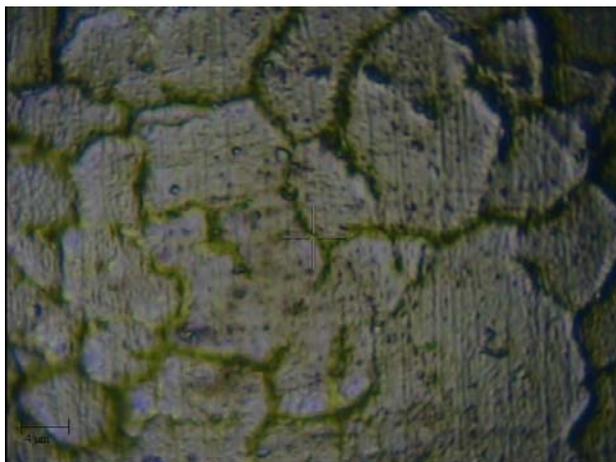


Les contrôles AFM sont fournis en fichier pdf annexes.

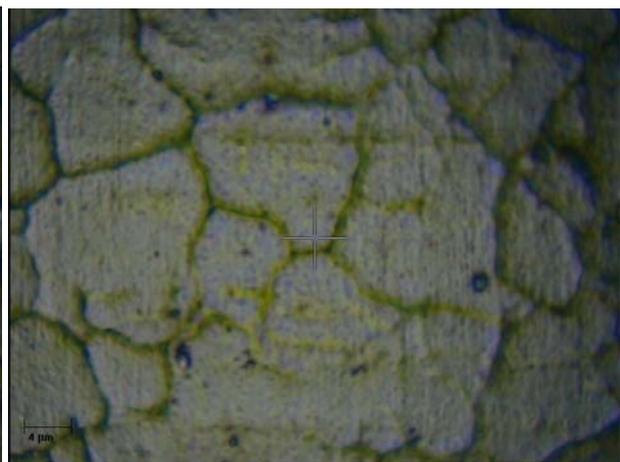
Nous avons contrôlé la rugosité sur la partie supérieure de ces plaques. Elle avoisine, après correction de profil les 6 à 7 nm. Pour éviter d'être sous l'influence de cette rugosité, la norme 14577 préconise une profondeur d'indentation supérieure à vingt fois la valeur du Ra. Nous avons donc opté pour une profondeur d'indentation voisine de 200 nm.

Une gestion de l'indentation par matrice visuelle (sélection sur l'image de la zone d'indentation) nous a permis d'obtenir des valeurs plus homogènes, comme le démontrent les faibles valeurs d'écart type, en ciblant le milieu des plaques.

Les résultats indiquent que le DLC présente la dureté la plus faible. Nous avons retrouvé, sur l'ensemble des échantillons fournis cet aspect morcelé de la couche.



