

# UNIVERSITE DE LIMOGES

Faculté des Sciences et Techniques

Ecole Doctorale Science - Technologie - Santé

Laboratoire du Groupe d'Etude des Matériaux Hétérogènes

N° [15-2010]

THESE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE DE LIMOGES

Discipline : Procédés et Matériaux Céramiques

Présentée et soutenue publiquement par

RANJBAR-FAR Maryam

Le 18 Mai 2010

## SIMULATION NUMERIQUE DU COMPORTEMENT THERMOMECHANIQUE DE SYSTEMES MULTICOUCHES. APPLICATION AU CAS DU SYSTEME BARRIERE THERMIQUE

Directeurs de Thèse : Joseph ABSI et Gilles MARIAUX

### JURY

<b>J. Besson</b>	Directeur de recherche - CNRS Ecole Mines de paris	Rapporteur
<b>R. Mévrel</b>	Ingénieur de recherche - ONERA-DMMP	Rapporteur
<b>G. Montavon</b>	Professeur, UTBM	Examineur
<b>D. S. Smith</b>	Professeur, GEMH-ENSCI, Université de Limoges	Examineur
<b>J. Absi</b>	Professeur, GEMH-ENSCI, Université de Limoges	Examineur
<b>G. Mariaux</b>	Maître de Conférences, ENSIL, Université de Limoges	Examineur



# *Remerciements*

La présente étude a été réalisée à l'Université de Limoges, au sein du Groupe d'Etude des Matériaux Hétérogène (GEMH), dans les locaux de l'Ecole Nationale Supérieure de Céramique Industrielle (ENSCI) de Limoges. Je remercie la région Limousin pour avoir assuré le financement pour mes travaux pendant trois années.

Je tiens à adresser tout d'abord mes plus sincères remerciements à mes deux directeurs de thèse, Joseph Absi, Professeur à l'ENSCI et Gilles Mariaux, Maître de Conférences à l'ENSIL. Je leur suis très reconnaissant de m'avoir proposé ce sujet de recherche. Ils m'ont toujours accordé leur confiance et m'ont laissé une grande liberté quant au déroulement et à l'organisation de mes recherches. Qu'ils trouvent ici l'expression de ma profonde gratitude.

Je remercie vivement Rémy Mévrel, Ingénieur de Recherche, ONERA-DMMP et Jacques Besson, Directeur de Recherche, CNRS Ecole Mines de Paris, de m'avoir fait l'honneur d'accepter de juger mon travail de thèse en tant que rapporteurs.

Je suis très reconnaissant envers David Smith, Professeur à l'ENSCI, d'avoir accepté de présider mon jury et envers Ghislain Montavon, Professeur à l'UTBM, d'avoir accepté d'examiner ma thèse.

Je prie Isabelle Jauberteau et Jean-Louis Jauberteau, Chargés de Recherche au CNRS, de trouver ici l'expression de mes sincères remerciements pour leurs apports importants afin que je puisse suivre mes études.

Mes sincères remerciements vont à Nicolas Tessier-Doyen, Maître de Conférences à l'ENSCI qui n'a pas hésité à m'accorder l'opportunité d'enseigner.

Je tiens à remercier tous les membres de l'ENSCI, chercheurs, techniciens et personnels administratifs avec qui j'ai eu le plaisir de travailler.

Je ne saurais oublier mes collègues et ami(e)s pour leur présence et leur sympathie : Bing, Monique, Béatrice, Céline, Marianne, Séka, Cédric, Joseph, Yasmine, Ismail, Guillaume, Christophe, Florence, Noelle et Martine. Je remercie tout particulièrement Fateh pour l'aide qu'il m'a apportée durant la dernière année de ma thèse.

Enfin, le merci du fond du coeur, un merci amoureux et infini à mon mari « Salman ». Tu es là, dans les creux et les sommets, pour mon plus grand bonheur. Ce travail, c'est aussi le tien, tu y as grandement participé. Merci de m'avoir soutenu, de m'avoir fait oublier mes

tracas, de m'avoir écouté, de m'avoir tant apporté et d'avoir toujours été présents auprès de moi.

Maryam

*À mon mari « Salman »*

*Et mes enfants Aréfé et Armin*



# *Table des matières*

<i>Introduction générale</i> .....	2
<i>Chapitre 1 – Contexte général de l'étude</i> .....	8
<b>I. Introduction</b> .....	10
<b>II. Fonctionnement d'un système barrière thermique</b> .....	10
II.1. La couche céramique (Thermal Barrier Coatings- TBC) .....	11
II.2. La couche d'oxyde (Thermally Grown Oxide- TGO) .....	13
II.3. La sous-couche métallique (Bond-Coat, BC) .....	13
II.4. Le substrat.....	13
<b>III. Interactions entre les couches</b> .....	14
III.1. Interaction entre gaz chauds et couche céramique .....	15
III.2. Interaction entre couche céramique et couche d'oxyde .....	15
III.3. Interaction entre couche d'oxyde et sous-couche.....	16
III.4. Interaction entre sous-couche et substrat.....	16
<b>IV. Procédés d'élaboration du système barrière thermique</b> .....	16
IV.1. Dépôt élaboré par la projection thermique .....	17
IV.2. Dépôt physique ou chimique en phase vapeur.....	18
IV.3. Traitement hybride plasma laser des barrières thermiques .....	20
<b>V. Endommagement du système barrière thermique</b> .....	21
V.1. Synthèse des principaux modes de dégradation du système BT .....	21
V.2. Création des contraintes sur le système BT.....	22
V.2.1. Contraintes formées lors d'élaboration du dépôt .....	23
V.2.2. Contraintes formées durant le service .....	25
V.3. Modes de dégradation.....	28
V.3.1. Modes de dégradation des barrières thermiques lamellaire (APS) .....	28
V.3.2. Modes de dégradation de barrière thermique colonnaire (EB-PVD) .....	30
<b>VI. Modélisation de l'endommagement dans les barrières thermiques</b> .....	30

VI.1. Modélisation analytique .....	31
VI.2. Modélisation numérique.....	32
VI.2.1. Choix du domaine de calcul.....	33
VI.2.2. Choix des propriétés des matériaux .....	38
VI.2.3. Conditions de fonctionnement (conditions aux limites) .....	43
<b>VII. Conclusion.....</b>	<b>45</b>

***Chapter 2 - Thermo-mechanical modelling: Effect of basic material properties and interface roughness of the stress distribution .....48***

<b>I. Introduction.....</b>	<b>50</b>
<b>II. Numerical modeling.....</b>	<b>51</b>
II.1. Composition, geometry and assumption of the TBC system .....	52
II.1.1. Composition.....	52
II.1.2. Geometry and calculation domain.....	52
II.1.3. Material properties and behaviors assumptions.....	53
II.2. Load and boundary conditions.....	58
II.2.1. Thermal Loads .....	59
II.2.2. Displacement conditions.....	59
II.2.3. Mesh grid and element type.....	60
II.2.4. Model set-up and convergence condition in Abaqus code .....	61
<b>III. Results.....</b>	<b>62</b>
III.1. Effect of material properties .....	63
III.1.1. Elastic calculation (Case A) .....	64
III.1.2. Effect of the TBC creep behaviour (Case B) .....	64
III.1.3. Effect of the BC creep behaviour (Case C).....	65
III.1.4. Effect of the TGO creep behaviour (Case D).....	66
III.1.5. Effect of the substrate creep behaviour (Case E) .....	67
III.1.6. Effect of the creep modeling in all layers (Case F).....	67
III.1.7. Effect of plastic BC behaviour considering the creep behaviour in all layers (Case G).....	67
III.2. Effect of TGO growth for different geometry amplitude.....	68



III.2.1. Without TGO growth .....	68
III.2.2. With TGO growth .....	69
III.2.3. Effect of the lateral TGO growth .....	71
III.3. Effect of the interface geometry .....	71
III.3.1. Effect of the interface undulation amplitude.....	71
III.3.2. Effect of the shape of the interface.....	73
III.4. Effect of thermal cyclic loading .....	75
<b>IV. Conclusion .....</b>	<b>76</b>

***Chapter 3 - Effect of the non-homogenous temperature distribution and coating process on the final stress distribution..... 78***

<b>I. Introduction.....</b>	<b>80</b>
<b>II. Effect of the heat transfers modeling (thermal loading cycle).....</b>	<b>82</b>
II.1. Description of the heat transfer model and temperature boundary conditions.....	82
II.2. Effect of the non-uniform temperature distribution on the TGO layer thickness.....	83
II.3. Effect of the non-uniform temperature repartition on the stress distribution .....	84
<b>III. Modeling of the residual stresses due to coatings process .....</b>	<b>86</b>
III.1. Thermal history .....	87
III.1.1. Step-1: coatings deposition .....	88
III.1.2. Step-2: non-homogenous thermal loading cycle.....	89
III.2. Formation of the residual stresses resulting of the plasma spraying process (Step-1)	89
III.2.1. Effect of substrate pre-heating .....	91
III.2.2. Effect of cooling rate.....	92
<b>IV. Effect of the coating process on the stress distribution on the system after service (Step-2) .....</b>	<b>94</b>
IV.1. Effect of the TGO growth on the residual stresses after in service thermal cycling and coating process .....	94
IV.2. Effect of the pre-heating temperature during coating formation on the stress distribution after in service thermal cycling.....	96
IV.3. Effect of the residual stresses resulting of the coating process on the stress distribution after in service thermal cycling .....	97

**V. Crack propagation perspective ..... 98**

**VI. Conclusion ..... 99**

***Chapter 4 - Crack modelling on the system..... 102***

**I. Introduction..... 104**

**II. Modeling of crack development: procedures and assumptions ..... 106**

II.1. Interface specification for crack propagation ..... 107

II.2. Crack propagation tool in Abaqus: “Debond” tool..... 107

**III. Part A: Crack development at the TBC/TGO and TGO/BC interfaces for a homogenous ceramic layer ..... 110**

III.1. Development of the cracks in the case of rugosity with an uniform amplitudes (15 $\mu$ m) ..... 113

III.1.1. Without TGO growth ..... 113

III.1.2. With TGO growth ..... 115

III.2. Development of the cracks in the case of dissimilar amplitudes of neighbor rugosities (15-5 $\mu$ m)..... 117

III.2.1. Without TGO growth ..... 117

III.2.2. With TGO growth ..... 119

III.3. Partial conclusion ..... 120

**IV. Part B: Crack development in a heterogeneous ceramic layer ..... 121**

IV.1. Effect of the TGO growth on the crack propagation in the case of uniform amplitudes (15 $\mu$ m)..... 125

IV.1.1. Without TGO growth..... 125

IV.1.1. With TGO growth: 3  $\mu$ m..... 125

IV.1.2. With TGO growth: 5  $\mu$ m..... 128

IV.1.3. With TGO growth: 7  $\mu$ m..... 128

IV.2. Effect of the interface morphology on the crack propagation in the case of 3 $\mu$ m TGO thickness ..... 129

IV.3. Determination of the critical TGO thickness leading to the TBC layer delamination according to the interface morphology..... 131

IV.4. Discussion ..... 132

IV.5. Effect of thermal loading cycle on the crack propagation .....	134
<b>V. Conclusions .....</b>	<b>136</b>
<i>Conclusion générale et Perspective .....</i>	<i>138</i>
<i>Bibliographie.....</i>	<i>142</i>
<i>Appendix A. User subroutine Creep .....</i>	<i>150</i>
<i>Appendix B. Convergence conditions.....</i>	<i>154</i>



# ***Introduction générale***

---

Dans l'objectif d'augmenter le rendement des turbines à gaz aéronautiques et terrestres ainsi que certains moteurs à combustion diesel, les constructeurs tentent d'accroître la température des gaz à l'entrée des turbines haute pression ou dans les moteurs. Il devient donc nécessaire de protéger certains organes (aubes, ...) généralement en superalliage dont les caractéristiques mécaniques peuvent être altérées par un environnement de plus en plus agressif. La solution adoptée par les constructeurs consiste à revêtir le substrat d'une couche céramique à basse conductivité thermique, permettant de diminuer sa température de fonctionnement. Pour assurer l'accrochage mécanique entre la barrière thermique et le substrat, le dépôt d'une couche intermédiaire est nécessaire. Ce matériau, constitué d'un alliage contenant de l'aluminium, assure de plus la protection du superalliage contre les phénomènes d'oxydation. En effet, durant le stade d'élaboration puis lors de l'utilisation de la BT, une couche d'alumine dont l'épaisseur et les caractéristiques évoluent en fonction du temps se forme à la surface de la sous-couche par diffusion chimique. On se trouve donc devant un système composite multicouche, chaque couche ayant un comportement thermomécanique assez différent des autres.

L'objectif de cette étude est de mieux comprendre les phénomènes d'endommagement des barrières thermique (BT) au cours de leur utilisation afin d'améliorer leurs performances et d'augmenter leur durée de vie. Pour mieux comprendre les phénomènes thermomécaniques intervenants dans ces BT, les simulations numériques sont devenues indispensables. Ainsi, nous allons nous intéresser plus particulièrement à la simulation par éléments finis des phénomènes menant à l'écaillage des barrières thermiques lorsque celles-ci sont soumises à des cycles thermiques en tenant compte :

- de la géométrie des interfaces entre les différentes couches liées à leur préparation avant revêtement,
- des différences de coefficients de dilatation thermique entre les couches
- du fluage et de la déformation plastique à haut température
- de la croissance de la couche d'oxyde
- des contraintes résiduelles formées dans le système durant l'élaboration du dépôt,

- de la structure lamellaire du dépôt avec ses défauts et porosités.

Un modèle fiable du système BT devrait permettre à terme de déterminer la micro-structure permettant d'obtenir une résistance accrue vis-à-vis des cycles thermiques, une taille optimum des grains, une rugosité maîtrisée ... etc.

Dans le premier chapitre du manuscrit, la problématique générale liée à l'étude et à la compréhension de l'initiation et de la propagation de fissures dans les barrières thermiques est exposée à partir d'une synthèse bibliographique. Après une présentation des divers matériaux en présence et de leurs procédés de fabrication, les différentes interactions, notamment mécaniques et chimiques intervenant entre les couches sont décrites en détail. Les différents paramètres et mécanismes pouvant influencer l'initiation et la propagation de fissures telles qu'observées dans la réalité sont présentés et expliqués par des résultats issus de modèles analytiques. Dans ce chapitre, on présente également une synthèse des travaux numériques essentiels réalisés sur le sujet des BT jusqu'à nos jours.

Dans le deuxième chapitre, on propose un modèle numérique à l'échelle de la rugosité des interfaces, identifiée comme échelle pertinente pour la compréhension et la description des mécanismes d'écaillage. La résolution numérique est basée sur la méthode des éléments finis. Ce modèle est basé sur deux hypothèses essentielles qui seront remises en question dans les chapitres 3 et 4 mais qui permettent de réaliser simplement une étude paramétrique et de comparer plus facilement nos résultats avec ceux issus des simulations d'autres auteurs de façon à « caler » notre modèle :

- les différentes couches sont homogènes, sans défaut et les contacts mécaniques et thermiques au niveau des interfaces sont parfaits. De plus, la propagation des fissures n'est pas modélisée.
- la température du système multi-couches est homogène
- les contraintes résiduelles issues du procédé d'élaboration des couches ne sont ni modélisées ni prises en compte comme conditions initiales

Tout d'abord, on procède à une description générale du modèle en décrivant la nature des différentes couches en présence, leurs propriétés, la géométrie du domaine de calcul, le maillage ainsi que les conditions aux limites de la cellule élémentaire. Ensuite, on étudie l'influence de divers paramètres du modèle tels que les lois de comportement relatives aux

différentes couches sur le comportement local du système au voisinage des interfaces. On s'intéresse successivement :

- aux équations représentant le développement normal et latéral de la couche d'oxyde. Une attention particulière sera donnée à la mise en œuvre de ces équations dans le code considéré. On indique aussi les procédures numériques mises en œuvre afin de tenir compte du rôle de la croissance normale et latérale de la couche d'oxyde sous l'effet de la température;
- aux lois de comportement employées pour simuler le fluage dans toutes les couches et la déformation plastique dans la sous-couche qui permettent de redistribuer partiellement les contraintes induites par l'oxydation et par les sollicitations thermomécaniques de la barrière thermiques;
- aux effets de la géométrie de l'interface (forme et amplitude) et du cycle thermique sur la répartition des contraintes;

Enfin, par une analyse des champs de contraintes, les zones sujettes à l'initiation des fissures et à leurs propagations pouvant provoquer un écaillage partiel ou total du système sont localisées, soit aux interfaces entre les milieux évolutifs (céramique, oxyde, sous-couche) soit au sein de la céramique. Une validation de nos résultats numériques est réalisée par comparaison à des résultats expérimentaux ou analytiques de la littérature à la fin de chaque étape.

Le troisième chapitre propose un modèle plus proche de la réalité pour lequel l'effet des contraintes résiduelles formées lors d'élaboration du système barrière thermique ainsi que l'effet d'une distribution non-homogène de la température dans le système durant le service sont pris en compte. On considère un transfert thermique entre les différentes couches par conduction et avec le milieu environnant par convection, tandis qu'un contact parfait sans résistance thermique est considéré entre les couches. Dans la première partie de ce chapitre, nous examinerons le rôle du gradient thermique apparaissant au sein du système sur la formation de la couche d'oxyde et la répartition des contraintes sans tenir compte du processus de dépôt. La deuxième partie se concentre sur le développement des contraintes résiduelles au cours d'élaboration de la BT et leurs effets sur la possibilité de nucléation de fissures dans la couche céramique. Ce travail s'effectue au travers d'un modèle simple dans lequel l'empilement des lamelles céramique n'est pas pris en compte. La couche céramique est assimilée à un bloc solide ayant une température proche de celle de la fusion du matériau.

Elle est assemblée instantanément sur les couches inférieures préchauffées à une température donnée. Le calcul des contraintes résiduelles est réalisé pour différentes températures de préchauffage du substrat et différents taux de refroidissement. Enfin, la troisième partie du chapitre 3 est consacrée à l'étude de la répartition des contraintes dans le système à la fin d'un cycle thermique, tandis que les contraintes résiduelles générées par le procédé de dépôt sont considérées comme des conditions initiales. Les résultats obtenus sont alors comparés à ceux obtenus sans modélisation des contraintes résiduelles. Nous discutons également des différentes possibilités de trajet de propagation de fissures qui semblent être en assez bon accord avec les observations expérimentales.

Enfin, le quatrième et dernier chapitre sera dédié à la modélisation de l'endommagement du système barrière thermique en simulant la propagation de fissures par débouonnages de nœuds à partir de fissure pré-existantes et suivant des interfaces prédéterminées (L'outil de gestion de contact "*Debond*" du code ABAQUS sera utilisé pour modéliser la propagation des fissures au sein des différents matériaux). Le chapitre 4 comporte deux parties. Dans la première, nous poursuivons le développement du modèle utilisé au chapitre 3 avec des matériaux homogènes sans défauts afin de simuler la propagation de fissures le long des interfaces entre les différents matériaux définis comme étant des chemins prédéterminés et possibles pour la propagation de fissures pré-existantes (TBC/TGO et TGO/BC interfaces). La comparaison des résultats obtenus avec ceux des chapitres précédents montre bien l'effet de l'ouverture des fissures sur la relaxation des contraintes et le fait que les prévisions réalisées par analyse des champs de contraintes à posteriori au chapitres 2 et 3 pour prévoir les chemins de fissuration n'étaient pas complètement réalistes. On examinera notamment l'effet de la géométrie de l'interface et de la croissance de la couche d'oxyde sur différents scénarios d'ouverture de fissures. Dans la deuxième partie, nous présenterons un nouveau modèle de BT utilisant une couche céramique modélisée par un empilement lamellaire hétérogène similaire à celle obtenue réellement par projection plasma. Ce nouveau modèle de la couche céramique est créé à l'aide d'un logiciel développé au sein de notre laboratoire et permettant de maîtriser simultanément le taux de porosité et le pourcentage de surface de contact entre grains. Ce nouveau modèle nous permettra d'étudier de façon plus réaliste le rôle de la morphologie de l'interface et de la croissance de la couche d'oxyde sur la formation et l'ouverture des fissures entre couche et dans la céramique et notamment de déterminer une épaisseur critique de la couche d'oxyde



afin d'éviter un écaillage partiel ou total du système multicouche. Les informations produites permettront d'aider à la détermination des paramètres de préparation de surface et de projection conduisant à la micro-structure la plus complaisante et la plus adhérente possible vis-à-vis des cycles thermiques et permettant d'allonger la durée de vie de la BT.

Enfin, en conclusions et perspectives, on présentera les points faibles et forts de notre travail. Les démarches nécessaires pour obtenir un modèle plus représentatif et plus proche de la réalité seront finalement proposées.



# *Chapitre 1 – Contexte général de l'étude*

## **Sommaire**

---

<b>I. Introduction.....</b>	<b>10</b>
<b>II. Fonctionnement d'un système barrière thermique .....</b>	<b>10</b>
II.1. La couche céramique (Thermal Barrier Coatings-TBC) .....	11
II.2. La couche d'oxyde (Thermally Grown Oxide-TGO).....	13
II.3. La sous-couche métallique (Bond-Coat-BC).....	13
II.4. Le substrat.....	13
<b>III. Interactions entre les couches.....</b>	<b>14</b>
III.1. Interaction entre gaz chauds et couche céramique .....	15
III.2. Interaction entre couche céramique et couche d'oxyde .....	15
III.3. Interaction entre couche d'oxyde et sous-couche.....	16
III.3. Interaction entre sous-couche et substrat.....	16
<b>IV. Procédés d'élaboration du système barrière thermique.....</b>	<b>16</b>
IV.1. Dépôt élaboré par la projection thermique.....	17
IV.2. Dépôt physique ou chimique en phase vapeur.....	18
IV.3. Traitement hybride plasma laser des barrières thermiques .....	20
<b>V. Endommagement du système barrière thermique.....</b>	<b>21</b>
V.1. Synthèse des principaux modes de dégradation du système BT .....	21
V.2. Création des contraintes sur le système BT.....	22
V.2.1. Contraintes formées lors d'élaboration du dépôt .....	23
V.2.2. Contraintes formées durant le service .....	25
V.3. Modes de dégradation.....	28
V.3.1. Modes de dégradation des barrières thermiques lamellaire (APS) .....	28
V.3.2. Modes de dégradation des barrières thermiques colonnaire (EB-PVD) .....	30
<b>VI. Modélisation de l'endommagement dans les barrières thermiques.....</b>	<b>30</b>
VI.1. Modélisation analytique .....	31
VI.2. Modélisation numérique.....	32
VI.2.1. Choix du domaine de calcul.....	33

VI.2.2. Choix des propriétés des matériaux .....	38
VI.2.3. Conditions du fonctionnement (condition aux limites).....	43
<b>VII. Conclusion.....</b>	<b>45</b>

---

## I. Introduction

Les systèmes barrières thermiques (BT) sont largement utilisés pour protéger de la chaleur les pièces métalliques situées dans les parties chaudes des turbines à gaz aéronautiques et terrestres ainsi que dans certains moteurs à combustion diesel. Leur fonction première est l'isolation des composants métalliques permettant une utilisation de gaz de combustion à des températures élevées (entre 400-500 °C pour les moteurs diesel, 900-1100 °C pour des turbines à gaz terrestres de production d'énergie, 1300-1500°C pour les réacteurs d'avions civils, 1500-1600°C, voire plus, pour les réacteurs d'avions militaires [Tri-05]).

L'utilisation et les propriétés d'un système BT sont fonction de sa structure, de sa composition, de sa morphologie, de l'adhérence à la surface du métal sur lequel il est appliqué et qui dépend du procédé du dépôt.

Dans le domaine aéronautique, les barrières thermiques sont des revêtements constitués d'une couche céramique (généralement composée de zircone partiellement stabilisée à l'yttrine), déposée sur une couche de liaison métallique servant à accommoder les coefficients de dilatation thermique des différentes couches, elle-même déposée sur le substrat. L'avantage de ce type de revêtement est sa faculté à écrêter les pics de température locaux ou transitoire grâce à la faible conductivité thermique de la céramique. L'abaissement de la température en surface du métal de base permet une prolongation de la durée de vie des systèmes en les protégeant des attaques chimiques de l'environnement extérieur et en améliorant la tenue au fluage et à la fatigue.

La durée de vie du système barrière thermique dépend essentiellement de sa capacité à tolérer les contraintes thermomécaniques générées lors du fonctionnement du système.

## II. Fonctionnement d'un système barrière thermique

Les barrières thermiques sont une superposition de couches visant en premier lieu à réduire la température à la surface d'un matériau et dans un second temps à le protéger des conditions critiques de l'environnement (attaques chimiques, érosions...). Le système étudié dans ce travail est le plus rencontré dans les réacteurs aéronautiques. Il se compose de 4 couches, deux céramiques et deux métalliques, avec de grandes différences dans leurs propriétés thermomécaniques. La configuration d'un système barrière thermique peut être

schématisée comme indiqué sur la **Fig.1-1**, la fonction de chaque couche est explicitée en détail dans les paragraphes suivants.

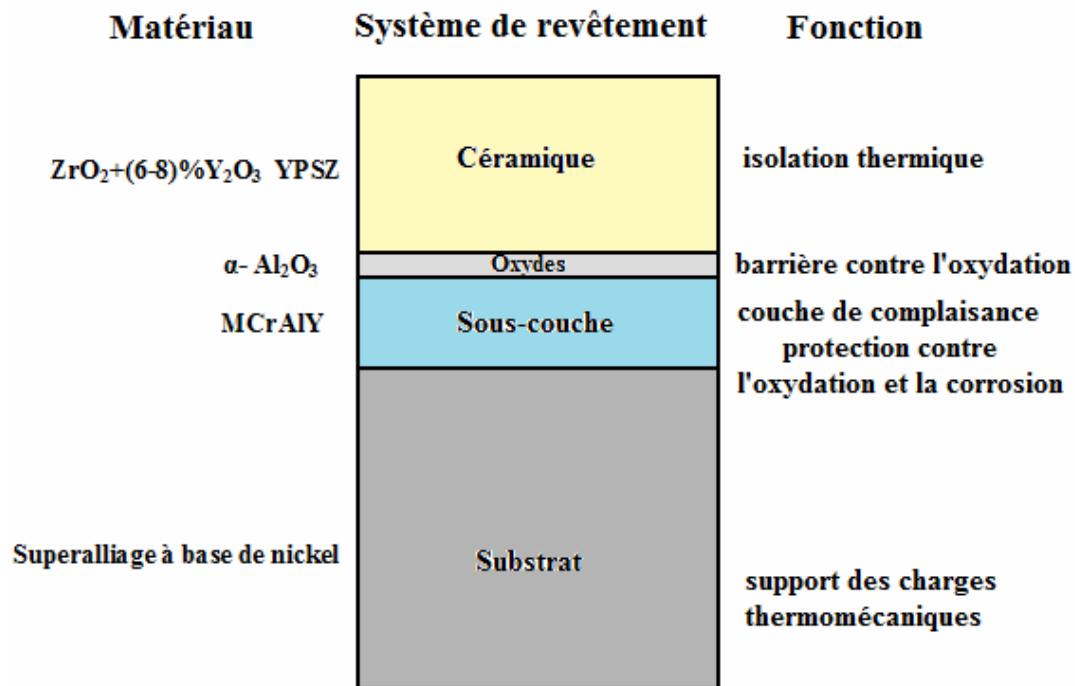


Figure 1-1. Schéma de principe des barrières thermiques.

## II.1. La couche céramique (Thermal Barrier Coatings- TBC)

La couche supérieure, en céramique, est généralement constituée de zircone partiellement stabilisée à l'yttrine. Les proportions de cet ajout sont de 6-8% en masse et permettent de stabiliser la phase tétragonale métastable durant un refroidissement rapide (**Fig.1-2**). Cette phase est recherchée car elle présente de meilleures propriétés thermomécaniques (résistance à la fracture, ténacité et tenue au cyclage thermique) que les phases monoclinique, tétragonale ou cubique [Ant-04]. Les propriétés mécaniques et thermiques de la couche céramique dépendent très fortement de sa morphologie poreuse qui dépend elle-même de la technique utilisée pour élaborer le dépôt. Dans le cadre de l'optimisation de la couche céramique, celle-ci doit présenter les caractéristiques suivantes :

- une faible conductivité thermique de l'ordre de  $2 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  pour une zircone colonnaire et de l'ordre de  $1 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  pour une zircone lamellaire [Tri-05],
- une bonne stabilité chimique et thermique à haute température,
- un coefficient de dilatation thermique le plus proche possible de celui du

substrat métallique afin de limiter les contraintes dues aux différences de coefficients de dilatation thermique substrat - dépôt.

Ainsi pour obtenir une meilleure résistance thermique du système, il est souhaitable d'augmenter la porosité du dépôt pour diminuer sa conductivité thermique (K) ainsi que son épaisseur.

Dans cette couche, les modes de transferts thermiques mis en jeu sont essentiellement : la conduction (phonons par vibration), la convection (solide-fluide dans les pores, négligeable), le rayonnement (négligeable).

Les paramètres qui influencent la conductivité thermique de la céramique sont : la température, le taux d'yttrine, le vieillissement thermique et la densité du réseau poreux. Ces paramètres sont détaillés dans le cadre de travail de G. Antou [Ant-04].

La couche céramique présente une épaisseur de l'ordre de 150 à 300 micromètres dans le cas des turbines aéronautiques et jusqu'à 2 mm dans les applications concernant les turbines terrestres et les moteurs à combustion diesel [Tri-05].

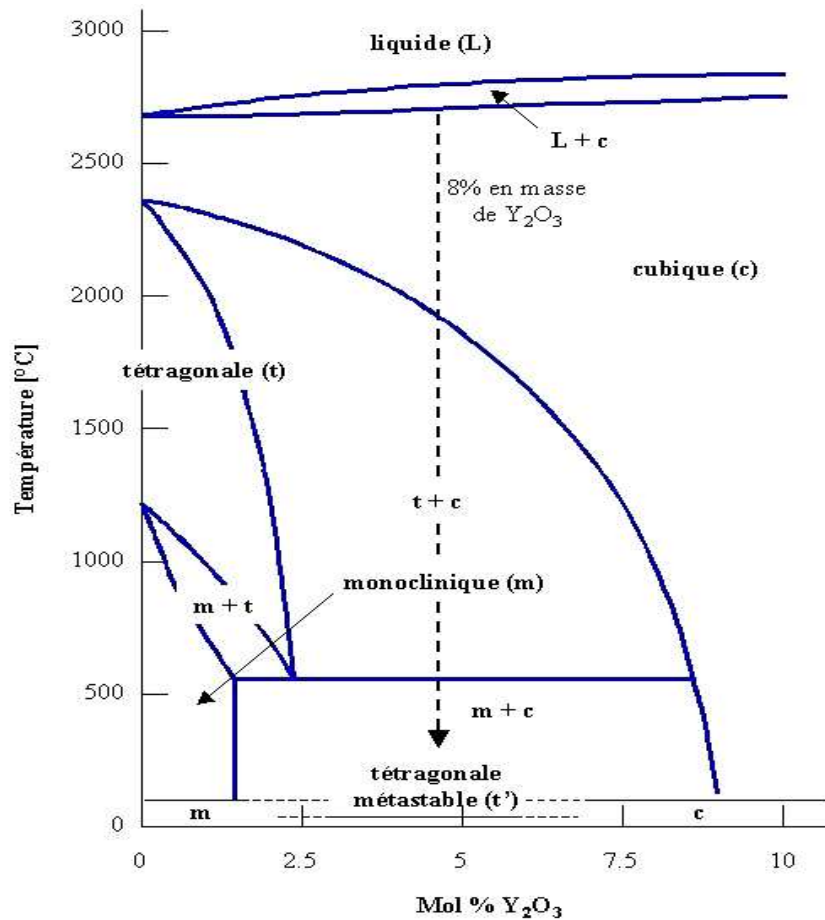


Figure 1-2. Diagramme des phases  $ZrO_2$  ( $Y_2O_3$ ) % mol [Ant-04].

## II.2. La couche d'oxyde (Thermally Grown Oxide- TGO)

Durant le stade d'élaboration, une fine couche ductile et continue d'alumine généralement inférieure à 1µm d'épaisseur se forme à la surface de la sous-couche. Cette couche d'oxyde se développe lors des expositions à des températures élevées et en présence d'oxygène. Son épaisseur et ses caractéristiques évoluent en fonction du temps.

La couche d'oxyde assure d'une part la liaison entre la céramique et la sous-couche et d'autre part le rôle de barrière chimique en empêchant la diffusion de l'oxygène vers la sous-couche ou le substrat [EMH\* -01].

## II.3. La sous-couche métallique (Bond-Coat, BC)

La sous-couche métallique est une base MCrAlY d'une épaisseur de l'ordre de 100 µm où M représente une combinaison de Nickel et de Cobalt ou bien une combinaison d'aluminure de Nickel modifiée au Platine(Ni,Pt)Al. La sous-couche est résistante à l'oxydation et à la corrosion à chaud. C'est une couche de complaisance permettant d'accommoder les différents coefficients de dilatation thermique de la céramique et du substrat. Elle sert également de réservoir de l'élément aluminium lors du développement de la couche d'oxyde.

## II.4. Le substrat

La nature du substrat dépend des applications, des aciers inoxydables, des alliages base nickel pour les turbines terrestres, des alliages base nickel ainsi que des superalliages base nickel de type Inconel ou René pour les turbines aéronautiques [Tri-05]. La principale fonction du substrat est de supporter les charges thermomécaniques.

Une diminution notable de la résistance mécanique du superalliage est notée au dessus de 1100°C [Ant-04]. La morphologie et la distribution des précipités cohérents  $\gamma'$  ( $\text{Ni}_3\text{Al}$ ) au sein de la matrice  $\gamma$  (Ni) sont métastables. La croissance des précipités à haute température d'après Ostwald conduit à leur incohérence, puis à leur évolution vers des géométries aciculaires [Ant-04]. Les deux phénomènes conduisent à une diminution notable de la résistance mécanique du superalliage, notamment une évolution de son module d'Young, entre autres caractéristiques.



Le substrat, lorsqu'il est exposé à de hautes températures (supérieures à 600 °C) doit également être refroidi. Ceci est effectué grâce à un écoulement turbulent d'air ou d'eau au dos de la pièce [Tri-05].

### III. Interactions entre les couches

Pour aller plus en avant, les travaux menés aujourd'hui sur les barrières thermiques se focalisent d'une part sur l'amélioration des performances du système, qui passe par l'optimisation des fonctions de chaque couche et, d'autre part, sur le prolongement de la durée de vie qui, elle, est gouvernée par les interactions entre les couches. Les paragraphes suivants déclinent les interactions entre les différentes couches et avec leur environnement. La **Fig.1-3** présente une vue schématique des composants d'un système barrière thermique, de leurs propriétés et des transformations survenant durant leur mise en service.

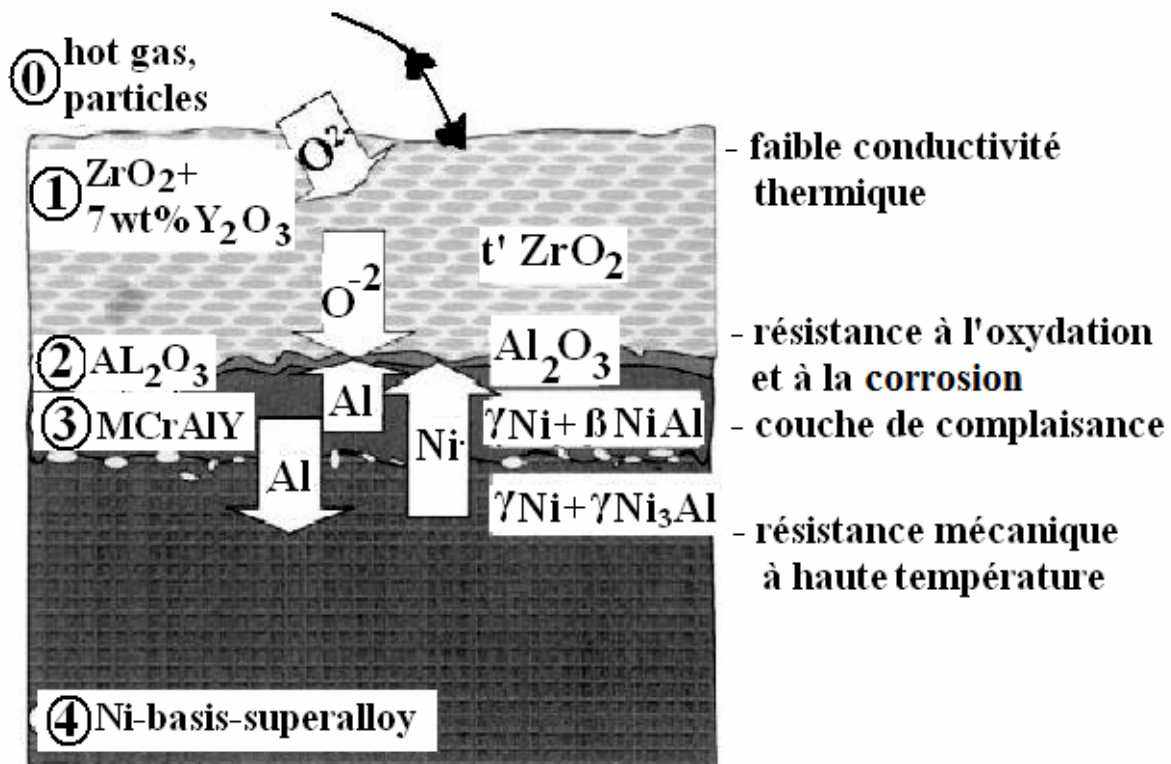


Figure. 1-3. Interactions entre les composants d'un système barrière thermique durant leur mise en service [Tri-05].

### III.1. Interaction entre gaz chauds et couche céramique

Les impacts des particules présentes dans les gaz chauds conduisent à l'érosion du revêtement céramique. La teneur du poids perdu par l'érosion dépend de l'angle de contact entre les particules percutant la surface (*Fig.1-4*). On observe une érosion plus élevée à  $90^\circ$  qu'à  $30^\circ$  [AVM-04]. Cette diminution de l'épaisseur entraîne une température plus élevée du substrat, et également une croissance plus rapide de la couche d'oxyde à l'interface céramique/sous-couche. On réduit les problèmes d'érosion par l'installation de filtres.

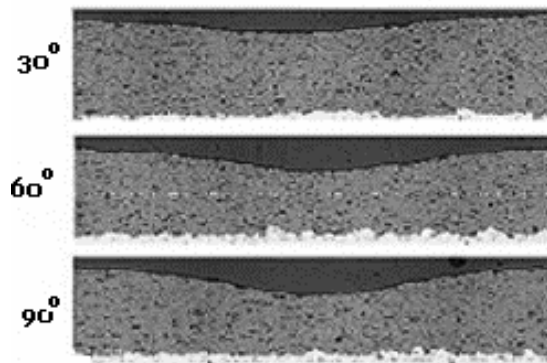


Figure. 1-4. Erosion de la couche céramique en fonction de l'angle de contact [AVM-04].

### III.2. Interaction entre couche céramique et couche d'oxyde

La rugosité à l'interface céramique/oxyde permet une bonne adhérence du dépôt céramique. Cependant, cette géométrie crée des pics de contraintes de traction perpendiculaires à la surface qui augmente lors de la croissance de la couche d'oxyde (*Fig.1-5*). La couche céramique fissure et s'écaille près de l'interface céramique/couche d'oxydes, laissant après écaillage une mince couche blanche sur la sous-couche [Ant-04].

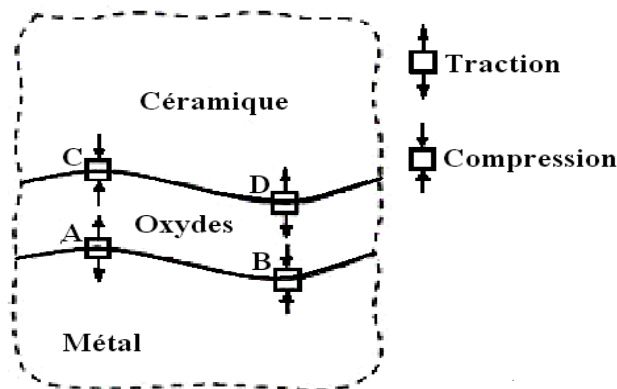


Figure 1-5. Zones en traction et en compression à l'interface rugueuse en présence d'une couche d'oxydes importante.

### III.3. Interaction entre couche d'oxyde et sous-couche

Ici encore, la rugosité à l'interface oxyde/sous-couche est responsable de l'apparition de pics de contraintes nuisibles. La couche d'oxydes croit de manière inhomogène sur les différentes phases de l'alliage MCrAlY, produisant ainsi le développement d'une rugosité supplémentaire à petite échelle et ce même sur des surfaces polies [Ant-04].

Durant les premières heures d'oxydation, les alumines de transition se forment d'abord ( $\theta$  et  $\gamma$ ). Lorsque l'épaisseur atteint environ une valeur de 300 nm, l'alumine se transforme alors en phase  $\alpha$  à partir de 900°C pour retourner vers son état thermodynamiquement stable [Ant-04]. Si la teneur en aluminium s'affaiblit, d'autres oxydes commencent à se développer sous forme d'aiguilles ( $\gamma'$ -Ni<sub>3</sub>Al ou Ni (Pt) Al [Spinelle]). Les oxydes présentent une faible adhésion et entraînent un état de contrainte complexe qui modifie les vitesses d'oxydation. Améliorer la résistance à l'oxydation et à la corrosion en diminuant les phénomènes de diffusion vers le substrat sont les objectifs de développement de la sous-couche. L'addition d'éléments d'alliage (Si, Hf, Ta, Zr, Re, etc.) semble influencer la diffusion de l'aluminium vers la surface, et donc modifier les vitesses d'oxydation [Ant-04].

### III.4. Interaction entre sous-couche et substrat

Le nickel provenant du substrat diffuse dans la sous-couche et le chrome et l'aluminium de la sous-couche diffusent dans le substrat. Les différents taux de diffusion des espèces causent la création des pores dits de Kirkendall [Ant-04]. Si ces pores sont nombreux, ils détruisent alors la continuité de l'interface avec le substrat. La diffusion du nickel du substrat vers la sous-couche forme également des zones pauvres en Ni<sub>3</sub>Al  $\gamma'$  dans le substrat. Ainsi, le substrat lui-même perd sa résistance mécanique. On peut augmenter la résistance au glissement et à l'oxydation par l'addition de rhénium.

## IV. Procédés d'élaboration du système barrière thermique

Trois classes de procédés d'élaboration sont principalement utilisées aux niveaux industriels.

## IV.1. Dépôt élaboré par la projection thermique

Le procédé de projection par plasma d'arc « Air Plasma Spray – APS » est le plus couramment employé industriellement. Les matériaux utilisés sous forme de poudres fines sont introduits dans l'écoulement plasma, puis chauffés et si possible fondus et accélérés vers le substrat (*Fig.1-6*). Les gouttelettes s'écrasent sur le substrat pour former des lamelles qui s'empilent les unes sur les autres, formant ainsi le dépôt (*Fig.1-7*).

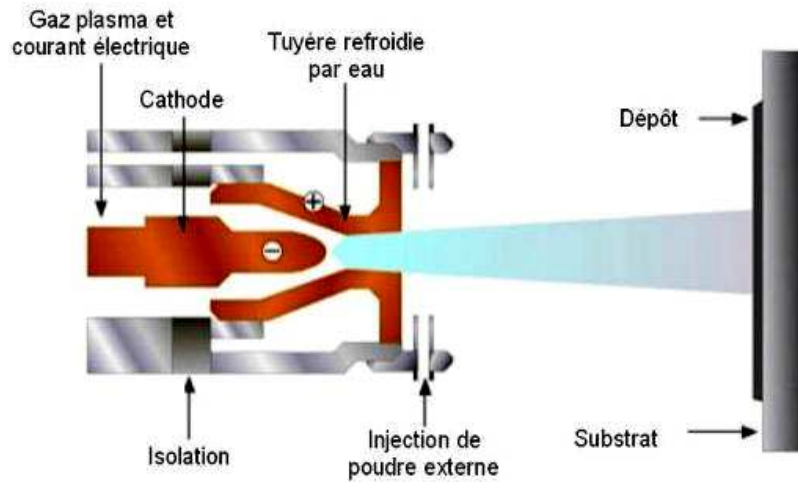


Figure 1-6. Principe schématique de la projection plasma.



Figure 1-7. Aspect lamellaire et fissuré d'un dépôt de zircone yttrée projeté par plasma (cliché ONERA).

L'empilement des lamelles n'étant pas parfait, une porosité est présente entre celles-ci. Elle peut être classée en deux catégories :

- Des pores globulaires de forme sphérique de quelques micromètres de diamètre : cette

porosité est principalement due à la présence de particules infondues ou partiellement fondues ou à la présence de trous entre les lamelles, trous non comblés par la nouvelle lamelle en formation. Les pores globulaires résultent du chevauchement imparfait des lamelles lors de leur empilement.

- Des microfissures : Ces pores sont globalement parallèles au substrat et sont à l'origine de la faible conductivité thermique des dépôts projetés de zircone ( $0,8 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  à température ambiante, alors qu'elle est d'environ  $2,2 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  pour de la zircone massive). On peut distinguer deux types de fissures : fissure inter-lamellaire et fissure intra-lamellaire qui sont aussi des défauts qui limitent le flux thermique car ils sont majoritairement perpendiculaires à celui-ci. Ces deux types de défauts réduisent aussi le module d'élasticité de la couche et ainsi permettent au matériau de mieux accommoder les contraintes. Cependant, cette microstructure constitue de nombreuses amorces de fissures qui se propageront sous un état de contrainte critique, en service par exemple.

