



HAL
open science

Description de la fissuration des couches d'oxyde par le couplage des méthodes à discontinuités fortes et d'éléments d'interface

Lu Li, Delphine M Brancherie, Jérôme Favergeon, Jean-Marc Roelandt

► To cite this version:

Lu Li, Delphine M Brancherie, Jérôme Favergeon, Jean-Marc Roelandt. Description de la fissuration des couches d'oxyde par le couplage des méthodes à discontinuités fortes et d'éléments d'interface. 9e Colloque national en calcul des structures, CSMA, May 2009, Giens, France. hal-01421848

HAL Id: hal-01421848

<https://hal.science/hal-01421848>

Submitted on 23 Dec 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License

Description de la fissuration des couches d'oxyde par le couplage des méthodes à discontinuités fortes et d'éléments d'interface

L. Li¹, D. Brancherie¹, J.Favergeon¹, J.M. Roelandt¹

¹ Laboratoire Roberval UMR6253, Université de Technologie de Compiègne
BP 20529 60 205 Compiègne Cedex, France
E-mail : lili@utc.fr

Résumé — Dans le contexte de la prévision de la tenue des matériaux en environnement agressif multiphysique, nous présentons un modèle numérique permettant de décrire les phénomènes d'endommagement et de rupture des couches d'oxyde tels que la fissuration traversante des couches et la décohésion des interfaces métal/oxyde. Ce modèle, basé sur la méthode à discontinuités fortes et des éléments d'interface, a été utilisé dans le cadre d'une approche probabiliste pour évaluer les distances interfissures et les décollements des couches du système Ni-NiO sollicité en traction.

Mots clés — modèle à discontinuités fortes, endommagement, analyse probabiliste, oxydation.

1 Contexte et problématique

La présence d'une couche de surface, qu'elle soit naturelle (oxydation à haute température, film passif en corrosion aqueuse), ou déposée (revêtement) permet de séparer un métal de son environnement externe, et donc contribue à le protéger des phénomènes de corrosion. Dès lors que cette couche est endommagée, son rôle protecteur disparaît et la corrosion de l'alliage métallique s'accélère. Par ailleurs, les phénomènes d'endommagement des couches en proche surface sont très fortement liés aux conditions d'élaboration et aux sollicitations environnementales, thermiques et mécaniques. En effet, la structure de l'interface, le type d'oxyde généré, les contraintes et déformations résiduelles dépendent fortement des conditions d'élaboration des couches (température, atmosphère, épaisseurs). Selon ces conditions, différents scénarii de rupture peuvent alors être observés comme, en particulier, l'apparition de fissures traversant la couche d'oxyde (et éventuellement le métal) suivie de la décohésion de l'interface métal/oxyde menant au décollement de la couche d'oxyde [1] [2]. Une description fine des phénomènes d'endommagement doit prendre en compte les phénomènes générés par la croissance des couches. Les contraintes et déformations induites peuvent être évaluées [1] à partir :

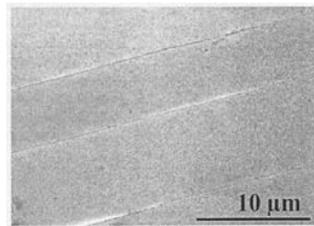
- d'une analyse cristallographique permettant de déterminer les réseaux de plus proche coïncidence associés aux déformations d'épitaxie
- d'une analyse thermodynamique permettant d'évaluer la structure des couches d'oxyde et d'en déduire les déformations d'interphases
- du suivi de l'équilibre thermo-mécanique des couches au cours de leur croissance, incluant les déformations d'origine cristallographiques et les conditions aux interphases

Dans les travaux présentés, on ne prend pas en compte les contraintes et déformations résiduelles d'élaboration des couches, nous focalisant sur les aspects de l'initiation et de la propagation des défauts.