Surface du CrN



Surface du DLC

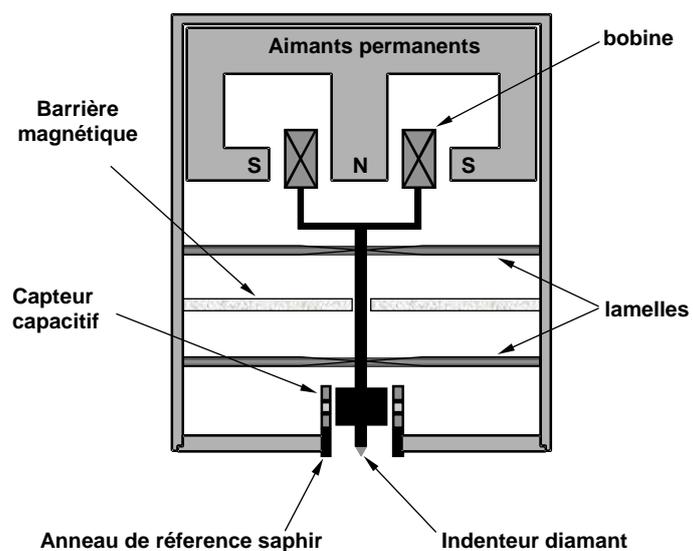
Annexe 1

//// L'instrument NHT

> Photographie



> Schéma du système d'indentation



//// Spécifications du NHT

> Application de la charge	électroaimant
Charge maximale	500 mN
Charge minimale	< 0.05 mN
Résolution	40 nN
> Mesure de déplacement	capteur LVDT
Profondeur d'indentation maximale	gamme fine : 20 µm
	gamme normale : 200 µm
Résolution	gamme fine: 0.04 nm
	gamme normale: 0.3 nm

ANNEXE 2

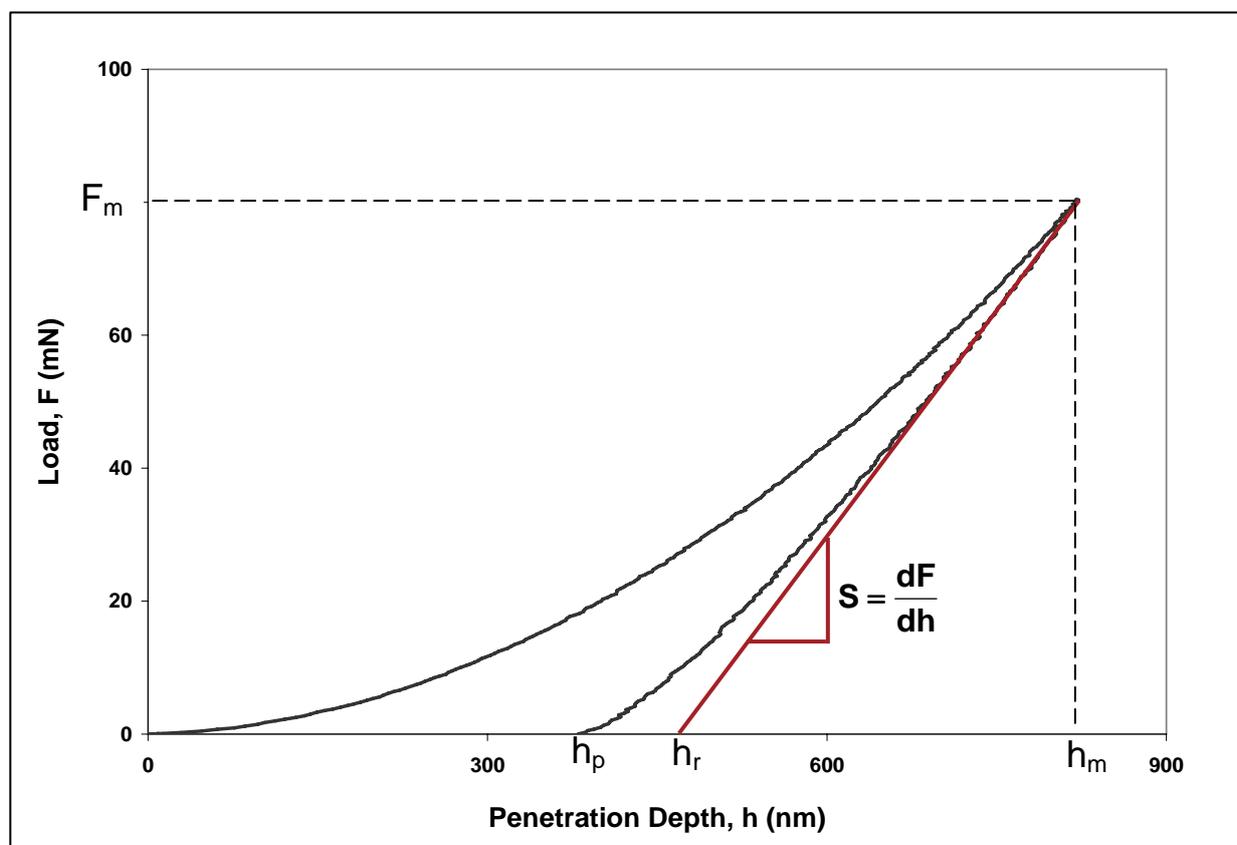
//// Principe de la technique d'indentation instrumentée