Ainsi, le réseau poreux de la couche céramique conduit à une conductivité thermique apparente largement inférieure à la conductivité thermique intrinsèque des matériaux céramiques massifs. L'architecture du réseau poreux (taux de porosité, répartition et densité de fissures) joue un rôle prépondérant sur la fonction d'isolation thermique de la couche céramique et sur son intégrité mécanique. A température ambiante, l'élasticité du dépôt est essentiellement contrôlée par l'orientation des pores; le taux de porosité ne joue qu'un rôle secondaire. Cependant, lors d'une exposition prolongée à haute température, le dépôt poreux subit un frittage qui entraîne une évolution des propriétés thermiques (la conductivité thermique augmente) et mécaniques (la dureté augmente, la fragilité aussi). La structure lamellaire conduit parfois à l'obtention de propriétés particulières pas recherchées.

## IV.2. Dépôt physique ou chimique en phase vapeur.

Les barrières thermiques colonnaires sont obtenues par dépôt sous vide, à partir d'une phase vapeur.

On distingue trois familles de dépôt sous vide [Tri-05, Ant-04] :

- Les dépôts physiques en phase vapeur «Electron Beam Physical Vapour Deposition», (EB-PVD): qui consiste à chauffer par faisceau d'électron jusqu'à son évaporation le matériau devant être déposé. Les atomes vont ensuite se condenser sur les pièces qui se trouvent en face de la source. Sous certaines conditions de pression et de température, le dépôt se forme

d'abord sous la forme de petits grains équiaxes puis par colonnes monocristallines (**Fig.1-8**). Le diamètre d'une colonne est de l'ordre de 5  $\mu\text{m}$  et l'épaisseur du dépôt d'environ 100  $\mu\text{m}$  [Cal-01]. Ce type de dépôt est le plus adapté au cas des pièces tournantes car il permet de mieux accommoder les contraintes du fait de sa microstructure. De plus, si le principal mode de dégradation dans les systèmes APS est la croissance de fissures dans la zircone (Rabiei *et al.* [RE-00]), le dépôt EB-PVD offre l'avantage de stopper une telle fissure quand elle rencontre un espace intercolonnaire.

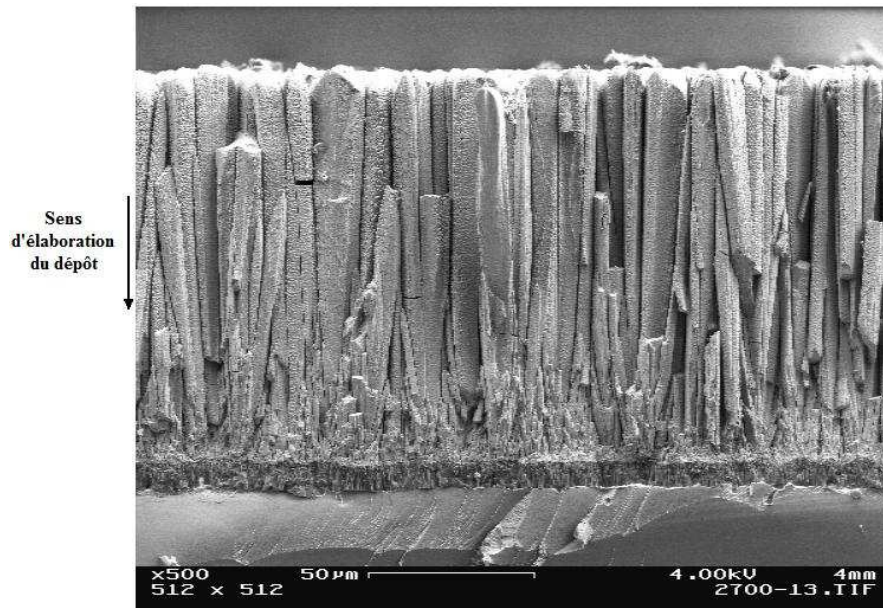


Figure 1-8. Aspect colonnaire d'un dépôt de zircone yttrée déposé par EB-PVD (cliché ONERA).

Les principaux inconvénients de la zircone déposée par voie EB-PVD par rapport au dépôt par voie plasma sont :

- sa conductivité thermique plus importante : on obtient des valeurs de l'ordre de 2  $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  pour une zircone colonnaire et de l'ordre de 1  $\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$  pour une zircone lamellaire;
- des coûts de l'installation et de l'amortissement environ dix fois plus importante qu'en APS; une vitesse de dépôt plus faible: elle atteint au maximum 200  $\mu\text{m}/\text{h}$  pour une surface de 1 $\text{cm}^2$ , alors qu'en projection elle peut atteindre 1  $\text{mm}/\text{min}$  pour la même surface (tableau I-1).

- Une autre technique, l'EB-DVD « Electron Beam Directed Vapour Deposition », repose sur le même principe que l'EB-PVD, mais les vapeurs sont redirigées vers le substrat au moyen d'hélium ou d'argon grâce à une buse.

- Dépôts chimiques en phase vapeur «Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition», (PE-CVD), consiste à réaliser un dépôt par réaction ou décomposition de précurseurs gazeux à la surface d'un substrat. La pression de fonctionnement est plus élevée qu'en EB-PVD, et est de l'ordre de 1 à 10 Pa. Le principal inconvénient de cette technique réside dans la vitesse de dépôt qui est faible.

### IV.3. Traitement hybride plasma laser des barrières thermiques

Cette technique consiste à réaliser un dépôt par projection thermique, puis à le refondre totalement ou partiellement, au moyen d'un faisceau laser [Ant-04]. Il a été prouvé que la présence de fissures verticales, induites par le traitement laser, améliore la résistance aux chocs thermiques des dépôts. Ce traitement s'effectue dans deux cas : traitement *a posteriori* et traitement *in situ*.

Tricoire [Tri-05] a résumé les principales caractéristiques de chaque technique dans le *tableau 1-1*.

	APS	EBPYD	PECVD	EBDVD	APS retraité par laser
<b>Goût investissement et fonctionnement</b>	+	+++	++	++	++
<b>Pression de travail (Pa)</b>	$10^5$	$10^{-4}$ - $10^{-1}$	$10^0$ - $10^2$	$10^{-1}$ - $10^3$	$10^5$
<b>Conductivité thermique du dépôt (W/m.K)</b>	0.6	2.0	1.6	1.2	0.4- 1.0
<b>Résistance aux sollicitations mécaniques</b>	+	+++	+++	+++	+
<b>Structure</b>	Lamelles	Colonnes( quelques microns de diamètre)	Colonnes( quelques dizaines de microns de diamètre)	Colonnes( quelques dizaines de microns de diamètre)	Lamelles alternées avec zones denses( <i>in situ</i> ) ou lamelles et couche dense surfacique( <i>a posteriori</i> )
<b>Durée de vie du dépôt</b>	+	+++	+++	++	+
<b>Vitesse de dépôt maximale atteinte pour 1cm<sup>2</sup></b>	>1 mm/min	~200µm/h	~150µm/h	~3mm/h	Idem APS( <i>in situ</i> ), 2 fois moindre( <i>a posteriori</i> )
<b>Rendement de dépôt moyen observé pour 1cm<sup>2</sup></b>	55%	5%	8%	80%	55%
<b>Impact environnemental : consommation d'énergie et de matière</b>	Faible	Forte	Forte	Moyenne	Moyenne

Tableau 1-1 : Comparatif des principales techniques de réalisation de barrière thermique.

Dans cette étude, le système barrière thermique est constituée d'une couche de céramique (zircone partiellement stabilisée à l'Yttrine) déposée par voie APS sur un revêtement NiCoCrAlY et d'un substrat en superalliage base nickel (Inconel 617). On se trouve donc devant un système composite multicouche, chaque couche ayant un comportement mécanique très différent des autres constituants.

## V. Endommagement du système barrière thermique

L'endommagement dans les barrières thermiques se traduit par la création de fissures, le plus souvent à l'interface céramique/oxydes ou oxydes/sous-couche. Durant le service, ces fissures coalescent, pouvant entraîner un écaillage partiel de la couche céramique ou la ruine totale du système. Il est clairement établi que l'initiation de l'endommagement est liée aux contraintes résiduelles formées dans la couche céramique après projection thermique, à la géométrie de ses interfaces, ainsi qu'à la croissance de la couche d'oxyde durant le service. Une analyse à l'échelle des interfaces est donc nécessaire car elle permet d'identifier les paramètres géométriques (ondulation locale de la couche d'oxyde liée au sablage), mécaniques (contraintes d'origine thermique) ou chimiques (contraintes de croissance de la couche d'oxyde) qui vont conduire à l'initiation d'une microfissure et/ou à sa propagation.

Nous allons discuter dans cette section des différents mécanismes et paramètres pouvant avoir un caractère endommageant pour le système ou pouvant influencer sur la tenue mécanique de la barrière au cours du temps et différents modes de formation de la fissure au niveau de la BT.

### V.1. Synthèse des principaux modes de dégradation du système BT

La ruine d'une barrière thermique peut avoir de nombreuses et diverses origines dont les principales sont [Tri-05] :

- 1) les contraintes résiduelles formées dans le système durant d'élaboration du dépôt, la porosité et la microstructure des revêtements produits par plasma sont les premiers paramètres à l'origine de la dégradation du système BT ;
- 2) les différences des coefficients linéaires de dilatation thermique entre les couches durant le service provoquent de fortes contraintes dans le système ;



- 3) la croissance de la couche d'alumine pendant les cycles thermiques. Cette formation d'oxyde entraîne un changement dans la composition et donc dans les propriétés de la sous-couche qui s'appauvrit en aluminium. De plus, cette diffusion forme des lacunes dans la sous-couche qui, en grand nombre, donnent des défauts proches de l'interface avec l'alumine. Enfin, le grossissement de cette couche d'oxyde entraîne naturellement de fortes contraintes de compression et de traction dans la barrière thermique car cette croissance se passe sur une surface non plane. Ces contraintes provoquent un décollement de la sous-couche.
  - 4) un frittage de la couche céramique (vieillissement thermique), dû aux longues périodes d'exposition à des températures élevées. Ce mécanisme entraîne un durcissement localisé et donc une fragilisation et augmentation de la conductivité thermique de la céramique.
  - 5) une diminution de la stabilité de la phase tétragonale de la zirconie. Les composés à base de vanadium et de soufre contenu dans les carburants consomment les éléments stabilisants de la zirconie. Cela entraîne des changements de la phase tétragonale à monoclinique lors des cycles thermiques. Ce passage donne une variation de 4 à 6% en volume qui forme d'importantes contraintes.
  - 6) l'érosion du dépôt provoquée par l'écoulement de gaz chauds et des résidus de combustions.
  - 7) la corrosion à chaud de la zirconie yttrée, se faisant par pénétration de sels fondus, par minéralisation ou par attaque chimique. Les principaux éléments attaquant la zirconie sont Na, V, P et Pb, souvent présent dans le kérosène. L'endommagement localisé faisant suite à l'impact de particules solides.
  - 8) l'endommagement localisé faisant suite à l'impact de particules solides [EMH\*-01].
- De tous ces phénomènes, les facteurs 1, 2 et 3 sont les principaux modes de dégradation des BT.

## V.2. Création des contraintes sur le système BT

L'endommagement des BT sous chargement thermomécanique est très complexe car il est influencé par différents paramètres tel les contraintes résiduelles, la différence de coefficient de dilatation thermique, l'oxydation, la rugosité à l'interface, le fluage et le frittage. La détermination du champ des contraintes nous permet d'en extraire des

informations sur la formation des fissures et leur propagation. On peut distinguer deux formes de contraintes ; les contraintes qui se forment lors d'élaboration du dépôt et les contraintes qui se produisent durant en service.

### V.2.1. Contraintes formées lors d'élaboration du dépôt

#### a) Contraintes dues au sablage du substrat

Pour avoir une meilleure accroche des particules fondues sur le substrat et une meilleure adhérence du dépôt, celui-ci subit une opération de sablage afin d'obtenir une surface rugueuse et d'augmenter la surface réelle de contact entre les matériaux. Ce traitement a pour conséquence de mettre superficiellement en compression la face du substrat [BP-97]. A la suite de cette opération, la valeur de la contrainte maximum obtenue expérimentalement est aux alentours -200 MPa. Durant le service et à haute température, ces contraintes se relaxent.

#### b) Contraintes résiduelles

Les contraintes résiduelles dans un revêtement obtenu par la projection plasma sont liées à trois phénomènes [WLH-03] : le changement de phase, la contraction rapide des lamelles liée à leur refroidissement après l'impact et la différence du coefficient de dilatation thermique entre le substrat et le dépôt.

#### **b-1) Contraintes dues aux changements de phase**

La contrainte provoquée par le changement de phase, aussi bien liée au passage de l'état liquide à l'état solide qu'à la transformation de phase de l'état solide, est négligeable dans le dépôt  $ZrO_2-8\%Y_2O_3$  [LWH-01]. En effet, le changement de phase de la zircone de la phase tétragonale à la phase monoclinique génère une augmentation de volume de 4,6% mais, dans le dépôt en zircone yttrée partiellement stabilisée, ce changement de phase de la zircone n'existe plus.

#### **b-2) Contraintes de trempes (Quenching Stresses, $\sigma_q$ )**

Les contraintes de trempe sont liées à la contraction rapide des lamelles écrasées du fait de leur refroidissent extrêmement rapide [Yam-00] lors du contact avec la cible, de la température de projection à la température moyenne de la surface de la cible. Leur valeur est directement reliée à la morphologie de la particule étalée et à la qualité du contact avec le

substrat. Les particules déposées se retrouvent en tension et la valeur est réduite par le préchauffage du substrat. La contrainte de trempe s'exprime sous modèle unidimensionnel suivant [LWH-01] :

$$\sigma_q = \alpha_d \times \Delta T \times E_d \quad (1-1)$$

Où  $\alpha_d$  et  $E_d$  représentent respectivement le coefficient de dilatation thermique et le module d'Young du matériau déposé. Les travaux de Kuroda et Clyne [KC-91] montrent que les contraintes de trempe mesurées sont plus faibles que les valeurs modélisées, en particulier pour un dépôt fragile et ceci du fait de l'apparition des microfissures dans les lamelles, qui relaxent les contraintes. Ceci n'a pas été pris en compte dans les modèles développés.

### b-3) Contraintes thermiques (Thermal Stresses, $\sigma_{th}$ )

Les contraintes thermiques sont liées à la rétraction du matériau projeté et du substrat du fait de leur différence de coefficient de dilatation thermique lors du refroidissement de l'ensemble substrat/dépôt depuis la température moyenne du dépôt lors de projection (2680 °C) [Tri-05] jusqu'à la température ambiante (25 °C). Elles sont déterminées par la loi de Hooke [LRH\*-92] :

$$\sigma_{th} = E_d (\alpha_s - \alpha_d) (T_d - T_{amb}) / (1 - \nu) \quad (1-2)$$

où  $E_d$  est le module d'Young du dépôt (Pa),  $\alpha_s$  et  $\alpha_d$  sont les coefficients de dilatation du substrat et du dépôt,  $\nu$  est le coefficient de Poisson,  $T_{amb}$  et  $T_d$  sont respectivement la température ambiante et la température moyenne de dépôt.

Ces contraintes, suivant le signe de  $\alpha_s$  et  $\alpha_d$ , seront en tension ou en compression et viennent s'ajouter aux contraintes de trempe ainsi qu'à celles générées au voisinage de la surface du substrat par sablage. Dans le cas d'une céramique déposée sur un substrat métallique pour lequel  $\alpha_d < \alpha_s$ , ce phénomène conduit à l'apparition de contraintes de compression dans le dépôt lors de son refroidissement.

La valeur globale des contraintes résiduelles développées dans la barrière thermique obtenue par projection lors de son refroidissement, est la somme des contraintes de trempe et des contraintes thermiques si les contraintes dues aux changements de phase sont négligeables [WLH-03] :

$$\sigma_{résiduelle} = \sigma_q + \sigma_{th} \quad (1-3)$$

Dans le cas d'un substrat métallique, les contraintes mécaniques sont plus importantes dans un dépôt céramique que métallique puisque la différence des coefficients de dilatation thermique entre le substrat et le dépôt est plus importante mais aussi parce que le dépôt en céramique possède une faible conductivité thermique et que le gradient de température entre le substrat et le dépôt est plus important du fait d'une plus haute température de fusion.

En réalité ces contraintes sont relaxées par microfissuration de la céramique et par fluage dans les métaux. Dans ce dernier cas, elles peuvent être en partie relaxées par un chauffage à la température de recuit ( $0.4 T_{\text{fusion}}$ ) pendant quelques heures.

Les contraintes résiduelles causent de la compression et de la traction sur le dépôt céramique. Chacune de ces contraintes est à l'origine de différentes influences dont on parlera en détaille dans le chapitre 3 de ce manuscrit.

### V.2.2. Contraintes formées durant le service

#### a) Contraintes d'origine thermique

Les couches du système BT présentent différents coefficients de dilatations thermiques (CTE) qui induisent des contraintes mécaniques d'origine thermique au cours des cycles thermiques : le substrat présente un CTE d'environ  $12.10^{-6} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$  qui est supérieur à celui qui est mesuré pour la couche céramique ( $\approx 9.10^{-6} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$ ). La sous-couche ( $\approx 10.10^{-6} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$ ) est principalement choisie pour son CTE intermédiaire entre celui du substrat et de la couche céramique et limiter ainsi les contraintes d'origine thermique. Le coefficient de dilatation thermique de la couche TGO est d'environ  $5.10^{-6} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$ . La contrainte thermique formée sur la TGO est en état de compression et pourrait atteindre un maximum de 3 à 6 GPa à température ambiante [EMH\*-01]. Si le système BT se chauffe et se refroidi de façon répétée, une fatigue d'origine thermique se produira. Cette contrainte globale peut être calculée selon la formule 1-2.

#### b) Contraintes dues à la rugosité d'interface

La **Fig.1-9** montre l'interface rugueuse entre la couche céramique et la sous-couche en présence de la couche d'oxyde [HFJ-00]. En général, la rugosité de l'interface augmente la durée de vie des barrières thermiques car elle augmente l'adhésion entre les couches [HFJ-00]. Cependant, sa géométrie modifie la répartition des contraintes résiduelles à l'interface. On peut distinguer deux types de contrainte normale ( $\sigma_y$ ) à l'interface :

- $\sigma_y > 0$ , induisant de la traction et ainsi la formation de fissures plutôt à tel endroit;

-  $\sigma_y < 0$ , induisant de la compression plutôt à tel endroit. Ceci empêche la formation de fissures.

Lorsque l'amplitude de l'onde augmente, la valeur de  $\sigma_y$  augmente aussi. Nous examinerons au sein du chapitre 2 de ce manuscrit, au moyen des modèles numériques, l'influence de la forme et l'amplitude de l'interface sur la distribution des contraintes.

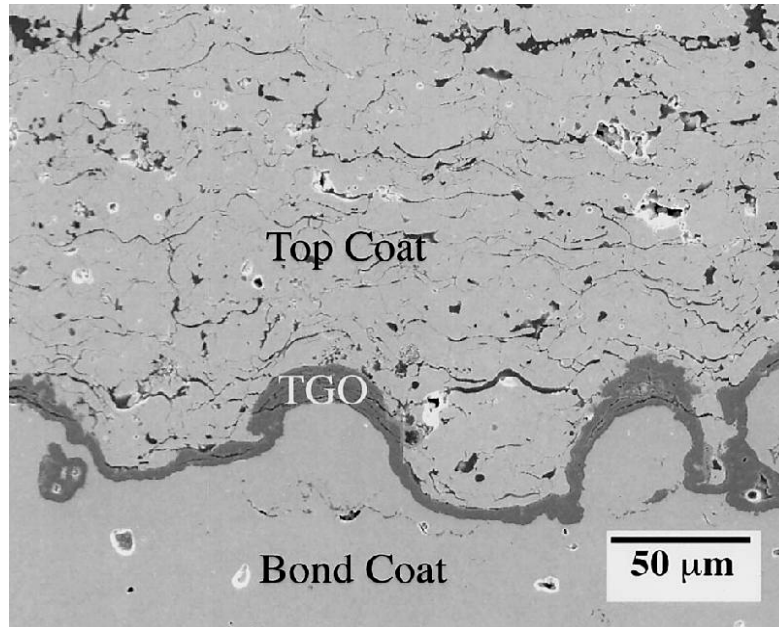


Figure.1-9. Interface rugueuse entre la couche céramique et la sous-couche en présence de la couche d'oxydes [HFJ-00].

### C) Contraintes dues à la croissance de la couche d'oxyde

En service, les températures atteintes et les cycles répétés favorisent la croissance de la couche d'oxyde (rapide aux premiers temps puis de plus en plus lente) et peuvent lui faire atteindre  $10\mu\text{m}$  [EMH\*-01]. Deux phénomènes interviennent, la diffusion de l'Aluminium contenu dans la sous-couche et le passage de l'oxygène à travers la zircone via les porosités interconnectées dû au fait de sa grande diffusivité ionique dans  $\text{ZrO}_2$ . A l'opposé, l'oxygène traverse très difficilement la couche d'alumine formée qui joue donc le rôle de barrière, retardant l'oxydation de la sous-couche.

Dans la bibliographie [EMH\*-01, ASM-05], suivant les conditions expérimentales et en particulier la température, toutes les lois de calcul d'épaisseur du TGO prévues par les différentes théories de l'oxydation ont été considérées : lois linéaires, paraboliques et cubiques. D'une manière générale l'accord entre les auteurs est satisfaisant à partir de  $1000^\circ\text{C}$ .

Dans le cadre de ce travail, nous avons utilisé une loi parabolique [RBA-04] dont l'équation est donnée par :

$$s = \sqrt{k'_p t_{ox}} \quad (1-4)$$

Où  $k'_p$  est la constante de vitesse de la loi parabolique. Cette constante de vitesse est une fonction croissante de la température. Dans cette étude, la valeur  $k'_p (1000^\circ\text{C}) = 1.5 \times 10^{-17} [\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}]$  est utilisée.

D'un point de vue bibliographique, de nombreuses études portent sur la mesure des contraintes liées à la croissance dans les couches d'alumine (par exemple : Tolpygo *et al.* [TDC-98], Schumann *et al.* [SSB\*-00], Atkinson *et al.* [ASW-00]). Dans la majorité des cas, « les contraintes de croissance » sont obtenues après mesure de la contrainte de compression à froid. Si on suppose l'oxyde élastique et un état de contrainte biaxiale, les contraintes de croissance (notées  $\sigma_{ox}$ ) sont obtenues par soustraction de la contrainte de compression due au refroidissement  $\sigma_o$  (donnée par l'équation (1-2)) à la contrainte mesurée à froid (notée  $\sigma_{mes}$ ) :

$$\sigma_{ox} = \sigma_{mes} - \sigma_o \quad (1-5)$$

#### d) Relaxation des contraintes par phénomènes de fluage et de plasticité

Les niveaux de contraintes dépendent évidemment des taux de charge introduits par grossissement de la couche d'oxydes et par dilatation thermique entre les couches ainsi qu'au taux des décharges liés au fluage et à la plasticité. Les différentes couches surtout la sous-couche commencent à se ramollir au-dessus de  $600^\circ\text{C}$  [Ant-04] en fonction de leur composition chimique et leur microstructure. Ainsi, le système complet est presque exempt de contraintes à haute température. Toutefois, lors du refroidissement rapide, la déformation plastique est irréversible et les couches sont alors contraintes de nouveau. Un nouvel état de contraintes se crée : des contraintes de compression apparaissent au sein de la céramique et des contraintes de traction dans le substrat et la sous-couche. Des contraintes extrêmes de traction, perpendiculaires à la surface apparaissent lors du refroidissement dans les "vallées" de l'aspérité et conduisent à l'écaillage de la couche céramique. Dans le chapitre 2, on discutera sur le comportement visco-élasto-plastique des couches.

Karlsson et Evans [KS-01] ont montré que l'évolution de la géométrie de la rugosité est liée au seuil de plasticité de la sous-couche. Si on dépasse ce seuil lors de la remontée en température, alors la géométrie de l'interface évolue continûment avec le nombre de cycles,

du fait de l'augmentation de la taille de zone plastifiée proche de l'interface. En revanche, He *et al.* [HEH-00] ont observé qu'il existe un rapport amplitude/période d'ondulation critique en deçà duquel on n'a pas évolution de la rugosité et que ce rapport est lié à la valeur de la contrainte d'écoulement de la sous-couche. Ce travail montre de plus que la présence de contraintes de croissance amplifie cet effet de rugosité.

### V.3. Modes de dégradation

Du fait de ces phénomènes (différence de coefficients de dilatation thermique, oxydation, rugosité à l'interface, fluage, frittage, .etc.), on rencontre quatre modes de formation de fissures pour les barrières thermiques élaborées par APS et deux modes de formation des fissures pour les BT élaborées par EB-PVD (*Fig.1-10* et *Fig.1-12*) [NPM-02].

#### V.3.1. Modes de dégradation des barrières thermiques lamellaire (APS)

Les contraintes formées à l'interface TGO/BC sont en traction au niveau des "sommets" des ondulations et sont en compression au niveau des "vallées". Quand la couche d'oxyde croit, la contrainte de traction augmente et cause la formation des fissures au sommet des ondulations à l'interface TGO/BC (mode I, *Fig.1-10* A, B).

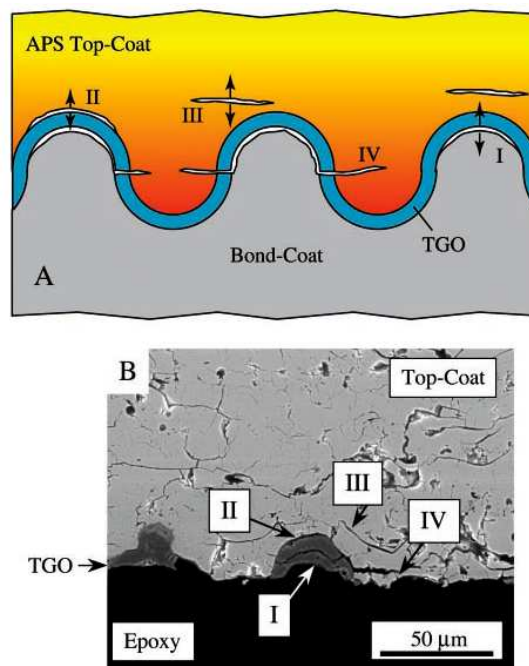


Figure 1-10. Mécanismes de formation de fissures d'une BT élaborée par projection plasma [NPM-02].

Dans le dépôt élaboré par APS, même si l'interface céramique/métal est rugueuse pour favoriser l'accrochage mécanique lors de l'élaboration, ses ondulations provoquent la formation de contraintes au voisinage de l'interface TBC/TGO : traction au sommet des ondes et compression aux vallées. La traction provoque une fissuration au sommet des pics (mode II **Fig.1-10** A, B). Le comportement fragile de la couche céramique favorise une fissuration au voisinage des sommets dans cette couche (mode III **Fig.1-10**). Généralement, les contraintes thermomécaniques causées par dilatation thermique sont localement dominantes à l'interface TGO/BC par rapport aux TBC et BC considérées individuellement. En revanche, lorsque l'épaisseur de TGO devient critique, la contrainte thermique de TGO/BC devient faible en comparaison aux TBC et BC. Donc on observe le comportement inverse sur l'ondulation : traction aux vallées et compression aux sommets des ondes ce qui permet le développement de la fissure initiée à l'interface TGO/BC à la couche céramique (mode IV **Fig.1-10**).

Il faut ajouter que la formation des fissures à la surface de la TBC et l'interface de TBC/TGO varie en fonction de la température et l'épaisseur de la couche céramique élaborée par projection thermique (**Fig.1-11**). D'après Choules *et al.* [CKT-01], quand l'épaisseur du dépôt ( $L_c$ ) augmente, le nombre de fissures diminue. La longueur de fissure,  $a$ , comparée à  $L_c$ , ( $a / L_c$ ) est plus importante quand  $L_c$  est plus petite (voir **Fig.1-11**). En augmentant la température pour les couches fines de céramique, on observe la formation d'un plus grand nombre de fissures verticales et plus longues mais pour les couches céramiques épaisses, des fissures parallèles à l'interface se produisent.

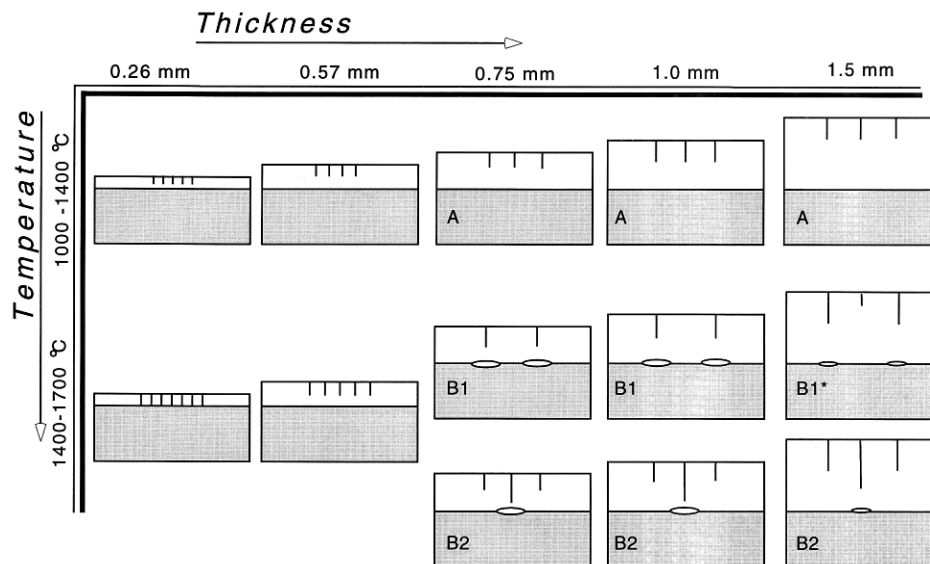


Figure 1-11. Effet de la température et l'épaisseur sur formation des fissures à la couche céramique élaborée par APS.



### V.3.2. Modes de dégradation de barrière thermique colonnaire (EB-PVD)

Deux modes de formation des fissures existent dans ce système aux interfaces TGO/BC et TBC/TGO [NPM-02]. Le mode I est similaire au mode I rencontré dans le cas BT lamellaire. Dans le mode II (*Fig.1-12*), la fissure se forme à l'interface TBC/TGO et se propage dans la TGO. L'origine de ce mécanisme peut être attribuée à l'un des deux phénomènes suivants : i) la rugosité progressive à la surface de la couche d'oxyde due à un glissement de la sous-couche lors de cyclage thermique; ii) l'accélération de la croissance du TGO grâce à la fissure locale.

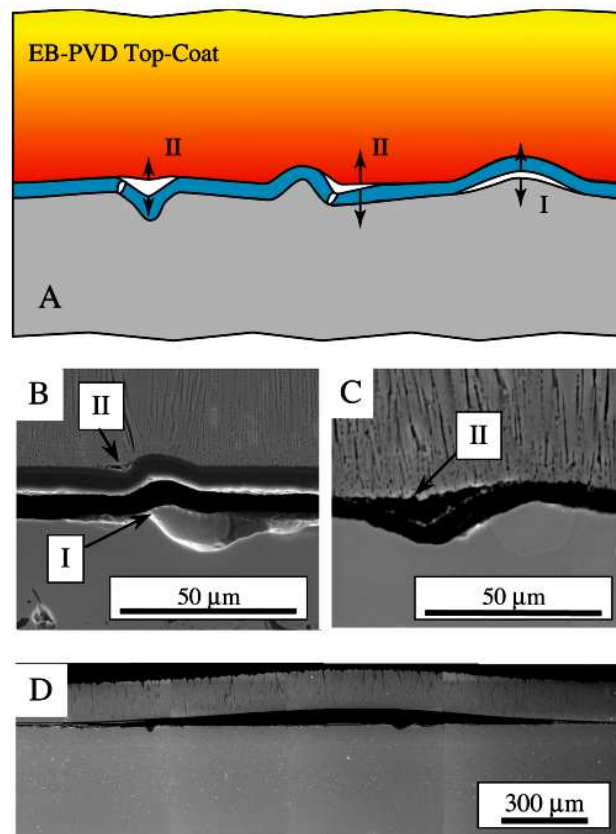


Figure 1-12. Mécanismes de formation des fissures à la BT élaborée par EB- PVD [NPM-02].

## VI. Modélisation de l'endommagement dans les barrières thermiques

Pour mieux comprendre les mécanismes d'endommagement dans les barrières thermiques, la modélisation est devenue une aide précieuse. Comme on l'a vu dans les sections précédentes, les mécanismes responsables de l'initiation de l'endommagement sont

essentiellement liés à la forme de la rugosité des interfaces, à la croissance de la couche d'oxyde, à la différence de coefficients de dilatation thermiques entre les couches ainsi qu'au fluage et à la plasticité. Le modèle doit être capable de décrire l'évolution de l'endommagement en fonction de la croissance de la couche d'oxyde et des différents chargements appliqués. Le choix des lois de comportement utilisées, pour chaque couche, est bien sûr très important du fait des mécanismes très locaux intervenant dans le comportement du système.

Dans cette partie, nous allons présenter deux types de modélisation des barrières thermiques, décrites dans la bibliographie et basées respectivement sur une approche analytique et numérique.

## VI.1. Modélisation analytique

Hsueh et Fuller [HF-00] ont développé un modèle analytique pour lequel les interfaces (convexe et concave) sont représentées par trois couches circulaires superposés. La sous-couche (phase 1), la couche d'oxyde (phase 2) et la couche céramique (phase 3) sont décrites sur la **Fig.1-13** (rayon  $a$ ,  $b$  et  $c$ ) afin de modéliser l'interface convexe. Dans le deuxième cas, les phases 1, 2 et 3 sont respectivement TBC, TGO et BC dans le but de modéliser l'interface concave. Les contraintes thermiques résiduelles se développent du fait du changement de température dans le système à cause de la différence entre les coefficients de dilatation thermique des trois phases. Ces contraintes à l'interface TBC/TGO et TGO/BC changent en fonction de l'épaisseur de la croissance de la couche d'oxyde.

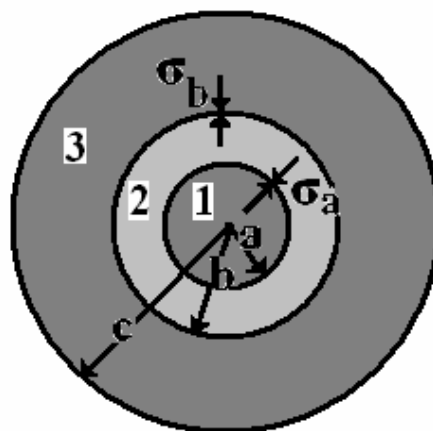


Figure 1-13. Schéma du modèle analytique à trois couches circulaires proposées par Hsueh [HF-00].

Hsueh a montré que pour le modèle convexe, les contraintes présentes à l'interface TGO/BC sont en traction et leurs concentrations augmentent lors du grossissement de la couche d'oxyde. En revanche, la contrainte radiale à l'interface TBC/TGO est en traction si  $(b-a)/a < 0.75$  et elle est en compression si  $(b-a)/a > 0.75$ .

Dans le cas de la zone concave de la rugosité, la contrainte radiale à l'interface TGO/BC est en compression et la contrainte présente à l'interface TBC/TGO devient moins compressive en fonction de la croissance de la couche d'oxyde.

Une analyse des contraintes radiales en fonction des paramètres géométriques de la rugosité de la sous-couche a été obtenue par Ahrenes *et al.* [ALV\* -04]. Il a été clairement démontré que l'influence de la courbure de l'interface sur le champ des contraintes ne peut pas être calculée à l'aide de trois couches circulaires concentriques et que le pic de la sous-couche ne peut être modélisé comme une inclusion métallique dans une matrice céramique. Les modèles d'écaillage analytique présentés par Evans et Lobb [EL-84] n'ont pas permis d'établir de critères de fissuration pertinents et ne prennent pas en compte les évolutions physico-chimiques au sein du matériau.

## VI.2. Modélisation numérique

Ayant observé les difficultés des méthodes analytiques à prédire le comportement mécanique d'un système BT, les modèles numériques ont été développés pour permettre des études détaillées des champs de contraintes et de déformations tout en tenant compte des phénomènes de propagation de chaleur en régime instantané. En générale, une modélisation numérique est basée, en premier lieu, sur un choix du domaine mathématique représentatif de la structure en question. Il s'en suit un autre choix concernant les propriétés des matériaux définissant le système et respectueux des conditions de fonctionnement. D'un autre côté, les conditions aux limites sont nécessaires afin de faciliter l'homogénéisation des résultats au domaine global. Enfin, la technique de résolution numérique adoptée permettra, une fois le maillage et le choix des éléments réalisé, de résoudre les équations régissant le phénomène en question et de fournir au moteur graphique associé au post processeur la possibilité d'afficher les résultats.

Dans les deux paragraphes qui suivent, nous allons nous intéresser à l'étude bibliographique des différentes méthodes de choix du domaine de résolution et des propriétés des matériaux. Pour finir nous consacrerons le dernier paragraphe à l'analyse de l'influence des conditions de fonctionnement.

### VI.2.1. Choix du domaine de calcul

Les problèmes de la mécanique introduisent des entités aux échelles très diverses telles que : atome, molécule, grain, inclusion, fibre, ..., outil et pièce. Pour une majorité de problèmes, une analyse considérant un comportement moyenné sur l'ensemble du système isolé à l'échelle du système est suffisante. Cependant, certains problèmes soulevés par les avancées d'élaboration des matériaux, ou bien de façon plus classique dans le domaine des procédés de fabrication, nécessitent une analyse plus fine avec une prise en compte du couplage entre le comportement des entités à l'échelle inférieure (que nous désignerons dorénavant par l'échelle microscopique) et la réponse globale du système (que nous désignerons dorénavant par l'échelle macroscopique). Ce genre de prévision, nécessite des modèles macroscopiques impliquant la description microscopique des phénomènes physiques.

A ce stade une modélisation multi-échelles est préconisée. Une étape importante de cette modélisation consiste à identifier les propriétés du problème posé, à partir desquelles on pourrait tirer profit pour concevoir des stratégies adaptées. Ainsi, il est utile de trouver une classification des problèmes introduisant la notion de multi-échelles selon leurs propriétés communes. On rencontre dans la littérature [WEL\* -00] la classification suivante :

- *Problèmes de type A* : Ce sont les problèmes qui contiennent des défauts ou des singularités isolées tels que des fissures, dislocations, chocs ou lignes de contact. Pour ces problèmes, un modèle macroscopique adéquat est suffisant dans le majeure parti du domaine, le modèle microscopique est seulement nécessaire dans le voisinage des défauts ou des singularités.

- *Problèmes de type B* : Ce sont les problèmes pour lesquels un modèle macroscopique approprié existe pour un ensemble de variables macroscopiques correctement choisis. Dans ce type de problèmes, le rôle de la modélisation multi-échelles est d'effectuer des simulations

macroscopiques sans utiliser des relations constitutives à cette échelle. L'information macroscopique nécessaire est extraite à partir de modèles microscopiques sous-jacents.

- *Problèmes de type C* : Ce sont les problèmes qui ont des propriétés du type A et du type B.

Un des objectifs importants de l'étude d'un matériau non homogène est la déduction du comportement global "effectif" ou "apparent" du matériau à partir du comportement des constituants, du comportement des interfaces entre elles et de l'arrangement géométrique des phases. C'est ce qu'on appelle l'homogénéisation. Il existe plusieurs approches de l'homogénéisation. Nous nous attacherons à présenter, de manière non exhaustive, les méthodes les plus classiques.

Les approches analytiques sont historiquement les plus anciennes, les formulations utilisées considèrent un comportement élastique linéaire. L'extension des formulations au domaine non linéaire n'est pas triviale et reste un domaine ouvert de recherche.

Globalement les approches analytiques de la théorie de l'homogénéisation se divisent en deux grandes familles :

- *Les approches asymptotiques* :

L'approche asymptotique consiste essentiellement en l'étude de l'influence de petites variations des paramètres sur la solution du problème global. Les méthodes asymptotiques sont issues de la communauté des mathématiques appliquées. Dans ce type d'approche on fait l'hypothèse que les échelles sont parfaitement séparées, que le milieu est périodique. De plus, on considère les champs microscopiques comme une perturbation des champs macroscopiques. Ceci permet de réécrire les équations du problème sur les deux échelles, pour obtenir la solution en résolvant ce jeu d'équations.

- *La théorie du champ moyen* :

Cette approche a été initialement proposée par les mécaniciens. Tout comme pour l'approche asymptotique on fait l'hypothèse que les échelles sont infiniment séparées, mais en introduisant un niveau intermédiaire, le Volume Élémentaire Représentative "VER". Le VER doit être suffisamment grand pour être statistiquement représentatif du milieu et assez petit pour qu'à l'intérieur les variations des champs macroscopiques soient négligeables. On utilise le VER pour avoir une approximation des champs de déformation et de contrainte sous des

conditions aux limites adéquates. Ceci nous permet de remonter à un comportement effectif du milieu homogène. Cette approche s'applique aux milieux hétérogènes aléatoires et s'appuie sur 3 étapes majeures : Représentation, Localisation, Homogénéisation.

**Représentation** : Travailler sur des milieux hétérogènes impose d'avoir une représentation d'une certaine forme de base de ces derniers, on définit alors un volume d'homogénéisation, le VER ou Volume Élémentaire Représentatif. Dans le cas idéal, le VER devrait être choisi pour être un volume élémentaire approprié, c'est un volume secondaire statistiquement représentatif de la géométrie microscopique du matériau (**Fig.1-14**). Son choix est conditionné par 3 paramètres :

- $d$  : la taille caractéristique des hétérogénéités et des propriétés sujettes à l'analyse ;
- $L$  : la taille de la structure à analyser ;
- $l$  : la taille du VER proprement dit.

La condition entre les symboles dénotés :

$$d \ll l \ll L$$

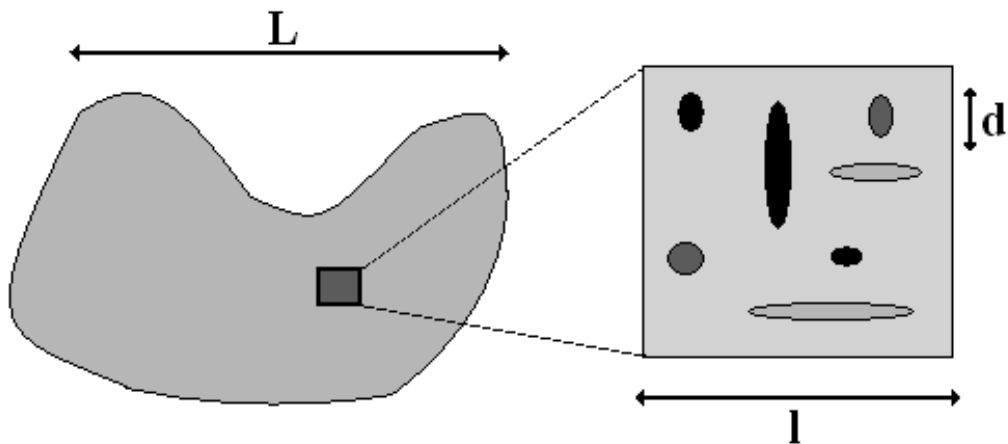


Figure 1-14. Milieu hétérogène et son VER, les différentes échelles.

**Localisation** : Le fait que le VER soit une image statistique et incomplète de la microstructure considérée nous interdit d'affecter des caractéristiques mécaniques précises à tout point du VER, de ce fait la détermination des champs locaux n'a pas de solution unique. En outre le problème est *mal posé* dans le sens où on doit résoudre un problème de structure sans véritables conditions aux limites ; à la place, nous considérons des conditions de moyenne sur les variables locales. En pratique on préfère substituer un problème plus classique en imposant des conditions homogènes sur le contour  $dV$  qui respectent la condition

de moyenne ;  $\sigma^0$  et  $\varepsilon^0$  sont les valeurs macroscopiques de la contrainte et de la déformation au point matériel que représente le VER.

**Homogénéisation** : Cette étape vise à trouver l'expression du comportement du milieu homogène équivalent. Ceci s'effectue en exprimant, grâce à la loi de comportement locale et aux conditions aux limites homogènes sur le contour, les champs localisés fonction de la variable microscopique  $x$ . On effectue par la suite une opération de moyenne sur la variable microscopique, couramment définie comme :

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} \varepsilon(x) dV \quad (1-6)$$

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{V_{VER}} \int_{VER} \sigma(x) dV \quad (1-7)$$

On accède ainsi aux champs macroscopiques associés et on peut à partir de là définir le module d'Young ou le comportement effectif qui servira au calcul macroscopique.

Dans la mise en place du VER, deux méthodes peuvent être employées avec tout ce qu'on peut leur attribuer comme avantages et inconvénients. La première méthode, consiste à utiliser un VER obtenu grâce à une observation microscopique par l'intermédiaire, par exemple, d'un microscope électronique à balayage (MEB) suivi d'un seuillage de niveau de gris pour ensuite réaliser une vectorisation des frontières en segments linéaires. Ces frontières délimitent respectivement les défauts, les inclusions et la matrice. La vectorisation permet le passage à l'étape suivante dédiée à la mise en place d'un domaine mathématique à frontière connue et contenant un nombre fini de points. Cette opération s'appelle le maillage (Voir **Fig.1-15** Grandjean *et al.* [GAS-06]). Les logiciels les plus connus dans ce domaine se réfèrent aux travaux de Staicu au CEA [Sta-00] et aussi aux travaux de Hsueh *et al.* [HHL\* -99] (**Fig.1-16**), Michlik et Berndt [MB-06] en utilisant un logiciel dénommé OOF (Object-Oriented Finite-element analysis) [LCF-98].