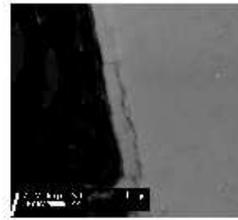
Nous décrivons dans la suite le modèle numérique bidimensionnel que nous proposons pour décrire un scénario de rupture des couches d'oxyde couramment observé consistant en la fissuration périodique traversante des couches d'oxyde suivie de leur décollement.

Nous présentons ensuite les résultats obtenus, par une démarche probabiliste, en terme de distances inter-fissures et de conditions de décollement.

Nous concluons sur la pertinence du modèle et sur ses extensions futures qui doit nous permettre à terme de définir pour un système donné, ses conditions d'élaboration admissibles pour une utilisation imposée.



(a) Fissuration périodique du système Ni-NiO [1]



(b) Décollement des couches du système Zr-ZrO₂

figure 1 – Modes d'endommagement

2 Modèle numérique

Nous nous proposons de modéliser chacun des phénomènes de rupture : fissuration traversante et décohésion par des approches spécifiques basées sur la méthode des éléments finis. La figure 2 présente le système étudié ainsi que le chargement et les conditions aux limites utilisées. Les chargements appliqués sont supposés unidirectionnels, les hypothèses des déformations planes sont adoptées et appliquées au domaine et les comportements du métal et de l'oxyde sont considérés élastiques isotropes endommageables (la rupture des couches d'oxyde est en général de type fragile).

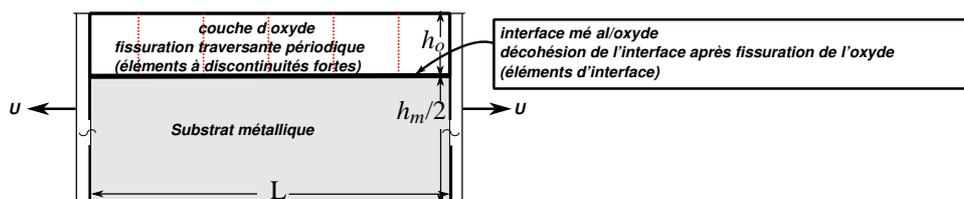


figure 2 – Le modèle numérique du système métal/oxyde en traction

On note h_o l'épaisseur de la couche d'oxyde, h_m l'épaisseur du substrat métallique et L la longueur de l'échantillon considéré. Comme la fissuration dans la couche d'oxyde a très peu d'influence au loin dans le substrat, le modèle est considéré comme quasi-symétrique. Nous n'étudions donc le système métal/oxyde que sur sa demi-épaisseur.

- Pour la description de la fissuration traversante périodique, nous nous appuyons sur les méthodes à discontinuités fortes qui permettent de s'affranchir de la dépendance au maillage et de gérer de façon automatique la propagation de zones à fort endommagement [3]. Le substrat et son oxyde sont modélisés par des éléments à discontinuité forte auxquels nous associons des contraintes limites à rupture distribuées de façon aléatoire.

- La décohésion des couches d'oxyde avec le substrat est représentée, quant à elle, par un modèle d'interface. L'élément développé s'appuie sur une relation entre tractions et sauts de déplacements à l'interface métal/oxyde [5].

2.1 Description de la fissuration traversante par un modèle à discontinuités fortes

Le principe des modèles à discontinuités fortes est basé sur l'introduction dans les éléments de discontinuités du champ de déplacement auxquelles sont associées des lois traction / saut de déplacement.