Le MHT utilise une technique largement répandue consistant à enfoncer la pointe d'un indenteur de géométrie bien définie à la surface d'un échantillon, en appliquant une charge normale croissante. Lorsque la valeur de la force normale atteint son maximum, cette dernière est réduite jusqu'à l'obtention d'une relaxation partielle ou totale du matériau. Cette procédure est réalisée de manière répétitive. A chaque étape de l'analyse, la position relative de l'indenteur par rapport à la surface de l'échantillon est constamment contrôlée par le biais de capteurs capacitifs différentiels.

Pour chaque cycle de charge et de décharge, la force appliquée est exprimée en fonction de la position de l'indenteur correspondante. Les courbes résultantes fournissent des données spécifiques sur les propriétés mécaniques du matériau. Des modèles sont employés à partir de ces données pour déterminer la dureté et le module élastique.

> Analyse de la courbe d'indentation

Une courbe typique de force/déplacement est présentée ci-dessous :



Afin de déterminer la dureté et le module élastique du matériau étudié, nous utilisons une méthode développée par Oliver & Pharr. Cette méthode décrit la partie supérieure de la courbe de décharge par une loi de type :

$$F = F_m \left(\frac{h - h_p}{h_m - h_p} \right)^m$$

où les constantes m and h_p sont déterminées par le biais de la méthode des moindres carrés. L'exposant m est fonction de la géométrie de l'indenteur.

La raideur de contact S est donnée par la tangente à la courbe au point de force maximale :

$$S = \left(\frac{dF}{dh} \right)_{\max} = m \cdot F_m (h_m - h_p)^{-1}$$

Le prolongement de cette tangente sur l'abscisse donne h_r :

$$h_r = h_m - \frac{F_m}{S}$$

La profondeur de contact, h_c , est alors :

$$h_c = h_m - \varepsilon (h_m - h_r)$$

où ε dépend de l'exposant m .

> Détermination de la dureté et du module d'Young

Dureté H_{IT} :

La dureté H_{IT} est déterminée à partir de la charge maximale, F_m , divisée par la surface de contact projetée A_p à la profondeur de contact h_c :

$$H_{IT} = \frac{F_{\max}}{A_p(h_c)}$$

où A_p est fonction de la profondeur de contact h_c , et est déterminée par calibration de la pointe de l'indenteur.

Dureté Vickers HV_{IT} :

La dureté Vickers HV_{IT} est définie par :

$$HV_{IT} = \frac{F_m}{9.81 \cdot A_c(h_c)}$$

où A_c est la surface de contact développée et peut être calculée à partir de la surface de contact projetée et de la géométrie de l'indenteur par :

$$A_c = \frac{A_p}{\sin \alpha}$$

où α est l'angle entre l'axe de l'indenteur pyramidal et ses faces. $\alpha = 68^\circ$ pour un indenteur Vickers et $\alpha = 65.27^\circ$ pour un indenteur Berkovich modifié.

Finalement, pour un indenteur Vickers : $HV_{IT} = 0.0945 \cdot H_{IT}$

et pour un indenteur Berkovich modifié : $HV_{IT} = 0.0926 \cdot H_{IT}$

Module élastique E_{IT} :

Le module réduit, E_r , est donné par :

$$E_r = \frac{\sqrt{\pi} \cdot S}{2 \cdot \beta \cdot \sqrt{A_p(h_c)}}$$

où β est le facteur de forme de l'extrémité de l'indenteur (circulaire: $\beta = 1$, triangulaire : $\beta = 1.034$, carré: $\beta = 1.012$)

Le module d'Young, E_{IT} , est obtenu par :

$$\frac{1}{E_r} = \frac{1 - \nu_s^2}{E_{IT}} + \frac{1 - \nu_i^2}{E_i}$$

où E_i et ν_i sont respectivement le module élastique et le coefficient de Poisson de l'indenteur et ν_s le coefficient de Poisson de l'échantillon.