Les inconvénients de cette méthode peuvent être attribués aux faits que le prélèvement aléatoire de la zone d'observation ne permet en aucun cas au concepteur de maîtriser les caractéristiques du modèle en termes de taux de porosité ou d'inclusions ou bien en termes de respect de la granulométrie de l'échantillon de départ dans le cas des matériaux fortement hétérogènes.

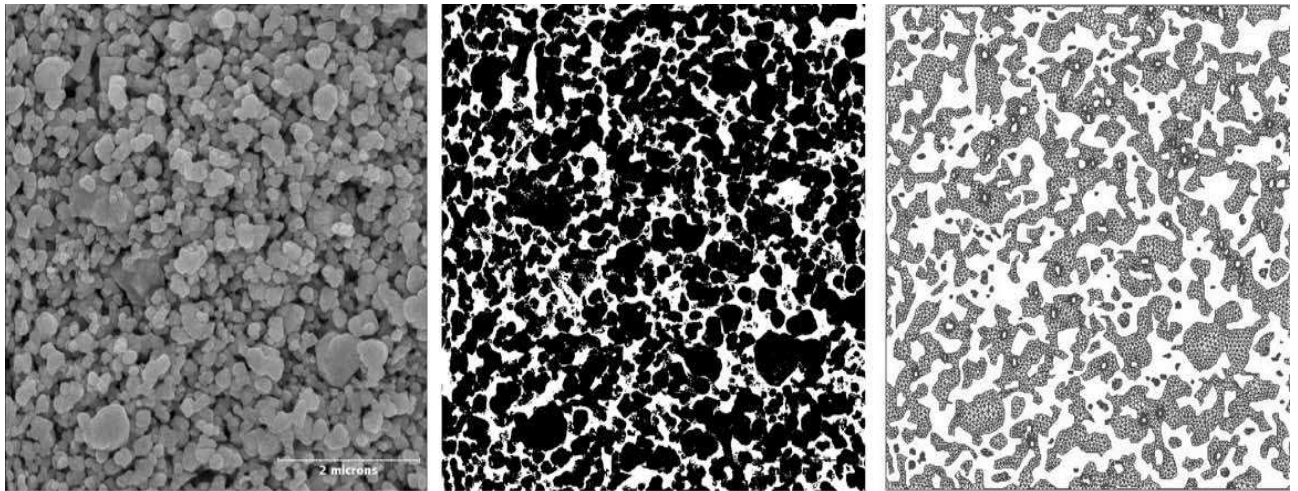


Figure 1-15. Micrographie d'un matériau poreux suivi d'un seuillage et d'un maillage (d'après les travaux de Grandjena et al [GAS-06]).

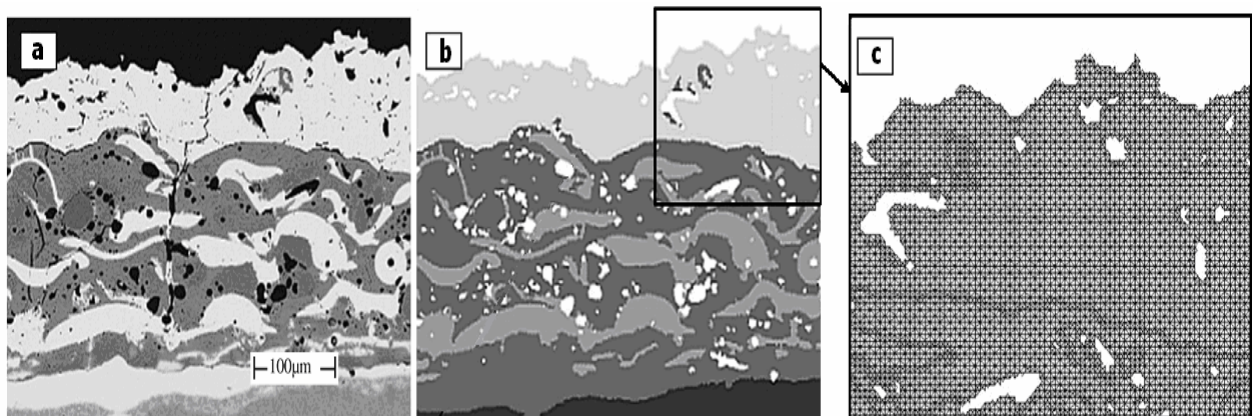


Figure 1-16. Micrographie d'une couche céramique 8% YSZ (a), modèle crée par PPM2OOF (b), maillage associé à une zone du modèle (c) [MB-06].

Pour apporter une solution aux problèmes soulevés précédemment, une deuxième méthode a été développée au sein du laboratoire GEMH de l'ENSCI et qui consiste à réaliser des VER grâce à une application informatique écrite en langage C++ (M.O.A, Modeleur d'Objets Aléatoires). Cette application est capable de gérer les formes et les taux de porosité dans un matériau poreux ainsi qu'une granulométrie donnée dans le cas d'un matériau hétérogène. Les modèles peuvent être en deux ou en trois dimensions (voir *Fig.1-17*)

Dans le cadre de notre travail de thèse nous avons choisi d'utiliser la deuxième méthode pour des raisons de facilité de mise en œuvre et de maîtrise des paramètres géométriques des VER.



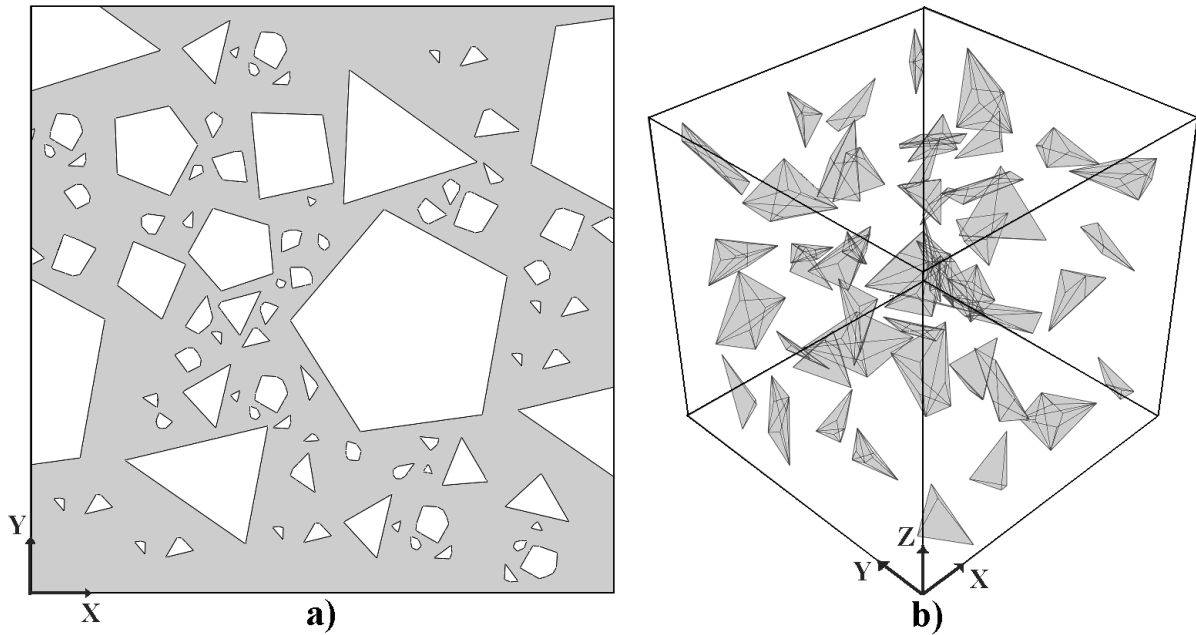


Figure 1-17. Exemples de génération d'objets avec M.O.A, a) en 2D et b) en 3D.

### VI.2.2. Choix des propriétés des matériaux

Une fois le VER défini, les propriétés mécaniques et thermiques des matériaux existant dans le VER doivent être obligatoirement spécifiés. Les deux paragraphes qui suivent, décrivent des travaux présentés dans la bibliographie et où les propriétés mécaniques des matériaux ont été considérées dans le domaine élastique linéaire ou bien viscoélastique.

#### A) Matériaux ayant un comportement élastique linéaire

Des études numériques basées sur l'hypothèse d'un comportement élastique linéaire dépendant de la température ont été réalisés par Chang en 1987 [CPM-87]. Dans ce modèle toutes les couches avaient des propriétés d'élasticité et la contrainte était formée du fait des différences de coefficient de dilatation thermique entre les couches. Après refroidissement du système de haute température à température ambiante, une contrainte de traction radiale au sommet des rugosités était observée. Les contraintes obtenues étaient largement supérieures à celles obtenues expérimentalement à cause de la non prise en compte du fluage et de la plasticité. Ils ont aussi montré que les contraintes formées dues à la croissance de la TGO ont un effet important sur la durée de vie du revêtement puisqu'elles augmentent avec l'épaisseur du TGO et conduisent à remplacer la traction par la compression au sommet des rugosités et de la compression par de la traction en creux de la vallée de la TBC.

A la suite de leur travail de type analytique, Hsueh *et al.* [HFJ-00] ont étudié numériquement le comportement thermomécanique du système barrière thermique. Leur but été d'examiner :

- 1) l'influence de la forme de l'interface,
- 2) l'influence de l'amplitude,

Pour le rôle de la forme de l'interface, ils ont choisi deux formes : rectangulaire et semi-circulaire. Ils ont constaté que les contraintes obtenues dans le cas d'une forme en demi-cercle étaient plus critiques comparées à celles obtenues sur l'interface rectangulaire. Ils ont également montré que lors de la croissance de la couche d'oxyde, la contrainte formée au sommet de la TBC se transforme d'un état de traction (150 MPa) en compression (-100 MPa) et dans la vallée elle passe d'un état de compression (-200 MPa) en état de traction (100 MPa) en fonction de son amplitude. Leur étude se termine par une comparaison des résultats numériques aux résultats analytiques qui montre que la valeur de la contrainte n'est pas la même mais que l'évolution de la distribution des contraintes en fonction du grossissement de la TGO est la même.

Zhang *et al.* [ZXW\*-06] ont examiné l'influence de la forme de l'interface et la croissance de la couche d'oxyde en considérant tous les matériaux isotropes et élastiques. Dans le cadre de leur étude, ils ont adapté les modèles analytiques proposés par Hsueh et Fuller [HF-00] puis ont comparé leurs résultats numériques aux résultats analytiques. Une bonne corrélation a été observée.

### B) *matériaux ayant un comportement viscoélastique*

Nous savons que le système barrière thermique n'a pas un comportement purement élastique. Les couches ayant un comportement plastique et viscoélastique plus marqué sont la couche d'oxyde et la sous-couche métallique [XJG-06]. Ces propriétés compliquent l'état des contraintes dans la BT.

Les propriétés viscoélastiques de la couche céramique et la sous-couche ont été prises en compte par Freborg *et al.* [FFB\*-98]. Ils ont montré qu'en absence de la couche d'oxyde, l'apparition du fluage à haute température (à partir de 1000°C) sur la sous-couche et la couche céramique induit une contrainte radiale de traction au sommet (~80 MPa) et de compression

dans la vallée (~-50 MPa). En revanche, le processus d'oxydation transfère la contrainte en contrainte de traction dans la vallée (~150 MPa) et repousse la zone de compression vers le sommet de la rugosité (~-17 MPa). Ils ont prévu le scénario de dégradation de la BT en regardant le taux et l'état des contraintes formées sur le système. Dans un premier temps, en l'absence de la couche d'oxyde la fissure peut se propager vers la vallée mais elle s'arrête aussitôt à cause de la présence de la compression dans cette zone. Après 51 cycles thermiques correspondant à une couche d'oxyde d'environ 1  $\mu\text{m}$ , une contrainte de tension apparaît dans la vallée. Cette dernière est suffisamment importante pour permettre à la fissure de se propager dans cette zone. Cette fissure va se joindre à la fissure déjà propagée au voisinage du sommet de l'interface. Ces fissures peuvent causer de l'écaillage partiel ou de l'endommagement total au système lors du cyclage thermique.

L'influence de la structure rugueuse à l'interface pour différentes épaisseurs de la couche d'oxyde, sur la distribution des contraintes a été étudié par Pincera *et al.* [PAA-00]. Ils ont utilisé les mêmes propriétés et le même cycle thermique que Freborg *et al* [FFB\* -98]. La rugosité de l'interface est périodique de longueur d'onde égale à 50  $\mu\text{m}$  avec une amplitude constante au sommet égale à 10  $\mu\text{m}$  et une amplitude variant dans la vallée (4  $\mu\text{m}$ , 10  $\mu\text{m}$  ou 16  $\mu\text{m}$ ) (voir **Fig.1-18**). Dans la première étape, ils ont étudié l'influence des différentes amplitudes en l'absence de la couche d'oxyde. Les résultats montraient qu'après refroidissement du système, une augmentation de l'amplitude de l'interface TBC/BC entraîne une augmentation du niveau de contrainte présente dans la vallée (de -55 MPa pour 4  $\mu\text{m}$  amplitude à -153 MPa pour 16  $\mu\text{m}$ ) mais peu d'influence sur l'augmentation de la valeur de contrainte au sommet (de 59 MPa pour 4  $\mu\text{m}$  amplitude à 69 MP pour 16  $\mu\text{m}$ ). Puis, dans une deuxième étape, ils ont indiqué que la croissance de la couche d'oxyde a un rôle important sur la distribution de contrainte dans la BT. Pour une fine couche d'oxyde égale à 1  $\mu\text{m}$ , le maximum de contrainte de traction (52 MPa) se forme au sommet de la couche de céramique à une distance de 2  $\mu\text{m}$  au-dessus de l'interface TBC/TGO. Cette contrainte devient moins critique à l'interface avec une valeur de 42 MPa et devient compressive dans la vallée. Ils ont déclaré que pour une fine couche d'oxyde, la naissance d'une fissure au sommet de la couche céramique est probable et cette fissure peut se propager durant le service et pourrait entraîner finalement la fissuration de la couche céramique.

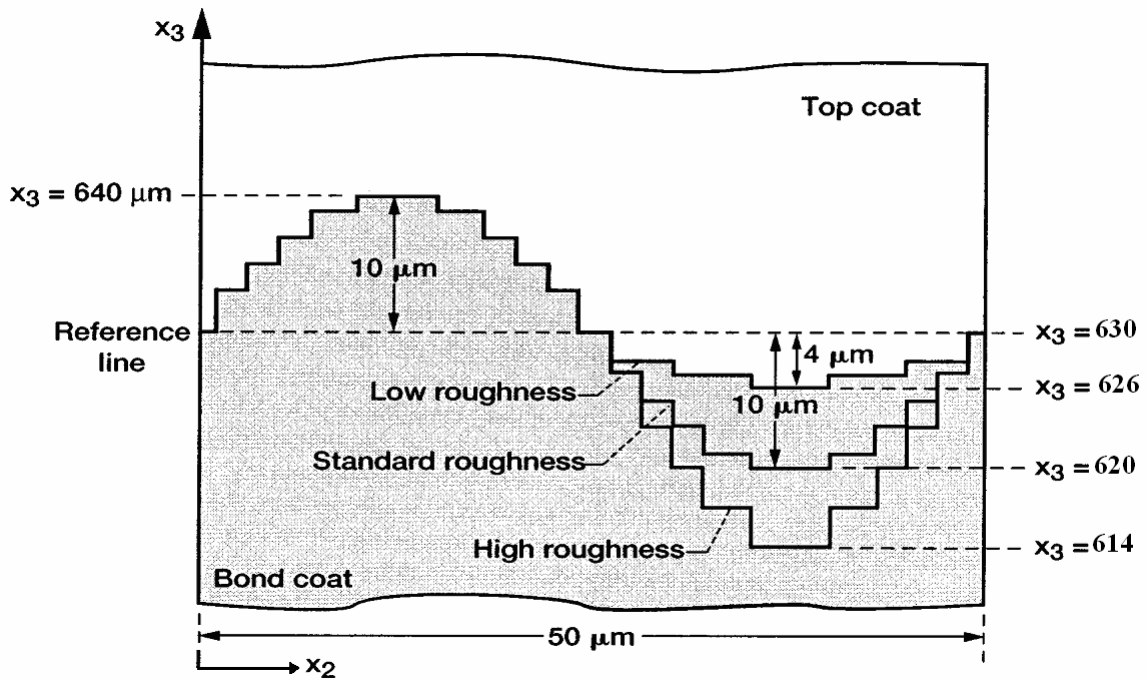


Figure 1-18. Géométrie utilisée à l'interface dans le cadre de travail de Pincera *et al.* [PAA-00].

L'utilisation d'une loi de diffusion, modélisant le processus d'oxydation et son influence sur le développement de la contrainte a été effectuée par Busso *et al.* [BLS-01]. Ils ont prédit la durée de vie d'un système élaboré par APS en utilisant un facteur d'endommagement  $D$  ( $0 < D < 1$ ), qui vaut 1 lorsque l'endommagement du système est total. L'endommagement dépend de la contrainte de traction maximum qui elle-même dépend de différents mécanismes : oxydation, frittage, cycle thermique et fluage. Quand le cycle thermique est court, la déformation reste élastique mais quand le cycle thermique est long, la limite d'élasticité de la BT diminue et une déformation plastique se forme sur le système. Le modèle utilisé dans cette étude avait une interface sinusoïdale avec une longueur d'onde égale à  $48 \mu\text{m}$  et une amplitude égale à  $17 \mu\text{m}$ . Après 50 cycles thermiques, l'épaisseur de la couche d'oxydes arrivait à  $3 \mu\text{m}$ . Après refroidissement, une zone de traction ( $328 \text{ MPa}$ ) apparaît proche du sommet de la TBC et une autre égale à  $338 \text{ MPa}$  proche du sommet de la BC.

Bäker *et al.* [BRH-05] ont montré que le système multicouche se charge par le grossissement de la couche d'oxyde, par la différence des coefficients de dilatation thermique entre les couches et par la géométrie de l'interface. Il se décharge par les phénomènes de fluage et de plasticité à haute température. Pour simuler le système BT, ils ont utilisé un modèle avec une interface sinusoïdale de  $24 \mu\text{m}$  de longueur d'onde et de  $5 \mu\text{m}$  d'amplitude.

La loi du comportement du fluage faisait appel à la forme simple :  $\dot{\varepsilon}_{cr} = A \sigma^n$  et la croissance de la couche d'oxyde est modélisée par la loi de Tamman [Bür-98]. Dans la première étape de leur travail, ils ont présenté les résultats obtenus pour un modèle purement élastique. Puis, ils ont introduit séparément le fluage au niveau des différentes couches. Ensuite, ils ont considéré du fluage dans les couches TGO, TBC et BC en même temps et ont comparé les résultats au cas purement élastique. Enfin, ils ont examiné la vitesse du fluage sur la formation des contraintes. Comme résultat, ils ont déclaré que le fluage des couches TGO, TBC et BC a un rôle important sur la durée de vie de la BT car il diminue les contraintes de traction radiale imposée sur ces couches. Cette réduction dépend de la vitesse du fluage qui influence très fortement la contrainte formée après refroidissement du système. En conséquence, la valeur de la contrainte estimée pour une vitesse de fluage élevée est moindre par rapport à celle mesurée dans le cas purement élastique ou bien le cas d'une vitesse de fluage lente. D'après ces résultats, l'épaisseur critique de la couche d'oxyde où l'endommagement apparaît passe de  $4 \mu\text{m}$  à  $7$  ou  $10 \mu\text{m}$ .

Aktaa *et al.* [ASM-05] ont examiné l'influence des différents paramètres sur la distribution des contraintes et ont prévu l'orientation de l'ouverture de la fissure aux interfaces et dans la couche céramique et la couche d'oxyde. Ils ont présenté un modèle numérique fonctionnant à température homogène sur tout le système et dans lequel uniquement la sous-couche est soumise à un comportement viscoplastique. Le modèle était constitué de quatre couches de forme sinusoïdale avec une longueur d'onde égale à  $60 \mu\text{m}$ . Afin d'examiner l'influence de la rugosité, l'amplitude a varié entre  $5$  et  $30 \mu\text{m}$ . Pour modéliser le fluage, la loi utilisée était à la forme simple :  $\dot{\varepsilon}_{cr} = A \sigma^n$  et pour la croissance de la couche d'oxyde, la loi était celle de Mannsmann [Man-95] :  $s_{ox} = \sqrt[3]{k t_{ox}}$

Premièrement, ils ont examiné l'influence de l'amplitude de l'interface, puis l'influence de la croissance de la couche d'oxyde sur l'état et la valeur de la contrainte formée dans la couche céramique. Leurs résultats montrent que la hauteur de la rugosité de l'interface et l'épaisseur de la couche d'oxyde joue un rôle important sur la distribution des contraintes. En utilisant la méthode MCCI (Modified Crack Closure Integral), ils ont constaté qu'une microfissure située au pic de la couche céramique peut se développer sous un angle de  $0^\circ$  à  $77^\circ$  par rapport à l'interface en fonction de l'amplitude de celle-ci. Pour une amplitude inférieure à  $10 \mu\text{m}$ , cette fissure peut se propager parallèlement à l'interface ( $0^\circ$ ). Ils ont

vérifié la coalescence entre deux fissures propagées sur deux ondes voisines (une onde ayant une amplitude  $<10 \mu\text{m}$  et l'autre ayant une amplitude  $>10 \mu\text{m}$ ) en fonction de l'épaisseur de la couche d'oxyde. Ils ont proposé différents scénarios de coalescence entre les fissures qui peuvent conduire à la delamination de la couche céramique et l'endommagement complet de la BT.

Bialas [Bia-08] a présenté un modèle plus proche de la réalité en étudiant l'influence des propriétés thermomécaniques de chaque couche. La sous-couche a un comportement viscoplastique et les autres couches ont des propriétés viscoélastiques. Il a simulé la propagation d'une fissure à l'interface TGO/BC par la méthode d'éléments cohésifs. Ensuite, il a examiné l'influence de l'ouverture de la fissure sur la redistribution des contraintes de la couche céramique et de la couche d'oxyde. En plus, l'influence du cycle thermique a été vérifiée. Comme résultat il a montré qu'en ignorant la propagation de fissure dans le modèle et en respectant un temps d'oxydation identique, la distribution des contraintes sur une BT lors d'un cycle simple est quasiment la même que celle obtenue pour plusieurs cycles.

Dans cette thèse, nous avons choisi des propriétés dans le domaine viscoélastique. Le fluage sera calculé par la loi simple et le grossissement par la loi de Tamman [Bür-98]. Le détail du travail de simulation numérique sera présenté dans les chapitres 2 et 3.

### VI.2.3. Conditions de fonctionnement (conditions aux limites)

Dans tous les travaux numériques cités ci-dessus, l'intérêt des auteurs porte sur l'importance de l'influence des paramètres géométriques et/ou du comportement des matériaux sur les champs de contraintes calculés à la fin du cycle thermique. Les modèles considèrent une température homogène sur toutes les couches de la BT. La valeur de cette température varie à chaque étape de la simulation. Dans le deuxième chapitre de cette thèse, nous allons nous inspirer du travail d'Akta *et al.* [ASM-05], Bialas [Bia-08] et Bäker *et al.* [BRH-05] afin de réaliser un modèle de départ et valider les résultats obtenus pour ensuite proposer un modèle plus réel et plus complexe dans les autres chapitres. Notre modèle considère une température homogène et des propriétés thermomécaniques parmi les plus proches de la réalité. Nous vérifierons l'influence des différents paramètres sur la formation de la contrainte dans le système BT après refroidissement. Puis, nous validerons nos résultats en les comparant aux résultats obtenus par ces auteurs.

Simplifier le modèle pour gagner du temps de calcul en travaillant dans un environnement de température homogène est une bonne idée, mais cela implique un éloignement des conditions réelles de fonctionnement. Dans un système BT, la chaleur se propage à travers le système par l'intermédiaire de la couche céramique et génère un gradient de température à travers les différentes couches. Ce flux de chaleur peut influencer le taux de fluage ainsi que le grossissement de la couche d'oxyde. De plus, dans les travaux précédents, le rôle des contraintes résiduelles formées durant d'élaboration du système a été négligé. Pour ces raisons, dans le cadre de notre travail, nous nous sommes intéressés à ce type de contraintes et aux simulations numériques du système BT en phase d'élaboration. Parmi ces travaux, on peut citer ceux de Bengtsson et Persson [BP-97], Widjaja *et al.* [WLH-03] et Teixeira [Tei-02].

Bengtsson et Persson [BP-97] ont déterminé des contraintes résiduelles lors de l'élaboration de la barrière thermique par technique APS, expérimentalement ainsi que numériquement. Tout d'abord, ils ont estimé la contrainte formée sur le substrat par le sablage et ont trouvé une valeur aux alentours de -200 MPa. Après dépôt de la couche céramique, ils ont trouvé que cette dernière est en compression (environ -15 MPa) et la sous-couche est en tension (environ 100 MPa). Les résultats numériques ont été comparés aux données expérimentales montrant un bon accord.

Widjaja *et al.* [WLH-03] ont vérifié l'influence des différentes températures du substrat et des différents coefficients de convection afin d'estimer les valeurs des contraintes résiduelles sur la couche céramique à la fin de l'étape de dépôt. Ils ont montré que la température des matériaux au-dessous de la céramique (température du substrat) a une influence non négligeable. Quand la température du substrat augmente, la différence entre la température du dépôt et celle du substrat est réduite, alors les contraintes formées deviennent moins critiques.

Teixeira [Tei-02] a estimé les contraintes résiduelles formées sur la couche céramique par la méthode des éléments finis. Il a montré l'influence des différentes contraintes résiduelles sur la formation des fissures parallèles à l'interface et entre les lamelles ainsi que sur les fissures normales à l'interface d'une lamelle individuelle.

Les contraintes résiduelles et leurs effets sur la distribution des contraintes en service seront étudiés dans le chapitre 3 de ce manuscrit.

Aucune des études citées ci-dessus ne traite de la simulation de l'écaillage de la BT à l'échelle des interfaces. Dans le chapitre 4 nous allons proposer une méthode afin de modéliser la propagation des fissures sur une structure massive en utilisant les modèles obtenus au chapitre 3. Finalement, dans le but de modéliser une coalescence entre les fissures et ses effets sur l'endommagement du système nous présenterons une structure lamellaire pour la couche céramique.

Le Tableau I-2 résume les différents points d'intérêts des travaux les plus couramment rencontrés dans la littérature.

Travail de	Propriété			Température		Forme de l'interface	Epaisseur de TGO (t) $\mu\text{m}$	Contrainte (MPa) sur la couche TBC		
	Elastique	Fluage	Plastique	Uniforme	Non uniforme			Sommet	Milieu	Vallée
Hsueh <i>et al.</i> [HFJ-00]	Oui	-	-	Oui	-	Rectangulaire et demi-cercle	(t/A)=0.8	-100	-	100
Freborg <i>et al.</i> [FFB <sup>s</sup> -98]	Oui	TBC et BC	-	Oui	-	Sinusoidal A= 10 $\mu\text{m}$ $\lambda= 30 \mu\text{m}$	1 $\mu\text{m}$	-17	-	150
Pindera <i>et al.</i> [PAA-00]	Oui	TBC et BC	-	Oui	-	Sinusoidal A= (4, 10, 16 $\mu\text{m}$ ) $\lambda= 50\mu\text{m}$	1 $\mu\text{m}$	69	-	-153
Busso <i>et al.</i> [BLS-01]	Oui	Toutes les couches	BC	Oui	-	Sinusoidal A= 17 $\mu\text{m}$ $\lambda= 48 \mu\text{m}$	3 $\mu\text{m}$	328	-	-
Bäcker <i>et al.</i> [BRH-05]	Oui	TBC et TGO	BC	Oui	-	Sinusoidal A= 5 $\mu\text{m}$ $\lambda= 24 \mu\text{m}$	3 $\mu\text{m}$	-300		50
Actaa <i>et al.</i> [ASM-05]	Oui	BC	BC	Oui	-	Sinusoidal avec différent $\lambda= 30 \mu\text{m}$ , A=(5, 10, 20, 30 $\mu\text{m}$ )	t=3 $\mu\text{m}$ A=10 $\mu\text{m}$	100	400	-800
Bialas [Bia-08]	Oui	Toutes les couches	BC	Oui	-	Sinusoidal A= 15 $\mu\text{m}$ $\lambda= 30 \mu\text{m}$	3 $\mu\text{m}$	-60	50	-10

Tableau I-2 : Résumé de plusieurs travaux effectués sur la simulation numérique du système multicouches.

## VII. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté le système barrière thermique et les différents procédés d'élaboration. Le dépôt élaboré par projection thermique APS a été choisi pour cette étude. Après une énumération des divers matériaux en présence et de leurs procédés de fabrication, on a détaillé les différentes interactions entre les couches. Ensuite, nous avons exposé la problématique générale liée à l'étude et à la compréhension de l'initiation et de la propagation d'une fissure dans les barrières thermiques. Les paramètres pouvant influencer



son initiation et sa propagation à savoir la rugosité, les lois de comportement des différents constituants, les contraintes de croissance accompagnant la croissance de l'oxyde ont été passés en revue.

Enfin, nous avons présenté une bibliographie sur les études déjà effectuées analytiquement ou numériquement dans ce domaine afin de connaître la nature de ces travaux, leur avancement et de réaliser ultérieurement, dans les chapitres qui suivent, les modèles les plus pertinents et plus proches de la réalité. Dans un dernier volet nous avons passé en revue les différentes stratégies utilisées en calcul numérique.



# ***Chapter 2 - Thermo-mechanical modelling: Effect of basic material properties and interface roughness of the stress distribution***

## **Summary**

---

<b>I. Introduction.....</b>	<b>50</b>
<b>II. Numerical modeling .....</b>	<b>51</b>
II.1. Composition, geometry and assumption of the TBC system .....	52
II.1.1. Composition.....	52
II.1.2. Geometry and calculation domain .....	52
II.1.3. Material properties and behaviors assumptions.....	53
II.2. Load and boundary conditions.....	58
II.2.1. Thermal Loads .....	59
II.2.2. Displacement conditions.....	59
II.2.3. Mesh grid and element type.....	60
II.2.4. Model set-up and convergence condition in Abaqus code .....	61
<b>III. Results .....</b>	<b>62</b>
III.1. Effect of material properties .....	63
III.1.1. Elastic calculation (Case A) .....	64
III.1.2. Effect of the TBC creep behaviour (Case B) .....	64
III.1.3. Effect of the BC creep behaviour (Case C).....	65
III.1.4. Effect of the TGO creep behaviour (Case D).....	67
III.1.5. Effect of the substrate creep behaviour (Case E) .....	67
III.1.6. Effect of the creep modeling in all layers (Case F).....	67
III.1.7. Effect of plastic BC behaviour considering the creep behaviour in all layers (Case G).....	68
III.2. Effect of TGO growth for different geometry amplitude .....	68
III.2.1. Without TGO growth .....	69
III.2.2. With TGO growth .....	70

III.2.3. Effect of the lateral TGO growth .....	71
III.3. Effect of the interface geometry .....	71
III.3.1. Effect of the interface undulation amplitude.....	72
III.3.2. Effect of the shape of the interface.....	73
III.4. Effect of thermal cyclic loading .....	75
<b>IV. Conclusion .....</b>	<b>76</b>

---

## I. Introduction

The thermal barrier coatings with high heat resistance are widely used in the components of gas turbine to increase their energetic efficiency by operating at higher temperature [AVS-02]. The TBCs structure consists of four layers: the superalloy substrate, the metallic Bond-Coat (BC), the Thermal Grown Oxide (TGO) and the plasma-sprayed Thermal Barrier Coating (TBC) *Fig.2-1* [RE-00]. Each layer has markedly different physical, thermal and mechanical properties, increasing the difficulty to study this multi-material system.

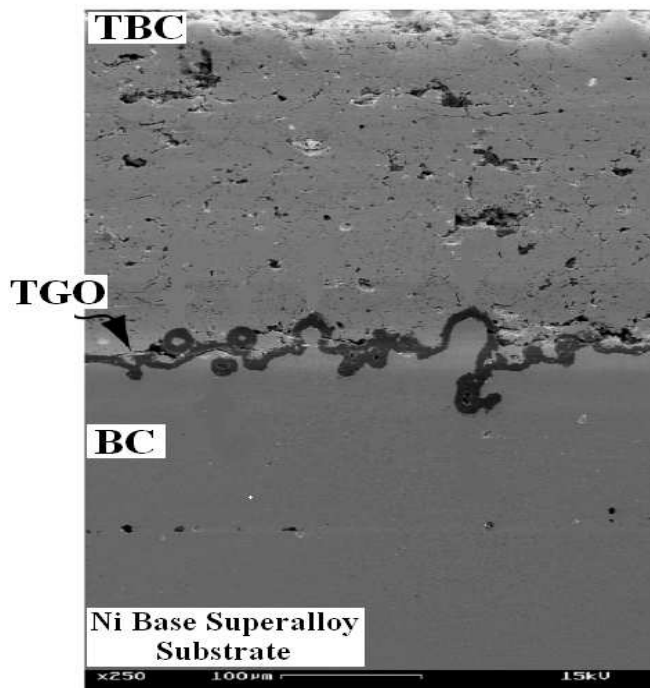


Figure 2-1. Micrograph of plasma sprayed thermal barrier coating system [RE-00].

A major weakness of TBC system is the interface between the metallic bond-coat and the ceramic TBC. At this interface, in-service degradation is observed often leading to a macroscopic spallation of the ceramic layer [ML-82]. The interface regions undergo high stresses due to the mismatch of thermal expansion between BC and TBC. Additionally growth stresses due to the development of thermally grown oxide (TGO) at the interface and stresses due to interface roughness are superimposed. Creep due to high temperature usually leads to stresses relaxation, but thermal cycles can give rise to enhanced stress accumulation resulting in early crack initiation at the BC/TGO interface and spallation failure afterwards [Bia-08].

One of the key issues of the present chapter is to investigate the influence of creep in all layers, plastic deformation in the bond-coat as well as the oxidation of the top-coat/bond-coat interface upon stress distribution and the creation of critical sites and the prevision of the possible crack paths during cooling, especially near the metal/ceramic interface. In addition, the effect of the geometry and amplitude of the rough interface as well as the effect of thermal cyclic loading on stress distribution and on the possible crack initiation and propagation in the system is examined.

To carry out these investigations, we have set a simple model to assess the thermo-mechanical behaviour of the TBC system using the finite element code ABAQUS. Two top-coat/bond-coat geometries corresponding to different interfacial asperity morphologies (semicircle or sinusoidal) are modeled considering a two dimensional and periodic geometry as calculation domain. However, all layers are considered as homogeneous and isotropic without any defects, the role of the residual stresses generation during the coatings process is neglected and if the system temperature evolves in time, it remains constant through the whole system.

This type of model is similar to these of Bialas [Bia-08], Sfar *et al.* [SAM-02] and Aktaa *et al.* [ASM-05] but in a first modeling step, the use of such a model seems to be necessary to determine the correct properties, boundary conditions, morphology of the interface and finally, to valid and compare the magnitude and distribution of the stresses given by our model with those of other authors [Bia-08], [SAM-02], [ASM-05] and with experimental results. Thus, this model will be used as a starting point for the following chapters where the model will be progressively improved.

## II. Numerical modeling

The finite element simulation of the multi-layer system has to take into account the judicious material data, the most representative geometry of the multi-layers and their interfaces, the adequate mesh elements and finally boundary conditions close as possible of the experimental conditions. The intensity of the thermal load and its duration are naturally imposed following the actual cycle [WLH-02], [VKS-01], [MBF\* -06].

## II.1. Composition, geometry and assumption of the TBC system

### II.1.1. Composition

The TBC system is composed of an Inconel 617 substrate, a MCrAlY bond-coat and an air plasma-sprayed ceramic top-coat (Ytria Partially Stabilized Zirconia,  $ZrO_2$ -8 wt. %  $Y_2O_3$ ) that gives rise to an  $Al_2O_3$  thermally grown oxide. The thickness of each layer is considered to be 1.6 mm, 0.1 mm, and 0.25 mm, respectively. An initial oxide layer of  $1\mu m$  in thickness is considered between the top-coat and the bond-coat (see *Fig.2-2*).

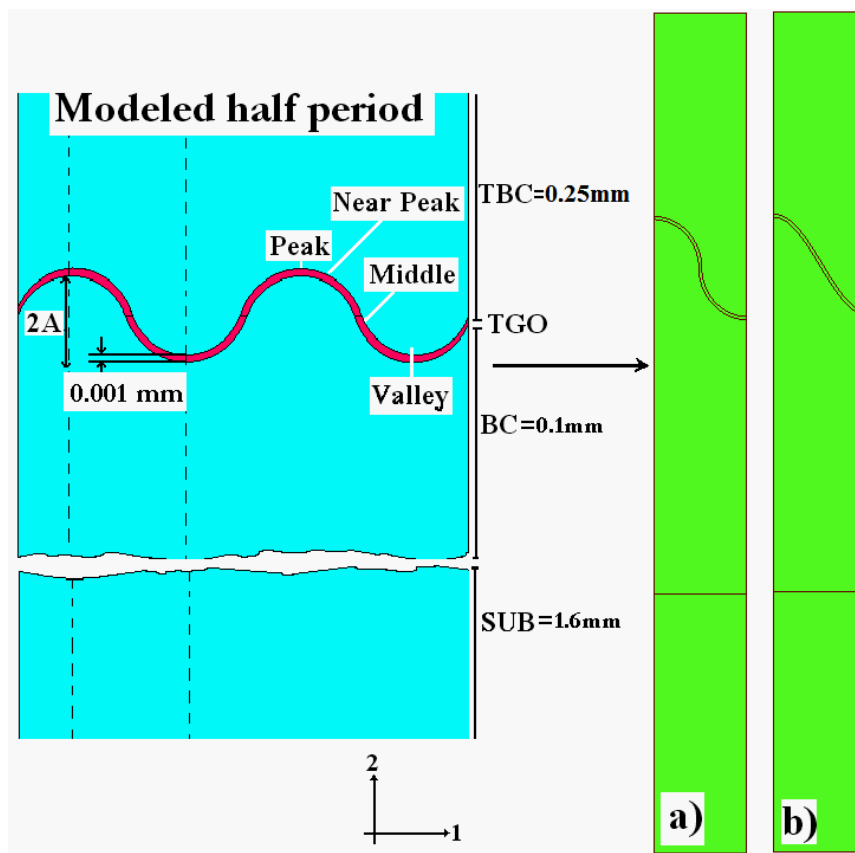


Figure 2-2. TBC calculation domain, a) semicircular, b) sinusoidal wavy interface.

### II.1.2. Geometry and calculation domain

Due to the manufacturing process (blasting step) the TBC/BC interface is very rough [HHL\* -99] with different amplitude and wavelength (see *Fig.2-1*). To reproduce an actual interface shape with the model would considerably increase the size of the calculation domain required to represent different rugosity shapes, the effort to generate a suitable mesh and

consequently the calculation times. For these reasons, the geometries used for the numerical simulations were ideally considered as a perfect sinusoidal or semicircular shape (see **Fig.2-2 a** and **b**) and reduced to a region covering only a half period by using symmetry condition on the left side of the model and periodicity boundary condition on the right side of the model as explained in Subsection II.2.2.

In this 2D (two-dimensional) approach, the semicircle or sinusoidal interface has a wavelength of 60  $\mu\text{m}$  and an amplitude (A) ranging between 5 and 30  $\mu\text{m}$ . These values are commonly obtained from observations of coating micrographs (**Fig.2-1**) and usually used in literature ([Bia-08], [SAM-02], [ASM-05]). Perfect bonding without thermal contact resistance between TBCs layers is assumed. In addition, the effect of the coatings porosity is neglected.

### II.1.3. Material properties and behaviors assumptions

In this model, all layers are considered to be homogeneous and isotropic. This assumption is not realistic as the different layers present defects with a preferential orientation due to the coating process for the ceramic one. In a first approach, and as done by many authors ([Bia-08], [SAM-02], [ASM-05]) the layers are supposed to be made of homogeneous and isotropic materials and a large calculation domain is considered in comparison to the dimensions of the defects. The thermally grown oxide, the ceramic and the substrate layers are treated as elastic and viscous materials whereas the BC is an elastic and visco-plastic material. The material properties listed in **Tab.2-1** are temperature dependent ([Bia-08], [SAM-02], [ASM-05], [WLH-03]). Note that the yield strength  $\sigma_y$  represents the threshold stress beyond which micro-cracks begin to form.

#### II.1.3.1. Plastic strain

For a stress level larger than a critical value, the material will undergo plastic or irreversible deformation  $\varepsilon_p$ . This critical stress can be tensile or compressive. The Von Mises criteria are commonly used to determine whether a material has yielded.

$$\varepsilon_p = \left( \frac{\sigma - \sigma^0}{K} \right)^M \quad \text{if } \sigma \geq \sigma^0, \quad (2-1)$$

$$\varepsilon_p = 0 \quad \text{if } \sigma < \sigma^0 \quad (2-2)$$



where  $\sigma^0$ ,  $K$  and  $M$  are the characteristic parameters of each materials dependent on the temperature.

In order to generalize the case of the uniaxial plastic behaviour, the law of three-dimensional plastic isotropic hardening is defined. Isotropic hardening means that the yield surface changes size uniformly in all directions such that the yield stress increases (or decreases) in all stress directions as plastic straining occurs. We can consider that the matrix of the plastic strain increment  $d[\varepsilon_p]$  and the matrix of the deviator stress  $[\sigma^D]$ , have the same main direction and differ only by a scalar  $d\lambda$  called plastic multiplier. It is also the consequence of the existence of a plastic potential.

$$d[\varepsilon_p] = [\sigma^D] d\lambda \quad \text{or} \quad d\varepsilon_{ij}^p = \sigma_{ij}^D d\lambda \quad (2-3)$$

It is also convenient to define an **Equivalent tensile stress** or **von Mises stress**,  $\sigma_{eq}$ , which is used to predict yielding of materials under **multiaxial loading conditions** using results from simple uniaxial tensile tests. Thus, we define the equivalent tensile stress and equivalent plastic strain by the equations:

$$\sigma_{eq} = \left( \frac{3}{2} \sigma_{ij}^D \sigma_{ij}^D \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2-4)$$

$$dp = \left( \frac{2}{3} d\varepsilon_{ij}^p d\varepsilon_{ij}^p \right)^{\frac{1}{2}} \quad (2-5)$$

The ABAQUS code provides an isotropic hardening model, which is useful in cases where the straining at each point is essentially in the same direction in strain space throughout the analysis. Therefore, when the isotropic hardening is defined, the yield stress,  $\sigma^0$ , can be given as a tabular function of uniaxial equivalent plastic strain of temperature. In our models, we use the isotropic hardening option in the implantation of the plastic deformation and to represent the plastic behaviour in the metallic bond-coat, the data table of yield stress values versus equivalent plastic strain at different temperature is presented in **Tab.2-2**.

### II.1.3.2. Creep strain:

Creep involves time dependent deformation and fracture of materials. The creep intensity strongly depends on the temperature and its effects will become significant when the

system temperature overcomes approximately 600°C as mentioned by Antou [Ant-04] and Pan et al. [PCW\* -03].

Different creep equations have been proposed to predict the actual material response. A creep law is usually composed of three different stages. Initially, the primary or transient creep takes place (Stage I). The creep rate is at first high, but it decreases soon and quickly. During this period, sudden but low deformations proceeds until there rate decreases and reaches that of stationary creep (stage II). During this next stage, also called secondary creep, the creep rate is roughly constant but low and corresponds to a slow strain increase. In Stage III (tertiary or accelerating creep), the creep rate increases more rapidly and the strain become so large that it results to failure.

The creep strain rate following this general form can be written as follow:

$$\dot{\varepsilon}_{cr} = f^{cr} ( p , \sigma , \varepsilon^{cr} , t ) \quad (2-6)$$

where :

(  $\varepsilon^{cr}$  ) is the uniaxial equivalent « creep » strain, conjugate to Mises or Hill equivalent stress

(p) is the equivalent pressure stress,  $p = \frac{1}{3} \sigma_{ii}$

( $\sigma$ ) is the equivalent deviatoric stress (Mises or if anisotropic creep behavior is defined the Hill's definition).

In its general form, the creep law is written as

$$\dot{\varepsilon}_{cr} = A' \sigma^{n'} e^{-\frac{\varepsilon_{cr}}{\varepsilon'}} + A \sigma^n + A'' \sigma'' e^{-\frac{\varepsilon_{cr}}{\varepsilon''}} \quad (2-7)$$

Stage I      Stationary creep (Stage II)      Stage III

where  $A'$ ,  $n'$ ,  $\varepsilon'$ ,  $A''$ ,  $n''$ ,  $\varepsilon''$ ,  $A$ ,  $n$  are temperature dependent material parameters.

The implementation of this relationship in ABAQUS code has been done using the “*creep subroutine*”. At the first time, the whole terms of equation (2-7) were implanted (see the listing given in Appendix A). The calculation has proceeded and terminated giving a realistic distribution of the stresses but at the end of an excessive computation time. At the end of this experience, only the Norton power-law creep, that consists in the second part of equation (2-7) (steady creep) was used leading to a significant reduction of the computation time and to nearly no changes in the stress distribution (< 5%). Consequently, only the stationary creep was modelled for all layers. In this equation  $\dot{\varepsilon}_{cr}$  is the strain rate ( $s^{-1}$ ), A is the

pre-factor ( $s^{-1}MPa^{-n}$ ) that depends of the temperature,  $\sigma$  is the stress (MPa) and  $n$  is the power-law creep exponent. The coefficients  $A$  and  $n$  are also temperature dependent as listed in **Tab.2-3** ([ASM-05], [RBA-04], [Bed-07]).