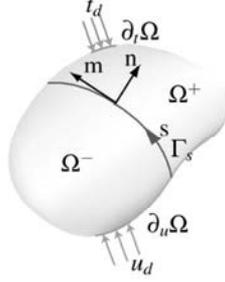


figure 3 – Domaine Ω coupé par une surface de discontinuité Γ_s en 2 sous-domaines Ω^- et Ω^+

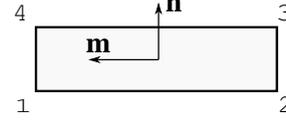


figure 4 – Élément d'interface

Le champ de déplacement s'écrit alors : $u(x) = \bar{u}(x) + [[\mathbf{u}]](x)\mathcal{H}_{\Gamma_s}(x)$ où $\bar{u}(x)$ correspond à la partie continue du champ de déplacement et $[[\mathbf{u}]](x)$ correspond au saut de déplacement le long de la surface de discontinuité Γ_s . $\mathcal{H}_{\Gamma_s}(x)$ est la fonction de Heaviside qui vaut 1 sur Ω^+ et 0 sur Ω^- (voir Figure 3).

Une loi de comportement, écrite dans le cadre de la thermodynamique des interfaces, est introduite sur la surface de discontinuité. Cette loi permet de relier le saut de déplacement et la traction sur l'interface. Nous utilisons ici un modèle d'endommagement surfacique à deux surfaces seuil couplées[3] :

- fonction seuil (direction normale) : $\bar{\phi}_n(t_{\Gamma_s}, \bar{q}) = t_{\Gamma_s} \cdot n - (\bar{\sigma}_f - \bar{q}) \leq 0$
- fonction seuil (direction tangentielle) : $\bar{\phi}_m(t_{\Gamma_s}, \bar{q}) = |t_{\Gamma_s} \cdot m| - (\bar{\sigma}_s - \frac{\bar{\sigma}_s}{\bar{\sigma}_f} \bar{q}) \leq 0$

avec $\bar{\sigma}_f$ la limite d'élasticité en traction, $\bar{\sigma}_s$ la limite d'élasticité en cisaillement et t_{Γ_s} la traction sur la discontinuité. \bar{q} est la variable associée à l'écroutissage.

Une adaptation des modèles à discontinuité forte est nécessaire pour la description de la multifissuration, telle que celle observée dans l'épaisseur des systèmes métal/oxyde. En effet, le développement simultané de plusieurs fissures peut conduire d'un point de vue numérique à des instabilités liées à la présence de points de bifurcation. Pour assurer la convergence des solutions, nous avons utilisé une méthode de régularisation type "viscosité". À la valeur de la traction t_{Γ_s} obtenue par l'utilisation du modèle d'endommagement est ajoutée un terme visqueux $t_{\Gamma_s}^*$ qui s'écrit en fonction de la vitesse du saut de déplacement : $t_{\Gamma_s}^* = \gamma[[\dot{\mathbf{u}}]]$ où γ est le paramètre de viscosité [4].

2.2 Modélisation de la décohésion métal/oxyde : élément d'interface

Afin de décrire la décohésion à l'interface métal/oxyde, nous utilisons un élément d'interface à 4 noeuds sans épaisseur tel que présenté à la Figure 4 (les noeuds (1 et 4) et (2 et 3) sont géométriquement confondus).

Les fonctions de formes utilisées sont celles d'un élément linéaire à 2 noeuds. Le saut de déplacement associé à l'interface s'écrit alors :

$$[[\mathbf{u}]](x) = N_1(\xi)(u_4 - u_1) + N_2(\xi)(u_3 - u_2) \quad \text{avec} \quad x = N_1(\xi)x_1 + N_2(\xi)x_2 \quad (1)$$

où u_i correspond au déplacement du noeud i écrit dans la base locale (\mathbf{n}, \mathbf{m}) . Une loi d'endommagement, écrite dans le cadre de la thermodynamique des interfaces, est associée à l'interface.

Deux surfaces seuils indépendantes sont introduites de façon à gérer le comportement en traction/compression et en cisaillement :

- fonction seuil (direction normale) : $\bar{\phi}_n(t_\Gamma, \bar{q}_n) = t_\Gamma \cdot n - (\bar{\sigma}_f - \bar{q}_n) \leq 0$
- fonction seuil (direction tangentielle) : $\bar{\phi}_m(t_\Gamma, \bar{q}_m) = |t_\Gamma \cdot m| - (\bar{\sigma}_s - \bar{q}_m) \leq 0$

Les lois de traction/compression - ouverture de l'interface et de cisaillement - glissement sont représentées en Figure 5.