Annexe D

Discrétisation des équations du problème thermoélastique

Les équations sont discrétisées avec les différences finies du deuxième ordre. Le pas de maillage h est le même dans les deux direction.

D.1 Equation de la conduction 3D dans un solide non homogène

Les équations sont simplifiées en utilisant les hypothèses énoncées au chapitre 2. Il vient la forme stationnaire :

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial T}{\partial x} \right)}_{(1)} + k(x) \underbrace{\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right)}_{(2)} = 0 \quad (D.1)$$

Forme discrétisée :

$$(1) \quad \frac{k_{i+1/2} T_{i+1,j,l} - (k_{i+1/2} + k_{i-1/2}) T_{i,j,l} + k_{i-1/2} T_{i-1,j,l}}{h^2} \quad (D.2)$$

$$(2) \quad k_i \left(\frac{T_{i,j+1,l} + T_{i,j-1,l} - 2T_{i,j,l}}{h^2} + \frac{T_{i,j,l+1} + T_{i,j,l-1} - 2T_{i,j,l}}{h^2} \right)$$

avec $k_{i\pm 1/2} = \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{k_{i\pm 1}} + \frac{1}{k_i} \right) \right]^{-1}$ la moyenne harmonique de k_i et $k_{i\pm 1}$. Cette moyenne est utilisée car elle offre une plus grande stabilité dans les système avec de fortes discontinuités.

La forme instationnaire de l'équation de la conduction est la suivante :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + k(x) \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) = \underbrace{\rho(x)c(x)}_{(1)} \frac{\partial T}{\partial t} \quad (D.3)$$

Forme discrétisée (discrétisation aux différences finies avants d'ordre 1 sur le temps) :

$$(1) \quad \rho_i c_i \frac{T_{i,j,l}^n - T_{i,j,l}^{n-1}}{\Delta t} \quad (D.4)$$

Conditions aux limites

Les conditions aux limites de type Neuman nécessitent la discrétisation des équations à la surface ($i=0$ dans notre repère). la méthode de résolution est décrite au paragraphe 3.2.4. Un point fantôme ($i=-1$) est introduit afin d'utiliser un schéma aux différences centrées à la surface ($i=0$ dans notre repère). Ses propriétés sont les mêmes qu'en 0. L'inconnue au point $i=-1$ est $T_{-1,j,l} = u_1 - 2h\eta_0$ avec η_0 la dérivée en $i=0$. La forme discrétisée de la relation D.1 au point $i=0$ est

$$\frac{(k_{i+1/2} + k_{i-1/2})(T_{1,j,l} - T_{0,j,l} - 2k_{-1/2}h\eta_0)}{h^2} + k_0 \left(\frac{T_{0,j+1,l} + T_{0,j-1,l} - 2T_{0,j,l}}{h^2} + \frac{T_{0,j,l+1} + T_{0,j,l-1} - 2T_{0,j,l}}{h^2} \right) = 0 \quad (D.5)$$

La résolution aux points $(0,j,l)$ et $(1,j,l)$ est faite par bloc afin de limiter au maximum l'erreur transmise par le traitement de la condition à la limite vers les points intérieurs. On pose

$$\begin{cases} \bar{T}_{0,j,l} = \tilde{T}_{0,j,l} + \Delta_{0,j,l} \\ \bar{T}_{1,j,l} = \tilde{T}_{1,j,l} + \Delta_{1,j,l} \end{cases}$$

avec $\bar{T}_{0,j,l}$ la valeur de T au point $(0,j,l)$ après la relaxation et $\tilde{T}_{0,j,l}$ la valeur de T au point $(0,j,l)$ avant la relaxation.