Rösler et al. [RBA-04] have shown that the failure occurs at low temperatures, when creep is unimportant. During the high temperature phase, creep can relax the stresses due to the growing TGO layer and can result in a quasi-free stress state at the end of the heating period. They have studied the effects of creep pre-factor ( $A$ ) on the stress distribution for values varying from  $1.8 \times 10^{-11}$  (slow creep) to  $1.8 \times 10^{-5}$  (fast creep) in the TBC and from  $1.8 \times 10^{-12}$  to  $7.3 \times 10^{-4}$  in the TGO. Their results showed an important difference in the sign and magnitude of the stress formation on the system depending on the pre-factor. The fast or intensive creep reduces the stress level after cooling and thus increases the lifetime of the TBC system. In this study, a representative value ranging between fast and slow creep for both TBC and TGO layers was adopted. The creep pre-factor for TBC is equal to  $1.8 \times 10^{-7}$  and for TGO is equal to  $7.3 \times 10^{-10}$ .

	$T$ ( $^{\circ}C$ ) Temperature	$E$ (GPa) Young modulus	$\nu$ Poisson's ratio	$k$ (W/m K) Thermal conductivity	$\sigma_y$ (MPa) Yield strength	$C$ (J/Kg K) Specific heat	$\rho$ (Kg/m <sup>3</sup> ) Density	$\alpha \times 10^6$ ( $^{\circ}C^{-1}$ ) Thermal Expansion		
TBC ( $Y_2O_3$ -ZrO <sub>2</sub> )	25	17.5	0.2	1.05	10- 100	483	5650	9.68		
	400	-						-		
	800	-						9.88		
	1000	12.4						10.34		
TGO (Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> )	25	380	0.27	25.2	1200	857	3978	5.1		
	400	-						-		
	800	338						-		
	1000	312						9.80		
BC (MCrAlY)	25	183	0.3	4.3	270	501	7320	-		
	400	152						6.4	592	12.5
	800	109						10.2	781	14.3
	1000	-						16.1	764	16.0
Substrate (Inconel 617)	25	211	0.3	11.5	1185	431	8220	12.6		
	400	188						17.3	524	14.0
	800	157						23.8	627	15.4
	1000	139						-	740	16.3
Ref.		[Bia-08] [SAM-02] [ASM-05]	[SAM-02]	[WLH-03]	[WLH-03]	[WLH-03]	[WLH-03]	[Bia-08] [SAM-02] [ASM-05]		

Table 2-1. Physical properties of the different materials depending on of temperature.

Stress (MPa)	Plastic Strain	T (°C)
1000	0	25
2500	0.23	400
2200	0.3	600
375	0.022	800
60	0.02	900
19	0.01	1000

Table 2-2. Plastic data for bond-coat layer [ASM-05].

	A ( $s^{-1}MPa^{-n}$ )	n	T (°C)	Ref
TBC (ZrO <sub>2</sub> )	$1.8 \times (10^{-11} - 10^{-5})$	1	1000	[BRA-04]
TGO (Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> )	$7.3 \times (10^{-12} - 10^{-4})$	1	1000	[BRA-04]
BC (MCrAlY)	$6.54e-19$ $2.2e-12$ $1.84e-7$ $2.15e-8$	4.57 2.99 1.55 2.45	$\leq 600$ 700 800 $\geq 850$	[ASM-05]
Substrate (Inconel 617)	$4.85e-36$ $2.25e-9$	1 3	10 1200	[Bed-07]

Table 2-3. Creep data for all layers.

### II.1.3.3. Alumina TGO behaviour

The oxidation process is considered for temperature above 900 °C and maintained during the heating dwell-time at 1000 °C. The oxidation time,  $t_{oxid}$  is chosen so that at the end of this period, the TGO thickness reaches about 3  $\mu\text{m}$  or 5  $\mu\text{m}$ . If  $s$  is the initial TGO thickness and is equal to 1  $\mu\text{m}$ , the growth rate,  $\dot{s}$  can be calculated from Tamman's law [RBA-04], [Bür-98]:

$$s^2 = k'_p t_{oxid} \Rightarrow \dot{s} = \frac{1}{2} \frac{k'_p}{s} \quad (2-8)$$

Here  $k'_p = 1.5 \times 10^{-17} \text{ m}^2/\text{s}$  is the parabolic growth constant of the oxide scale and  $t_{oxid}$  is the oxidation time. The growth rate  $\dot{s}$  is calculated for the initial TGO thickness according to Eq. (2-8) and kept constant throughout the calculation.

In the Abaqus code, the strain rate  $\dot{\epsilon}$  should be given by

$$\dot{\epsilon} = \frac{\dot{s}}{s} \quad (2-9)$$

Note that if  $\dot{s}$  is constant, the strain rate  $\dot{\epsilon}$  decreases with time.

In our model, the growth of the alumina layer at high temperature should be modelled by anisotropic swelling of the elements to represent the actual TGO growth. The oxidation strain rate in tensor notation is provided by the relation:

$$\dot{\epsilon}_{ii}^{oxydation} = \frac{1}{3} \dot{\epsilon} \quad (2-10)$$

Vectors  $r_{ii}$ ,  $i = 1, 2, 3$  define a local coordinate system with axis 1 and 2 are, respectively, perpendicular and parallel to the initial TGO layer. Thus, Eq.(2-10) gives a generalization of the one dimensional oxidation law (2-9) to the three dimensional case. In this study, the lateral TGO growth as well as the normal one is considered in the system. Evans *et al.* [EMH<sup>\*</sup>-01] defined the ratio between perpendicular growth and lateral growth equal to 10. Thus, we respect this relation in all models by setting  $r_{11} = 0.3$ ,  $r_{22} = 3$  and  $r_{33} = 0$ .

The TGO layer must be orientated to make sense to this anisotropy. This work was easy for semicircular asperity because it needs only two spherical orientations: one for the convex part and other for concave part of the asperity (see **Fig.2-3a**) whereas, the orientation of the sinusoidal asperity was complex as it required to partition the asperity into several sub-domains that has its proper orientation (see **Fig.2-3b**). When the partitions number increases, thickness of the TGO layer becomes more accurate.

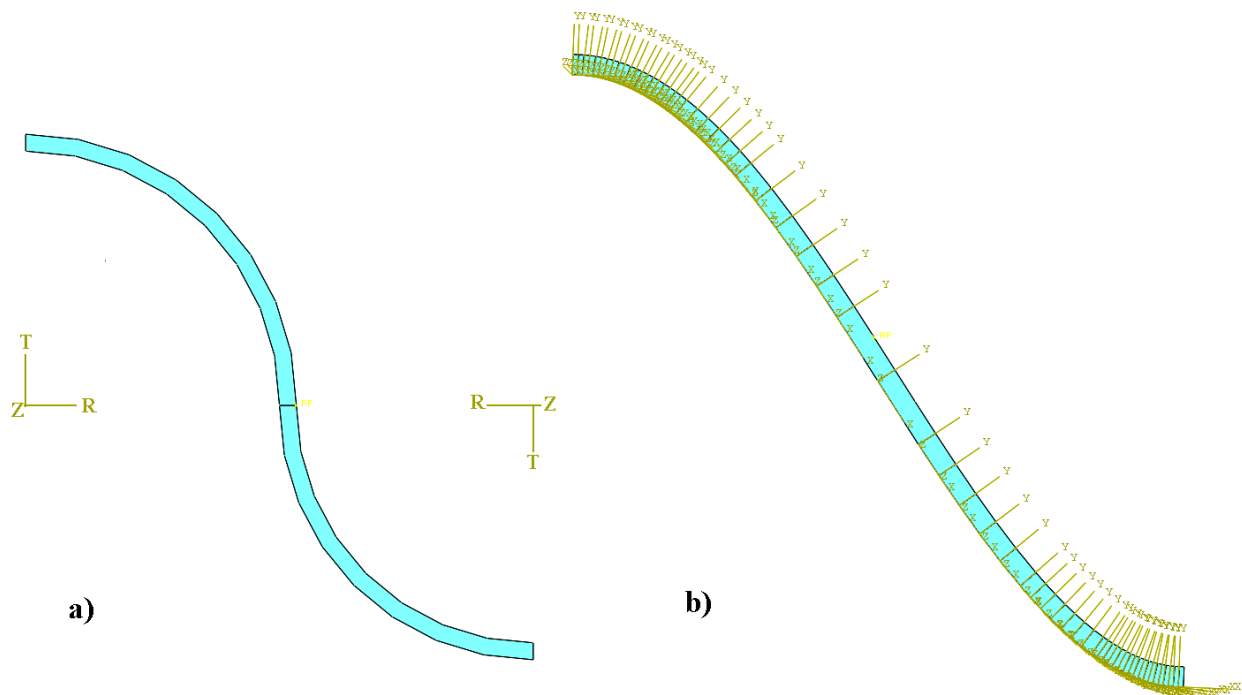


Figure 2-3. TGO orientation for the modelling of the anisotropic swelling, a) semicircular, b) sinusoidal asperity.

## II.2. Load and boundary conditions

In the first step of TBCs simulation, we must define the material used in the system and their properties that was explained in the previous section. After that, it is necessary to fix the thermal history and different boundary conditions imposed on the system during the

service. Finally, the meshing operation should be performed within the model in order to prepare our model to run. The following subsections depict in detail these steps of calculation.

### II.2.1. Thermal Loads

The thermal loading of TBCs consisted to impose an homogeneous temperature on the whole system following the thermal cycle of **Fig.2-4a** or **b**. For the case of a single cycle (**Fig.2-4a**), the load consists of three steps. First, heating from 25°C to 1000°C in 300 s, followed by a dwell-time at 1000°C during  $t_{oxid}$  seconds and finally, a cooling step from 1000°C to 25°C in 300 s. The time of oxidation,  $t_{oxid}$  is chosen so that at the end of the heating dwell-time, TGO thickness reaches about 3  $\mu\text{m}$  or 5  $\mu\text{m}$ .

For the multi-cycles case (**Fig.2-4b**), the thermal load is identical to the previous one, but the dwell-time is fixed to a multiple of 2 h per individual cycle. The relation:  $t_{oxide} = n_{cycles} \times 2 \text{ h}$  can be established between the two cases.

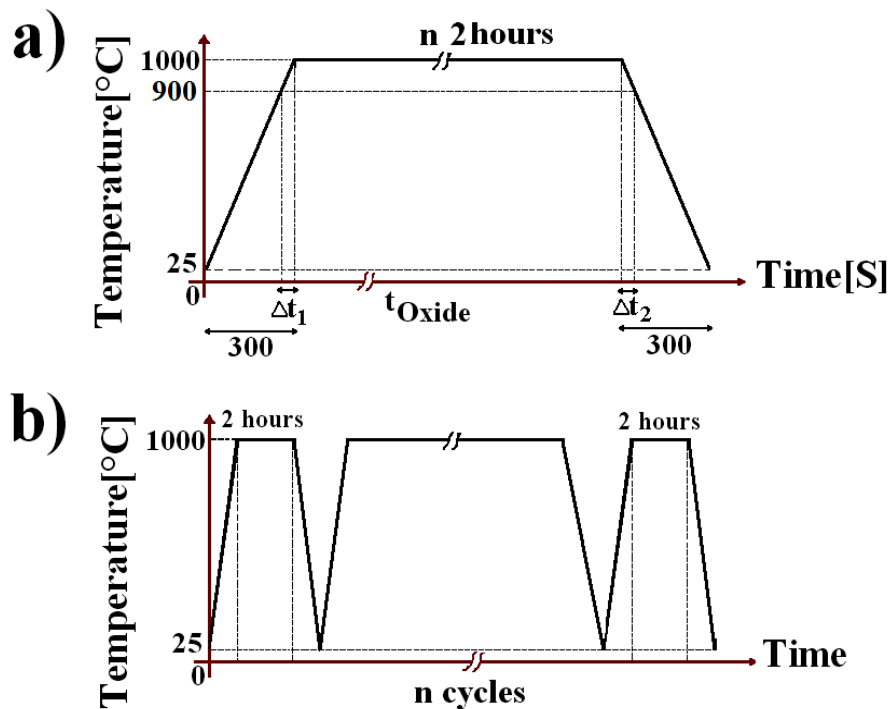


Figure 2-4. Thermal cycle used in FEM simulation, a) single cycle, b) multiple cycles.

### II.2.2. Displacement conditions

The periodicity boundary condition is imposed in the right part of the restricted calculation domain defined in **Fig.2-5** using a Multi-Point Constraint (MPC). This condition allows the affected mesh nodes to move freely but simultaneously in the horizontal direction.

At the same time, their displacement in the vertical direction is possible. The horizontal displacement at the left boundary of the model is cancelled to obtain a symmetric condition. The global movement of the system is avoided by blocking the displacements of node A in all directions otherwise, the static mechanical simulations will become a much more complex dynamic one.

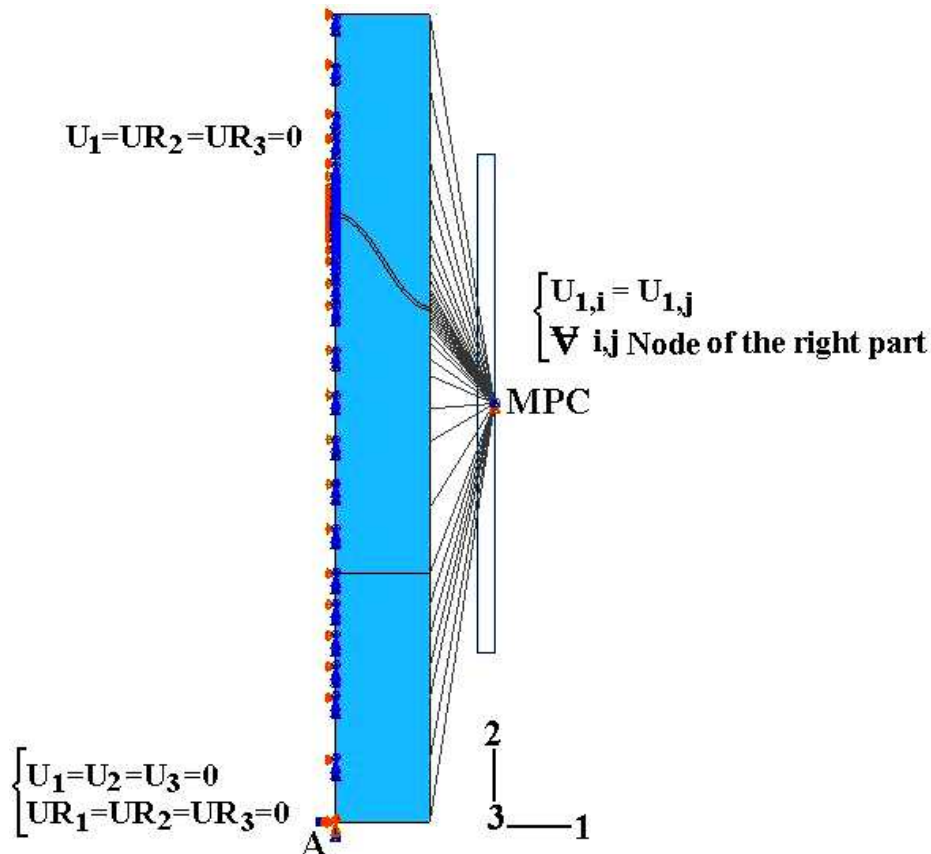


Figure 2-5. Displacement conditions.

### II.2.3. Mesh grid and element type

The meshing operation is performed by using quadratic six nodes triangular elements with generalized plane strain approximation (CPEG6MT A 6-node designation in Abaqus code) and reduced integration. A quadratic shape function provides a higher order interpolation of displacement field and consequently, more accurate stress and strain distributions. As the mesh-grid refinement has a significant influence on the results, especially on the study of the stress distribution at the sinusoidal wave interfaces, the interface layer has been discretized with a small element size in order of  $0.25 \mu\text{m}$  (see **Fig.2-6**) to improve the result accuracy.

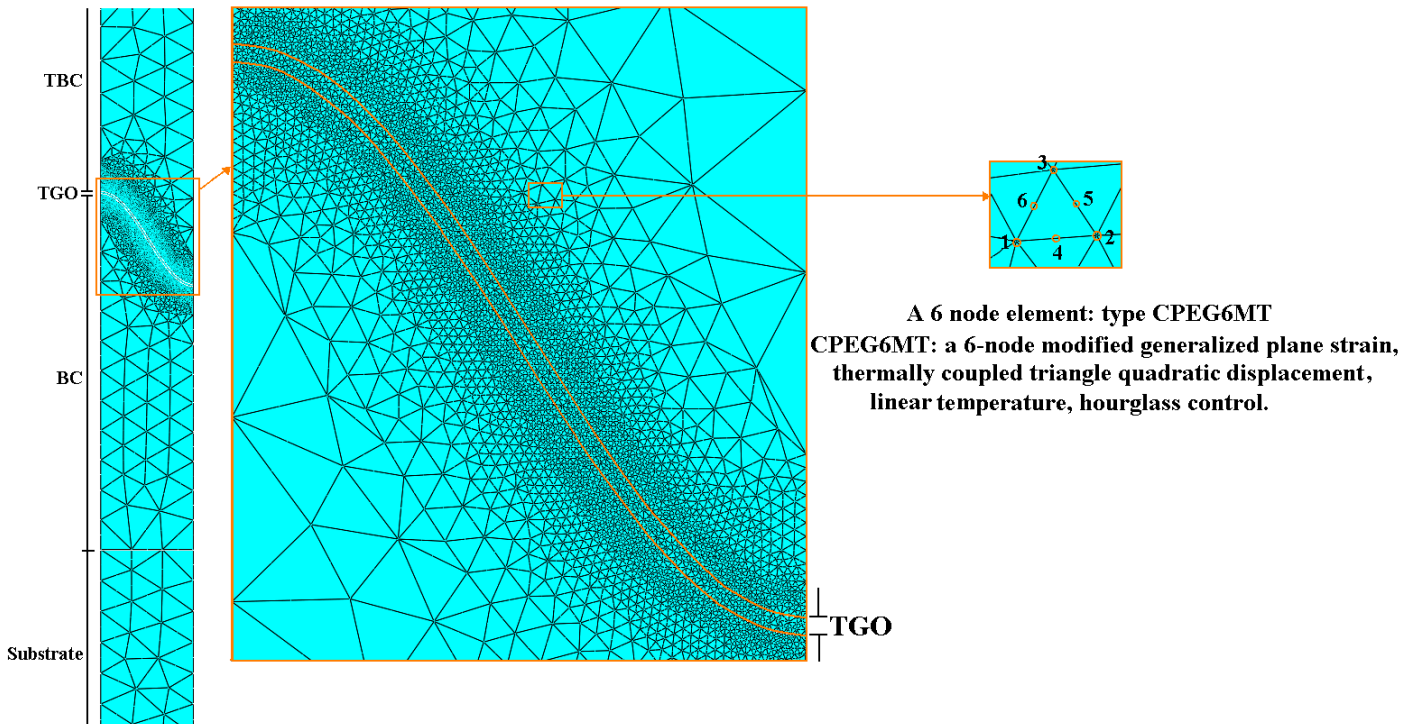


Figure 2-6. Meshing of the TBC calculation domain.

#### II.2.4. Model set-up and convergence condition in Abaqus code

The flowchart in **Fig.2-7**, represents the different steps to set-up the model and to run a calculation with the Abaqus code. The *convergence* conditions of this flowchart are explained in appendix B.

In the present investigation, the transient coupled temperature-displacement analysis is considered. The temperatures are integrated using a backward-difference scheme. A non-linear coupled system is solved using Newton's method and the time increment is controlled automatically. Very small time increment in order of  $10^{-3}$  s is required during the heating and cooling steps of the thermal cycle to obtain convergence solution. The maximum increment value is defined to limit the temperature change by 10 °C per step but the solutions convergence is usually obtained by repeating the calculation step for decreasingly smaller time increments, as well as by ensuring that the continuity of interfacial displacement across the TBC/TGO and TGO/BC interfaces is satisfied.

An analysis of the resulting residual stress fields (as a post-processing step) will assist to locate the possible paths of crack propagation. At the end of this work (chapter 4), we will be able to predict and to propagate cracks in the critical zones of the TBC system with a more realistic way.



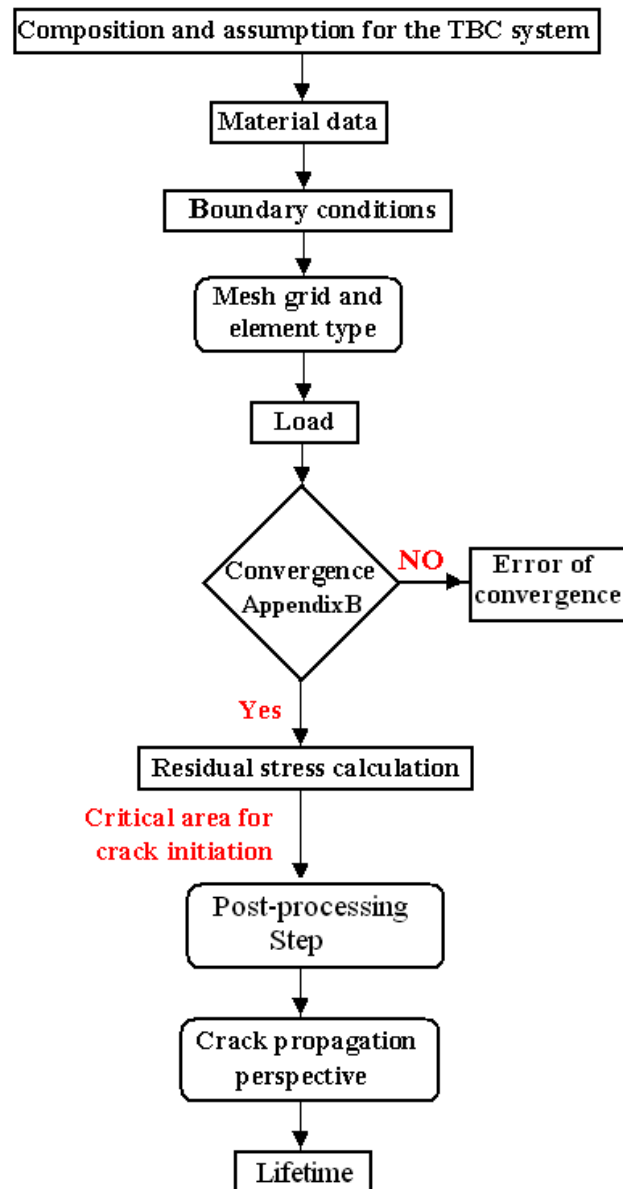


Figure 2-7. Flow chart of different steps of the numerical procedure.

### III. Results

The stress state depends crucially on the ratio of the loading rate caused by growth and swelling of the oxide layer and the unloading rate by creep and plastic relaxation during thermal cycle loading.

Subsections III.1, III.2 and III.3 present the effects of different material behaviour, TGO growth and interface geometry (two morphologies, semicircular or sinusoidal as a function of roughness amplitudes), on the normal residual stresses  $S_{22}$  (vertical) within the

TBC and BC respectively. In addition, we will locate the crack propagation path by considering the stress distribution in the system and the subsequent delamination of the APS TBC. Finally, in the Section III.4, the effect of the thermal cyclic loading on the stress distribution without modelling the crack propagation will be examined. Note that at the end of each subsection, and if it is possible, our numerical results will be compared to those obtained by other authors.

The normal stress to the interface,  $S_{22}$ , is not the most recommended stress to predict crack propagation path and that considering the principal stresses will be more obvious. Therefore, in a first time we are interested in wondering the horizontal crack propagation that is responsible of the coating delamination between the lamellas. In addition, we can conclude at the end of this chapter that the  $S_{22}$  stress distribution is able to predict rather accurately the cracking path at the interfaces. Therefore, among, the three classical crack propagation modes,

- mode I, the “opening mode” that corresponds to the crack surfaces separation in the direction normal to the crack plane;
- mode II, that corresponds to a sliding translation of crack surfaces in the crack plane (due to shearing stresses) and perpendicular to the crack head plane;
- and mode III that corresponds to a sliding rotation of the crack surfaces in the crack plane and in a parallel direction to the crack head;

only the first mode is modeled in the following as the calculation is a 2D one.

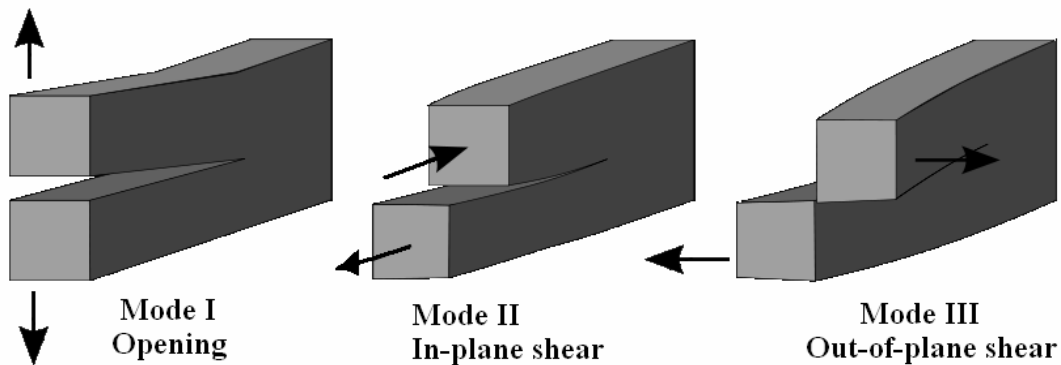


Figure 2-8. Different modes of crack propagation.

### III.1. Effect of material properties

In this section, systematic studies of the effect of different material behaviour are presented in seven cases itemized A to G in *Tab.2-4*. The effects of a particular parameter like creep or plastic behaviour of one of the layers is easier to interpret if compared with a

relatively simple case for which all layers are considered as elastic. For all cases, the location and magnitude of the extreme stresses are determined for a sinusoidal asperity geometry with an amplitude of 15  $\mu\text{m}$  and an increasing of the oxide layer from 1  $\mu\text{m}$  to 3  $\mu\text{m}$  thickness. Figure 2-9 shows the maximum compressive or tensile stresses ( $S_{22}$ ) near the interface in the ceramic layer at the peak (a) the middle (b) and the valley (c) of the asperities after cooling for the previous cited case (A to F). Figure 2-10 shows the same results but in the bond coat layer.

Case	Elastic In all layer	Creep				Plastic (BC)
		TBC	BC	TGO	Substrate	
A	Yes	-	-	-	-	-
B	Yes	Yes	-	-	-	-
C	Yes	-	Yes	-	-	-
D	Yes	-	-	Yes	-	-
E	Yes	-	-	-	Yes	-
F	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	-
G	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes	Yes

Table 2-4. Assignment of different material properties used for FE simulations.

### III.1.1. Elastic calculation (Case A)

When all the constituents are elastic (case A), a concentration of tensile stresses at the middle (1.1 GPa) and compressive stresses at the peak (-1.3 GPa) and valley of the TBC layer asperity appear (see *Fig.2-9*) due to the thermal expansion mismatch between TBC and bond-coat and the expansion of the TGO layer. Concerning the stress at the BC peak (see *Fig.2-10a*), it is characterized by a tensile stress about 1 GPa but the maximum tensile stress zone is observed in the middle with a value of 6.4 GPa whereas the maximum compressive stress is located in the valley (-10.5 GPa). The level of stress obtained in this case is very important and can rapidly cause crack propagation and delamination of the system as the yield stress of the bond coat is about 270 MPa [WLH-03] and this of the TBC is about 10 to 100 MPa [Bia-08], [WLH-03]. As it is shown later, this stress level is attenuated when creep proceeds in the ceramic and bond-coat layers.

### III.1.2. Effect of the TBC creep behaviour (Case B)

The extreme stress values with TGO growth (3  $\mu\text{m}$ ) are summarized in *Tab.2-5* and shown in *Fig.2-9* and *Fig.2-10*. The B case shows that the TBC creep tends to reduce the overall stress level in the TBC (about 3 times less for the compressive stress state and 6.8 times less for the tensile stress state). Thus creep tends to decrease the stress development induced

either by the thermal expansion mismatch between TBC and bond-coat and by the development of thermally grown oxide.

It should be noted that the TBC creep is the only one behaviour that changes the sign of the stress in the TBC peak. However, the stress level within the bond-coat layer increases slightly at the middle and at the valley regions thanks to the TBC creep.

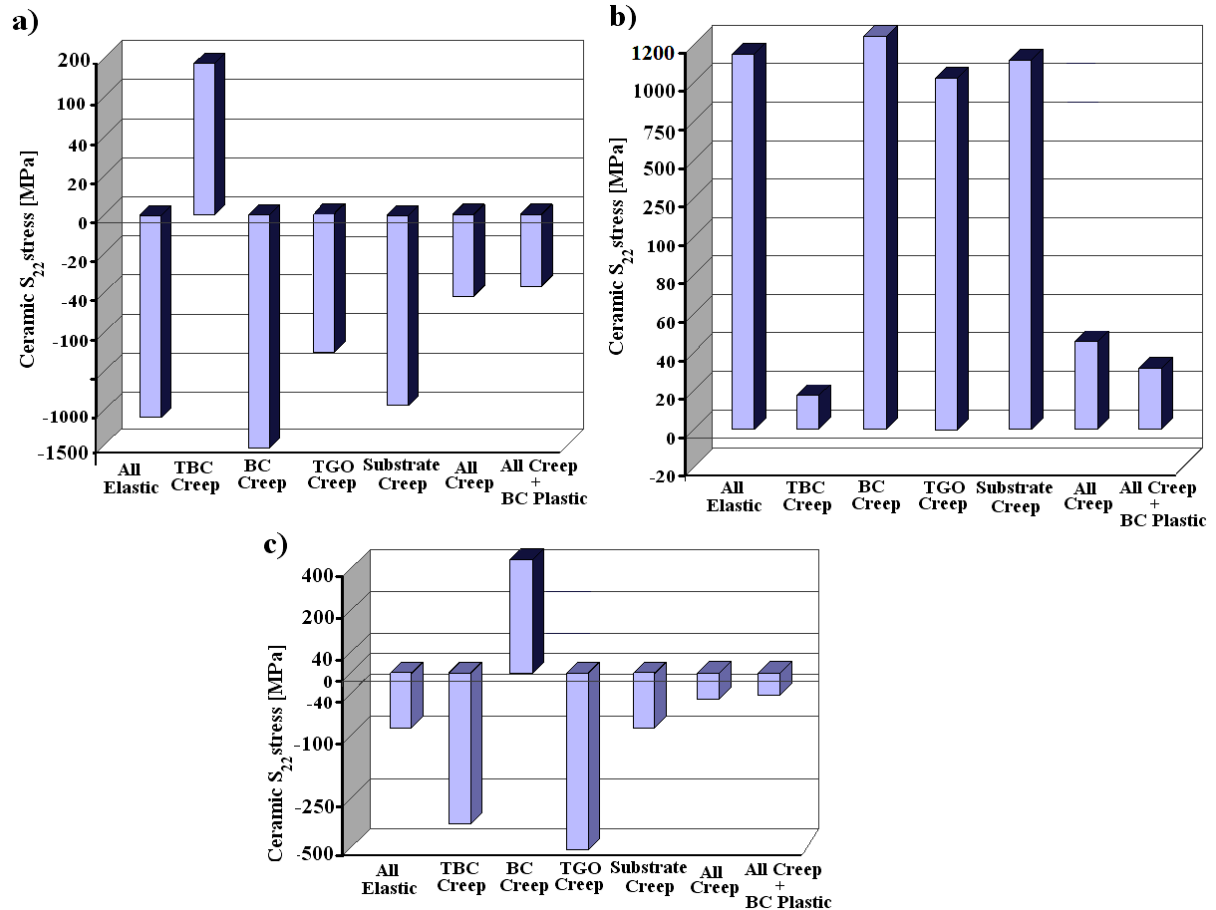


Figure 2-9. Comparison of the extreme  $S_{22}$  stresses in the **ceramic layer** near the interface after cooling for the case of all elastic, TBC creep, BC creep, TGO creep and all creep for a  $3\mu\text{m}$  TGO growth ( $1\mu\text{m}$ , initial), conditions in (a) the peak, (b) the middle and (c) the valley locations.

### III.1.3. Effect of the BC creep behaviour (Case C)

Compared to the full elastic model, the effect of bond-coat creep is not very influent on the stress level at the peak and middle of the TBC, but in the valley, it reverses the stress from negative values to higher positive (400 MPa) ones. The same comparison in the bond-coat shows that the maximum tensile stresses caused by the growth of the TGO layer inside the bond-coat are relaxed at high temperatures by a factor of 11, 51 and 44 at the peak, middle and valley regions, respectively (see *Tab.2-5* case A and C) when the BC creep proceeds.

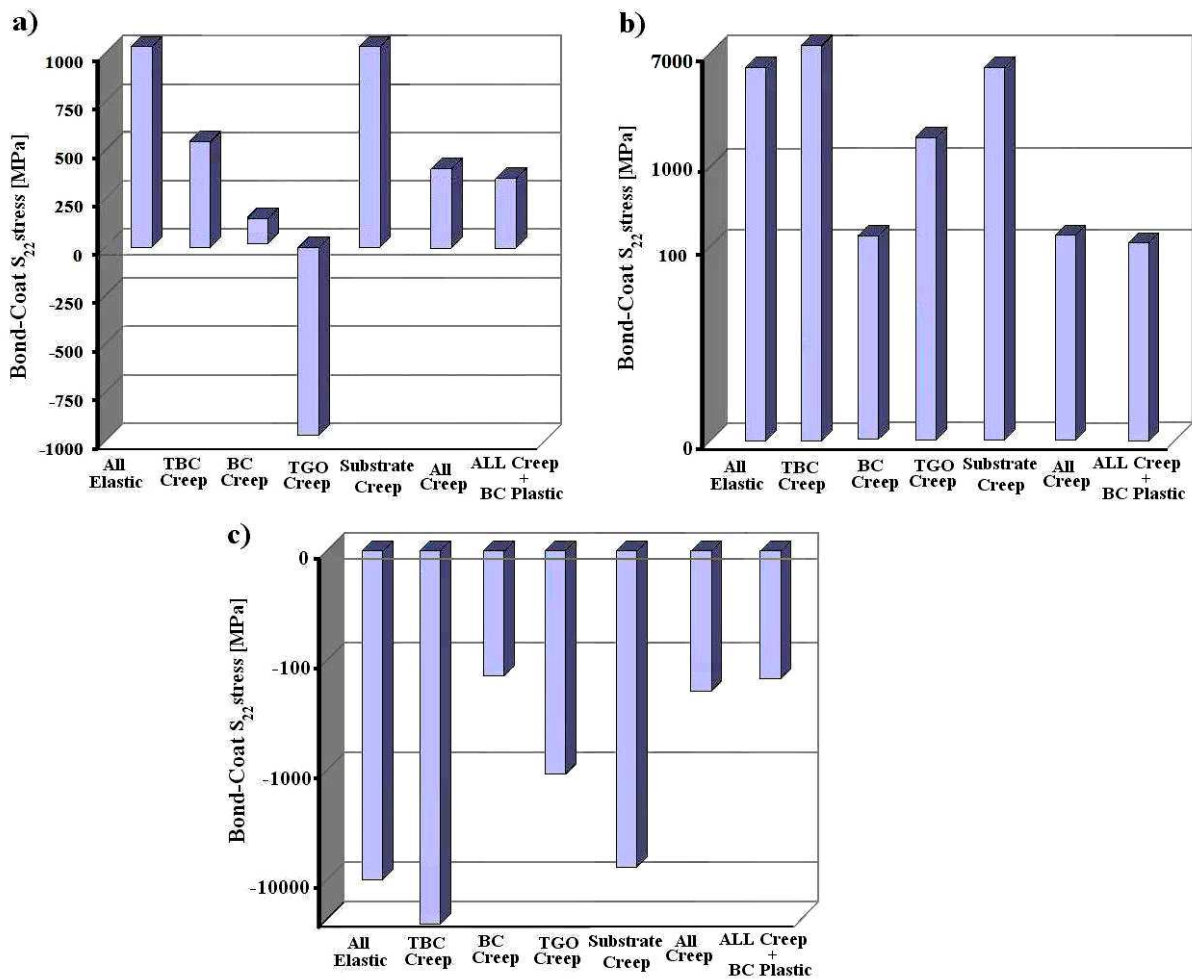


Figure 2-10. Comparison of the extreme  $S_{22}$  stresses in the **bond-coat layer** after cooling for the case of all elastic, TBC creep, BC creep, TGO creep and all creep for a  $3\mu\text{m}$  TGO growth ( $1\mu\text{m}$ , initial), conditions in (a) the peak, (b) the middle and (c) the valley locations.

### III.1.4. Effect of the TGO creep behaviour (Case D)

Creep in the TGO clearly reduces the tensile stresses caused by the TGO growth and thus shifts its critical thickness to larger values [EMH<sup>\*</sup>-01] as will be discussed in the III.1.7. The TGO creep tends to increase the compressive stress in the valley of the ceramic and to change the nature of the stress in the peak of the BC that becomes compressive compared to the full elastic case (A). The effect of the TGO creep on the stress level within the TBC and BC, depends strongly on the creep pre-factors value and will be important solely for fast TGO creep. In this study, the creep pre-factor of the TGO slightly reduces the stress level within the TBC. However, it changes significantly the stress magnitude in the BC (see **Tab.2-5** case A and D).

Case	Maximum $S_{22}$ stress (MPa) in the ceramic			Maximum $S_{22}$ stress (MPa) in the bond-coat		
	peak	Middle	Valley	Peak	Middle	Valley
A	-1300	1100	-100	1000	6450	-10500
B	160	10	-465	500	7000	-11000
C	-1500	1200	400	88	125	-237
D	-400	1000	-500	-1000	1600	-1300
E	-1150	1080	-100	1000	6300	-9800
F	-51	40	-22	400	130	-370
G	-45	30	-20	350	90	-352

Table 2-5.  $S_{22}$  stress distribution at the different position of the TBC and BC (near the interface) for different case of table 2-4 for 15  $\mu\text{m}$  sinusoidal interface with 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness (initial value 1 $\mu\text{m}$ ).

### III.1.5. Effect of the substrate creep behaviour (Case E)

The results obtained with and without creep in the substrate (**Tab.2-5** case **A** and **E**) show that it does not play any role on the stress distribution around the TBC/BC asperity but only reduces the stress level on the BC/substrate interface.

### III.1.6. Effect of the creep modeling in all layers (Case F)

Considering simultaneously the interactions of top-coat, bond-coat, TGO and substrate creep with a 3  $\mu\text{m}$  thick TGO leads to a decrease in the tensile stress level by 30, 16 and 6 times less than for the pure elastic case, in the TBC, BC and TGO layers (**Tab.2-5** case **A** and **F**) respectively. This comparison shows that the role of the creep on the stress relaxation is significant and cannot be neglected but does not change the sign of the stress obtained in the pure elastic case.

### III.1.7. Effect of plastic BC behaviour considering the creep behaviour in all layers (Case G)

The stresses in the bond-coat with creep relaxation still remained considerably high. In comparison to case F (creep in all layers), considering the plasticity in the bond coat (with creep in all layers) does not modify the qualitative repartition of stresses in the top-coat and bond-coat but slightly decreases their intensity in the ceramic layer. The stress decrease is much more important in the bond-coat and particularly the decrease in the tensile stresses at the peak region for large TGO thickness. This reduction is also observed by Bäker et al. [BRH-05] with the same final TGO thickness.

To estimate the effect of creep on the lifetime of the system, Rösler et al. [RBA-04] have shown numerically that in the purely elastic case, TGO critical thickness is in the order of 4  $\mu\text{m}$ . This thickness is smaller than typical TGO thickness measured experimentally by Evans et al. [EMH<sup>\*</sup>-01] with a value going between 7 and 10  $\mu\text{m}$ . For these reasons and to get more accurate results, the role of stress relaxation by creep and plastic deformation should to be taken into account. It must be noted that in this chapter, the crack propagation is not modeled and consequently it is not realistic to predict the critical TGO thickness that leads to the TBC delamination. This critical value will be discussed in chapter 4 for two different interface amplitudes.

In the following study, creep behavior in all layers and plastic behavior in the BC layer (Case G) will be considered.

## III.2. Effect of TGO growth for different geometry amplitude

Oxidation of the bond-coat has been repeatedly identified as one of the important factors affecting the ceramic top-coat durability during service [RE-00]. In the present section, we will examine the effect of the oxide growth on the stress distribution within the thermal barrier coating system for a sinusoidal interface of 15  $\mu\text{m}$  in amplitude. As in section III.1.7 (case G), the creep behaviour is considered in all layers and plastic strain in the BC layer. Two different cases corresponding to final TGO thickness of 3  $\mu\text{m}$  and 5  $\mu\text{m}$  are compared to the case for which the thickness remains constant and equal to 1  $\mu\text{m}$ . In each case, the initial TGO thickness is 1  $\mu\text{m}$ .

### III.2.1. Without TGO growth

The layer thickness of TGO remains constant and equal to 1  $\mu\text{m}$ . *Fig.2-11a* presents the residual stresses  $S_{22}$  in the TBC and BC after cooling for an interface roughness of 15  $\mu\text{m}$  in amplitude. Due to the CTE mismatching and the high amplitude of the metal/ceramic interface undulations, significant stress levels appear in the vicinity of the TBC/TGO and TGO/BC interfaces. As the CTE of the bond-coat is larger than that of the TBC, the bond-coat induces on the TBC, after cooling, tensile stresses at the peak (27 MPa) and compressive stresses at the valley region (-32 MPa). These results are in good agreement with the numerical results given by Bialas [Bia-08], Aktaa et al. [ASM-05], and Hsueh et al. [HFJ-00]. In fact, all these authors

have described the same qualitative stress distribution in the TBC layer. The values obtained are ranging between 50 MPa and 250 MPa for tensile stresses and between -50 MPa and -200 MPa for compressive stresses. The difference between their results and our numerical results can be explained by the presence of the creep in all layers and plastic deformation on the BC layer in our model that decreases significantly the stress level in our model.

The qualitative distribution of the stresses within the bond-coat layer is nearly the same as this of the TBC but with amplitudes about ten times higher. Thus, after cooling, localized tensile stresses takes place (260 MPa) at the peak and compressive ones (-250 MPa) at the valley region.

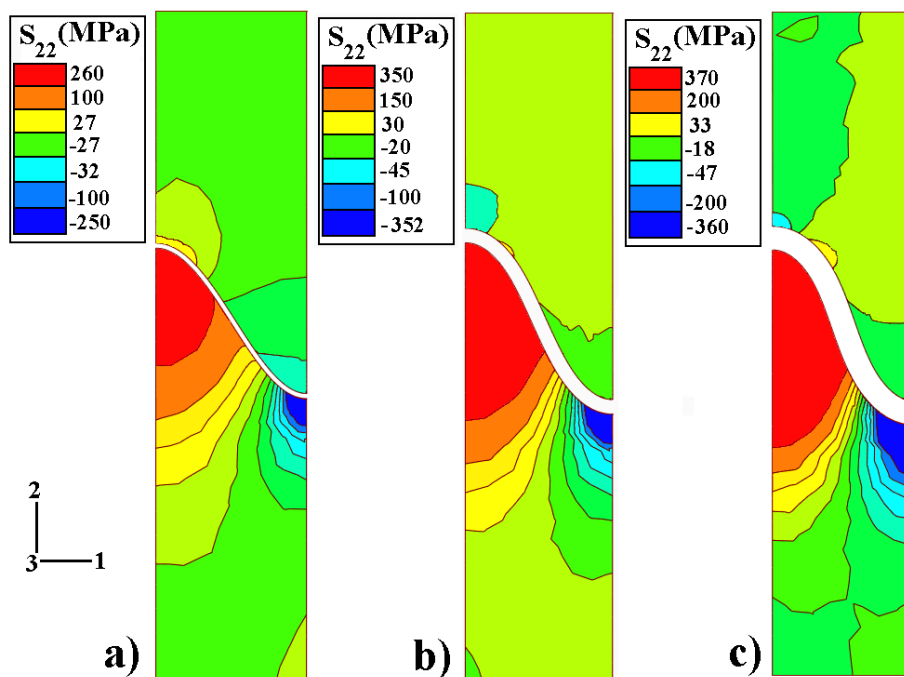


Figure 2-11.  $S_{22}$  stresses distribution in the TBC and BC with sinusoidal shape after cooling for undulation amplitude of 15  $\mu\text{m}$ , a) without growth TGO, b) 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness, c) 5  $\mu\text{m}$  TGO thickness.

### III.2.2. With TGO growth

In this case, the formation of aluminum oxide is taken into account in lateral and normal direction to the interface. The stress distribution due to the continuous growth of the TGO thickness between 1  $\mu\text{m}$  and 3 (or 5  $\mu\text{m}$ ) is predicted following the relations described in Section II.13.3. Figure 2-11 shows that, after TBCs cooling, the  $S_{22}$  stress distribution at the sinusoidal interface of the TBC/TGO and TGO/BC depends significantly on the oxidation duration that is on the final oxide thickness values.



It has already been discussed in section III.2.1 of this chapter that for small TGO thickness, the TBC stress state is mainly affected by the difference in layers CTE. When the TGO becomes thick, the thickening induces another stress distribution showing a tensile stress in the valley and a compressive stress in the peak region of the TBC. Moreover, the stress distribution induced by the CTE mismatching remains. The combination of these two sources of stresses in the TBC lead to move the maximum tensile stresses from the peak toward the middle and a compressive stress takes place at the peak. In the valley region, a zone of compressive stresses is observable but this stress becomes progressively less important when the TGO thickness enhances (see *Fig.2-11b,c* corresponding to TGO thickness 3 and 5  $\mu\text{m}$ ).

In the bond-coat layer, the tensile stress region of the peak and the compressive one of the valley extend to the middle region and increase in intensity by a factor 1.44 and 1.4, respectively.

To resume, the change in stress magnitude for all locations is due to:

- a change in volume of the TGO layer;
- the effect of the addition of an oxide layer with drastically different modulus and CTE than the coated materials.

The TGO thickness increase induces generally the following behaviour in the TBC and BC:

- i. the stresses are quantitatively higher;
- ii. the region of tensile stresses becomes wider in the BC;
- iii. the region of maximum tensile moves from the peak to the middle of the TBC layer;
- iv. an important compressive zone (~ -45 MPa for 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness) appears in the TBC peak whereas the valley region becomes progressively less compressive.