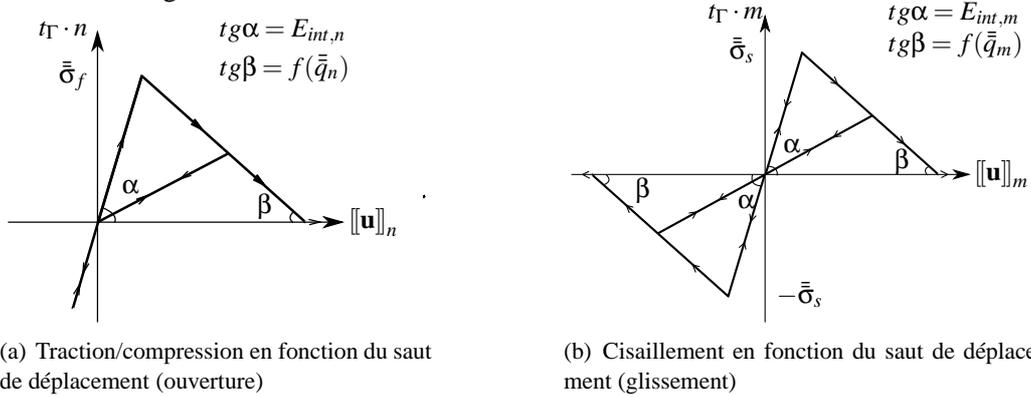


figure 5 – Traction/compression et cisaillement en fonction du saut de déplacement à l'interface métal/oxyde

3 Résultats

Le modèle numérique permet de décrire les scénarii de rupture des couches d'oxyde couramment observés consistant en la fissuration périodique traversante suivie du décollement des couches. Nous cherchons notamment ici à évaluer l'espacement interfissure. Nous présenterons tout d'abord les résultats obtenus pour un calcul classique basé sur une méthode de "dichotomie", puis en considérant un modèle à discontinuités fortes pour la couche d'oxyde et une adhérence parfaite métal/oxyde, et enfin en autorisant le décollement métal/oxyde par l'introduction d'éléments d'interface. Les résultats ainsi obtenus seront comparés en termes de distance interfissure.

3.1 Détermination de la longueur interfissure par une méthode de dichotomie

Le calcul par dichotomie est réalisé en considérant un système métal/oxyde, ici Ni/NiO de longueur L présentant une fissure à chacune des extrémités de la couche d'oxyde. Les déplacements imposés aux extrémités libres du substrat sont augmentés jusqu'à atteindre la valeur de la contrainte à rupture dans la couche d'oxyde. Une fissure est alors introduite au milieu de la longueur L dans la couche d'oxyde. Par symétrie du problème ainsi obtenu, toute la démarche présentée peut être reprise avec un système de longueur $L/2$. Ceci est répété avec des systèmes de longueur $L/2^n$ jusqu'à ce que la couche d'oxyde soit totalement en compression, aucune autre fissure traversante ne pouvant alors être introduite. La figure 6 présente les contraintes principales dans la couche d'oxyde pour des longueurs interfissures correspondant à 2 itérations de dichotomie successives. On remarque que pour $L=0.03125\text{mm}$, les contraintes principales de la 1ère couche d'éléments de la couche d'oxyde sont totalement en compression. La distance interfissure dépend de la longueur initiale du système considéré : la longueur interfissure s'écrit toujours sous la forme $d = L_{initial}/2^n$. Nous avons fait varier la longueur initiale du problème ce qui a permis de déterminer une distance interfissure d telle que $0.016\text{mm} < d \leq 0.032\text{mm}$.