Ces deux équations doivent être résolues simultanément. Le système précédent s'écrit

$$\begin{bmatrix} -\frac{k_{1/2} + k_{-1/2}}{h^2} - \frac{4k_0}{h^2} & \frac{k_{1/2} + k_{-1/2}}{h^2} \\ \frac{k_{1/2}}{h^2} & \frac{k_{1/2} + k_{3/2}}{h^2} - \frac{4k_1}{h^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta_{0,j,l} \\ \Delta_{1,j,l} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(\mathcal{L}u_{0,j,l} - f_{0,j,l}) \\ -(\mathcal{L}u_{1,j,l} - f_{1,j,l}) \end{bmatrix} \quad (D.6)$$

A chaque relaxation la matrice est inversée pour déterminer $\Delta_{0,j,l}$ et $\Delta_{1,j,l}$.

D.2 Equation de l'élasticité linéaire dans un massif non homogène

Les équations de Lamé généralisées sont décrite dans le paragraphe 2.4.2. On pose $Q = \lambda + 2\mu$.

La première équation de lamé s'écrit

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(Q \frac{\partial u}{\partial x} \right)}_{(1)} + \underbrace{\mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right)}_{(2)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial v}{\partial y} \right)}_{(3)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial w}{\partial z} \right)}_{(4)} + \underbrace{\mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial z} \right)}_{(5)} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} ((3\lambda + 2\mu) \alpha T)}_{(6)} \quad (D.7)$$

Forme discrétisée :

$$\begin{aligned}
 (1) \quad & \frac{Q_{i+1/2}u_{i+1,j,l} - (Q_{i+1/2} + Q_{i-1/2})u_{i,j,l} + Q_{i-1/2}u_{i-1,j,l}}{h^2} \\
 (2) \quad & \mu_i \left(\frac{u_{i,j+1,l} + u_{i,j-1,l} - 2u_{i,j,l}}{h^2} + \frac{u_{i,j,l+1} + u_{i,j,l-1} - 2u_{i,j,l}}{h^2} \right) \\
 (3) \quad & \frac{\lambda_{i+1}(v_{i+1,j+1,l} - v_{i+1,j-1,l}) - \lambda_{i-1}(v_{i-1,j+1,l} - v_{i-1,j-1,l})}{4h^2} \\
 (4) \quad & \frac{\lambda_{i+1}(w_{i+1,j,l+1} - w_{i+1,j,l-1}) - \lambda_{i-1}(w_{i-1,j,l+1} - w_{i-1,j,l-1})}{4h^2} \\
 (5) \quad & \frac{v_{i+1,j+1,l} - v_{i-1,j+1,l} - v_{i+1,j-1,l} + v_{i-1,j-1,l}}{4h^2} + \frac{w_{i+1,j,l+1} - w_{i-1,j,l+1} - w_{i+1,j,l-1} + w_{i-1,j,l-1}}{4h^2} \\
 (6) \quad & \frac{(3\lambda_{i+1} + 2\mu_{i+1})\alpha_{i+1}T_{i+1,j,l} - (3\lambda_{i-1} + 2\mu_{i-1})\alpha_{i-1}T_{i-1,j,l}}{2h}
 \end{aligned}$$

La seconde équation de Lamé :

$$\underbrace{Q \frac{\partial^2 v}{\partial y^2}}_{(1)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right)}_{(2)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right)}_{(3)} + \underbrace{(\lambda + \mu) \left(\frac{\partial^2 w}{\partial y \partial z} \right)}_{(4)} + \underbrace{\lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}}_{(5)} + \underbrace{\mu \frac{\partial^2 v}{\partial z^2}}_{(6)} = \underbrace{(3\lambda + 2\mu) \alpha \frac{\partial T}{\partial y}}_{(7)} \quad (D.8)$$