Bialas [Bia-08], Aktaa *et al.* [ASM-05] and Hsueh *et al.* [HFJ-00] have also examined the effect of the TGO growth on the stress repartition and described the same qualitative stress distribution in the TBCs but with a stress magnitude considerably more important than our predicted ones. As an example, Aktaa *et al.* [ASM-05] have determined the stress level on the TBC sinusoidal interface for 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness. A maximum tensile stresses (400 MPa) appears at the middle and the maximum compressive stresses (-800 MPa) is located at the valley region. In this work, the creep behaviour and plastic deformation are taken into account only in the BC layer and the lateral TGO growth is neglected.

### III.2.3. Effect of the lateral TGO growth

Up to now, in all cases, the lateral TGO growth was modeled. Now, another model is considered where its normal growth is only taken into account. Thus, the Vectors  $r_{ii}$  presented in section II.1.3.3 changes to  $r_{11}=0$ ,  $r_{22}=3$  and  $r_{33}=0$ .

For a sinusoidal model with 15  $\mu\text{m}$  amplitude and 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness (initially equal to 1), the comparison between the normal plus lateral TGO growth with the case neglecting the lateral TGO growth shows that the location of the maximum compressive stresses in the TBC moves from the peak to the valley asperity. Concerning the maximum tensile stresses, it remains at the middle, but its magnitude becomes more important (from 30 MPa to 35 MPa). Nevertheless, considering both the normal and lateral TGO growth is closer to the actual behaviour [EMH\*-01] than considering only the normal one and consequently in the following simulations, the lateral TGO growth will be modeled as well as the normal one ( $r_{11}=0.3$ ,  $r_{22}=3$  and  $r_{33}=0$ ).

## III.3. Effect of the interface geometry

The effects of the geometry of the TBC/BC interface as well as the amplitude of the corresponding roughness are known to be influent on the stress level in the TBC system subjected to TGO growth. As in section III.1.7 (case G), the creep behaviour is considered in all layers and plastic strain in the BC layer. The TGO growth starts from 1  $\mu\text{m}$  to reach 3  $\mu\text{m}$  at the end of the cooling step. The effect of different roughness amplitudes and geometries (sinusoidal and semi-circular) on the stress distribution is predicted and analyzed in the two following subsections.

### III.3.1. Effect of the interface undulation amplitude

To investigate the effect of the interface roughness amplitude on the stress distribution, the simulation is repeated with different amplitudes (A) equal to 5, 10, 15, 20 and 30  $\mu\text{m}$  for a sinusoidal geometry. Figure 2-12 represents the stress values near the interfaces at different locations (peak, middle and valley) and after cooling for a resulting 3  $\mu\text{m}$  (1  $\mu\text{m}$  initial) TGO

thickness and different amplitudes. These values show that the asperity amplitude affects the quantitative stress values. In the ceramic layer, the region of tensile stresses located near the valley for small roughness decreases in size, tends toward the peak and increase in amplitude from 20 MPa to 35 MPa as the roughness amplitude increases. At the same time, in the bond-coat layer, as the undulation amplitude increases from 5 to 30  $\mu\text{m}$ , the tensile stress region increases from 241 MPa to 400 MPa and extends more and more, from the peak to the valley, decreasing the size of the compressive zone in the valley.

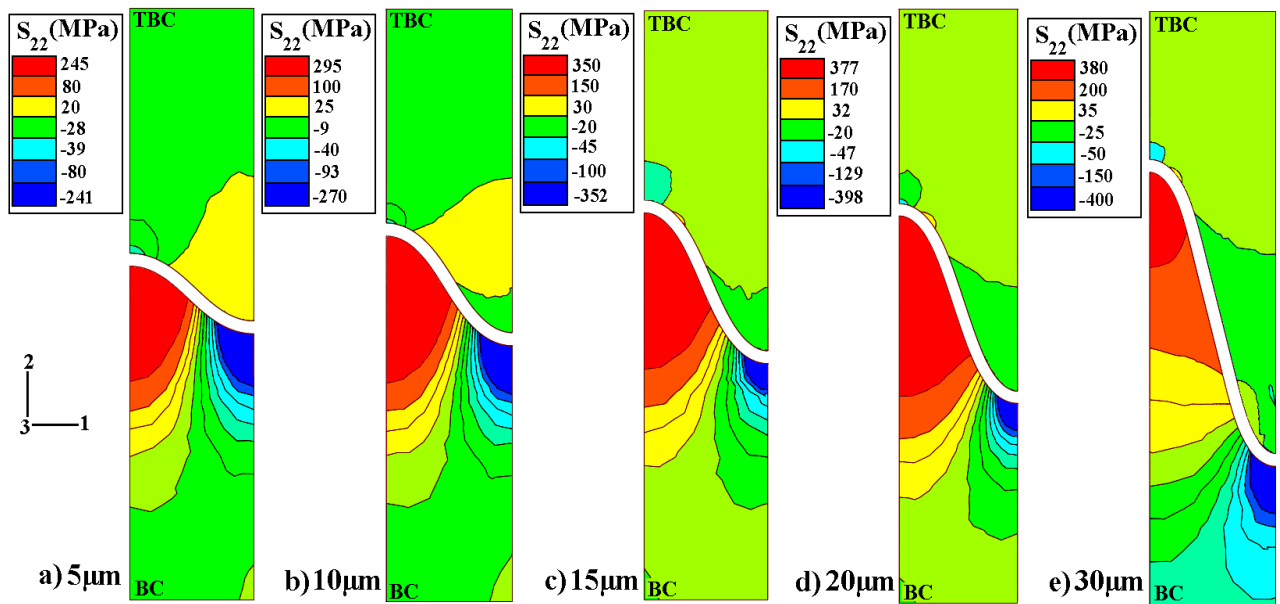


Figure 2-12.  $S_{22}$  stresses distribution in the TBC and BC with an interface sinusoidal shape after cooling for 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness (1  $\mu\text{m}$  initial) with a) 5  $\mu\text{m}$ , b) 10  $\mu\text{m}$ , c) 15  $\mu\text{m}$ , d) 20  $\mu\text{m}$  and e) 30  $\mu\text{m}$  undulations amplitude.

Therefore, the tensile and the compressive stresses are quantitatively increased in the case of high roughness amplitude ( $> 20 \mu\text{m}$ ) in comparison to low ones. However, for high amplitude, the region of compressive stresses located within the TBC becomes wider and the region of tensile stresses becomes smaller (see **Fig.2-12**) leading to a larger TBC lifetime. In the bond-coat, the tensile zone becomes wider and the stresses amplitude becomes progressively larger with increasing amplitude. The results are in good agreement with those of Ahrens *et al.* [AVS-02] and Limarga *et al.* [LWH-05]. As an example, Ahrens *et al.* [AVS-02] have obtained a stress distribution at the TBC peak as a function of amplitude of the sinusoidal roughness profile with a wavelength equal to 65  $\mu\text{m}$ . The stress generated in the case of an amplitude of 10  $\mu\text{m}$  was equal to 200 MPa, whereas this was about 500 MPa for 30  $\mu\text{m}$  amplitude. They show that with increasing the TGO thickness, as stress conversion is

delayed for higher amplitudes therefore it has longer lifetime in comparison of this for lower amplitude.

### III.3.2. Effect of the shape of the interface

In order to examine the role of the interface geometry on the stress distribution, the stress calculation is also performed for a semicircular asperity. As shown in *Fig.2-13* that represents the evolution of maximum tensile and compressive stresses  $S_{22}$ , after cooling in the TBC layer (near the interface) in terms of asperity amplitude for the semi-circular and sinusoidal interface geometry. The qualitative distribution of the stresses remains the same for both geometries but their values are different. Considering the semicircular interface, the maximum values of tensile stresses in the ceramic are higher than those obtained with sinusoidal asperity whereas the maximum values of compressive stresses are lower. Moreover, in the case of sinusoidal undulation, the compressive zone is more extended. Thus, a semicircular asperity shape is more likely to propagate crack in the TBC layer than a sinusoidal one due to a slightly higher stress level.

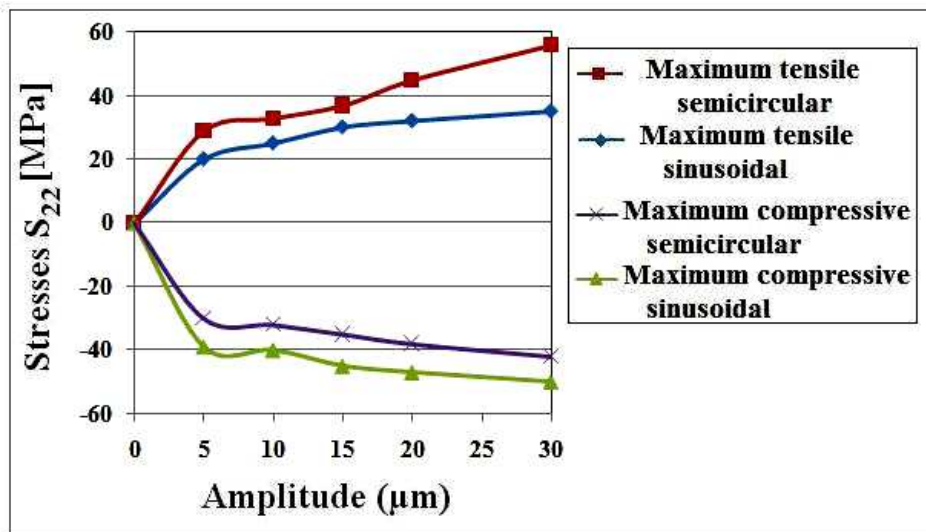


Figure 2-13. Evolution of maximum tensile and compressive stress  $S_{22}$ , after cooling in the TBC layer (near the interface) in terms of asperity amplitude for the semicircular and sinusoidal interface geometry and  $3\mu\text{m}$  final TGO thickness.

Therefore, in the following, the calculations will be limited to the sinusoidal interface according to the following reasons:

- Considering the yield strength  $\sigma_y$ , between 10 MPa to 100 MPa for the TBC layer, we have to avoid from large tensile stress in the TBC layer. Therefore, the sinusoidal asperity

behaviour characterized by less tensile stress is closer to the actual one than the semi-circular one.

- in the chapter 4, to examine the effect of the roughness on the crack propagation in the TBC system, we will consider a more realistic periodic model consisting of two asperities of different amplitudes, 5  $\mu\text{m}$  and 15  $\mu\text{m}$  with the same wavelength and the sinusoidal shape is much more useful to assure the geometric continuity of the profile than the semicircular one.

- finally, in many works [Bia-08], [SAM-02], [ASM-05] and [WLH-02], the more usually accepted interface geometry is considered as sinusoidal that seems to be closer to the actual TBCs geometry.

Considering the yield strength  $\sigma_y$ , indicated in **Tab.2-1** for TBC, BC and TGO, we could be able to wonder the possible crack propagation path depending on the stress state on the system. The TBCs failure modes by cracking and spalling are both dependent on the sign/magnitude of stresses with respect to the relative yield strengths.

Without TGO growth, the peak region of the roughness undulations is subjected to tensile stresses within the top-coat and bond-coat layer. The quantitative values of the stress increase when the amplitude enhances (see **Fig.2-12**). In this case, three regions are possible for crack propagation and the crack length should be a function of the undulations amplitude:

- a pre-existing or initiated cracks at the peak can propagate towards the valley in the TGO/bond-coat interface for amplitude greater than 20  $\mu\text{m}$ , or in the top-coat/TGO interface for all amplitude. However, due to very high compressive stresses at the TBC and BC valley, cracks would not be able to propagate either in the valley region or in the region above (see **Fig.2-11a**).

- the third region concerns the possible propagation of the micro-cracks present at the peak within the ceramic top-coat.

With TGO growth (see **Fig.2-11b, c**), the tensile stress region is developed at the peak of the bond-coat and at the middle of the TBC/TGO interface. A zone of compression is observable at the peak of the TBC layer and the valley region remains in compressive state except for a 5  $\mu\text{m}$  amplitude for which the valley becomes tensile (**Fig.2-12a**). In this case, cracks initiation can take place at the peak of the TGO/BC interface or at the middle of the TBC/TGO wave. At the TGO/BC interface, crack could be propagated toward the valley. This

propagation is attenuated and stopped by the presence of a compressive zone in the valley. Concerning the TBC/TGO interface, the presence of a compressive zone in the peak for all amplitudes and also, in the valley for the amplitudes higher than 5  $\mu\text{m}$  would prevent cracking. These cracks can coalesce through the TGO and thus their linking cause delamination of the system. This cracks propagation deduced from the stresses predicted with our numerical model are in good agreement with the experimental damage observations made by Rabiei and Evans [RE-00] and also with the failure propagation modeling proposed by Bialas [Bia-08], Aktaa et al. [ASM-05] and Freborg et al. [FFB\* - 98]. We will discuss in detail on the possible crack propagations in the next chapters.

### III.4. Effect of thermal cyclic loading

If we examined the effect of the thermal loading cycle upon stresses within the TBC and BC with the two different scenarios presented in **Fig.2-4**, one can see that multiple thermal cycling causes substantially larger TGO thickness in the same interval time in comparison with that of the single cycle. This phenomenon can be easily explained. The oxidation process starts above 900°C and takes place in the time interval  $\Delta t_1$  (see **Fig.2-4**) needed to increase the temperature from 900 to 1000°C, along the heating dwell-time  $t_{\text{oxide}}$  at 1000°C and during the cooling step, in the time interval  $\Delta t_2$  corresponding to the decrease of the temperature from 1000° to 900°C. In summary, for the single cycle, the time of oxidation process is equal to  $\Delta t_1 + t_{\text{oxide}} + \Delta t_2$ . For the multi-cycles scenario, the time of the oxidation process can be formulated as  $n \times \Delta t_1 + t_{\text{oxide}} + n \times \Delta t_2$  and in consequence, a larger TGO thickness is obtained. For example, in the single cycle with  $t_{\text{oxide}} = 20 \times 2$  h the thickness of TGO reaches 3  $\mu\text{m}$  whereas in the multi-cycles with 20 cycles of 2 h, the TGO thickness reaches about 3.25  $\mu\text{m}$ . It is obvious that due to a larger TGO thickness more stress will develop in the system.

In the following, the oxidation time is adjusted in order to get the same thickness value whatever the type of the thermal loading. In this case, it can be seen that the distributions of  $S_{22}$  stresses are almost identical and the difference observed on the minimal or maximal values are not significant. Bialas [Bia-08] has worked on the effect of cyclic loading without crack propagation and showed that these differences on minimal or maximal  $S_{22}$  stresses values were not higher than 2.5% agreeing with our results that are approximately of 2%. Nevertheless, if the material imperfections and cracks propagation are considered in the model, the role of the

thermal cycle becomes very important [Bia-08]. Extensive thermal cycling introduces a different set of stresses caused by phenomena such as TGO growth and/or the imperfections by ratcheting [EMH<sup>\*</sup>-01]. In the heating step, the imperfections can close, whereas in the cooling step the imperfections can open and propagate. In this chapter, we do not consider the presence of the imperfections and the prediction of their development that will be studied in chapter 4.

## IV. Conclusion

Despite the simple phenomenological approach adopted in this work, the proposed non-linear 2D FE model is able to describe efficiently and after experimental validation, the behavior of the TBCs under thermal loading cycle. In our study, even if first each parameter effect has been tested individually as in most of authors work, the main advantage is due to the fact that at fine they are considered simultaneously. Another satisfying aspect of our approach is linked to the possibility to develop the numerical model in order to take into account other parameters such as residual stresses due to the coating process and non-homogenous temperature distribution on the system.

The previous results indicate that:

- i) the stress relaxation during dwell-time by creep and plastic deformation is an important factor in the determination of the residual stress state. These processes strongly influence the stresses after cooling, resulting in a significantly larger lifetime of the coating;
- ii) without TGO growth, the peak regions of the ceramic and bond-coat layers are subjected to tensile stresses and result in possible crack propagation through the asperity interface. However, due to very high compressive stresses in the valley of these interfaces, cracks would not be able to propagate until the valley region;
- iii) with TGO growth, the tensile stress region that develops at the peak of the bond-coat and at the middle of the top-coat should lead to crack propagation at the peak of the TGO/BC interface and at the middle of the TBC/TGO interface. The quantitative values of stress increase when the roughness amplitude of the interface enhances;

iv) for a TBC system without crack propagation modeling, the role of the thermal cycle sequence is quasi unimportant as the high temperature step ( $> 900$  °C) only acts on the final thickness of the TGO layer.

In this chapter we have presented a simple numerical model similar and in good agreement to ones proposed by Bialas [Bia-08], Sfar et al. [SAM-02] and Akta et al. [ASM-05]. Thus, this model is rather realistic and will be used as a reference in the following chapters to model the residual stresses resulting of the spraying process and to consider a non-homogenous temperature through the system.



# ***Chapter 3 - Effect of the non-homogenous temperature distribution and coating process on the final stress distribution***

## **Summary**

---

<b>I. Introduction.....</b>	<b>80</b>
<b>II. Effect of the heat transfers modeling (thermal loading cycle).....</b>	<b>82</b>
II.1. Description of the heat transfer model and temperature boundary conditions.....	82
II.2. Effect of the non-uniform temperature distribution on the TGO layer thickness.....	83
II.3. Effect of the non-uniform temperature repartition on the stress distribution.....	84
<b>III. Modeling of the residual stresses due to coatings process .....</b>	<b>86</b>
III.1. Thermal history .....	87
III.1.1. Step-1: coatings deposition .....	88
III.1.2. Step-2: non-homogenous thermal loading cycle.....	89
III.2. Formation of the residual stresses resulting of the plasma spraying process (Step-1)	89
III.2.1. Effect of substrate pre-heating .....	91
III.2.2. Effect of cooling rate.....	92
<b>IV. Effect of the coating process on the stress distribution on the system after service (Step-2) .....</b>	<b>94</b>
IV.1. Effect of the TGO growth on the residual stresses after in service thermal cycling and coating process .....	94
IV.2. Effect of the pre-heating temperature during coating formation on the stress distribution after in service thermal cycling.....	96
IV.3. Effect of the residual stresses resulting of the coating process on the stress distribution after in service thermal cycling .....	97
<b>V. Crack propagation perspective .....</b>	<b>98</b>
<b>VI. Conclusion .....</b>	<b>99</b>

---



## I. Introduction

Air Plasma Sprayed (APS) thermal barrier coatings protection is widely used to prolong the lifetime of turbine components. Due to the low thermal conductivity of the top-coat, this layer can decrease the substrate temperature by some hundred degrees (*Fig.3-1*) [Bia-08].

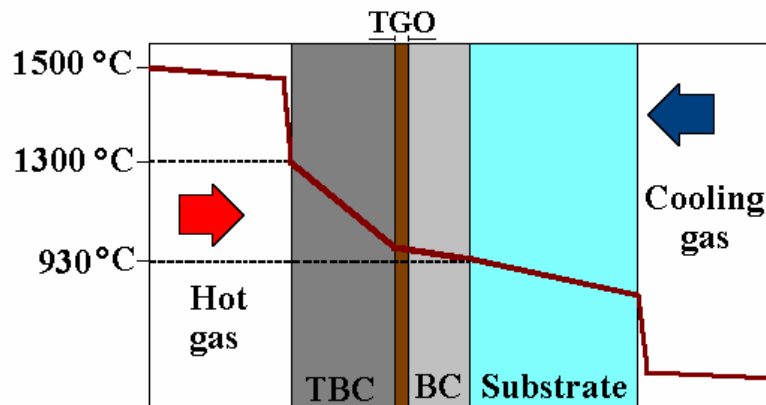


Figure 3-1. Qualitative temperature distribution across the TBC system.

The functionality and reliability of plasma spray coatings are strongly related to microstructure, porosity [PM-93] and residual stresses of thin films and coatings [BP-97], [WLH-03]. In addition, the stress state during service depends crucially on the ratio of the loading rate caused by growth and swelling of the oxide layer, different thermal expansion, interface morphology and the unloading rate by creep and plastic relaxation.

In the previous chapter, the effect of:

- the curvature and height of the interface asperity;
- the volume growth of the oxide layer;
- the sequence of the cyclic loading;
- and the relaxation by creep

on the stress formation during the service was examined. However, the temperature distribution was assumed to be homogenous and the residual stresses appearing during the spraying process were not considered. Therefore, the main objectives of this chapter consists in studying:

- firstly the effect of a non-homogenous temperature distribution due to the thermal conduction in the system;

- secondly, the coating process on the residual stresses in the TBC system.

The coating process consists in the four successive events; namely grit blasting of the substrates prior to bond-coat (BC) deposition, phase transformation, rapid contraction of sprayed splats (quenching stresses) and mismatch of thermal expansion coefficients of the substrate and coatings (thermal stresses) ([BP-97], [WL-03], [KC-91]).

In this chapter, a new step in the understanding of the TBCs behaviour with the objective to increase its performances is presented. A new thermo-mechanical Finite Element Model (FEM) has been developed to represent the non-homogenous temperature distribution due to the different thermal loadings imposed to the top-coat by the hot gases and to the substrate by the cooling gases. In the first part of this chapter, we run this model without considering the coatings process. The numerical simulations take into account the thermal mismatch of the material constituents, oxidation of the bond-coat, complex shape of the TBC/TGO/BC interface and redistribution of stresses via creep. The residual stress distribution given by this new model is compared to this resulting in a homogenous temperature distribution and that has already been described in chapter 2.

The second part of this study focuses on the development of residual stresses during the spraying process of zirconia-based thermal barrier coatings and their effects on the possible crack nucleation in the top-coat. The stress calculation is done as a function of different preheating temperatures of the substrate and different cooling rates.

Finally, the third part is devoted to the study of the stress distribution within the system at the end of a thermal loading cycle while the residual stresses in the top-coat are considered as initial conditions. The results obtained with the non-homogenous temperature model and considering the residual stresses will be compared to those of the model without residual stresses. The different crack path propagation possibilities in the system are also discussed and seems to be in rather good agreement with the experimental observations.

The simulations done in the previous chapter without crack propagation modelling have shown that the effect of the thermal cycle loading sequence on the stress distribution is not important. Thus, in this work, as the crack propagation is still not considered, a single thermal cycle is considered.

## II. Effect of the heat transfers modeling (thermal loading cycle)

In this approach, the TBC/BC rough interface consists in a sinusoidal wavy interface with a half wavelength ( $\lambda/2$ ) of 30  $\mu\text{m}$  and a amplitude (A) equal to 15  $\mu\text{m}$  (see **Fig.2-2b**). The thermally growth oxide, the ceramic and the substrate layers are considered as elastic and viscous materials whereas the BC is an elastic and visco-plastic material. Moreover, the behaviour of the lateral TGO growth as well as the normal one is considered. The model description is precisely given in chapter 2, Section II.

### II.1. Description of the heat transfer model and temperature boundary conditions

This new model considers the thermal transfer between the different layers by conduction, with a perfect contact between the layers and with the surrounding environment by convection. To reduce the complexity of this study, the thermal transfer by radiation is neglected.

During service, the thermal cycle on the top-coat surface consists of three stages (**Fig.3-2**): the heating stage from 25°C to 1300°C in 300 s, followed by a dwell-time at 1300°C during  $t_{oxid}$  seconds and finally, a cooling stage from 1300°C to 25°C in 300 s. The time of oxidation,  $t_{oxid}$  is chosen so that at the end of the heating dwell-time, TGO thickness reaches about 3  $\mu\text{m}$  or 5  $\mu\text{m}$ . In fact, the TBC system is submitted at the top-coat free surface in contact with the hot gas, to a temperature varying from 25°C to 1300°C. Heat is transferred through the system by conduction (see **Tab.2-1** for the material data).

Simultaneously, another thermal boundary condition is imposed at the substrate free surface. It follows the same sequence imposed to the top-coat surface but with the following temperatures: heating from 25 to 400°C, keeping at 400°C during the dwell-time and finally, cooling from 400°C to 25°C. **Fig.3-3** shows the temperature distribution in the system when it has reached the steady state of the dwell-time stage. This distribution seems to be realistic as the temperature field is slightly altered near the TGO layer and as the gradient is much more important in the ceramic layer than in the other layers considering their respective thickness.

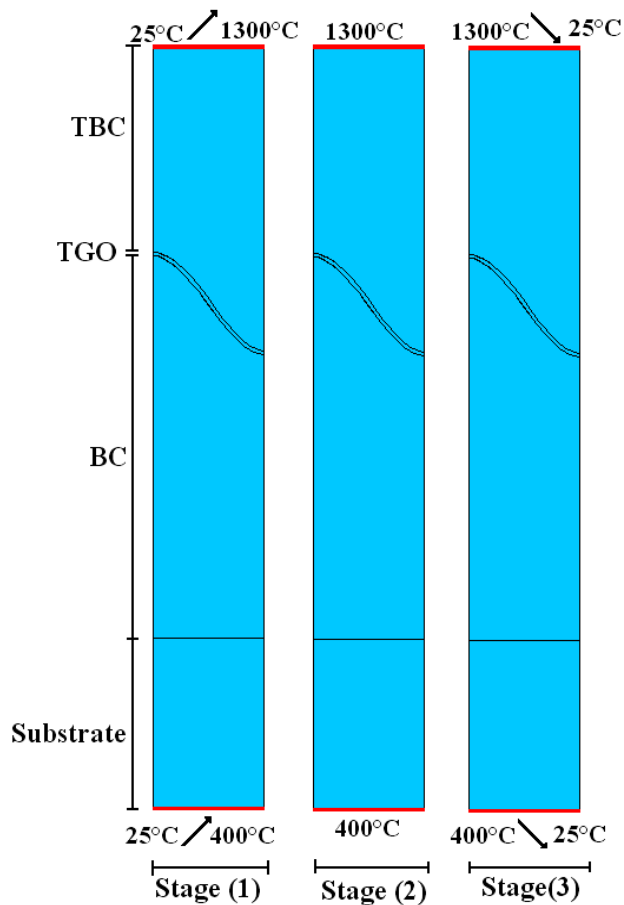


Figure 3-2. Thermal loading of the top-coat and substrate surfaces during the service: surfaces temperature evolutions during the 3 stages of the thermal cycle.

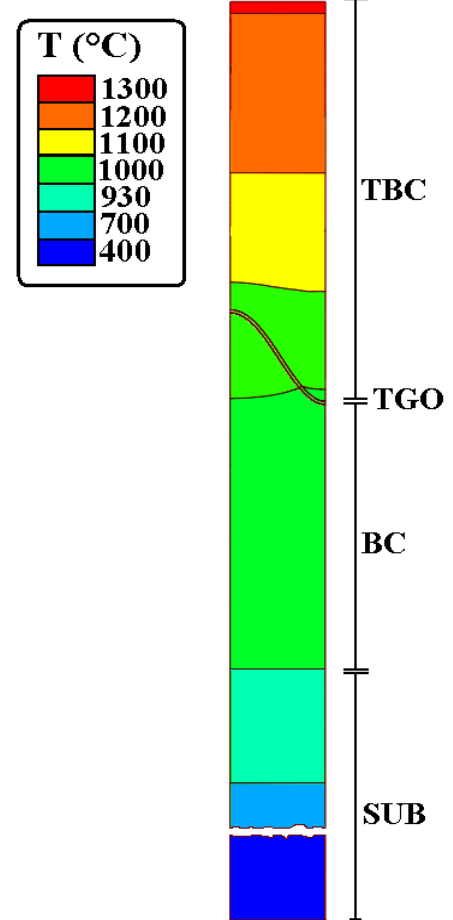


Figure 3-3. Steady state temperature distribution into the system during dwell-time stage.

## II.2. Effect of the non-uniform temperature distribution on the TGO layer thickness

At high temperature, the TGO layer usually forms along the top-coat/bond-coat interface of the TBCs and can be considered as an influent factor on the failure of the coating. In the previous chapter, the homogenous temperature of 1000°C imposed to the whole system during the dwell-time resulted in a uniform TGO layer thickness along the rough TBC/BC interface (*Fig.3-4a* and *Fig.3-4b*).

As the oxidation process starts above 900 °C and increase linearly with temperature, the new heat transfer model that results in a non-uniform temperature distribution lead also to an non-uniform TGO thickness along the interface. *Fig.3-5a* and *Fig.3-5b* represent the

temperature distribution and expansion of the TGO layer at the beginning of the dwell-time and after the  $t_{oxid}$ , dwell-time when the maximum TGO layer thickness at the peak reaches 5  $\mu\text{m}$ . One can see that the growth of the TGO layer is more important in the peak region (5  $\mu\text{m}$ ) where it is hotter than in the TGO valley region (4.4  $\mu\text{m}$ ).

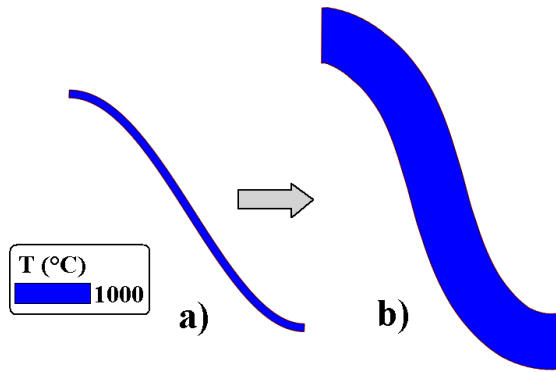


Figure 3-4. Temperature distribution in the TGO layer, a) at the beginning of the dwell-time (TGO thickness is constant and equal to 1  $\mu\text{m}$ ), b) at the end of the dwell-time (5  $\mu\text{m}$  TGO thickness along the whole layer) for an homogenous temperature distribution.

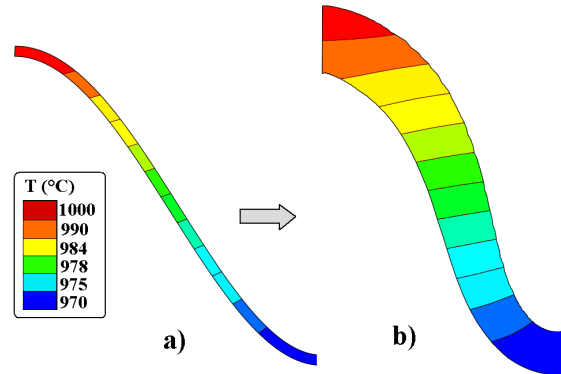


Figure 3-5. Temperature distribution in the TGO layer, a) at the beginning of the dwell-time (TGO thickness is constant and equal to 1  $\mu\text{m}$ ), b) at the end of the dwell-time (5  $\mu\text{m}$  TGO thickness at the peak) for a non-homogenous temperature distribution.

Experimental observations ([HHL\*-99], [TBH\*-08], [NPM-02]) like this in **Fig.1-9** (see for example) show that the TGO layer is generally non-uniform at the ceramic/metal interface and confirm that the conductive heat transfers through the TBC system must be modeled.

### II.3. Effect of the non-uniform temperature repartition on the stress distribution

The numerical results show that for a non-uniform temperature distribution, after 5  $\mu\text{m}$  TGO growth at high temperature and after cooling, a compressive stress appears at the TBC peak in order of -26 MPa (**Fig.3-6a**). At the same time, the tensile zone takes place at the TBC middle region and reaches a value of 12 MPa. Finally, in the asperity valley, the stress distribution is in compressive state with a level of -15 MPa. Concerning the bond-coat layer (see **Fig.3-7a**), an important zone of tensile stresses takes place at the peak (345 MPa) and a zone of compressive stresses at the asperity valley (-180 MPa).

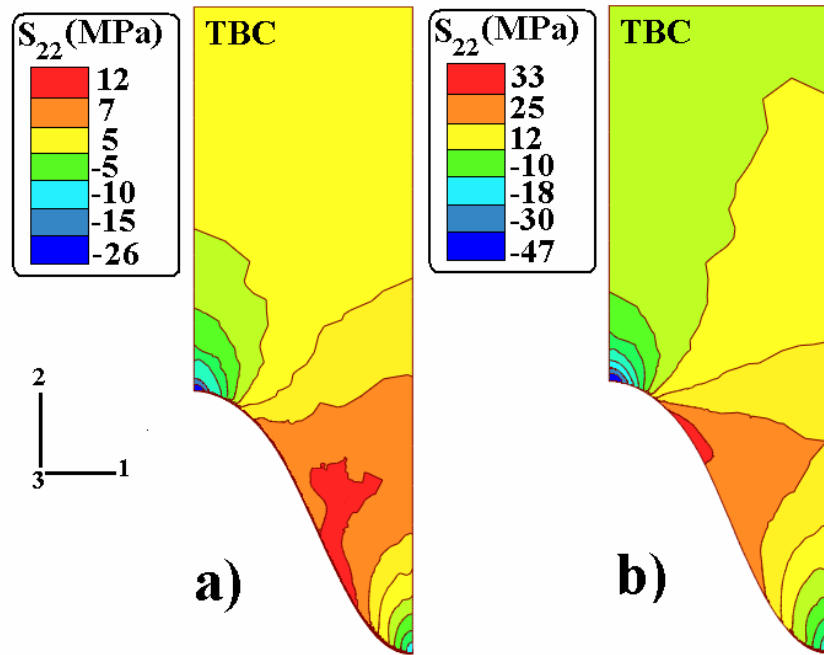


Figure 3-6.  $S_{22}$  stress distribution in the TBC layer, after 5  $\mu\text{m}$  TGO thickness and after cooling, a) non-homogenous thermal model, b) isothermal model.

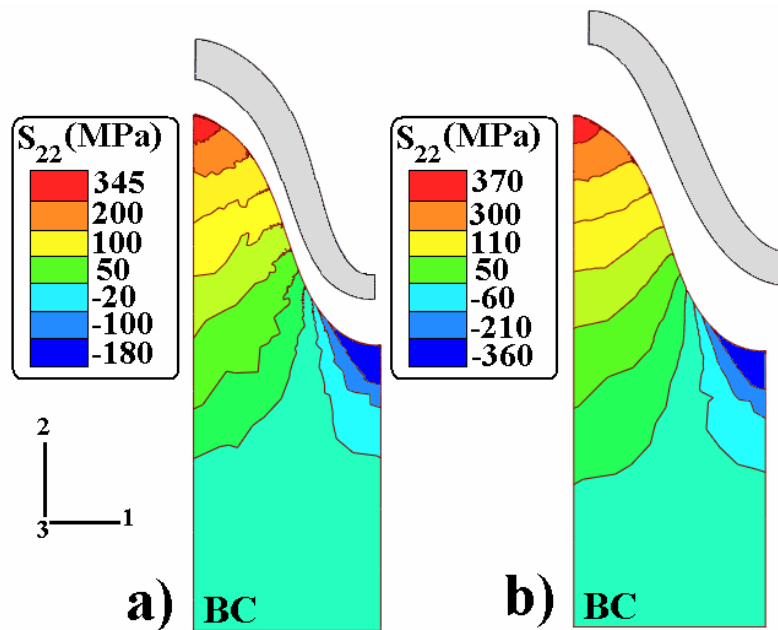


Figure 3-7.  $S_{22}$  stress distribution in the BC layer, after 5  $\mu\text{m}$  TGO thickness and after cooling, a) non-homogenous thermal model, b) isothermal model.

In order to examine the effect of non-uniform temperature distribution on the stress repartition, the stress distribution in the TBC obtained in this case (*Fig.3-6a* and *Fig.3-7a*) is compared with the one obtained in the case of a homogenous temperature distribution (*Fig.3-6b* and *Fig.3-7b*) at the end of the thermal cycle and neglecting the coating process for both cases. As a result, the stress distribution follows the same trend of variations in both cases.



After cooling, in the TBC layer, highly localized tensile stresses in the middle and compressive stresses in the peak and in the valley regions are observed. However, the localization and the value of the maximum tensile stress are different. In fact, for the isothermal distribution, the maximum tensile stress in the TBC is located near the peak region and is higher by a factor about 2.75 in comparison with the non-homogenous one for which it is localized near the valley region (see *Fig.3-6*). At the same time, the stress distribution in the BC layer for the homogenous distribution (*Fig.3-7*) is also more important, probably inducing crack in this region.

These results can be explained through the following reasons: at high temperature, the two functioning modes induce a difference on TGO growth rate and in consequence, a difference on the maximum tensile stress localization. At the same temperature level, the low thermal conductivity of the TBC layer constitutes a thermal barrier to the heat transfer toward the underlying materials. Consequently, for the model leading to the non-homogenous temperature distribution in comparison with one with homogenous temperature distribution, the ceramic layer is hotter inducing more stress relaxation by creep. The same analysis can be applied to the BC layer. Therefore, a non-homogenous temperature repartition strongly influences the residual stresses after cooling, and significantly reduces TBC and BC stresses, possibly leading to a substantial increase in TBCs lifetime.

As a result, to model the in-service stress in plasma sprayed coatings and crack propagation, one first needs to consider a model leading to realistic thermal transfers in the TBC system as the assumption of homogenous temperature distribution in the whole system is overly simplistic.

### III. Modeling of the residual stresses due to coatings process

To get more realistic simulations of the residual stresses in the TBCs, after service, the residual stress generation during the coating process is now considered. It must be noted that in the actual coating process, the thickness of the deposited layers is in order of 13  $\mu\text{m}$  per passage of the plasma gun [BP-97]. The modelling of the residual stress development lamellae by lamellae or layer by layer will lead to more realistic results but will be complex and high CPU consuming. Therefore, a simplified model where the top-coat layer is considered as one

solid block is used to represent the coatings process and to calculate the residual stresses. So, in the first step, a hot TBC block is considered to be instantly in perfect contact with the underlying surface materials as illustrated in **Fig.3-8**. In our model, the thin oxide layer (1  $\mu\text{m}$ ) is present since the first instant of simulation. More details of our approach will be given below, but despite its phenomenological aspect and the lack of fundamental theory, the good agreement between the obtained numerical results and the experimental data of literature shows that our numerical approach is not so unrealistic.

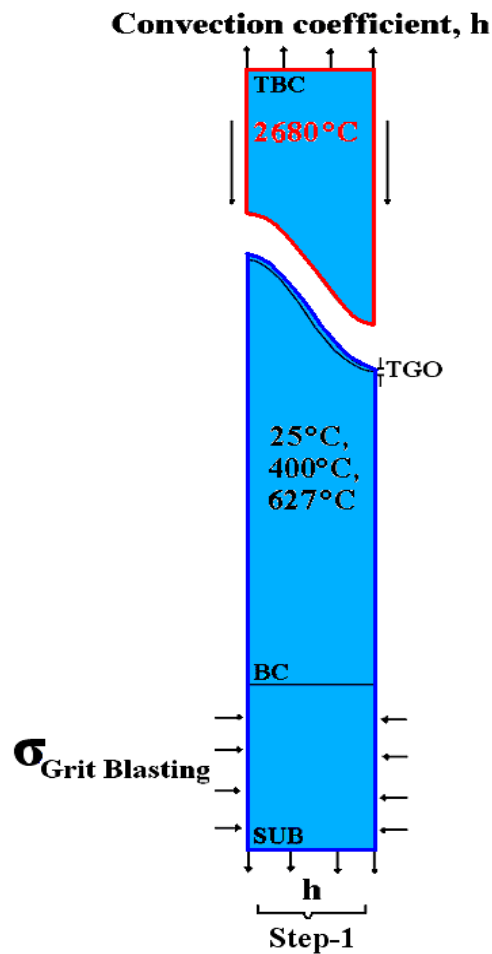


Figure 3-8. Coatings process simulation.

### III.1. Thermal history

The thermal cycle consists of two steps (see **Fig.3-9**):

- first, the deposition of the hot ceramic layer considered as a solid block at the melting temperature onto the surface of the underlying materials (Step-1) of given preheating

temperature, followed by the cooling of the whole system toward the ambient temperature;

- second, the non-homogenous thermal cycle affecting the top-coat during the service (Step-2).

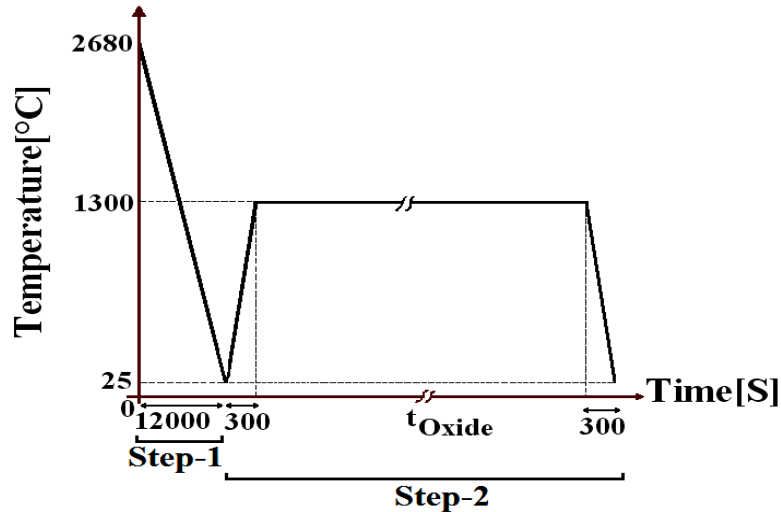


Figure 3-9. Thermal cycle used in FEM simulation.

### III.1.1. Step-1: coatings deposition

In this step, cooling is considered from ceramic coating deposition temperature (2680°C) to the ambient one (25°C) during 12000 seconds (**Fig.3-9**). To calculate the stress generated during spraying, the top-coat layer is considered as a hot block at the melting temperature (2680 °C) [BP-97], [Tri-05] (**Fig.3-8**) and is tied to the underlying materials (substrate +BC +TGO) at a given uniform preheating temperature. This latter is successively considered to be equal to 25°C [WLH-03], 400°C [CVF-06] or 627°C [WLH-03] to study the effect of “substrate pre-heating” (Step-1 in the **Fig.3-8**). The top-coat layer is assumed to be in solid phase at the melting temperature, assuming that the contraction of the material due to the transformation from the liquid phase to the solid phase at constant temperature does not generate significant stresses. To study the effect of different cooling rates on the residual stress distribution within the system, the convection coefficients ( $h$ ) relating to the top-coat and substrate layers is successively equal to 10 W/m<sup>2</sup>K, 25 W/m<sup>2</sup>K or 100 W/m<sup>2</sup>K [WLH-03]. In addition, an initial condition (acting before its sticking with the top-coat block) that consists in a compressive stress in order of -200 MPa is imposed to the substrate to represent

the effect of grit blasting with respect to the measured experimental data of Bengtsson and Persson [BP-97] (see *Fig.3-8*).

### III.1.2. Step-2: non-homogenous thermal loading cycle

During service, the system is submitted to a thermal loading cycle that consists in setting the top coat and substrate surface temperatures following three stages that have already been described in Section III.1 of this chapter (*Fig.3-2* and *Fig.3-9* (Step-2)): the heating stage, followed by a dwell-time and finally, a cooling stage.

## III.2. Formation of the residual stresses resulting of the plasma spraying process (Step-1)

During spraying, the thermal model predicts a rapid decrease in the temperature of the deposited material, from the melting temperature (2680°C) to approximately the preheating temperature of the underlying materials: this temperature is approximately equal to 40 °C, 436 °C and 663 °C for 25 °C, 400°C and 627°C substrate pre-heating temperature, respectively. Thus, by heat conduction, all layers reach a quasi steady-state temperature that leads to the quenching stresses. Simultaneously but with a greater time constant, the thermal transfers of the whole system proceeds by convection with the environment leading to the cooling of the system until 25°C and to the residual stresses formation while the TBCs temperature decreases.

The quenching stresses cause the substrate to expand and the deposit to shrink leading to tensile stresses in the top-coat layer [MS-03]. During cooling to room temperature, the difference in thermal expansion coefficients between the coating and the substrate cause compressive stresses that are superimposed with the top-coat quenching stresses.

Simulations show that after spraying (and full cooling), the final stresses generated in the top-coat for a 400°C substrate pre-heating temperature and a convection coefficient of 25 W/m<sup>2</sup>K are compressive (~ -17 MPa), except a small tensile zone (~ 18 MPa) located at the valley region (see *Fig.3-10a*). This result is due to larger thermal stresses with respect to the quenching ones in the TBC. In the bond-coat, the residual stresses are found to be predominantly in tensile state (~ 66 MPa) except for a small zone in compressive one at the valley region.