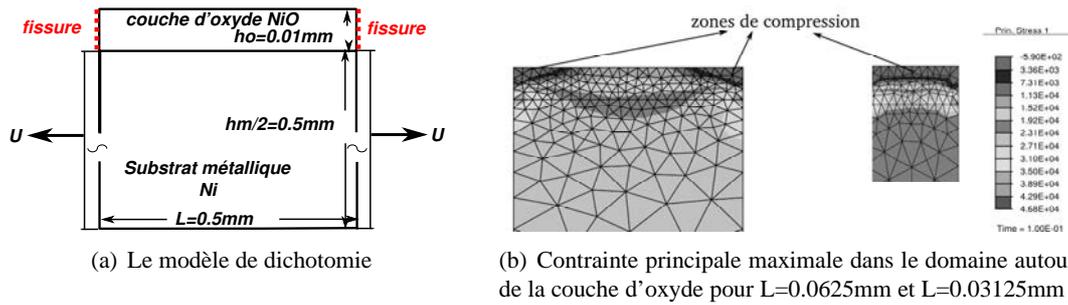


figure 6 – Modèle de dichotomie et contrainte principale maximale dans les éléments de la couche d’oxyde

3.2 Calcul avec éléments à discontinuités fortes et interface parfaite

Tous ces phénomènes d’endommagement (fissuration traversante ou décohésion) sont très largement influencés par la présence de défauts dont la distribution dans le matériau est aléatoire. Pour rendre compte des aspects probabilistes, nous associons aux éléments constituant la couche d’oxyde et aux éléments d’interface des contraintes limites à rupture $\bar{\sigma}_f$ et $\bar{\sigma}_s$ distribuées de façon aléatoire.

Les valeurs des contraintes limites à rupture de la couche d’oxyde sont définies de la façon suivante : $\sigma_c = \sigma_{c_0} + \text{écart type} \times \chi$ avec σ_{c_0} valeur moyenne de la contrainte limite à rupture, χ une variable aléatoire qui suit une loi Gaussienne de moyenne nulle et d’écart type unitaire. La figure 7 présente le modèle utilisé pour le calcul avec la méthode à discontinuités fortes ainsi que les valeurs d’ouverture des fissures $[[\mathbf{u}]]_n$ obtenues en fin de chargement.

Afin d’obtenir une évaluation de la longueur interfissure moyenne, une ébauche d’analyse statis-

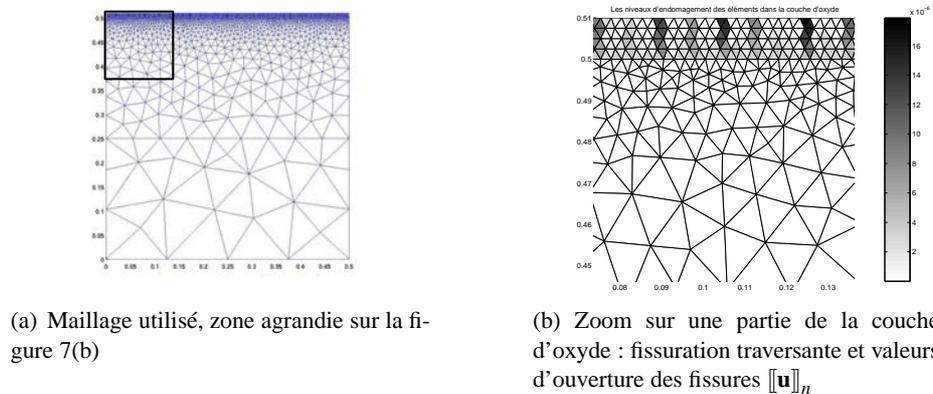


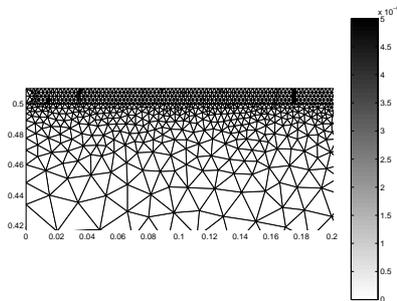
figure 7 – Fissuration traversante périodique et valeurs d’ouverture des fissures $[[\mathbf{u}]]_n$

tique comportant 20 tirages a été réalisée. Nous avons obtenu pour un écart type de 10% de σ_{c_0} , une longueur interfissure moyenne de 0.0242mm. Ceci est en accord avec les résultats obtenus dans la partie précédente.