Forme discrétisée :

$$\begin{aligned}
 (1) \quad & Q \frac{v_{i,j+1,l} + v_{i,j-1,l} - 2v_{i,j,l}}{h^2} \\
 (2) \quad & \frac{\mu_{i+1/2}v_{i+1,j,l} - (\mu_{i+1/2} + \mu_{i-1/2})v_{i,j,l} + \mu_{i-1/2}v_{i-1,j,l}}{h^2} \\
 (3) \quad & \frac{\mu_{i+1}(u_{i+1,j+1,l} - u_{i+1,j-1,l}) - \mu_{i-1}(u_{i-1,j+1,l} - u_{i-1,j-1,l})}{4h^2} \\
 (4) \quad & (\lambda_i + \mu_i) \frac{w_{i,j+1,l+1} - w_{i,j-1,l+1} - w_{i,j+1,l-1} + w_{i,j-1,l-1}}{4h^2} \\
 (5) \quad & \lambda_i \frac{u_{i+1,j+1,l} - u_{i+1,j-1,l} - u_{i-1,j+1,l} + u_{i-1,j-1,l}}{4h^2} \\
 (6) \quad & \mu_i \frac{v_{i,j,l+1} + v_{i,j,l-1} - 2v_{i,j,l}}{h^2} \\
 (7) \quad & \alpha_i (3\lambda_i + 2\mu_i) \frac{T_{i,j+1,l} - T_{i,j-1,l}}{2h}
 \end{aligned}$$

La troisième équation de Lamé :

$$\underbrace{Q \frac{\partial^2 w}{\partial z^2}}_{(1)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial w}{\partial x} \right)}_{(2)} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial z} \right)}_{(3)} + \underbrace{(\lambda + \mu) \left(\frac{\partial^2 v}{\partial y \partial z} \right)}_{(4)} + \underbrace{\lambda \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial z}}_{(5)} + \underbrace{\mu \frac{\partial^2 w}{\partial y^2}}_{(6)} = \underbrace{(3\lambda + 2\mu) \alpha \frac{\partial T}{\partial z}}_{(7)} \quad (D.9)$$

Forme discrétisée :

$$\begin{aligned}
 (1) \quad & Q \frac{w_{i,j,l+1} + w_{i,j,l-1} - 2w_{i,j,l}}{h^2} \\
 (2) \quad & \frac{\mu_{i+1/2} w_{i+1,j,l} - (\mu_{i+1/2} + \mu_{i-1/2}) w_{i,j,l} + \mu_{i-1/2} w_{i-1,j,l}}{h^2} \\
 (3) \quad & \frac{\mu_{i+1} (u_{i+1,j,l+1} - u_{i+1,j,l-1}) - \mu_{i-1} (u_{i-1,j,l+1} - u_{i-1,j,l-1})}{4h^2} \\
 (4) \quad & (\lambda_i + \mu_i) \frac{v_{i,j+1,l+1} - v_{i,j-1,l+1} - v_{i,j+1,l-1} + v_{i,j-1,l-1}}{4h^2} \\
 (5) \quad & \lambda_i \frac{u_{i+1,j,l+1} - u_{i+1,j,l-1} - u_{i-1,j,l+1} + u_{i-1,j,l-1}}{4h^2} \\
 (6) \quad & \mu_i \frac{w_{i,j+1,l} + w_{i,j-1,l} - 2w_{i,j,l}}{h^2} \\
 (7) \quad & \alpha_i (3\lambda_i + 2\mu_i) \frac{T_{i,j,l+1} - T_{i,j,l-1}}{2h}
 \end{aligned}$$