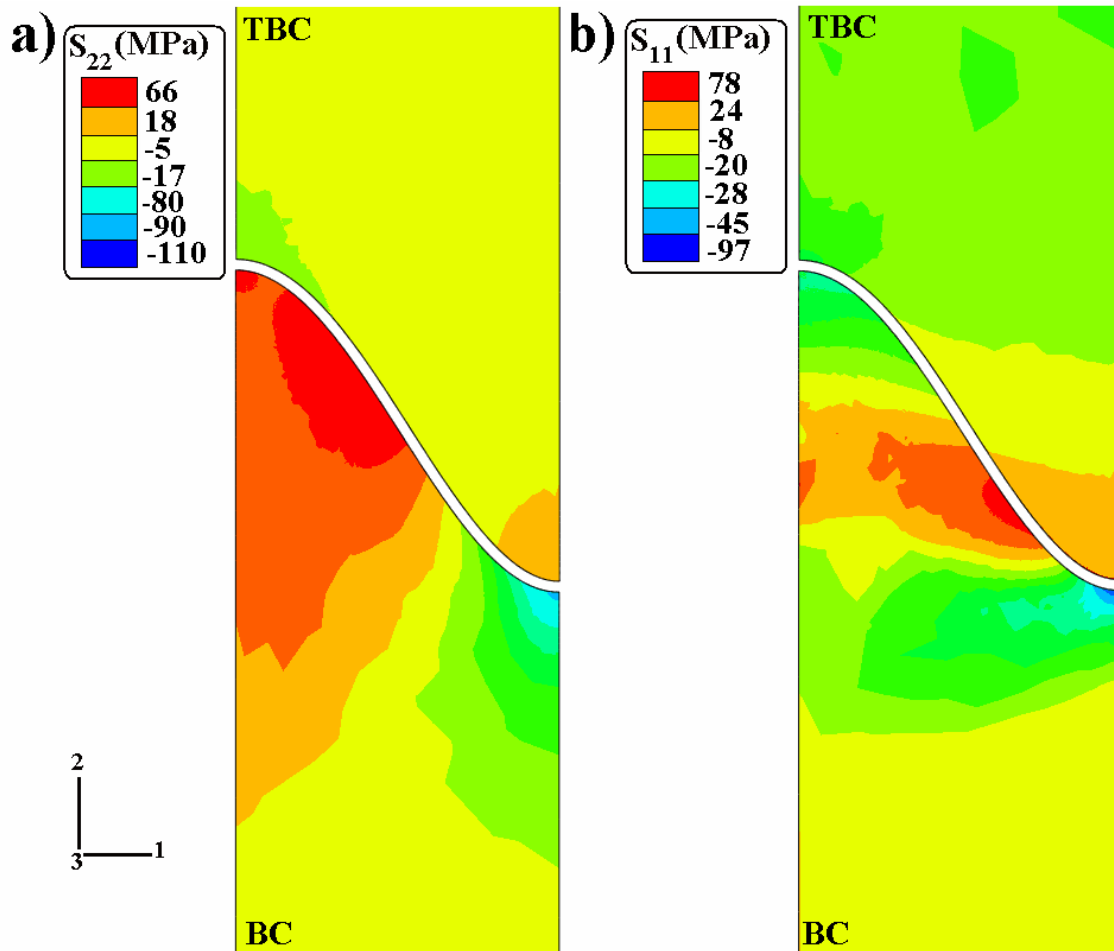


Figure 3-10. Residual stress (a- $S_{22}$  and b- $S_{11}$ ) generated by the spraying process for a 400°C substrate pre-heating temperature and a 25 W/m<sup>2</sup>K convection coefficient for the cooling step.

Concerning the  $S_{11}$  stresses (*Fig.3-10b*), we can observe the same qualitative distribution on the TBC layer in comparison to the  $S_{22}$  stress distribution with a slightly more important values. The maximum compressive stresses on the TBC appears at the peak (-20 MPa) and the maximum tensile stresses appears at the valley (24 MPa).

Note that the normal stress components  $S_{11}$  and  $S_{22}$  lead to the much more likely mode I fracture. It is known that the crack at the interfaces and between the lamellas leading to the delamination of the TBC layer is due to the effect of the  $S_{22}$  component whereas the vertical crack is due to the effect of the  $S_{11}$  component. In the future, we are looking after modeling of the horizontal crack propagation between the lamellas of the coatings and also at the TBC/TGO and TGO/BC interfaces. For these reasons, the stress component associated to the numerical simulations will be considered as  $S_{22}$  stresses.

The coatings failure modes by cracking and spalling are both dependent on the sign/magnitude of residual stresses with respect to the relative yield strengths of coatings [Tei-02]. Considering the yield strengths of the top-coat (**Tab.2-1**), **Fig.3-10** predicts that micro-crack probably can be formed near the peak of the TBC/TGO interface due to coating buckling. Additionally, horizontal micro-cracks between the lamellas may be appeared. These micro-cracks could propagate along the interface of the ceramic layer.

In the bond-coat, the level of the residual stresses remains lower than the yield strength value ( $66 \text{ MPa} < 270 \text{ MPa}$ ). Thus, the coatings process does not seem to damage the integrity of the bond-coat.

To justify the simplified approach adopted in our coating process simulations, a comparison of our predicted results with the experimental ones of Bengtsson and Persson [BP-97], Widjaja *et al.* [WLH-03] and Matejcek *et al.* [MS-03] has been carried out. Bengtsson and Persson [BP-97] measured the residual stress profiles in all samples by the modified layer removal method for a pre-heating temperature equal to  $100 \text{ }^\circ\text{C}$ . XRD (*X-ray diffraction*) strain measurement were made by Widjaja *et al.* [WLH-03] for a pre-heating temperature equal to  $627^\circ\text{C}$  on the surface of  $\text{ZrO}_2$  top-coat of various specimens using a Cu-target and a diffractometer that consisted of a goniometer, a rotating anode generator and a detector interfaced to a VAX computer terminal. Matejcek *et al.* [MS-03] performed additional measurements during spraying by the Tecnar DPV2000 in-flight particle diagnostic system to link the in-flight parameters with the coating residual stress for a preheating temperature equal to  $650^\circ\text{C}$ . The distribution and magnitude of our predicted stresses in the top-coat layer after coating process ( $-17 \text{ MPa}$  for  $S_{22}$  stress and  $-20$  for  $S_{11}$  stress) are in good agreement with their reported experimental data that range from  $-14 \text{ MPa}$  to  $-92 \text{ MPa}$ . According to this comparison, the modeling of the coating process by the deposition of a hot block can be acceptable.

### III.2.1. Effect of substrate pre-heating

The effect of the initial pre-heating temperature of the underlying materials ( $25^\circ\text{C}$ ,  $400^\circ\text{C}$  or  $627^\circ\text{C}$ ) on the residual stress distribution after coating process and after cooling (managed by a coefficient of convection equivalent to  $25 \text{ W/m}^2\text{K}$ ) is summarized in **Fig.3-11**. The stress repartition along the TBC/TGO interface is expressed in terms of the projected position on the horizontal axis (from peak  $x=0$  to valley  $x=30 \text{ }\mu\text{m}$ ). Higher pre-heating

temperature leads to lower stresses generated during the spraying process. Thus, as expected, the pre-heating temperature of the substrate of 627°C has a greater effect to reduce the stress than for 400 or 25°C. For 627°C temperature, a very small area of low tensile stress with a magnitude of approximately 12 MPa appears at the valley region of the TBC.

According to Eq. (1-3), the pre-heating process reduces the tensile quenching stress within the coatings. Moreover, the area of compressive thermal stress is more extended when the ceramic layer is cooled to room temperature. These results explain why in most applications, substrate is preheated prior to the deposition process to reduce the detrimental residual stresses and ultimately, to achieve a reliable TBC component. Substrate temperature can theoretically be adjusted to get the appropriate coating porosity. This latter can be increased to improve the thermal protection capability [ZSB<sup>\*</sup>-03] by decreasing the substrate preheating temperature, therefore the resulting actual coating adhesion is usually lower.

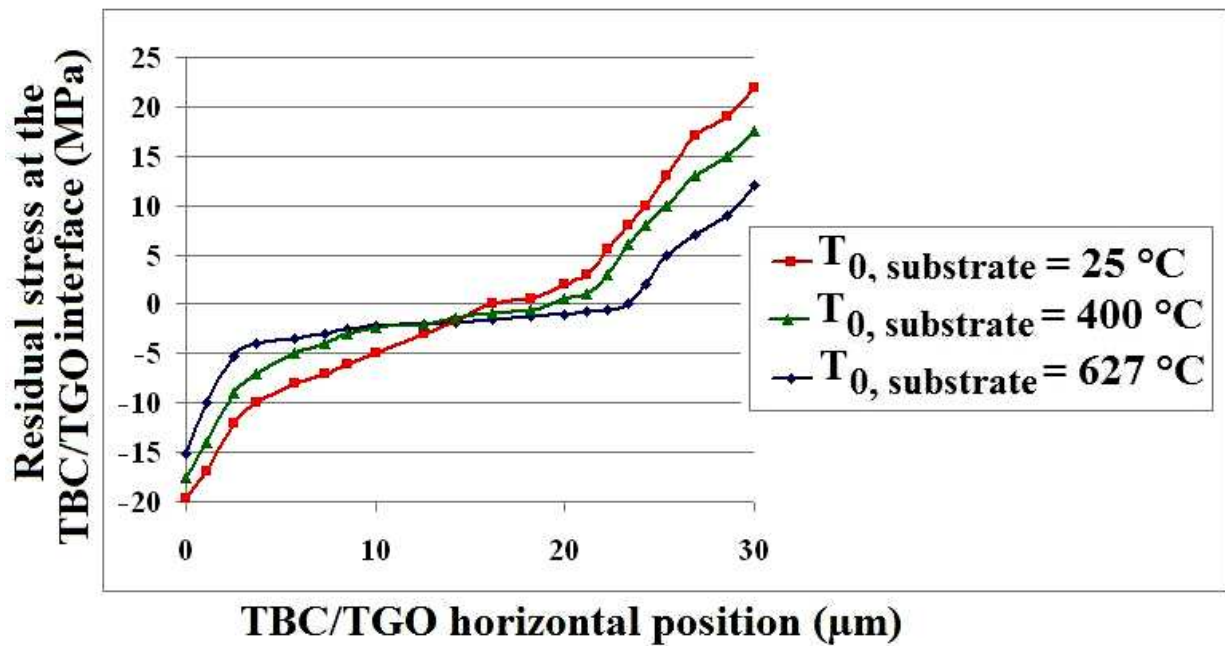


Figure 3-11. Effect of substrate pre-heating on the residual stress generated after spraying process in the TBC/TGO versus horizontal position.

### III.2.2. Effect of cooling rate

To understand the effect of the cooling rate on the system, different convection coefficient (10 W/m<sup>2</sup> K, 25 W/m<sup>2</sup> K, and 100 W/m<sup>2</sup> K) are considered with a constant substrate pre-heating temperature of 400°C (see *Fig.3-12*). The  $S_{22}$  residual stress distribution in the top-coat and along the TBC/TGO interface expressed in terms of the horizontal position

shows that the residual stresses after total cooling are slightly higher for high convection coefficient. As more heat is dissipated toward the environment for higher convection coefficient, it results in less heat being transferred by thermal conduction toward the underlying levels. As sprayed lamellas lose their heat rapidly it leads to higher quenching stresses that dominate the overall magnitude of the residual stresses [WLH-03]. Despite this detailed analysis, the effect of cooling rate seems to be less important in comparison to the effect of the pre-heating substrate temperature.

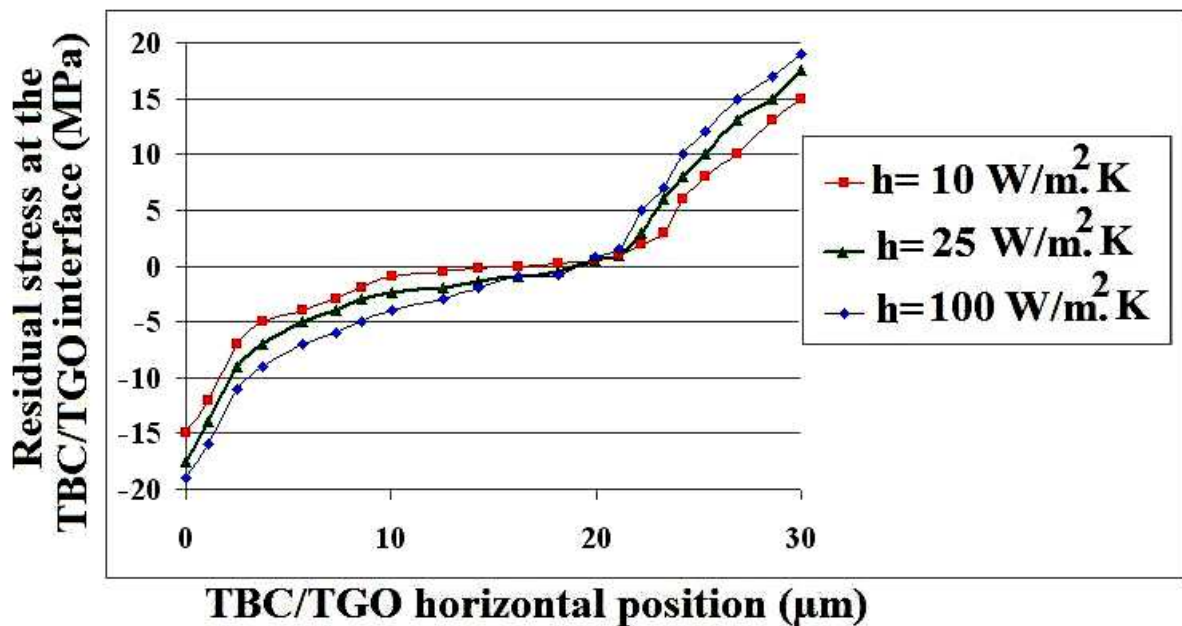


Figure 3-12. Effect of cooling rates on the residual stress generated after spraying in the TBC/TGO versus horizontal position.

Conclusion about residual stresses due to coating formation: the results of section III.2 of this chapter (III.2.1 and III.2.2) show that the role of residual stresses due to the coating formation is significant and can initiate the failure mechanisms especially during the deposition of the ceramic top-coat where micro-cracks can appear. Thus, in the following of the study, we will consider the coatings residual stresses as initial conditions of the numerical simulation at the beginning of the step-2 called “thermal cycle” even if stress relaxation due to failure is not modelled.



## IV. Effect of the coating process on the stress distribution on the system after service (Step-2)

In this part, the effect of the residual stresses due to the coating formation on the final stress distribution after thermal cycling is studied. During service or heat treatment, the stress state of the ceramic layer can evolve due to the thermal growth oxide and stress relaxation by creep during the high temperature operation stage. In subsection IV.1 of this chapter, the final stress distribution in the system is presented as a function of TGO thickness. The effect of the pre-heating temperature during the coating process on the final stress distribution will be investigated in subsection IV.2. Finally, a comparison of cases with and without residual stresses due to the coating process as an initial condition is carried out in the subsection IV.3.

### IV.1. Effect of the TGO growth on the residual stresses after in service thermal cycling and coating process

For the TBC layer, the numerical results associated to a 400°C underlying pre-heating temperature and a 25 W/m<sup>2</sup> K convection coefficient show that after service for a constant TGO thickness of 1 μm, the tensile zone existing after spraying process, in the “valley” region (*Fig.3-10*), moves to the “peak” region and reaches a value of 20 MPa (*Fig.3-13*). At the same time, in the valley asperity, the stress distribution becomes in compressive state with a level of -44 MPa.

Due to the thermal gradient in the system associated to the TGO growth modeling, a non-uniform TGO layer with an important thickness in the peak region develops. For a 3μm and 5μm TGO thickness and after cooling (*Fig.3-14* and *Fig.3-15*), the compressive stress zone takes place at the “peak” of the TBC layer (-34 MPa and -41 MPa respectively). The tensile zone extends toward the middle region and reaches a value of 25 MPa for 3μm TGO growth and 29 MPa for 5μm TGO growth. Finally, the area of compressive stresses at the valley asperity becomes small and less important. Briefly, continuing the oxidation process results in an increase in the size of the tensile region in the direction of the valley.

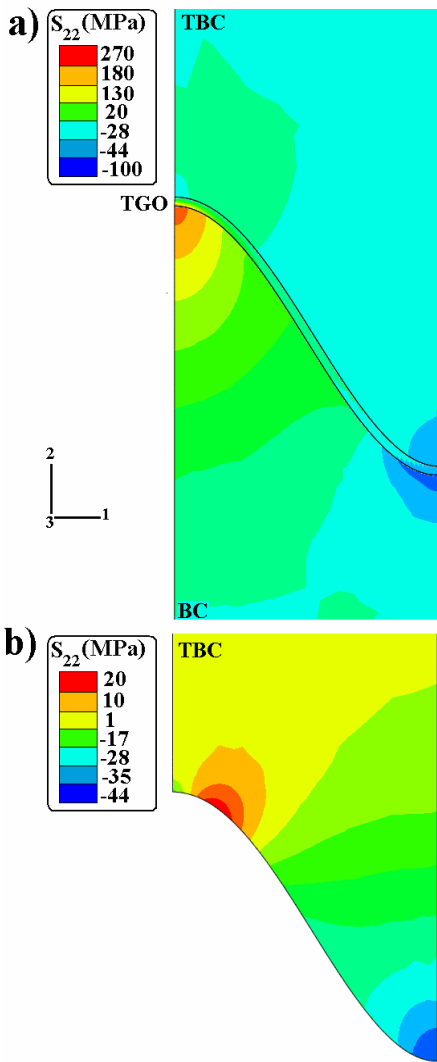


Figure 3-13.  $S_{22}$  stress distribution after cooling for a 1  $\mu\text{m}$  constant TGO thickness a) in the TBC system, b) in the TBC layer.

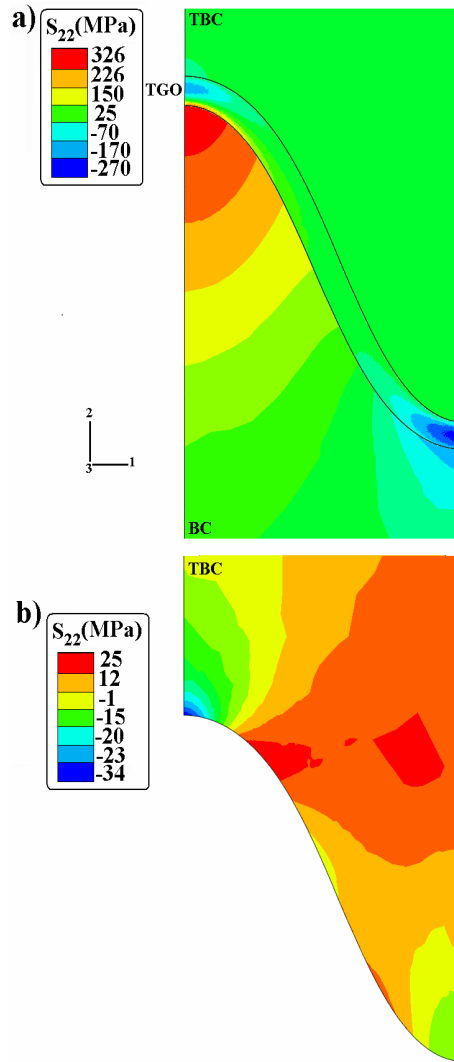


Figure 3-14.  $S_{22}$  stress distribution after cooling for a 3  $\mu\text{m}$  final TGO thickness, a) in the TBC system, b) in the TBC layer.

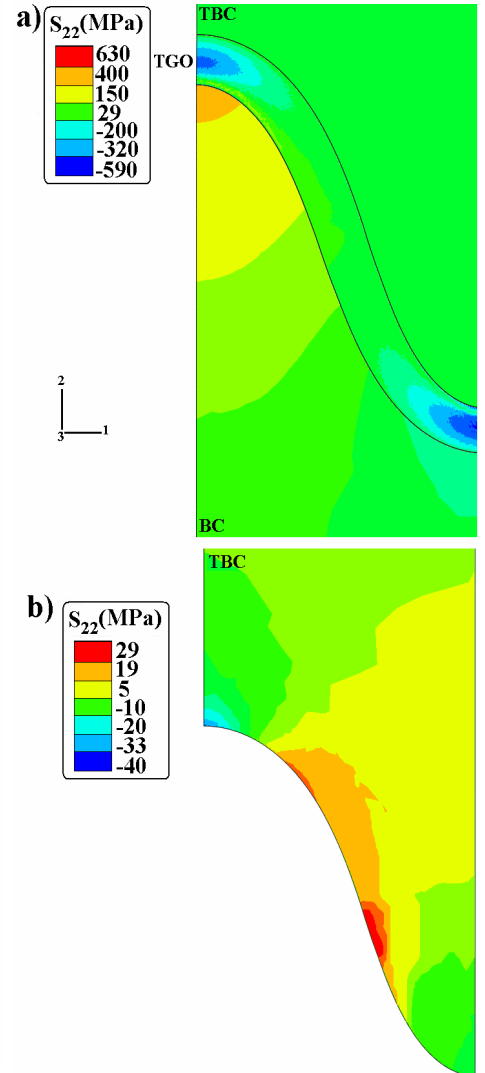


Figure 3-15.  $S_{22}$  stress distribution after cooling for a 5  $\mu\text{m}$  final TGO thickness, a) in the TBC system, b) in the TBC layer.

Concerning the bond-coat layer, for each oxide thickness, the maximal tensile and compressive stresses remain at the peak and valley region, respectively. These values, greater than the yielding threshold ( $> 270$  MPa), show that their effects on the deterioration of the system at the end of Step-2 should be considered.

The stress level in the TGO is not important when its thickness is thin (see *Fig.3-13*). This layer can be seen under extreme compressive and tensile stresses with growth of the oxide layer (see *Fig.3-15*).

## IV.2. Effect of the pre-heating temperature during coating formation on the stress distribution after in service thermal cycling

In order to examine the role of the different pre-heating temperature during the coating process (Step-1), the final stress distribution (Step-2) in the TBC layer and along the materials interface is presented in *Fig.3-16 a, b, c* in terms of the projected position of the interface abscissa on the horizontal axis (from peak  $x=0$  to valley  $x=30\ \mu\text{m}$ ) for a  $5\ \mu\text{m}$  TGO thickness.

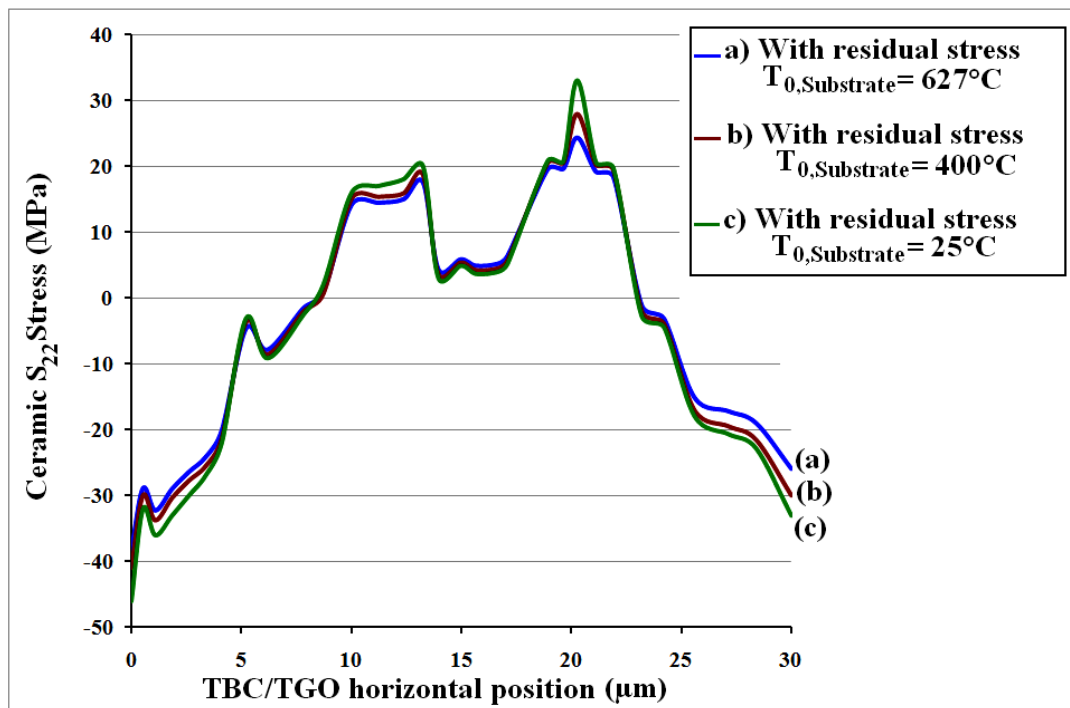


Figure 3-16. Effect of the residual stresses on the final stress distribution in the ceramic layer and along the interface in terms of the projected position of the interface abscissa on the horizontal axis (from peak  $x=0$  to valley  $x=30\ \mu\text{m}$ ) after service for a  $5\ \mu\text{m}$  TGO thickness and different pre-heating temperature.

After cooling, the residual stress distribution follows the same trend of this obtained at the end of the coating process for the different pre-heating temperature value ( $627^\circ\text{C}$ ,  $400^\circ\text{C}$  or  $25^\circ\text{C}$ ). A highly localized tensile stresses can be localized in the middle and a compressive stresses in the peak and in the valley regions, respectively. Note that the tensile stress zone is non-uniform as two zones of maximum tensile stresses can be observed. The first one is located between  $10\ \mu\text{m}$  and  $15\ \mu\text{m}$  in the horizontal position with a value of about  $20\ \text{MPa}$  and the second appears approximately at  $23\ \mu\text{m}$  in horizontal position with a magnitude about  $30\ \text{MPa}$ . Finally, *Fig.3-16* shows that the values of the pre-heating temperature do not affect the

final stresses for models without crack propagation but can explain and predict, on the basis of the residual stress state, the micro-cracks nucleation and failure on the ceramic layer after Step-1.

### IV.3. Effect of the residual stresses resulting of the coating process on the stress distribution after in service thermal cycling

Up to now, the evolution of the residual stress between the coating process (Step-1) and the in-service thermal cycling has been investigated. Now, in **Fig.3-17**, a comparison of the residual stresses after thermal cycle (Step-2) with (case a) and without (case b) considering the stress state due to coating formation (Step-1) is done. The  $S_{22}$  stress distribution in the TBC along the interface for both cases with a non-homogenous temperature distribution and with a final 5  $\mu\text{m}$  TGO thickness at the peak of the oxide layer is presented. The location and the magnitude of the maximum tensile stresses are not identical. In fact, for the model with Step-1 there are two maximum tensile stresses whereas in the case without Step-1, the tensile stress zone is very homogenous and located at 20  $\mu\text{m}$  in horizontal position. In addition, the stress generation in the case with Step-1 is more important ( $\sim 29$  MPa) in comparison to the one obtained without Step-1 ( $\sim 12$  MPa).

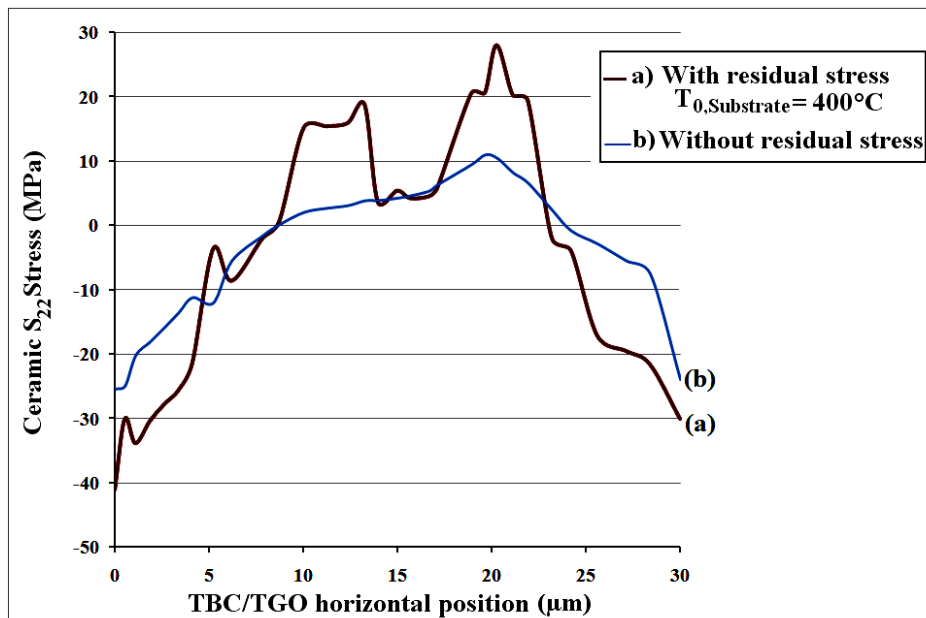


Figure 3-17. Comparison between the final stress distribution in the ceramic layer and along the interface in terms of the projected position of the interface abscissa on the horizontal axis (from peak  $x=0$  to valley  $x=30 \mu\text{m}$ ) after service and 5  $\mu\text{m}$  TGO growth, obtained in the case (a) with residual stresses and (b) without residual stresses.

This comparison leads us to affirm that the effect of the residual stress generated after coating process on the final stress distribution cannot be neglected. The results could be significantly different by considering the cracks formation and propagation in the model.

## V. Crack propagation perspective

We know that many different failure modes can occur in the TBCs, depending on the coating process, interface morphology, TGO growth ... etc. According to the specific model and parameters presented in section III.2, an overall view of the cracking process begins to emerge from these results in the thermal barrier coatings system with respect to the relative yield strengths,  $\sigma_y$  of the TBC, BC and TGO layers (see *Tab.2-1*).

For each oxide thickness (see *Fig.3-13*, *Fig.3-14* and *Fig.3-15*), if a micro-crack is present at the peak of TGO/BC interface, it can propagate toward the valley according to the “mechanisms I” described in the micrograph of the actual TBC system and presented in *Fig.3-18*. Nevertheless, its propagation is attenuated and stopped by the presence of a compressive zone in the valley. Moreover, in the case of thin TGO thickness, the initiated micro-crack after Step-1 at the near-peak of the TBC/TGO interface can be favorable to propagate toward the valley and the peak regions “mechanisms II”. However, cracking over the valley locations, is still difficult due to compressive stress.

For long time of oxidation and therefore higher oxide thicknesses, cracking over the TBC peak becomes less favorable while cracking at the TBC near-peak, middle and valley locations becomes easier. Thus, increasing the time of oxidation will develop the stress and favor the crack growth over the valley. The cracking at the TBC/TGO and TGO/BC interfaces will be able to coalesce through the TGO layer and then cause the delamination of the system following “mechanism III”.

An overview of actual micro-cracks propagations presented in *Fig.3-18* approves the accuracy of the present analysis done by post-processing the numerical stress fields [RE-00] even if is only based on the  $S_{22}$  stress. The arrows show the "mechanism I" of crack propagation at the TGO/BC interface, and "mechanism II" at the TBC/TGO interface. Linking the micro-cracks across the interfaces and within TBC through the TGO (“mechanism III”) could lead to a coating delamination in the system. The progression of cracks deduced from the stress predicted with the current model is also in good agreement with the failure progression modeling proposed by Freborg et al. [FFB\* -98].

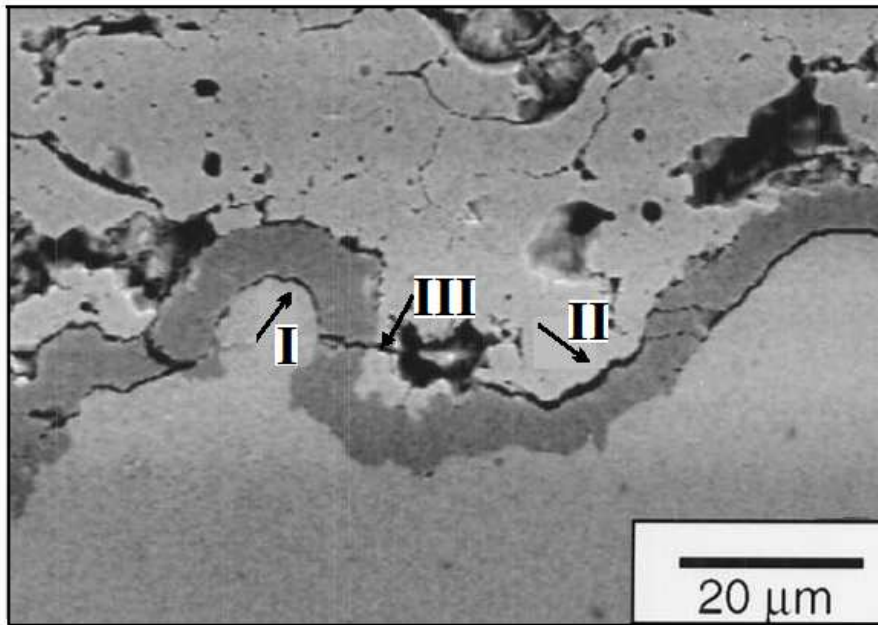


Figure 3-18. Overview of the TBC revealing the crack patterns. The arrows show the micro-cracks propagation in the TBC/TGO, TGO/BC interfaces and their coalescence [RE-00].

## VI. Conclusion

Among many factors affecting the durability and the failure mechanisms of thermal spray coatings in service, the residual stresses due to the coating process and temperature gradient play important roles. Numerical simulations based on the FE method was used to analyze the effect of residual stress on crack formation due to top-coat solidification and to wonder the crack path propagation during thermal cycling of a typical plasma sprayed TBCs. A non-homogenous temperature distribution due to thermal conduction phenomena was modeled including several phenomena: residual stress generated during the spraying of coatings, thermal mismatch of the material constituents, thermal growth oxide layers and creep in all layers and plastic deformation in the bond-coat during operation of the system.

The results show that after coating process, the residual stresses in the TBC peak region of the asperity are in compressive state. It is probable that, due to coating buckling, micro-cracks appear near the peak of the TBC/TGO interface. In use, these micro-cracks will probably propagate and coalesce with cracks already propagated at the TGO/BC interface and through the TGO. Thus, their link can cause delamination of the TBC layer.

The results considering a non-homogenous temperature distribution through the TBC system show that the oxide formed on rough TBC/BC interface during service has an intrinsically different morphology and different growth rate compared to those formed when considering a homogenous temperature. In addition, the predicted results show a large difference between maximum values of tensile stress observed with and without the heat transfer model that results in non-homogenous and homogenous temperature distribution, respectively. The lower values obtained for a non-homogenous temperature distribution should reduce the possibility of failure of the TBCs and lead to an increase the lifetime of the system.

Briefly, in this chapter, a more realistic model but without modelling the crack propagation in the system has been developed. In the following chapter, we will really simulate the crack propagation in the TBC/TGO and TGO/BC interfaces for a uniform and non-uniform sinusoidal asperity. After that, the numerical model will be used in order to follow, in situ, the development of a defect and predict its effect, under different thermal loading cycle, on the overall lifetime of TBCs. With this objective, further chapter would require to consider an anisotropic layer structure with features like porosity due to the lamellas stacking and to use an innovative numerical procedure able to debond the interfaces between lamellas or between the TBC/TGO and TGO/BC.





# *Chapter 4 - Crack modelling on the system*

## **Summary**

---

<b>I. Introduction.....</b>	<b>104</b>
<b>II. Modeling of crack development: procedures and assumptions .....</b>	<b>106</b>
II.1. Interface specification for crack propagation .....	107
II.2. Crack propagation tool in Abaqus: “Debond” tool.....	107
<b>III. Part A: Crack development at the TBC/TGO and TGO/BC interfaces for a homogenous ceramic layer .....</b>	<b>110</b>
III.1. Development of the cracks in the case of rugosity with an uniform amplitudes (15 $\mu$ m) .....	113
III.1.1. Without TGO growth .....	113
III.1.2. With TGO growth .....	115
III.2. Development of the cracks in the case of dissimilar amplitudes of neighbor rugosities (15-5 $\mu$ m).....	117
III.2.1. Without TGO growth .....	117
III.2.2. With TGO growth .....	119
III.3. Partial conclusion .....	120
<b>IV. Part B: Crack development in a heterogeneous ceramic layer .....</b>	<b>121</b>
IV.1. Effect of the TGO growth on the crack propagation in the case of uniform amplitudes (15 $\mu$ m).....	125
IV.1.1. Without TGO growth .....	125
IV.1.2. With TGO growth: 3 $\mu$ m.....	125
IV.1.3. With TGO growth: 5 $\mu$ m.....	128
IV.1.4. With TGO growth: 7 $\mu$ m.....	128
IV.2. Effect of the interface morphology on the crack propagation in the case of 3 $\mu$ m TGO thickness .....	129
IV.3. Determination of the critical TGO thickness leading to the TBC layer delamination according to the interface morphology.....	131
IV.4. Discussion .....	132

IV.5. Effect of thermal loading cycle on the crack propagation .....	134
<b>V. Conclusions .....</b>	<b>136</b>

---

# I. Introduction

The major weakness of TBC system is located at the interface between the metallic bond-coat and the ceramic top-coat. At this interface, an in-service degradation is usually observed leading to a macroscopic spallation of the ceramic layer [ML-82]. The interface regions undergo high stresses due to the mismatch of thermal expansion between BC and TBC. Additionally, growth stresses due to the development of thermally grown oxide (TGO) at the interface and stresses due to the interface roughness are superimposed. Stress relaxation leads generally to reduced stress level at high temperature, but can give rise to enhanced stress accumulation after thermal cycle resulting in early crack initiation at the TBC/TGO and TGO/BC interfaces and spallation failure after-wards [EMH\* -01].

Several finite element simulations of this process have been performed in the previous chapters. In chapter 2, the temperature distribution on whole TBCs system was considered as homogenous. The effects of the shape and height of the interface asperity, plastic, creep deformation and oxidation at the bond-coat/top-coat interface on the residual thermal stresses in thermal barrier coatings have been numerically simulated. It was demonstrated that the stresses in the TBCs, during the high temperature, are strongly influenced by creep properties of the TBC, BC and TGO layers.

In chapter 3, an additional model that considers the thermal conduction in the whole system and the convection with the surrounding environment leading to a non-homogenous temperature distribution has been proposed to improve the thermo-mechanical behaviour prediction of the thermal barrier coatings system. This model was used to describe the residual stress resulting from the plasma spraying process of a zirconia based thermal barrier coating. Moreover, this model was used to study the stress distribution in the system at the end of the thermal loading cycle while the residual stresses in the top-coat (due to the coating process) were considered as initial conditions. Thus, this model can be considered as sufficiently reliable to be developed with the objective to model the crack propagation.

The micro-structure of plasma sprayed coatings presents a porous and lamellar structure that consists in splats with micro-cracks normal to the interface so-called “vertical cracks” and of splats that are separated by inter-lamellas pores so-called “horizontal cracks” resulting from the rapid solidification of the lamellae. These very fine voids are formed by incomplete inter-

splat contact or around un-melted particles. Cracks formation and propagation play a key role in determining the thermo-mechanical behaviour of the coatings during service. Vertical cracks provide mechanic coating compliance that is important during thermal cycle [GVS-04]. Horizontal cracks reduce the thermal conductivity and hence increase the temperature drop across the coating. However, these latter also lead to spallation of the coating. As shown by experiments [Tei-01] and simulations of chapter 3, the initial TBC failure closely depends on the residual stress state due to the coating process. The apparition of cracks perpendicular to the interface is the best way to relax these stresses. Perpendicular cracks are generally obtained by the EB-PVD process that favors a columnar structure and less obtained by conventional plasma spraying. Solution or suspension plasma spraying that leads to a more refined microstructure seems to be a promising way to improve the mechanic compliance of the coating.

In the previous chapter, the crack propagation possibilities were predicted after analysis of the tensile stresses normal to the interface within the TBC system. The increase of the TGO layer induces an important tensile zone on the TBC, BC layer and TGO itself. These zones may lead to the crack initiation and propagation in the interfaces, within the TBC and the TGO layers. The critical zones have been observed at the “peak” of TGO/BC interface that was named “mechanism I” and at the “middle” of TBC/TGO interface that was named as “mechanism II”. Linking of the micro-cracks at the ceramic/metal interface, through the TBC and TGO layer could lead to ultimate spallation failure of the TBC (mechanism III). These three failure mechanisms that correspond to different scenarios of cracks formation have been experimentally studied by Nitin *et al.* [NPM-02] for thermal barriers developed by atmospheric plasma spraying (APS). More details of these mechanisms are given in Chapter 1, Section V.3.1.

Chapter 4 consists of two parts dealing with cracks propagation and using the thermo-mechanical model developed in chapters 2 and 3. Remember that it is already able to predict a non-homogenous temperature distribution, to take into account the effects of the residual stresses due to coating formation, the morphology of the top-coat/bond-coat interface, the oxidation and the creep behaviour.

In the first part of this chapter, the FEM model is developed to evaluate the stresses induced by the thermal cycling and to predict simultaneously the crack development along the TBC/TGO and TGO/BC interfaces for a TBC system composed of homogeneous layers. This model is extended to simulate the crack propagation along the TGO/bond-coat and top-

coat/TGO interfaces by using the unbuttoning or “*Debond*” technique that consists to separate mesh grid nodes, leading to propagate a defect according to a realistic stress criterion. All the layers are considered as homogenous but local adhesion defects at the interfaces are defined as initial conditions by unbuttoning several nodes between the materials. The crack propagation paths in mode I, correspond to interfaces between layers. It is investigated for different amplitudes of a sinusoidal interface and considering the evolution of the TGO thickness. Thus, this model is able to predict the effect of the crack propagation on the stress redistribution in the system.

In the second part (B), an extension of the thermo-mechanical model described in chapter 2 and 3 considering a heterogeneous ceramic layer is presented. The ceramic layer is composed of several lamellas with respect to the different conditions obtained by the experimentally data (porosity level, lamellas size, ..., etc). This model will be able to predict the crack development at the TBC/TGO, TGO/BC interfaces but also between the lamellas composing the ceramic by unbuttoning their interfaces. Simulations are performed with a geometry corresponding to identical or dissimilar amplitude of asperity and for different TGO thickness. Finally, results will be analyzed and in consequence, propositions to increase the in-service lifetime of the thermal barrier coating system will be presented.

## II. Modeling of crack development: procedures and assumptions

The results presented in chapters 2 and 3 concern the prediction of the stress distribution at the TBC/TGO and the TGO/BC interfaces without considering any microstructure defects and without modeling the cracks development. In the present chapter, a cracks propagation model is implemented in the critical areas of the TBC system and will point out the effect of the micro-cracks development on the stress redistribution in the regions of high tensile stresses. In order to predict the opening of cracks at the interface of distinct entities, a specific tool, able to separate the contact surfaces when a specific stress criterion is satisfied, becomes necessary. In this study, the crack propagation concerns a 2D quasi-static model. This model requires that the user define in advance two distinct contact surfaces, initially linked, between which the crack can propagate.

## II.1. Interface specification for crack propagation

Crack propagation is carried out on a nodal basis analysis. The common node existing between two materials can be separated in two different entities belonging to a predefined “Master surface” and predefined “Slave surface” of the contact pair. For each node of the “Slave Surface”, the FE code searches the nearest point of the “Master Surface” and projects it perpendicularly on the slave surface (*Fig.4-1*). The choice is done in such a way to prevent any penetration of the slave nodes into the master surface (defined in 2D as segments between two consecutive nodes) whereas the penetration of the master nodes is permitted into the slave surface. Thus, the “Slave surface” is usually defined as the entity that has the more refined mesh grid and if the meshes densities are similar, it is defined as the entity that has the lowest Young modulus. These surfaces are considered as temporary bonded.

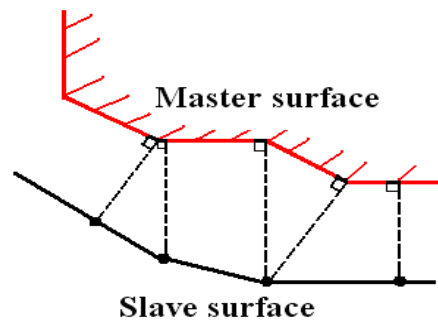


Figure 4-1. Discretization of the interaction and of the contact.

The numerical tool must satisfy to the three following criteria:

- avoiding the interpenetration of the two features (master and slave surfaces);
- being able to maintain the contact between the two entities until the stress level that corresponds to the material fracture criteria at a given point is reached;
- being able to open the contact between the two entities as soon as the local stress level is critical.

## II.2. Crack propagation tool in Abaqus: “Debond” tool

Crack propagation along pre-determined surfaces can be modelled in ABAQUS/Standard using the interface control tool "*Debond*" and "*Fracture Criterion*" option [Aba-V6.7].

The "**Debond**" tool consists of three programming steps defined by the following commands :

- 1- The "**Initial Conditions**" command;
- 2- The "**Debond**" command;
- 3- The "**Fracture Criterion**" command.

1- The "**Initial Conditions**" command is used to define the type of the contact (permanent, allowing separation, frictionless, with friction ...) to be assigned to each nodes of the interface, the nature of the surfaces contact-pair (the slave and master ones) and the set of nodes. A set of nodes corresponds to the nodes of the slave surface that are initially connected whereas the non-connected part corresponds to the pre-crack. The size of pre-cracks is chosen sufficiently small (to limit the weakening of the cross section of the loaded system), so that its influence on the stress level before crack growth may be neglected. Generally, the size of the pre-crack is chosen to be equal to one or three elements of the mesh.

2 - The "**Debond**" option makes it possible to propagate a pre-existent crack along a predetermined way defined by the user. In the "**Debond**" option, the interfaces are authorized to separate in two surfaces allowing the crack propagation. By default, if no specific initial contact option is prescribed, the crack propagation will not be possible.

3 - The "**Fracture Criterion**" command defines the nature of the crack propagation criterion and assigns it (to each point of the set defined above). Three different fracture criteria can be defined:

- the critical stress reaches at a given distance ahead of the crack-tip;
- the critical displacement of the crack surface;
- the crack length as a function of total time. To specify the crack propagation explicitly as a function of total time, a crack length versus time relationship and a reference point from which the crack length is measured must be define.

Note that among these criteria only one is permitted per contact.

In our study, the stress level at a given distance of the crack front ( $d$  in **Fig.4-2**) is considered as a pertinent opening criterion. Consequently, the crack-tip node debonds when the local stress across the interface at this given distance reaches a critical value. This criterion is typically used for crack propagation in brittle materials [Aba-V6.7]. The critical stress criterion ( $f$ ) is defined as:

$$f = \sqrt{\left(\frac{\hat{\sigma}_n}{\sigma^f}\right)^2 + \left(\frac{\tau_1}{\tau_1^f}\right)^2 + \left(\frac{\tau_2}{\tau_2^f}\right)^2}, \quad \hat{\sigma}_n = \max(\sigma_n, 0) \quad (4-1)$$

where  $\hat{\sigma}_n$  is the normal component of stress carried across the interface at the distance specified;  $\tau_1$  and  $\tau_2$  are the shear stress components in the interface; and  $\sigma^f$  and  $\tau_1^f$  are the normal and shear failure stresses, which must be specified. The second component of the shear failure stress,  $\tau_2$  is not relevant in a two-dimensional analysis; therefore, the value of  $\tau_2^f$  need not be specified. If the value of  $\tau_1^f$  is not given or is set to zero, the shear stress will not have any effect on the fracture criterion.