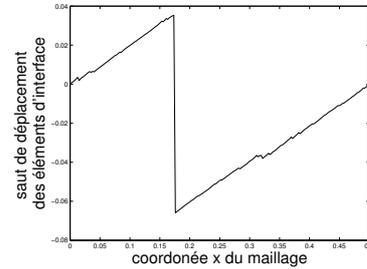
3.3 Calcul avec éléments à discontinuités fortes et éléments d’interface

Nous ajoutons ici au modèle numérique étudié dans la Figure 2 une couche d’éléments d’interface à l’interface métal/oxyde. L’apparition de fissures traversantes dans la couche d’oxyde est suivie par l’activation de glissements le long des éléments d’interface se situant au droit des fissures ouvertes dans l’oxyde. Les Figures 8(a) et 8(b) représentent respectivement les fissures

actives dans la couche d'oxyde et le glissement le long de l'interface métal/oxyde. Par analyse des premiers résultats obtenus, nous avons remarqué que la distance interfissure augmente quand nous introduisons des éléments d'interface.



(a) Zoom sur une partie de la couche d'oxyde : fissuration traversante et valeurs d'ouverture des fissures $[[\mathbf{u}]]_n$



(b) Le glissement $[[\mathbf{u}]]_m$ en fonction de l'abscisse du maillage

figure 8 – Fissuration traversante périodique et le glissement d'interface $[[\mathbf{u}]]_m$

4 Conclusion et perspective

Nous avons modélisé les phénomènes d'endommagement et de rupture observés dans les couches d'oxyde tels que la fissuration traversante des couches et la décohésion des interfaces métal/oxyde avec la méthode à discontinuités fortes et des éléments d'interface. La longueur interfissure obtenue avec le modèle numérique présenté ici est en accord avec les résultats obtenus par une méthode de dichotomie. En perspective, comme les phénomènes d'endommagement des couches en proche surface dépendent de nombreux facteurs multiphysiques, le modèle sera étendu pour prendre en compte les conditions d'élaboration, la croissance de couches d'oxyde et les contraintes résiduelles de croissance. Par ailleurs, une confrontation des résultats numériques aux résultats expérimentaux permettra d'identifier l'ensemble des paramètres des modèles utilisés.

Références

- [1] N.Vallino, L.Gaillet, L.Lahoche, J. M. Roelandt, V. L. Lorman, G. Moulin, S. B. Rochal. Experimental study and numerical modelling of the nickel oxide coating on the Ni(111). *Surface and Coatings Technology*, 135, 98-108, 2000.
- [2] J. Favergeon. Anisotropie dans l'oxydation du zirconium et de ses alliages Conséquences cinétiques, texturales et mécaniques. Apports expérimentaux et de modélisation. *Thèse de Doctorat, université de Bourgogne*, 2001.
- [3] D. Brancherie. Modèles continus et discrets pour les problèmes de localisation et de rupture fragile et/ou ductile *Thèse de Doctorat, LMT-Cachan*, n°2003/17, 2003.
- [4] J. Oliver, A.E. Huespe. Theoretical and computational issues in modelling material failure in strong discontinuity scenarios *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193, 2987-3014, 2004.
- [5] G. Alfano, M. A. Crisfield. Finite element interface models for the delamination analysis of laminated composites : mechanical and computational issues *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 50, 1701-1736, 2001.