D.2.1 Condition au limites

Les conditions aux limites mécaniques sont les contraintes imposées à la surface. Trois valeurs sont définies : σ_{xx}, σ_{xy} et σ_{xz} , soit

$$\begin{cases}
 \sigma_{xx} = \lambda \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} - (3\lambda + 2\mu) \alpha T \\
 \sigma_{xy} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\
 \sigma_{xz} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)
 \end{cases} \quad (D.10)$$

soit, en discrétisant avec les différences finies centrées :

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xx} \ 0,j,l &= \lambda_0 \left(\frac{u_{i+1,j,l} - u_{i-1,j,l}}{2h} + \frac{v_{i,j+1,l} - v_{i,j-1,l}}{2h} + \frac{w_{i,j,l+1} - w_{i,j,l-1}}{2h} \right) \\
 &\quad + 2\mu_0 \frac{u_{i+1,j,l} - u_{i-1,j,l}}{2h} - (3\lambda_0 + 2\mu_0) \alpha_0 T_{i,j,l} \\
 \sigma_{xy} &= \mu_0 \left(\frac{u_{i,j+1,l} - u_{i,j-1,l}}{2h} + \frac{v_{i+1,j,l} - v_{i-1,j,l}}{2h} \right) \\
 \sigma_{xz} &= \mu_0 \left(\frac{u_{i,j,l+1} - u_{i,j,l-1}}{2h} + \frac{w_{i+1,j,l} - w_{i-1,j,l}}{2h} \right)
 \end{aligned}$$

Résumé :

La notion de traitement de surface recouvre un grand nombre de procédés et de gammes de traitements. Leur objectif est de donner à la surface traitée d'une pièce des propriétés physico-chimiques, mécaniques ou géométriques particulières afin de la protéger des agressions extérieures tout en conservant les propriétés en volume de la pièce.

Ce travail a pour but d'enrichir les modélisations existantes et de développer un modèle innovant en proposant une description englobant les traitements de surface dans leur ensemble. De ce fait il est alors nécessaire de prendre en compte une variation continue et quelconque des propriétés mécaniques et thermiques dans l'épaisseur du matériau.

Nous avons développé un modèle thermoélastique 3D basé sur les équations de Lamé généralisées et l'équation de la conduction dans un solide non homogène. Le problème est résolu à l'aide d'une discrétisation aux différences finies du deuxième ordre. Le système linéaire en résultant est traité à l'aide de la méthode itérative de Gauss-Seidel couplée avec les techniques Multigrilles. Des méthodes numériques spécifiques ont été mises en place pour garantir la convergence optimale du solveur même dans les cas les plus sévères (variation de propriétés importantes).

L'application visée ici concerne l'amélioration du procédé d'injection des matières plastiques et l'augmentation de la durée de vie des moules avec l'utilisation de traitements à la surface à leur surface. Cette étude a nécessité la mesure des propriétés des différents revêtements sélectionnés et la mise en place d'un modèle d'injection simplifié à partir d'essais sur moule instrumenté.

Enfin, une étude utilisant un modèle simplifié a permis d'expliquer l'état de contrainte dans le revêtement et de choisir le traitement le plus approprié en fonction des sollicitations thermomécaniques subies.

Abstract:

Surface treatments cover a wide range of processes and treatments. Their aim is to increase life and operating performances of engineering materials by giving surfaces specific mechanical, thermal, and chemical properties. The task of determining which type of coating (material, thickness, and deposition process) is optimal is a complicated task. Optimizing a coating for a specific application requires bringing together knowledge from very different disciplines: physics, structural mechanics, surface chemistry, etc. This makes the development and selection of treatment a complex and costly task. It can only be undertaken with a recursive method, which includes experimental procedures and numerical calculations.