The crack-tip node debonds when the fracture criterion,  $f$ , reaches the value of 1.0 within a given tolerance  $f_{tol}$ :

$$1 - f_{tol} \leq f \leq 1 + f_{tol} \quad (4-2)$$

The distance ahead of the crack-tip is measured along the slave surface, as shown in **Fig.4-2**. The stresses at the specified distance ahead of the crack-tip are obtained by interpolating the values at the adjacent nodes. The interpolation depends on whether first-order or second-order elements are used to define the slave surface. A preliminary study [JAH<sup>\*</sup>-08] was performed to optimize this distance in order to avoid the effects of crack-tip singularity. It showed that the critical distance where the critical criterion must be satisfied is ranging between the first and third buttoned nodes ( $1 \text{ element} \leq d \leq 3 \text{ elements}$ ). When the failure criterion is reached, the crack-tip node is unbuttoned.

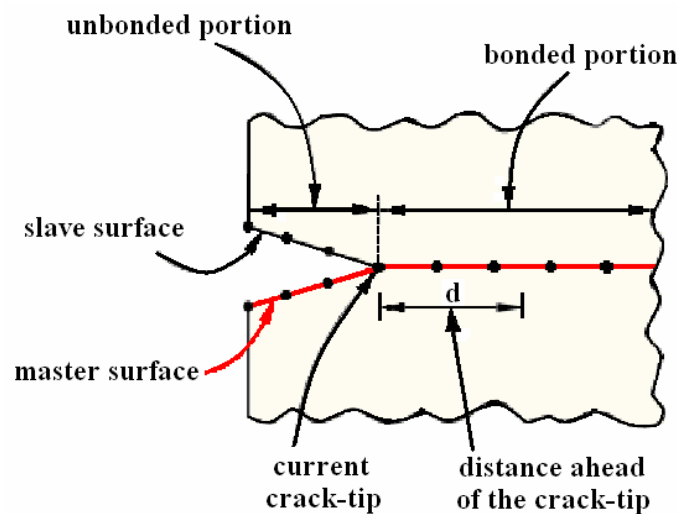


Figure 4-2. Definition of the critical parameters TYPE=CRITICAL STRESS.



As an example, **Tab.4-1** describes the different commands that have to be indicated in the keyword file sent to the ABAQUS solver in order to proceed to the crack propagation between the master and slave surface.

<pre> *initial conditions, Type=contact   slave, master, Set=set  *DEBOND, SLAVE=slave, MASTER=master, TIME INCREMENT=t   Data lines to define debonding amplitude curve  *FRACTURE CRITERION, TYPE=Critical stress, DISTANCE=n   Data lines to define fracture criterion </pre>
--

Tab.4-1. Three setting options used in Debond tool.

In the present study, the pathways correspond to the TBC/TGO, TGO/BC and lamella interfaces and pre-crack are arbitrarily located on the interfaces. It is postulated that the interface yield strength is close to that of the material having the lowest mechanical resistance, that is to say the ceramic at the TBC/TGO interface and bond-coat for TGO/BC interface. The yield strength of ceramic varies from 10 MPa to 100 MPa [WLH-03, Maj-04, Bia-05] and for bond-coat layer varies from 215 MPa [ANN-01] to 270 MPa [WLH-03]. In this study, we consider the critical normal stress in the “fracture criterion” option, for TBC/TGO, TGO/BC and lamellas interfaces equal to 40 MPa, 270 MPa and 20 MPa, respectively. Moreover, in order to predict the crack propagation within the TGO layer, the yield strength for this layer is set to be 1200 MPa [Bia-08].

### III. Part A: Crack development at the TBC/TGO and TGO/BC interfaces for a homogenous ceramic layer

Models, materials behaviours and data used in the present simulations have been described in the two previous chapters (2 and 3). In the present section, the interface region between bond-coat and top-coat is modelled with a sinusoidal geometry represented by a full wavelength of 60  $\mu\text{m}$  located between two peak regions as shown in **Fig.4-3**. This choice simplifies the comparison of the stress redistribution according to the micro-cracks positions at the TBC/TGO or TGO/BC interfaces. Moreover, two different geometries are used (see **Fig.4-3a, b**) to examine the effect of a variation of amplitude of two neighbors asperities:

- the first one corresponds to identical amplitude of  $15\ \mu\text{m}$  for all the asperities,
- the second one, corresponds to two different amplitudes for neighbors asperities,  $15\ \mu\text{m}$  and  $5\ \mu\text{m}$ .

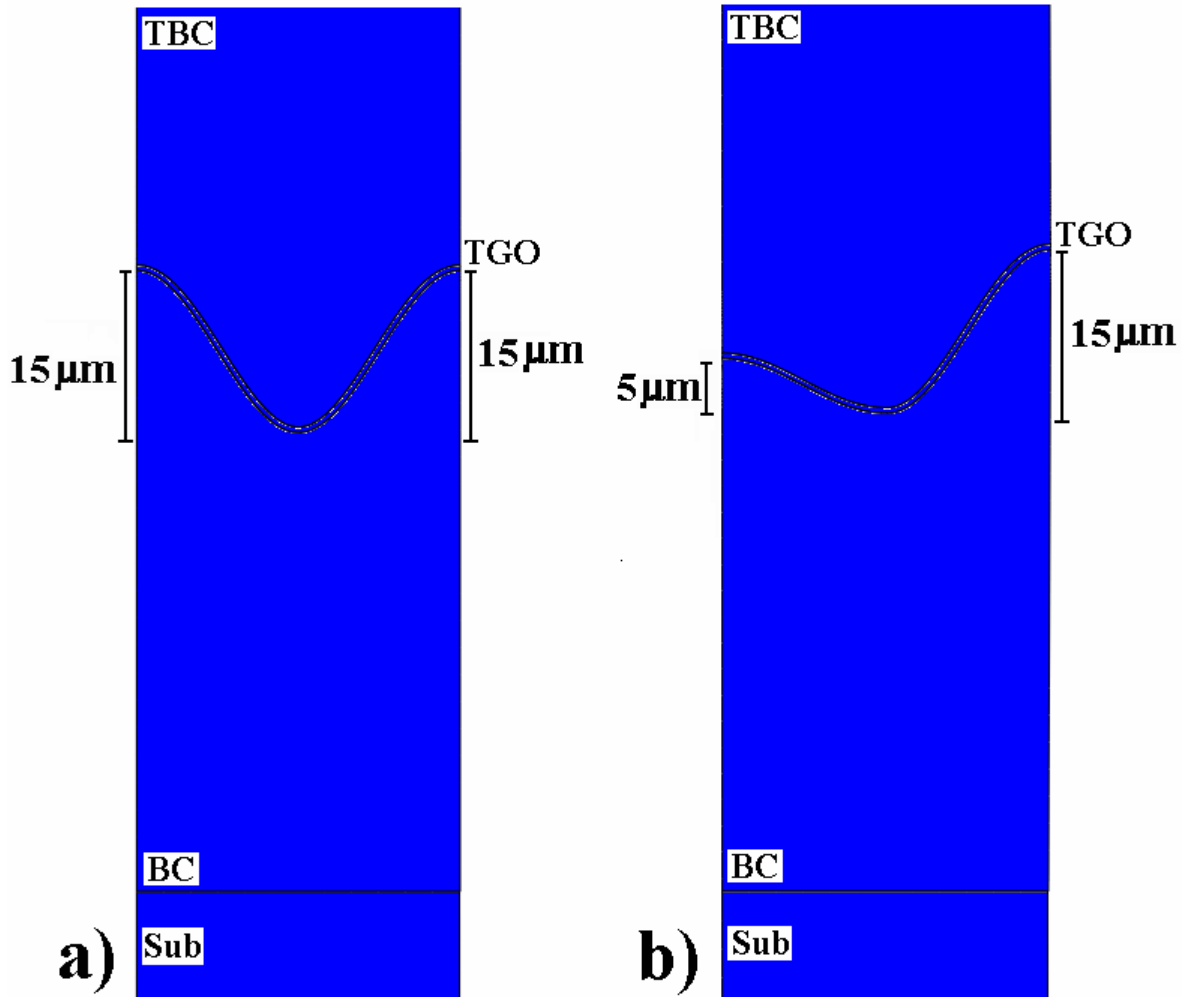


Figure 4-3. Geometry used to study the effect of roughness amplitude, a) uniform amplitudes, b) non-uniform amplitudes.

The thermal loading history is identical to one described in Chapter 3, Section III.1 (see *Fig.3-9*). It consists of two steps: first, the hot ceramic layer is deposit onto the surface of the underlying materials (Step-1), second, the thermal loading cycle is affected (leading to a non-homogenous temperature distribution) to the top-coat during service (Step-2). Note that the effect of thermal multi-cycles on the cracking scenario will be investigated in the last section of this chapter.

The simulation work presented in this part reveal the two different failure mechanisms characteristic of TBCs cracking and spallation (mechanism I and II) observed experimentally

in (*Fig.1-10*) and (*Fig.3-17*) [NPM-02, RA-00]. The first mechanism corresponds to the propagation of the crack along the TGO/BC interface and the second one corresponds to the crack propagation along the TBC/TGO interface.

*Fig.4-4* shows the initial conditions of contact along the TGO/BC and TBC/TGO interfaces. The surfaces-pairs are kept on bonded state for all thermal loading **until the cooling stage of Step-2 from which the “Debond” is permitted**. As results, the stress distribution on the system after coating process (Step-1), heating and dwell-time stages of Step-2 remains the same in comparison to one described in chapter 3. Therefore, in this chapter, we will present the effect of the crack propagation on the stress redistribution of the system only in the cooling stage of Step-2.

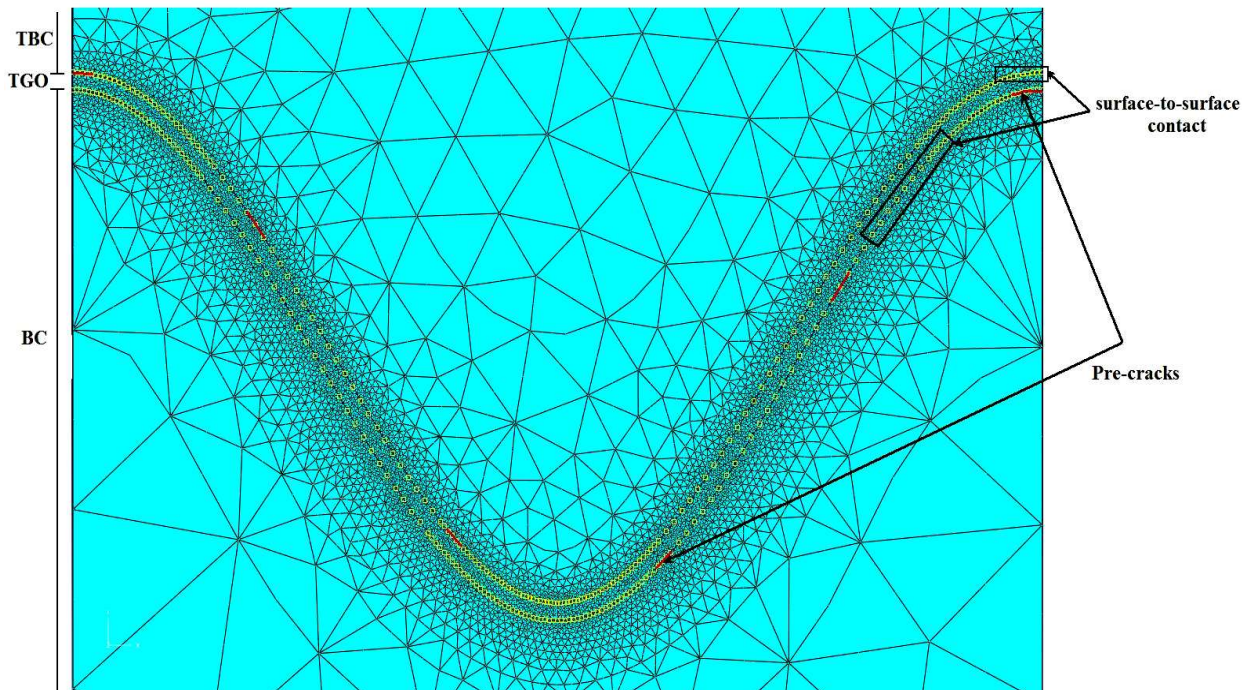


Figure 4-4. Location of the pre-cracks (in red) and of the possible crack path (unbuttoning regions) (in green) at the interfaces.

Three pre-cracks per interfaces have been initially defined and described in *Fig.4-4 in red color*. The first one is considered at the “peak”, the second at the “middle” and finally, the last concern the micro-cracks located at the “near-valley” of the TBC/TGO or TGO/BC interfaces.

In the following, the micro-cracks development and their effects on the stress redistribution within the system are examined as function of the thickness of the TGO layer and the height of the asperities.

### III.1. Development of the cracks in the case of rugosity with an uniform amplitudes (15 $\mu\text{m}$ )

In order to determine the effect of the TGO growth on the crack development within the system, different final values of the TGO thickness are investigated below.

#### III.1.1. Without TGO growth

When the interfacial cracks development is modelled along the TGO/BC and TBC/TGO interfaces for a constant TGO thickness of 1  $\mu\text{m}$ , the pre-cracks located at the peaks become critical and start to propagate (see *Fig.4-5a* mechanism I and II) since the first instances of **the cooling stage of the second step**. These cracks will be stopped at the point 1 and 2, respectively. The stress concentration around the point 1 is maximal whereas all the opening nodes before crack-tip have about zero stress level that is shown on blue color. The same scenario is repeated for the other models of cracking that follow in the next sections. The maximum tensile stress in order of 390 MPa (red color) that appears in the vicinity of the final crack-tip (corresponding to mechanism I) of the TGO layer (point 1) does not overcome the yield stress of the TGO ( $\sigma_y = 1200$  MPa). Thus, the crack initiation and propagation within the oxide layer is not appeared for 1 $\mu\text{m}$  TGO thickness.

Note that the micro-cracks located in the middle and valley of the asperities cannot propagate as the stress concentration in the vicinity of these pre-cracks is below the yield strength or is in compressive state.

In order to better understand the effect of crack propagation on the stress redistribution and crack path, these results have been compared to the produced ones by the model without crack modeling in the same configuration and without any pre-cracks implantation. After the ultimate cooling stage of step-2 (*Fig.4-5b*), an homogeneous and a gradual distribution of the stresses was appeared from a tensile state at the peak to a compressive state at the valley of the asperity within the TBC and BC layers. Due to the tensile stress magnitude in these zones, we can wonder that if a micro-crack was present at the peak of the TBC/TGO or TGO/BC interface, it could be propagated towards the middle. However, in the TBC layer, the compressive zone extends from middle to valley region and its level is sufficient high (-27 MPa). Thus, we predict that the crack must be stopped above the middle region of the TBC/TGO interface resulting in a short crack length. This prediction is in good agreement with

the experimentally observation [ASM-03, RE-00] that is shown the cracking on the system for a thin TGO layer is not important.

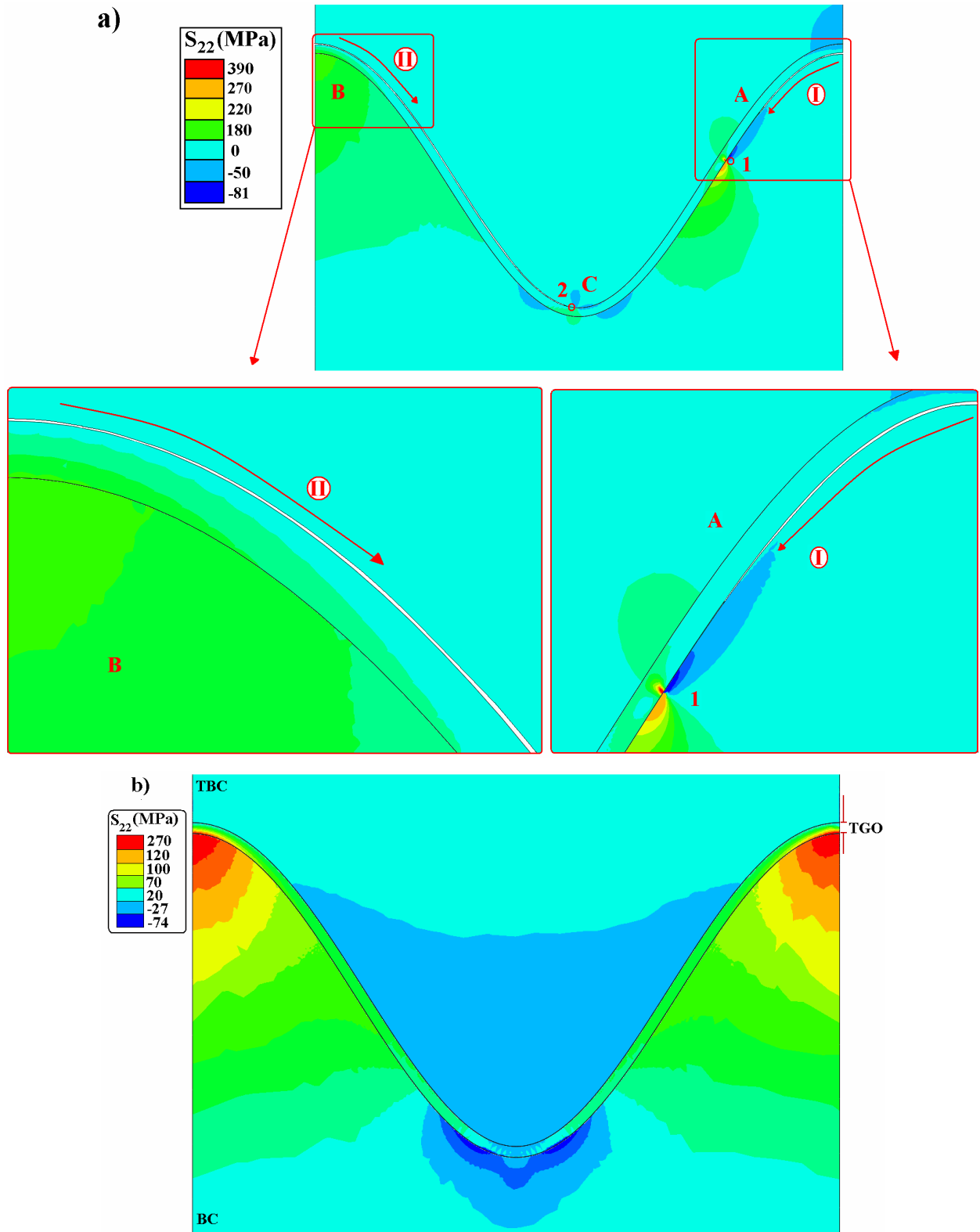


Figure 4-5.  $S_{22}$  stress distribution in the case of without TGO growth (1  $\mu\text{m}$ ), in the TBC/TGO and TGO/BC interfaces for two uniform amplitudes after cooling, a) with crack development, b) without crack development.

In other hand, for a model taking into account the crack propagation (**Fig.4-5a**), the crack length corresponding to mechanism II is greater than this predicted in the case without crack modelling. Three reasons can explain this phenomenon:

(1) the ceramic layer has been considered as an homogenous one (without any defaults). Therefore, the cracks can propagate only along the interfaces and cannot penetrate into the TGO or TBC layer. Thus, the maximum tensile stress at the crack-tip is enough high to promote the crack propagation along the interfaces;

(2) when a pre-crack is introduced in the system, the stress concentration at the crack-tip is more important than in the case without pre-crack;

(3) on the system without cracking, the prediction of the crack path (**Fig.4-5b**) correspond to the stress distribution at the end of the ultimate cooling stage whereas in the cracking model (**Fig.4-5a**) the pre-crack becomes to propagate once the stress at the crack-tip reaches the critical value. This propagation may be occurring since the first instances of the cooling stage. Consequently, this comparison should be realised only for the last moment of the cooling stage.

Despite the lack of this approach, the comparison of the stress level after cooling phase, between the cases with and without cracking remains interesting (**Fig.4-5**) as the crack development has a considerable effect on the stress redistribution around the asperity. Indeed, the development of the interfacial crack in the TGO/BC (mechanism I) causes a reversal of the stress state at the TBC peak from tensile stress to compressive stress (zone A). Similarly, after crack development following mechanism II, the stress level at the peak decreases in the BC layer (zone B) from 270 MPa to 180 MPa.

### III.1.2. With TGO growth

In the case corresponding to an oxide growth of 1  $\mu\text{m}$  to 3  $\mu\text{m}$  in thickness, the interfacial pre-crack located at the middle of the TBC/TGO interface becomes to propagate since the first instants of the cooling stage of Step-2 following the mechanism II (**Fig.4-6**) and extends toward the peak and valley regions where it stops temporary. After that, the pre-crack located at the peak of TGO/BC (mechanism I) develops toward the BC valley location and stops at the point 1 of the TGO/BC interface. Since this instant, the stress concentration at the cracks-tip that were stopped at the near-peak and valley regions of the TBC/TGO interface

increases and starts again to propagate. The TBC crack started at the near-peak develops until last point of the peak and the one restarts above the valley extends toward the valley, cross this zone and continues to propagate until the point 2 where it stops (**Fig.4-6**). This point is located approximately on the other side of the oxide layer compared to point 1 (see **Fig. 4-6** zone C point 1 and 2). This behaviour is due to the decrease of the stress level in zone A resulting from the opening of the pre-crack at the BC peak (mechanism I).

The crack behaviour at the interfaces for the model with TGO growth is different from that we expected after analysis of the stress fields obtained without crack modeling. The cracks that extend along the interfaces for mechanisms I and II are rather longer especially for mechanism II even if we expected that the cracks should have stopped near the TBC peak and valley due to the presence of the compressive stresses zone observed initially in simulations without cracks modeling (discussed in chapter 3, section V). The level of compressive stress existing in these zones can stop the crack propagation temporary but it cannot undergo it for long time.

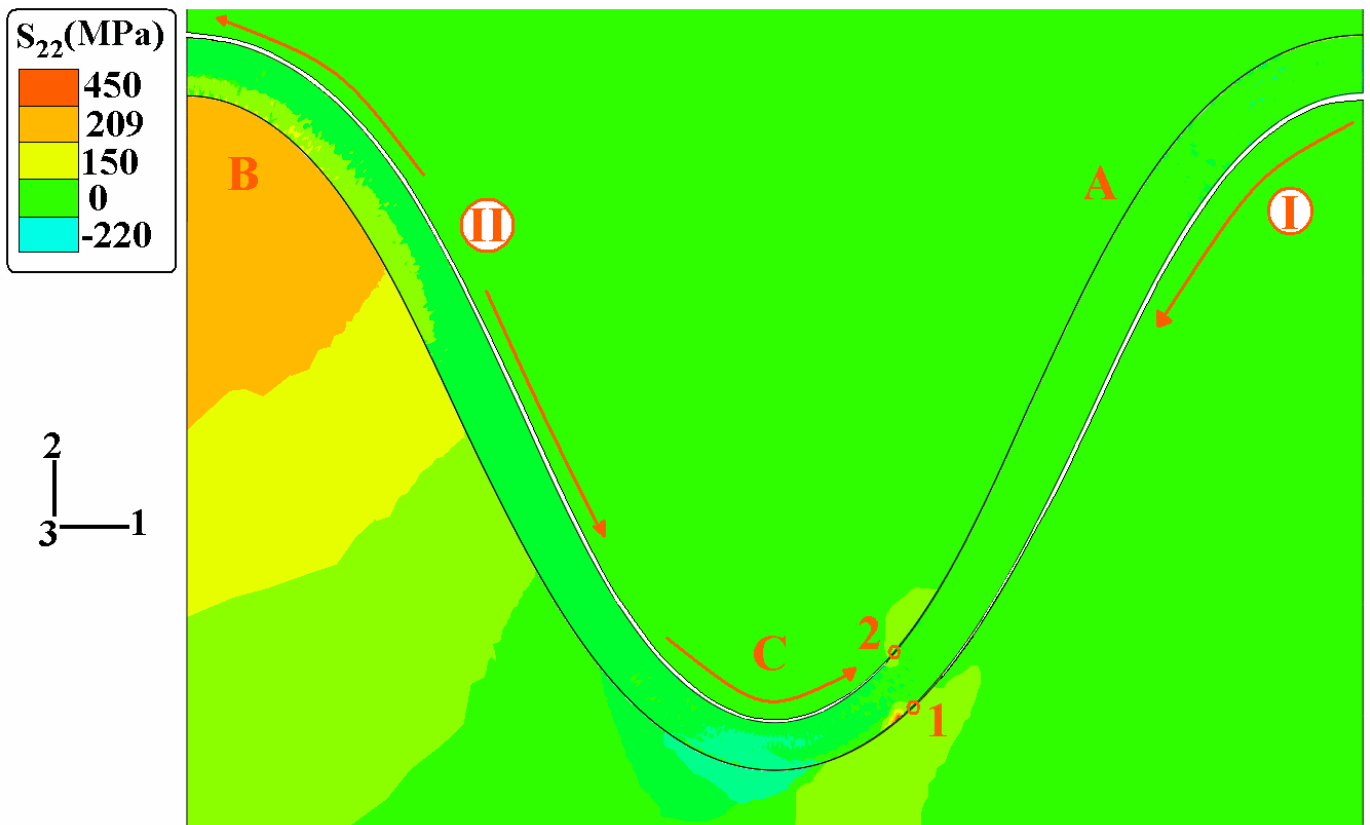


Figure 4-6. Crack development scenario in the case with 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness, in the TBC/TGO and TGO/BC interfaces for two uniform amplitudes (15  $\mu\text{m}$ ) after cooling.

After crack propagations at the TBC/TGO and TGO/BC interfaces, the stresses decrease strongly in the vicinity of these regions. The cracks representative of mechanism I and mechanism II cause an important decrease of the stress level at zone A and B of **Fig.4-6**, respectively.

Numerical simulations show that for TGO growth of 3  $\mu\text{m}$ , the crack length in TGO/BC interface stabilize and should not increase if the TGO thickness overcomes this value even if the tensile stress level increases as a function of the TGO thickness. It is due to the increase of the compressive stress level existing in these regions also as well as the tensile stress. According to this explication, with increasing the TGO thickness (5  $\mu\text{m}$  or 7  $\mu\text{m}$ ), the crack scenarios remain similar to that obtained for 3  $\mu\text{m}$  but the stress magnitude increases at the cracks-tips (point 1 and 2) and in oxide layer. Therefore, for this model we are not able to propose a critical TGO thickness leading to the TBC spallation.

### III.2. Development of the cracks in the case of dissimilar amplitudes of neighbor rugosities (15-5 $\mu\text{m}$ )

In this section, the crack propagation is investigated for a TBC system composed by two different amplitudes for neighbor asperities, 15  $\mu\text{m}$  and 5  $\mu\text{m}$ . The initial pre-crack location is described in **Fig.4-4** and correspond to a distribution similar to this used for roughness of uniform amplitudes. The effect of the TGO growth on crack path propagation and the stress redistribution is also investigated.

#### III.2.1. Without TGO growth

For a constant TGO thickness of 1  $\mu\text{m}$ , the opening of the pre-crack at the TBC/TGO interface (following mechanism II) located at the peak of the rugosity of high amplitude (15 $\mu\text{m}$ ) is observed since the first instants of the cooling stage of Step-2 (**Fig.4-7** zone A) as the stress concentration at the pre-crack-tip reaches to the critical yield strength. It stops at the middle of the 15 $\mu\text{m}$  rugosity amplitude (point 1). After that, the micro-crack introduced at the peak of TGO/BC interface starts to propagate in the same rugosity (15  $\mu\text{m}$  amplitude) as soon as the crack-tip stress reaches the critical value but rapidly stops due the stress relaxation in this zone consecutive to the crack propagation at the TBC/TGO peak. Thus, its length is short (zone B point 2). The stress level at the peaks of the TBC/TGO and TGO/BC interfaces of the



low rugosity amplitude ( $5\ \mu\text{m}$ ) is less important than for the large one ( $15\ \mu\text{m}$ ) and not enough to open the pre-cracks existing in these zones. Thus, no crack propagates in these zones. In addition, the opening of the crack at the interfaces (zone A and B) has no effect on the stress redistribution of the other zones (zone C and D).

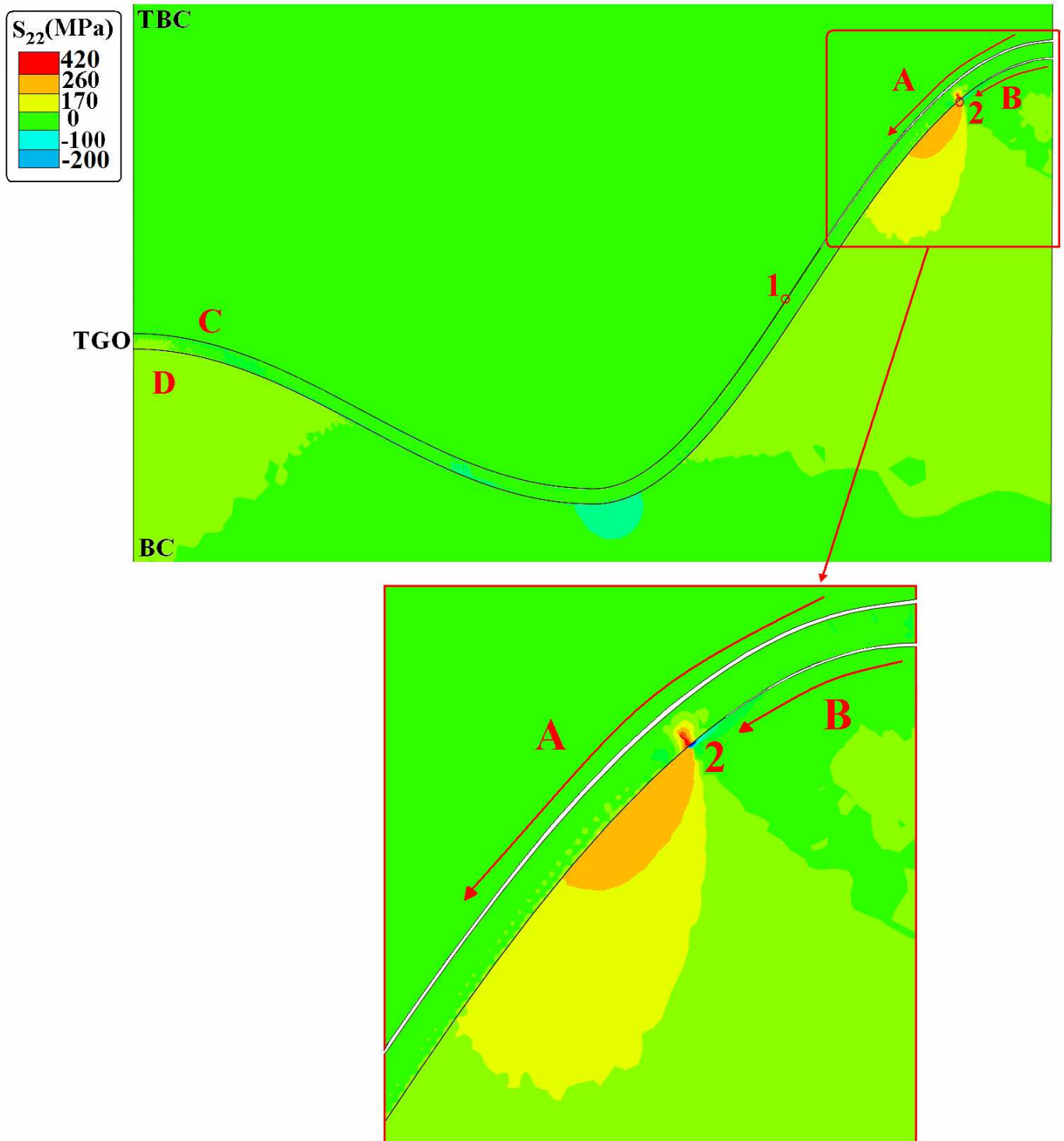


Figure 4-7. Crack development scenario in the case without TGO growth in the TBC/TGO and TGO/BC interfaces for two amplitudes non-uniform ( $15\text{-}5\ \mu\text{m}$ ) after cooling.

### III.2.2. With TGO growth

For a 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness (see **Fig.4-8**), at the first time of the cooling phase of Step-2 the pre-crack located at the middle of the TBC/TGO interface of the 15  $\mu\text{m}$  rugosity amplitude (point 1) starts to extend. It propagates toward the valley region and it follows its path above the peak of 5  $\mu\text{m}$  in amplitude. Even if we expect that it should stop before reaching the peak, it continues up to the peak (**Fig.4-8** zone C). It is due to the fact that the crack can propagate only along the TBC/TGO interface and there are any other defaults on the ceramic layer able to relax the stress generated on the system. Therefore, the tensile stress remains sufficiently high, leading the crack to extend on the interface until last point of the peak.

When the interfacial crack at TBC/TGO stops to propagate at point 1, the pre-crack existing at the peak of the 15  $\mu\text{m}$  roughness amplitude of TGO/BC interface (mechanism I), starts to propagate toward the valley. However, the tensile stress level existing in this zone (B) is already relaxed by the crack development of mechanism II and thus crack stops quickly in point 2.



Figure 4-8. Crack development scenario in the case of 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness in the TBC/TGO and TGO/BC interfaces for two amplitudes non-uniform after cooling.

The cracking at the TBC/TGO interface causes a decrease in the stress level within the TGO and BC layers in the zone of the low rugosity amplitude (5  $\mu\text{m}$ ) (**Fig.4-8** zone D) that avoids the development of the micro-cracks present on the TGO/BC interface (240 MPa < 270 MPa). However, if the micro-cracks located at the TBC/TGO interface of the rugosity of high amplitude were not introduced in the system, the maximum tensile stress in the peak of the TGO/BC interface of the rugosity of 5  $\mu\text{m}$  will be equal to 320 MPa. Therefore, this crack can be able to propagate and finally, stops at the middle due to the compressive zone (**Fig.4-8** zone D).

For a TGO thickness equal to 5  $\mu\text{m}$  or 7  $\mu\text{m}$ , the crack scenario remains the same than for 3  $\mu\text{m}$  but only the tensile zone within the TGO layer extends. Therefore, we cannot observe TBC spallation. However, if the crack propagation was permitted within the ceramic and oxide layers, this high stress level can favour the breaking, cracking and delamination of the system.

### III.3. Partial conclusion

In the part A, the propagation of pre-cracks located at the TBC/TGO and TGO/BC along these interfaces and their effects on the stress redistribution in the TBCs have been investigated. The results show that their behaviours depend on a large extent of the interface morphology and of the thickness of the TGO layer.

Without TGO growth, a highly localized tensile stress is observed in the peak region of the top-coat/TGO and TGO/bond-coat interfaces for 15  $\mu\text{m}$  amplitude in comparison to the 5  $\mu\text{m}$  amplitude case. Consequently, crack can be appeared in the peak region very close to the height amplitude.

When the cracking is only permitted in the interfaces, the opening of the crack is more extended in the case of uniform amplitudes (**Fig.4-5**) than in the case of non-uniform amplitudes (**Fig.4-7**). Nevertheless, the crack length is higher than we expect due to the stress redistribution resulting from the different cracks propagation but the damages observed in the system remain not very important.

In the case of oxidation growth and for both uniform and non-uniform amplitude of asperities, the pre-crack located at the middle of TBC/TGO interface of the rugosity of high amplitude starts to propagate from the middle towards the peak and the valley (**Fig.4-6** and **Fig.4-8**). The crack length observed for both cases is important and causes a decrease of

lifetime of the system. Concerning the TGO/BC interface, the pre-crack existing at the peaks of the high rugosity amplitude propagates toward the valley for both geometries. Nevertheless, the crack is longer than this described after analysis of the stress fields, without crack modeling, but it cannot extend to the valley due to the compressive zone existing at this location.

The cracks length along the interfaces is stabilized while the TGO thickness increases from 3  $\mu\text{m}$  to 5 or 7  $\mu\text{m}$ . However, the tensile area within TBC and TGO layer extend and promotes the development of the crack within the TBC and TGO layers.

The predicted scenarios of crack propagation were interesting. The critical zones, the crack development and their direction are in good agreement with the two mechanisms (I and II) observed by Nitin *et al.* [NPM-02] and by Rabiei and Evans [RE-00]. However, the crack length given by our model is larger than the experimental one. These results show that the coating delamination is not really predicted by the present model. Indeed, our model is not able to describe the cracking within the TBC or the TGO themselves and probably their linking through the interfaces. The last part of this study corresponds to the development of model with this objective.

## IV. Part B: Crack development in a heterogeneous ceramic layer

The microstructure of thermally sprayed coatings is markedly different to conventionally processed materials since they consist of rapidly solidified lamellas formed by the impact of a succession of molten droplets. Solidified particles, in this study known as splats or lamellae, build layer by layer a coating including pores or voids. Therefore, the final microstructure of the plasma sprayed coating is anisotropic, heterogeneous and exhibits porosity. In this second part of chapter 4, a lamellar structure of the top-coat layer with a 15% porosity volume fraction [AHC<sup>\*</sup>-06] is introduced in the model that has been build up to simulate the crack propagation within the ceramic layer. Note that in the following simulations, solely the opening of the crack parallel to the interfaces between the lamellae and along the TBC/TGO and TGO/BC interfaces will be modelled in order to limit the model complexity.

The previous results deals with a homogenous top-coat layer (without porosity) and, obviously, models containing different kinds of defaults in the ceramic layer exhibit a better ability to describe actual materials. Unfortunately, such type of structures is very complex to build in the FEM Abaqus code. Therefore, it was necessary to use a specific software able to generate automatically samples containing a given number of lamellas randomly distributed in the 2D space with respect to a given porosity fraction and surface contact ratio between the lamellas. The M.O.A program (Modeleur d’Objets Aléatoires) that has been developed in the laboratory GEMH of ENSCI in C++ language makes it possible to generate 2D representative geometries of lamellar ceramic layer. It is also able to generate a 3D representative geometries with respect to an imposed conditions of volume fraction or/and an imposed particle size distribution.

In order to build plasma sprayed coatings with lamellar structure respecting the experimental data published by Chang *et al* [CAM-97], the following relationships between the lamellas composing the microstructure are considered.

- (a) the mean lamellar thickness remained approximately constant (1.5 to 2  $\mu\text{m}$ );
- (b) each lamella has a free surface totally separated from another one (**Fig.4-9**) that is used as master surface or slave surface to realize the “Debond” tool between lamellas;

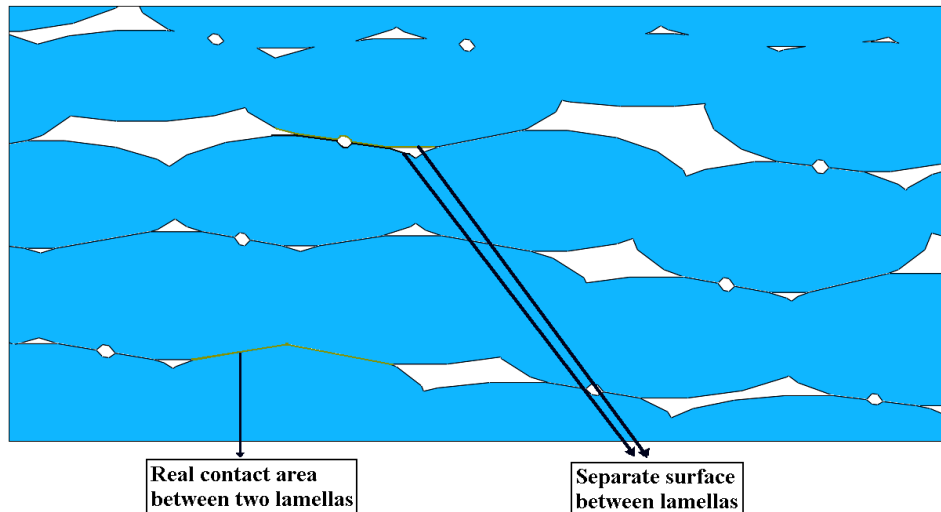


Figure 4-9. Lamellar structure of ceramic layer.

- (c) the mean bonding ratio (ratio of the bounded surface to the total one of a lamellas) ranges between 24 % to 30 % [CAM-97];

- (d) the vertical crack propagation is not considered in the model and thus, there is any possible crack path for development in this direction.

Two files consisting of the matrix (to realize the form of the interface) and the lamellae are obtained as output from M.O.A. The program is able to create different form of matrix according to the application, for example a plan surface or sinusoidal surface of the elementary representative volume. After that, this matrix will be fulfilled by the lamellae. In our study, only the file containing lamellas needs to be imported to the Abaqus code, which will consider each lamella as a separated geometric entity.

In order to examine the effect of the interface morphology on the delamination of the system, two shapes of ceramic layer are created by M.O.A. The first one is characterized by a uniform sinusoidal shape of 15  $\mu\text{m}$  in amplitude (see **Fig.4-10a**) whereas the second one is characterized by different amplitudes for the neighbor sinusoidal asperity, 5  $\mu\text{m}$  and 15  $\mu\text{m}$  in amplitudes (**Fig.4-10b**). Cracks pathways could be chosen freely between the lamellas with regard to the tensile stresses appeared in these areas during the cooling stage. In addition, the crack propagation at the TBC/TGO and TGO/BC interfaces is still possible and the pre-cracks are set at the peak and middle region of asperity (see **Fig.4-4**). Note that the oxide layer is always considered homogenous, thus, the crack cannot transverse it.

In the first part of the following simulations and for simplicity reasons, the single thermal cycle described in the previous chapters (**Fig.3-9**) is first used. In the final section of chapter 4, the effect of thermal multi-cycles will be examined on the crack development in comparison to the previous single one.

Concerning the meshing operation, the same size and type of mesh element must be applied to all lamellas, since we need to have identical mesh structure in each contact-pair surface to get a correct unbuttoning sequence and convergence. Using the very small mesh elements used up to now (0.25  $\mu\text{m}$ ) would increase considerably the number of total mesh-grid elements that would become out of the recent PC systems capability (leading to errors of convergence). To overcome this problem, slightly larger elements with characteristic size of 0.3  $\mu\text{m}$  have been used (**Fig.4-10**).

The same conditions of simulations as those described in the chapters 2 and 3 are used.

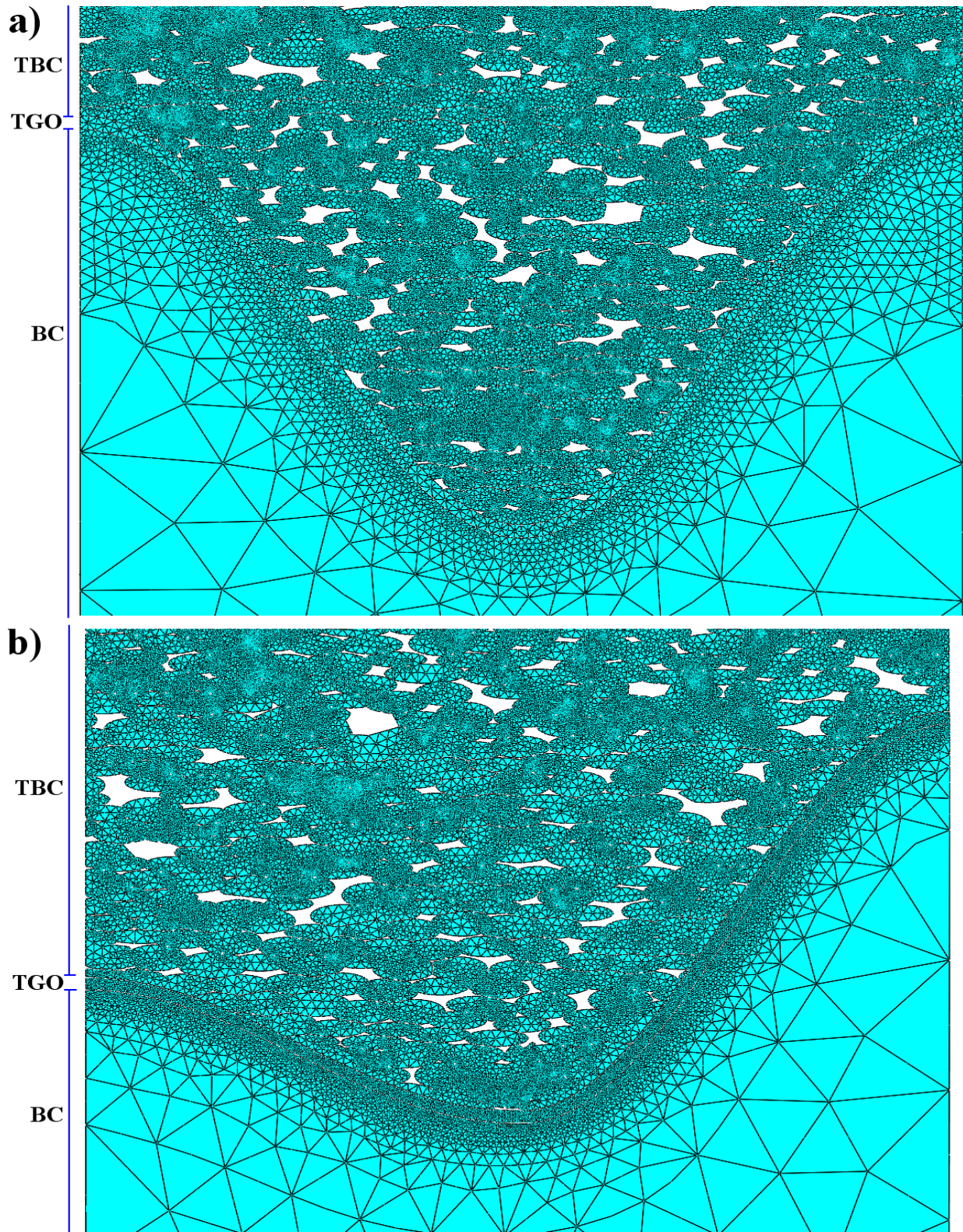


Figure 4-10. Inhomogeneous top-coat layer and mesh grid for sinusoidal asperity of, a) uniform amplitudes, b) a non-uniform amplitudes.