The current work aims at developing a 3D thermo-mechanical model for functionally graded materials (FGM). Such materials are commonly used to protect surfaces from tribological damages. They may be either coating materials or interface regions between successive coatings with varying properties. The model is based on second order Finite Difference (FD) formulation of the thermal and elasticity equations in a non-homogeneous solid. It can handle any kind of depth dependence of the material properties. Multigrid techniques and local refinement strategies have been implemented to accelerate the convergence, reduce CPU time and thus permit the use of fine grids to accurately describe the variation in the material properties. Specific numerical techniques are used to guarantee an optimal convergence rate of the numerical technique even in the most severe cases.

One application of this work is the analysis of the effect of different prospective coatings in polymer injection molding. The aim is to increase the mold life by protecting the surface and avoid the development of surface damages due to the process. An approximate model is developed for the thermal and mechanical conditions to which the coating is exposed in the different phases of the process. This study is completed with experimental methods that were used to characterize the coating properties.

Finally, a simplified model is used to complete the results obtained using the time dependent analysis. It helps understanding the thermo-mechanical coupling and stress calculated in the prospective coatings to determine the most appropriate treatment for this application.

FOLIO ADMINISTRATIF

THESE SOUTENUE DEVANT L'INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUEES DE LYON

NOM : WATREMETZ
(avec précision du nom de jeune fille, le cas échéant)

DATE de SOUTENANCE :

29 septembre 2006

Prénoms : Benoît Jean-Marie

TITRE :

Modèle thermomécanique 3D d'un matériau à gradient de propriétés à l'aide de techniques multigrilles.
Application aux moules d'injection de polymère.

NATURE : Doctorat

Numéro d'ordre : 2006-ISAL-0057

Ecole doctorale : MEGA

Spécialité : mécanique

Cote B.I.U. - Lyon : T 50/210/19 / et bis

CLASSE :

RESUME :

La notion de traitement de surface recouvre un grand nombre de procédés et de gammes de traitements. Leur objectif est de donner à la surface traitée d'une pièce des propriétés physico-chimiques, mécaniques ou géométriques particulières afin de la protéger des agressions extérieures tout en conservant les propriétés en volume de la pièce.

Ce travail a pour but d'enrichir les modélisations existantes et de développer un modèle innovant en proposant une description englobant les traitements de surface dans leur ensemble. De ce fait il est alors nécessaire de prendre en compte une variation continue et quelconque des propriétés mécaniques et thermiques dans l'épaisseur du matériau.

Nous avons développé un modèle thermoélastique 3D basé sur les équations de Lamé généralisées et l'équation de la conduction dans un solide non homogène. Le problème est résolu à l'aide d'une discrétisation aux différences finies du deuxième ordre. Le système linéaire en résultant est traité à l'aide de la méthode itérative de Gauss-Seidel couplée avec les techniques Multigrilles. Des méthodes numériques spécifiques ont été mises en place pour garantir la convergence optimale du solveur même dans les cas les plus sévères (variation de propriétés importantes).

L'application visée ici concerne l'amélioration du procédé d'injection des matières plastiques et l'augmentation de la durée de vie des moules avec l'utilisation de traitements à la surface à leur surface. Cette étude a nécessité la mesure des propriétés des différents revêtements sélectionnés et la mise en place d'un modèle d'injection simplifié à partir d'essais sur moule instrumenté.

Enfin, une étude utilisant un modèle simplifié a permis d'expliquer l'état de contrainte dans le revêtement et de choisir le traitement le plus approprié en fonction des sollicitations thermomécaniques subies.

MOTS-CLES : thermoélasticité, multigrilles, traitement de surface, revêtements, caractérisation mécanique, injection polymères

Laboratoire (s) de recherche : Laboratoire de Mécanique des Contacts et des Solides (LaMCoS), UMR CNRS 5514

Directeur de thèse: Dr. M.C. Baietto-Dubourg

Président de jury : LAMON Jacques

Composition du jury : LAMON Jacques, VENNER Kees, FRETIGNY Christian, BAIETTO-DUBOURG Marie-Christine, LUBRECHT Ton, BERTHIER Yves, HANRIOT Fabienne