## IV.1. Effect of the TGO growth on the crack propagation in the case of uniform amplitudes (15 $\mu\text{m}$ )

The effect of the TGO growth (initially 1  $\mu\text{m}$ ) on the crack propagation in the TBCs is first examined. The results obtained for 1  $\mu\text{m}$  (constant), 3  $\mu\text{m}$ , 5  $\mu\text{m}$  or 7  $\mu\text{m}$  of final TGO thickness are presented at **the end of cooling stage corresponding to the thermal cycle (Step-2)**. The main goal of this discussion consists to define the critical TGO thickness that will lead to the TBC layer delamination.

### IV.1.1. Without TGO growth

While TGO remains constant in order of 1  $\mu\text{m}$  in thickness and 100 seconds after the beginning of the cooling stage, the pre-cracks existing at the peaks of the TGO/BC interface (mechanism I) reach to the critical stress level and become active in both side of asperity (*Fig.4-11* mechanism I). Mechanism I of cracking continues to extend until point 1. After that, the pre-crack located at point 2 of the TBC/TGO interface (mechanism II) starts to propagate. It extends toward to the middle region. However, due to the presence of the compressive zone at the valley, the crack is deviated into the ceramic layer (point 3). Nevertheless, the tensile stress remains too low to allow its propagation between the lamellas in this area and consequently it stops at point 4. Note that some others dispersed or diffuse opening between the lamellas located at the peak appear (*Fig.4-11* zones A,B,C) but their length remains limited and they do not seems to be detrimental for the TBC system as they relax the stress. These results are more realistic in comparison with those obtained in the part A of chapter 4 in subsection III.1.1.

### IV.1.2. With TGO growth: 3 $\mu\text{m}$

In the case of a 3  $\mu\text{m}$  final TGO thickness, the cracking is observed within the ceramic layer since the first time of the cooling phase as the tensile stress level between the lamellas located at the middle exceed the yield strength (see *Fig.4-12* zone A). This crack develops along the lamellas and stops temporary at the points 1 of the TBC/TGO interface in *Fig.4-12*.



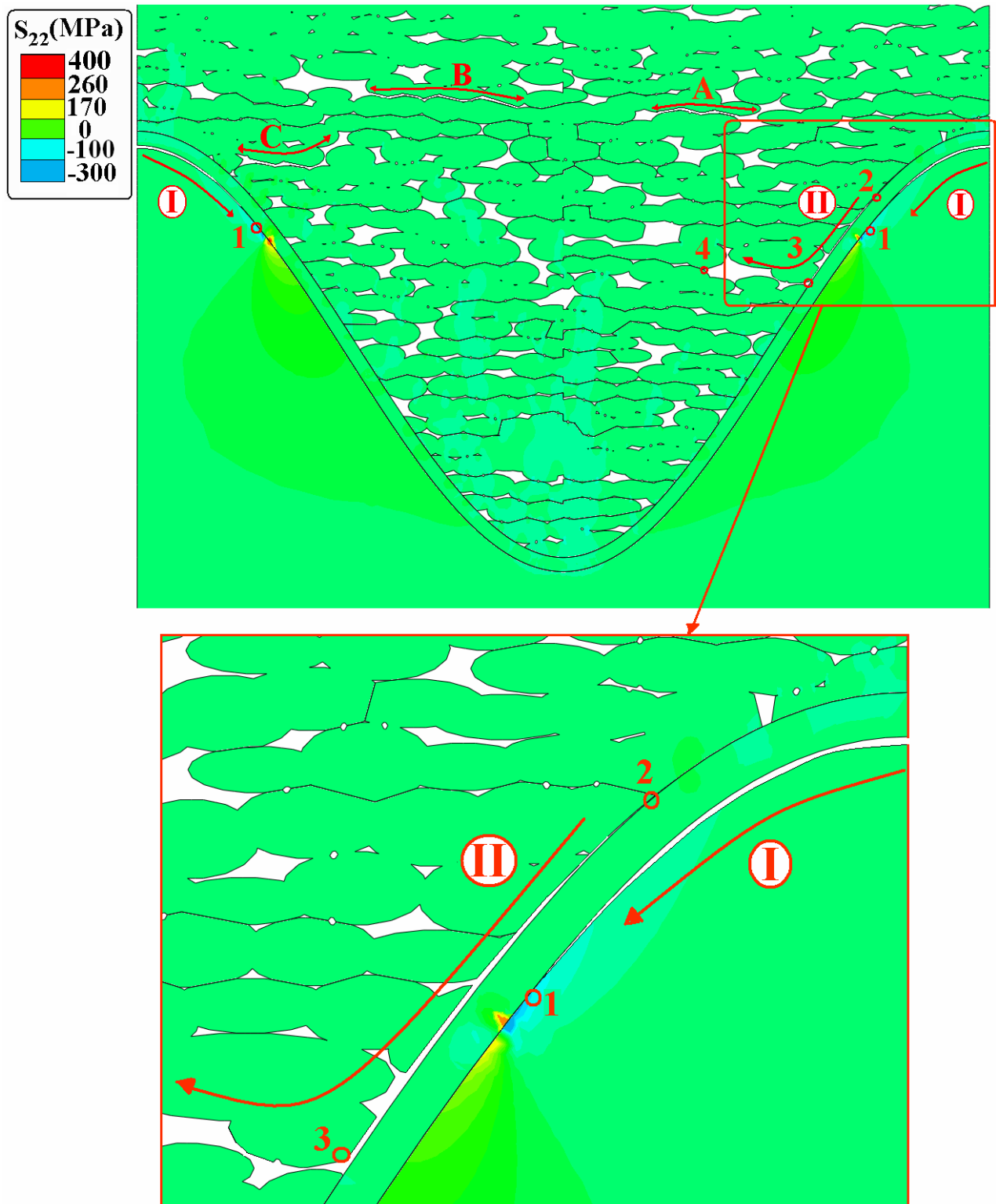


Figure 4-11. Crack propagation modeling in the case of uniform sinusoidal amplitudes (15  $\mu\text{m}$ ) without TGO growth.

The next cracking is observed at the peak of the TGO/BC interface (mechanism I) in both side of the asperity. It develops toward the valley region and finally stops at point 2 due to

the presence of the compressive zone. Nevertheless, the crack length is longer than that observed in the experimental observations.

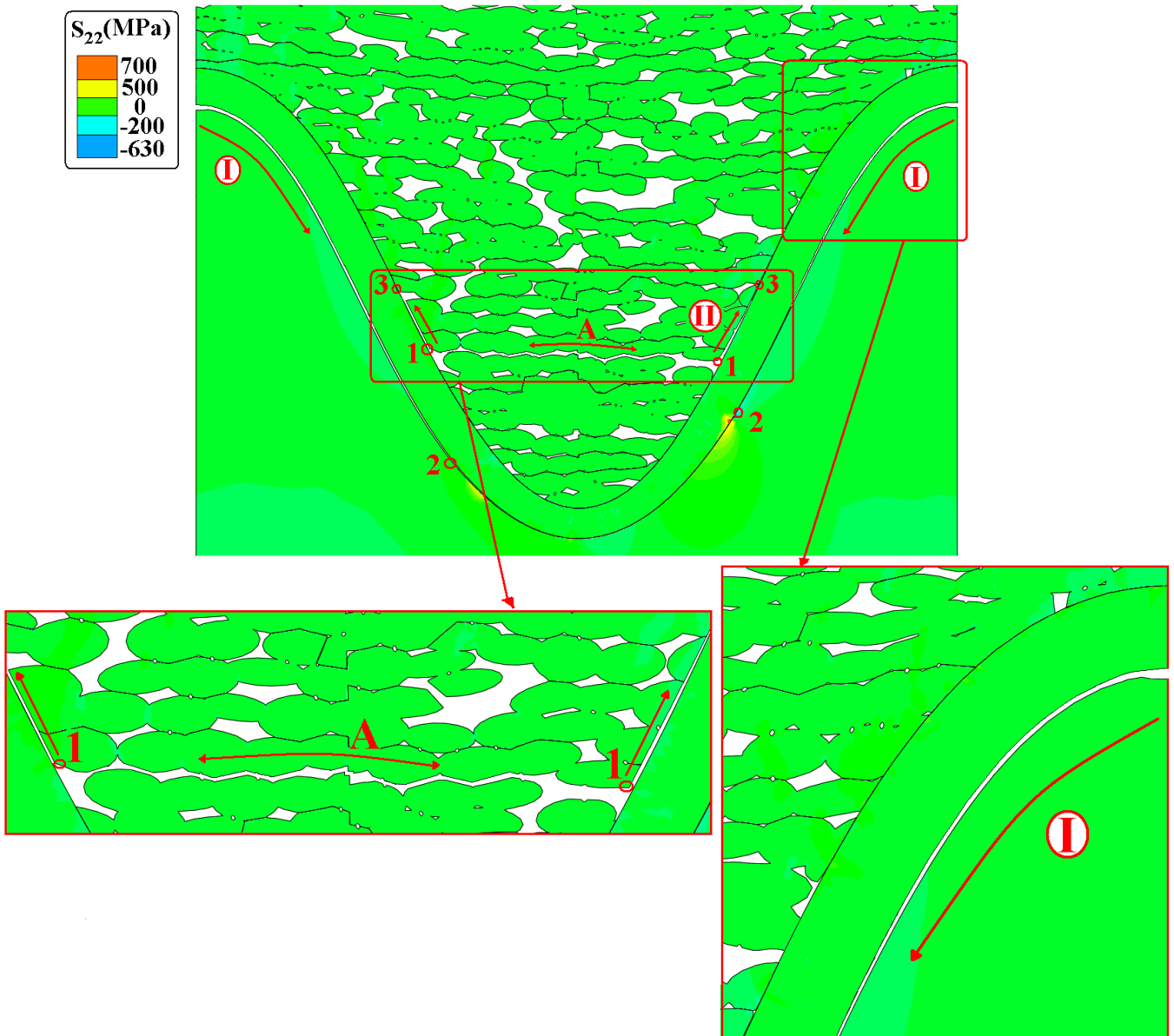


Figure 4-12. Crack propagation modeling in the case of uniform sinusoidal amplitudes ( $15 \mu\text{m}$ ) for  $3 \mu\text{m}$  final TGO thickness.

This discrepancy is due to the limitation of unbuttoning function that permits the crack propagation only between two interfaces as explained previously. Consequently, the crack in the TGO/BC interface is not able to penetrate into the TGO layer and it continues to extend along the interface rather more than expected. While this crack stops, another crack on the TBC/TGO interface becomes to propagate right away in the system. It is concerning the crack already stopped at points 1 in both side of the asperity. At this time, they reach the sufficient tensile stress and deviate and kink toward the TBC/TGO interface (mechanism II) and

propagate toward the peak. However, the stress level in this zone is already decreased by the opening of the crack at the TGO/BC interface (mechanism I) and consequently it stops quickly at the point 3. Nevertheless, the coalescence between two cracks located at the zone A in *Fig.4-12* is important but it is not sufficient large to lead to the TBC delamination.

#### IV.1.3. With TGO growth: 5 $\mu\text{m}$

When the oxide layer reaches 5  $\mu\text{m}$  in thickness, the cracking scenario is approximately the same as this observed for the 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness. The TGO/BC interface crack length remains stable but the stress concentration within the TGO and BC layer at point 2 (*Fig.4-12*) becomes more important ( $\sim 780$  MPa).

Concerning the TBC layer, the same cracking scenario between the lamellas is appeared and we can see also different areas of ceramic layer that is opened by the crack but their inter-lamella length is small and unimportant.

#### IV.1.4. With TGO growth: 7 $\mu\text{m}$

If the high temperature dwell-time is prolonged, the TGO thickness reaches 7  $\mu\text{m}$ . As shown in *Fig.4-13*, the delamination of the ceramic layer appears for this critical thickness.

The crack propagation through the oxide layer is not possible since no pathways have been predefined for the unbuttoning procedure. Therefore, there is a gap in the TBCs cracking behaviour between one corresponding to the 5  $\mu\text{m}$  TGO thickness for which different crack propagation are observed everywhere inside the ceramic layer including between the lamellas located at the peaks and one for the 7  $\mu\text{m}$  TGO thickness for which the crack propagation are more extended and leads to the delamination of the TBC layer.

Thus, in the case of uniform sinusoidal interface morphology, the critical TGO thickness that can lead to the delamination of the TBC seems to be about 7  $\mu\text{m}$ . However, the stress level within the TGO layer remains very high and should cause, as in the actual system, the crack initiation and propagation into the oxide layer. Consequently, if the coalescence of the cracks that develops along the TGO/BC and the TBC/TGO interfaces would be possible through the TGO layer, the delamination scenario of the system will be different from that is shown in *Fig.4-13*. This point will be discussed in detail in section IV.4.

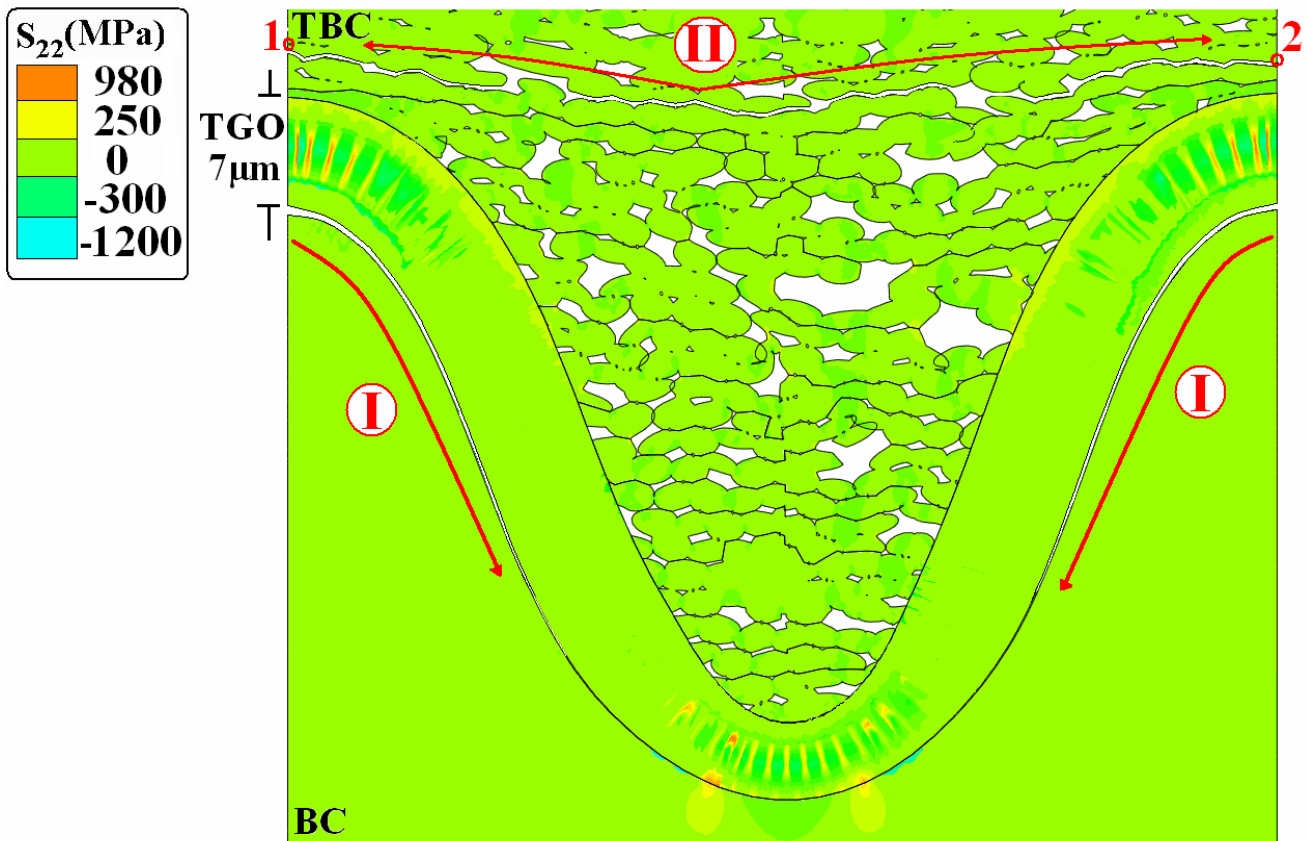


Figure 4-13. Crack propagation modeling in the case of uniform sinusoidal amplitudes (15  $\mu\text{m}$ ) for 7  $\mu\text{m}$  final TGO thickness.

#### IV.2. Effect of the interface morphology on the crack propagation in the case of 3 $\mu\text{m}$ TGO thickness

In order to examine the effect of the interface morphology on the crack development, two different cases of amplitudes of neighbors sinusoidal asperities, uniform (15  $\mu\text{m}$ ) and non-uniform (15  $\mu\text{m}$ -5  $\mu\text{m}$ ) are compared. The final TGO thickness is equal to 3  $\mu\text{m}$  at the peak of the TGO layer in both cases.

In the previous section, the cracking history in the case of a 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness for uniform asperities (*Fig.4-12*) has shown that cracks propagate between the lamellae located at the middle area of top-coat layer, at the TGO/BC interface and finally, at the TBC/TGO interface (see previous section).

The cracking scenario for the non-uniform amplitudes with a final TGO thickness of 3  $\mu\text{m}$  is examined in *Fig.4-14*. The first failure mechanism corresponds to the crack propagation in the TBC, induced by the TGO growth in the peak region of the rugosities areas of low amplitude (zone A in *Fig.4-14*). This crack can propagate only when the neighbouring

roughness has a high enough amplitude that leads to the sufficient tensile stresses in the midway region between peak and valley. This crack extends from point 1 to point 2.

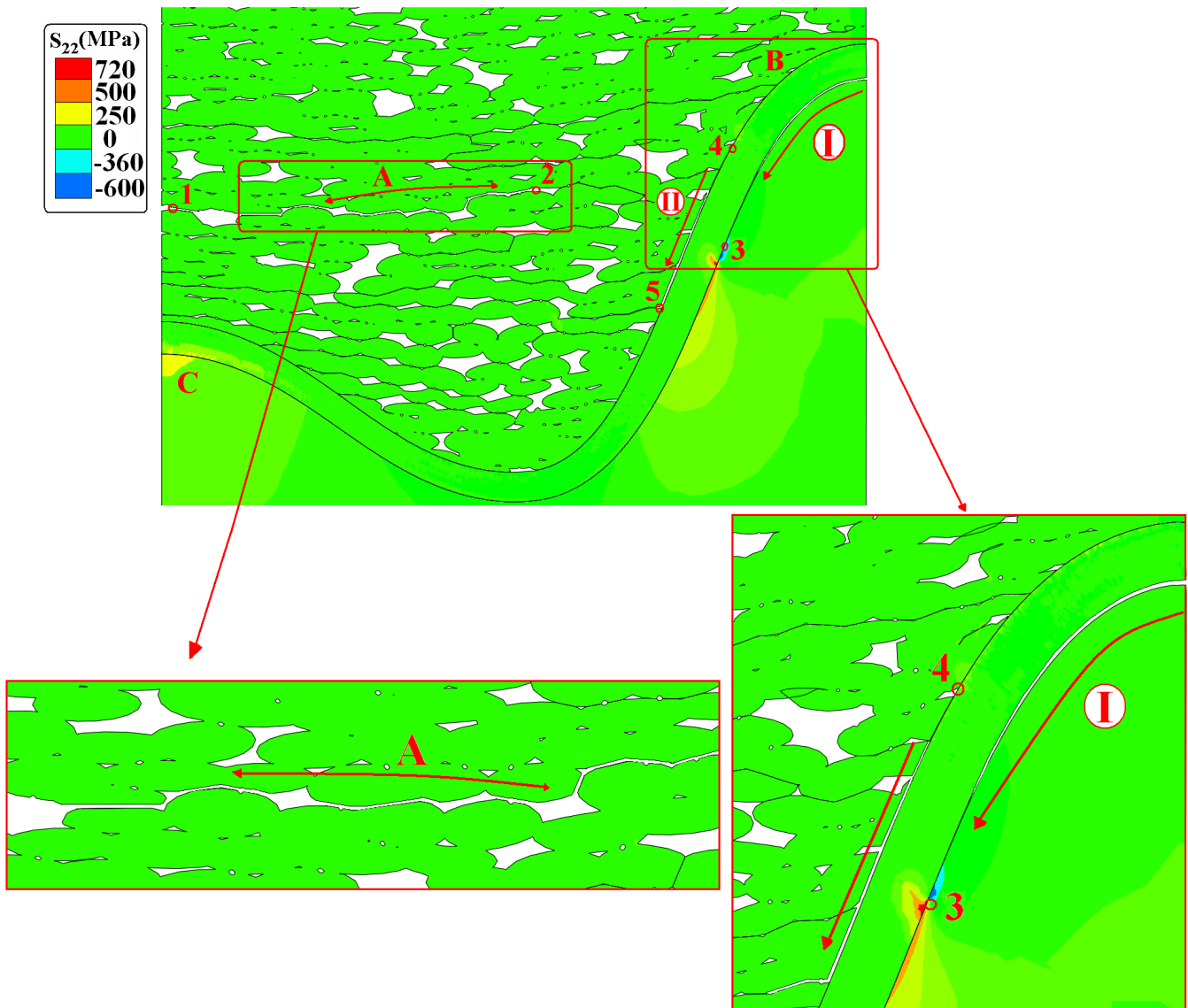


Figure 4-14. Cracking scenario for 3  $\mu\text{m}$  TGO thickness in the case of non-uniform sinusoidal amplitude of 15  $\mu\text{m}$ -5  $\mu\text{m}$ .

The second crack formation appears at the peak of the TGO/BC interface of the high rugosity amplitude (mechanism I in **Fig.4-14**). It propagates toward the middle, and finally it stops at the point 3 due to presence of the compressive zone in this region. After that, a crack opens at point 4 located on the TBC/TGO interface and develops toward the valley region (mechanism II). However, it stops rapidly at point 5 due to the compressive stresses. This crack does not extend toward the peak region because the opening of the crack mechanism I has already relaxed the stress level of zone B on the ceramic layer. Concerning the oxide layer

the tensile stress level is less than its yield strength ( $< 1200$  MPa). Thus, formation of the crack within this layer does not seem possible. Pre-cracks existing in the TBC/TGO and TGO/BC interfaces of low amplitude do not reach to the yield stress and consequently do not extend.

Comparing the uniform and non-uniform cases of neighbor rugosity amplitudes shows that the crack length formation in the case of non-uniform amplitudes is longer than one appears for uniform amplitudes.

### IV.3. Determination of the critical TGO thickness leading to the TBC layer delamination according to the interface morphology

As shown in *Fig. 4-13*, in the case of rugosities of uniform amplitudes, the TBC spallation can appear for a TGO layer around  $7 \mu\text{m}$  in thickness. Nevertheless, the link between the cracking mechanisms I and II through the TGO layer is not considered in our model. Thus, for a  $7 \mu\text{m}$  TGO layer thickness, the tensile stress concentration at the regions located in the peak asperities becomes more critical. At this time, crack propagation starts in this zone and develops from point 1 to point 2 of *Fig.4-13*. Cracking scenario of mechanism II is always present on the system.

Concerning the non-uniform amplitudes, the cracks propagation behaviour that lead to the delamination of the TBC layer is different from one observed for uniform amplitudes (*Fig.4-15*). The TBC spallation could occur as the TGO peak thickness reaches  $5 \mu\text{m}$ . The first crack opening due to the TGO growth takes place in the top-coat layer, at the peak region of the rugosities of low amplitude. This crack propagates between two lamellae located at a significant higher distance from the peaks of the low amplitude. It develops from point 1 to point 2. At this moment, the tensile stress is not enough at point 2 to develop the crack along the TBC/TGO interface. Thus, the crack stops temporarily in this zone.

The next crack opening is formed at the peak of the TGO/BC interface of high amplitude (mechanism I). The pre-crack existing at the peak starts to propagate toward the middle and finally stops at point 3. This crack length is longer than expected because the crack propagation through the oxide layer is not considered by the model. During this time, the crack-tip at point 2 reaches the yield stress at the TBC/TGO interface and starts to propagate

(mechanism II). It goes toward the peak asperity and stops at point 4 at the end of peak. At this time, the TBC spallation appears in the TBCs.

Note that in this model, the tensile stress in the TGO layer at neighboring the point 3 is not sufficient to allow the extension of the crack into the oxide layer due to the stress level relaxation already done by the delamination of the ceramic layer. In other hand, if the crack propagation inside the TGO layer has been modeled and has not been restricted to the interfaces, the link between the cracks would have caused the delamination of the TBC layer through the TGO layer.

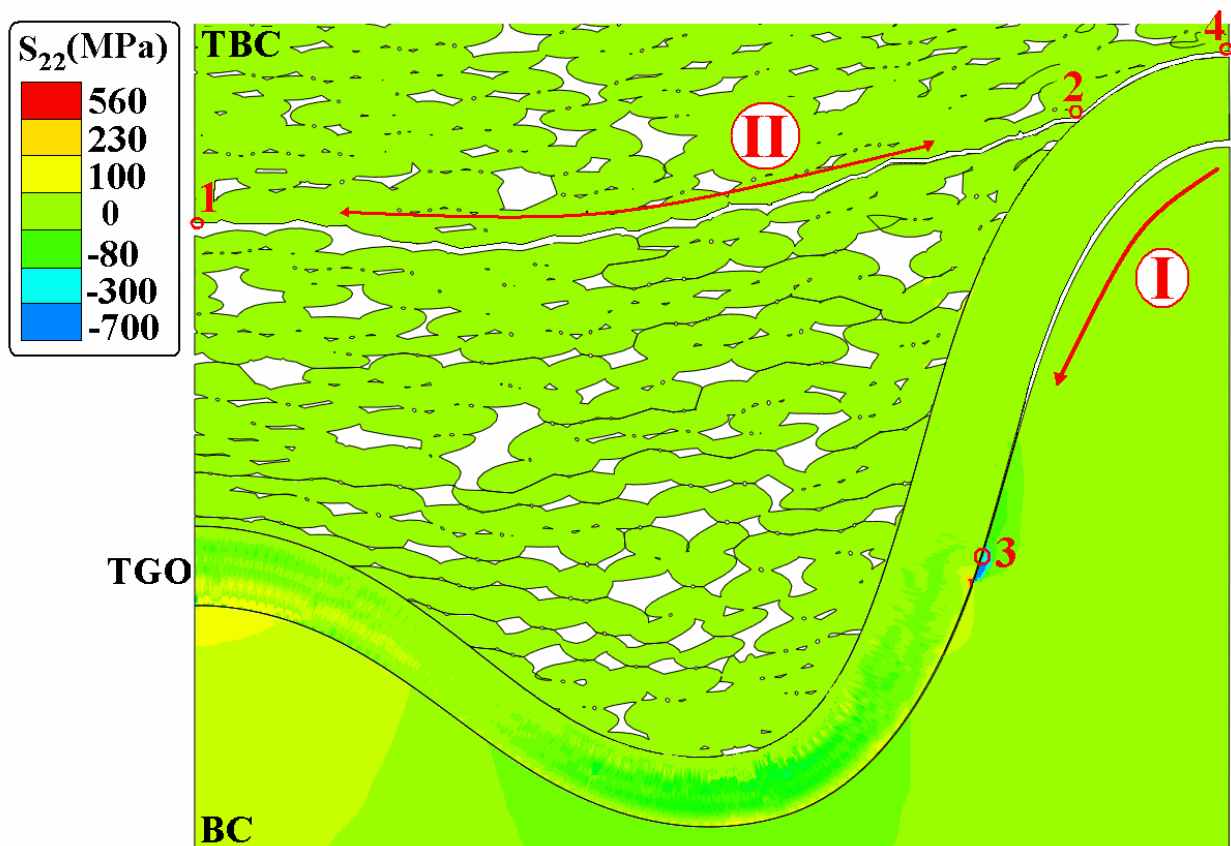


Figure 4-15. Effect of the TGO layer thickness on the delamination of the ceramic layer, in the case of neighbor rugosities of non-uniform amplitudes.

#### IV.4. Discussion

The numerical results obtained in the previous sections show that the crack behaviour in the TBC system is highly dependent on the morphology of the top-coat/bond-coat interface and on TGO thickness. The quantitative effect of the roughness amplitude on the crack loading is investigated in **Fig.4-16**. Low roughness amplitudes cause straight transversal crack paths,

whereas high amplitudes result in kinked crack paths. This phenomenon is verified by experimental observations made by Aktaa *et al.* [ASM-05] and Rabiei and Evans [RE-00]. The delamination should pursue by the coalescence with another crack initiated in the neighbour rough area, depending on the TGO growth and the interface morphology.

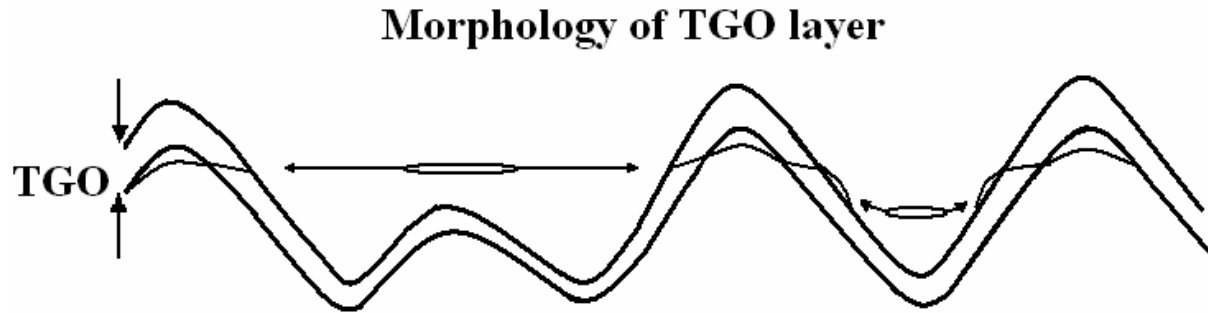


Figure 4-16. Crack propagation behaviour in the TBC system and its dependence on the morphology of the TGO layer and TBC/BC interface.

Regarding the different crack propagation behaviours of the TBC system, we can observe that the link of the cracks that develops in the case of rugosities of non-uniform amplitudes is more critical than this corresponding to the case of uniform amplitudes. This ascertainment is due to the importance of the crack length formation in the peak region of rugosities of low amplitude. If this crack penetrates into the TGO layer and coalesces with the crack already propagated at the oxide/bond-coat interface, it should lead to the delamination of an important part of the ceramic layer. This crack scenario is observable for non-uniform amplitudes since the TGO layer thickness reaches 5  $\mu\text{m}$  (as function of tensile and compressive stress level appearing on the system). In the other hand, with roughness of uniform amplitudes, the crack length that appears between two asperities is short and the formation of the crack within the oxide layer depends on the TGO thickness. Consequently, TBC spallation is observed for TGO thickness of at least 7  $\mu\text{m}$ .

The previous simulations *Fig.4-13* and *Fig.4-15* show that the critical thickness of the TGO layer that leads to the TBC spallation for two non-uniform neighbour rugosities is approximately between 5 and 6  $\mu\text{m}$  whereas it is about 7  $\mu\text{m}$  for uniform amplitudes. Thus, a uniform interface roughness is expected to extend the lifetime and, thus, to improve the reliability of TBC systems.

Finally, the model does not allow the cracks propagation through the TGO layer that can significantly affect the cracks link and the conditions of apparition of the spallation



phenomenon. Thus, this point should be considered as an important perspective for the development of the TBC system modeling

#### IV.5. Effect of thermal loading cycle on the crack propagation

In this last part, the effect of a thermal loading composed of several cycles of heating and cooling is investigated on the stress fields and crack formation in the TBC system. As the crack propagation is modelled, successive openings of the crack-tips can affect the crack propagation as the TGO thickness continuously evolves. In addition, this multi-cycle is much more representative of the actual system in operation than the single one.

The thermal cycle imposed to the TBC system is similar to the thermal scenario described in chapter 3, section III.1 (see **Fig.3-9**), but the single thermal cycle of Step-2 imposed on the TBC layer is replaced by a multi-cycles similar to one shown in **Fig.2-4b**. For the thermal multi-cycles case, the thermal load is identical to the single one, but the dwell-time is fixed to a multiple of 2 h per individual cycle. The relation  $t_{oxide} = n_{cycles} \times 2$  h can be established between the two cases.

The model with a sinusoidal interface and uniform amplitude of 15  $\mu\text{m}$  is used to examine the effect of the thermal loading cycles **Fig.4-10a**.

For a small number of thermal cycles ( $1 < n_{cycles} < 3$ ), the cracks development following mechanism I at the TGO/BC interface and mechanism II at the TBC/TGO interface are appeared **Fig.4-17**. They stop at the points 1 and 3, respectively. This cracking scenario is the same as one observed in the case of a single cycle with a thin TGO thickness (see **Fig.4-11**).

When the oxidation process proceeds slowly and the TGO thickness reaches about 3  $\mu\text{m}$  (after 20 thermal cycles), the crack propagation is predicted in the middle region of the TBC located between the two asperities (see zone A in **Fig.4-17**). Moreover, cracks already existing on the TGO/BC and TBC/TGO interfaces remain opened during thermal cycling whereas in the actual system, cracks opened in the cooling phase of Step-2 can close in the heating phase of Step-2 [Bia-08]. In our model, the “**Debond**” tool configuration is not able to close the cracks in the heating stage. Therefore, when a crack developed in the system, it remains always open.

For an important thickness of oxide layer about 7  $\mu\text{m}$  obtained after 50 thermal cycles, the cracking scenario that appears in the system is different from the one obtained in the case

of a single cycle in the *Fig.4-13* (the TBC delamination was observed at the peak area of the rugosities). For the thermal multi-cycles case, the crack opening at the middle region located between the two asperities (zone A) after 3  $\mu\text{m}$  does not permit to open another crack path at the peak due to the relaxation of the tensile stresses at this zone (see *Fig.4-17*). Consequently, the stress concentration at the last points of this crack (point 2) becomes more important. We can see that the crack kink at the TBC/TGO interface and develops toward the valley region. This crack continues to propagate until it coalescence with a symmetric crack and finally leads to delaminate a small part of the top-coat (*Fig.4-17*).

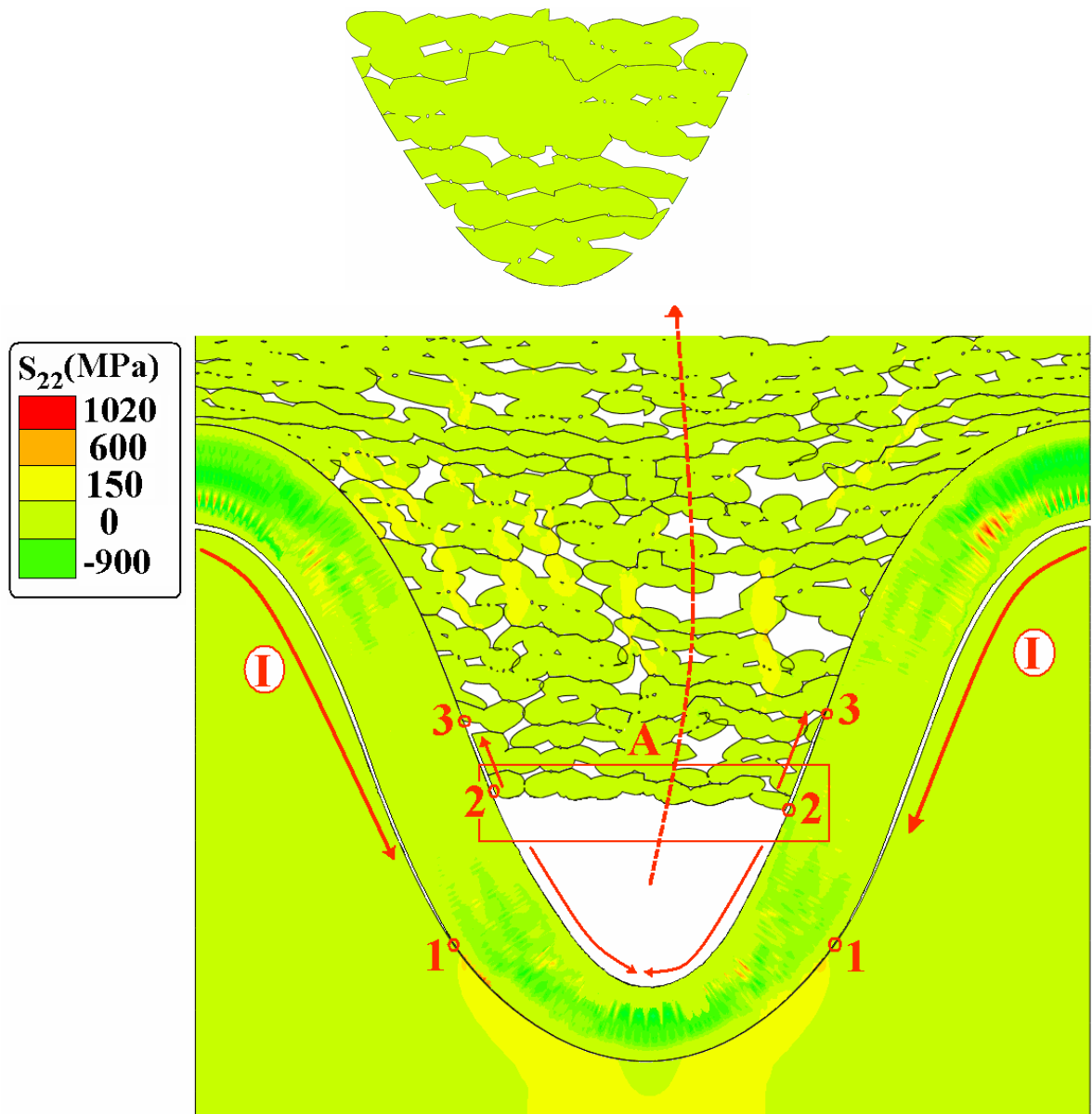


Figure 4-17. Delamination of the small part of ceramic layer, for uniform amplitude of 15  $\mu\text{m}$  at 7  $\mu\text{m}$  TGO thickness (after 50 thermal cycles), in the case of thermal multi- cycles.

Briefly, while the TGO thickness becomes large, the multiple thermal cycles can cause substantially different failure mechanism in the system in comparison to that obtained for the single cycle with the same dwelling time. As a result, the failure mode observed in the case of thermal multi-cycles is less critical for lifetime of the system in comparison to the one observed in the case of single cycle.

## V. Conclusions

The modelling of the crack development has shown a considerable influence on the stress redistribution around the undulations of the interfaces. After a description of the unbuttoning method, the chapter 4 was composed of two parts.

In the part A, we have used the same model presented in chapter 3 for crack simulation. The different crack initiation and propagation scenarios derived from the results of the residual stress calculations are more or less speculative. Two failure mechanisms of thermal barrier coatings (mechanism I and mechanism II) have been examined through a finite element model taking into account the residual stress generation within the top-coat and bond-coat due to thermal expansion mismatch, the oxidation and the morphology of interfaces. The simulation of interfacial crack development shows the appearance of a lower tensional region within the TBC by mechanism I and within the BC by mechanism II. We have given a particular attention on the effect of the oxide growth and of the interface morphology on the crack behaviour. The development of the tensile and the compressive zone within TGO is correlated with the thickness of the oxide layer itself and development of the interface crack.

After analysis we observe that the location of the crack was in the place that we expected, but the crack length was longer than one predicted. It was due to the unique presence of crack along the interfaces. Therefore, modeling the crack propagation within the ceramic layer was necessary.

In the part B, we have presented a new thermo-mechanical model with a lamellas structure for the ceramic layer. The cracks can penetrate between the lamellas. The results show that the morphology of the interface has an important role on the lifetime of the system. The system having homogenous and uniform ( $< 7 \mu\text{m}$ ) interface supports well the stress in comparison to the one having a non-uniform interface ( $< 5 \mu\text{m}$ ). In addition, in order to extend

the lifetime and to improve the reliability of TBC systems, we have to control the growth of the oxide layer. Finally, the delamination of the TBC layer is less critic in the case of thermal multi-cycles on comparison to the one observed in the case of single cycle.

In conclusion, the failure of a TBC is very complex and cannot be completely described by a simple model. For example, the whole crack propagation path and probable delamination scenarios, were not taken into account by the using the "Debond" tool in this approach.

# *Conclusion générale et Perspective*

---

L'objet de cette thèse concerne la mise en place d'un modèle de l'endommagement en service des barrières thermiques obtenues par procédé de projection plasma. De nombreux outils numériques basés sur la méthode des éléments finis ont été développés dans le but de mieux comprendre les phénomènes conduisant à la dégradation des barrières thermiques en service pour à terme proposer une microstructure conduisant à des caractéristiques mécaniques améliorées en terme de performances et durée de vie. La méthodologie appliquée est basée sur les étapes suivantes : élaboration des modèles de complexité croissante, résolution numérique, interprétation des résultats et validation expérimentale. Ce travail a été appliqué à la modélisation de l'état de contraintes, de la micro-fissuration et de l'évolution des propriétés thermo-mécaniques de matériaux en couches lors de leur élaboration ou de cyclage thermique en service. La modélisation avec ou sans endommagement a permis de décrire les interactions entre la croissance de la couche d'oxyde et le comportement thermomécanique du système, jusqu'à la simulation de l'écaillage du revêtement et ce à l'échelle de la rugosité de l'interface avec le substrat. Finalement, en s'appuyant sur les études menées à cette échelle nous avons proposé des pistes pour augmenter la durée de vie des barrières thermiques.

Après une étude bibliographique détaillée sur les propriétés des barrières thermiques, notamment sur les interactions entre les différentes couches, leur endommagement ainsi que sur les outils numériques utilisés dans la prédiction de leur comportement thermomécanique, nous avons réalisé un modèle simple basé sur des couches homogènes sans possibilité de fissuration et soumises à une température homogène. Cette étape préliminaire a permis de « caler » notre modèle de base par rapport aux résultats de la littérature et de réaliser ensuite, plus simplement, une étude paramétrique de façon à mieux cerner l'influence des paramètres essentiels responsables de la dégradation des barrières thermiques. Pour développer ce modèle, l'analyse des divers résultats expérimentaux décrits dans l'étude bibliographique, nous a permis de déterminer l'échelle pertinente pour décrire les mécanismes d'écaillage du système, ainsi que les principaux phénomènes et paramètres à prendre en compte et à étudier. Le modèle consiste en une cellule périodique, décrivant la rugosité des interfaces oxyde/sous-couche et oxyde/céramique résultant de la préparation du substrat par sablage avant l'étape de projection. La prise en compte de la géométrie de l'interface, de la croissance de la couche d'oxyde par intégration de la loi de Tamman, de la dilatation thermique et du comportement thermomécanique des couches en termes de fluage et de déformations plastiques de la sous-

couche ont permis de cartographier les contraintes au sein des matériaux. Cette étude a permis de créer le modèle à couches homogènes et sans fissuration qui néanmoins se rapproche au mieux des conditions et des phénomènes qui interviennent dans la vie d'une barrière thermique.

Afin d'obtenir un modèle plus proche de la réalité, nous avons ensuite tenu compte des contraintes résiduelles formées lors d'élaboration du système BT ainsi que des gradients thermiques apparaissant au sein du système durant le service. Une attention particulière a été donnée à l'étape de création de contraintes résiduelles pour différentes températures du substrat et différentes vitesses de refroidissement. Nos résultats sont en bon accord avec les observations expérimentales. Cette étape a permis de localiser les zones propices à une rupture de la barrière thermique par délaminage du dépôt.

Finalement, nous avons mis en place un modèle assez proche des conditions réelles de fonctionnement et où la propagation de fissures a été introduite grâce à l'outil « *Debond* » du logiciel Abaqus. Cet outil a permis le déboutonnage des noeuds du maillage suivant des interfaces prédéfinies. Dans un premier temps nous avons validé ce modèle pour prédire la décohésion des interfaces entre matériaux toujours considérés comme homogène. Nous avons ensuite proposé un nouveau modèle plus réaliste qui prend en compte la structure lamellaire de la couche céramique dans lequel on a introduit des microfissures capables de se propager aux interfaces et dans la couche céramique. Ceci constitue une étape de modélisation des systèmes plus proches de la réalité en comparaison aux travaux réalisés dans ce domaine et décrits dans la littérature. Dans ce cadre, nous avons étudié et modifié plusieurs types de modèles fonction de la croissance de la couche d'oxyde et de la morphologie de l'interface et nous avons présenté différents scénarios de fissuration. Selon nos résultats numériques, les conditions pour lesquels la durée de vie d'un système barrière thermique peut augmenter correspondent plutôt au cas d'une rugosité de forme régulière associé à un contrôle de la croissance de la couche d'oxyde durant le service. Une étude de l'influence du cyclage thermique a montré qu'un fonctionnement avec un chargement thermique répétitif à courte durée est plus favorable à une durabilité du système BT par rapport à un fonctionnement avec un cycle thermique ayant un long palier à haute température.

## Perspective

Dans le cadre de notre étude et afin de simplifier le calcul, toutes les couches étaient considérées comme isotropes alors que cette hypothèse n'est pas réaliste, ajouter à cela le fait

que les différentes couches présentent des défauts non pris en compte dans nos modèles numérique. En outre, l'effet du vieillissement thermique et le phénomène du frittage ont été négligés tandis que ces phénomènes ont un rôle important sur la durée de vie d'un système BT. Ainsi, comme perspectives à notre travail, il serait souhaitable que les modèles numériques considérés dans l'avenir tiennent compte de l'anisotropie des couches ainsi que du vieillissement et du frittage.

Par ailleurs, l'évolution de l'endommagement aux interfaces et dans la couche céramique a été simulée par l'outil « *Debond* » d'Abaqus. Les résultats numériques présentent une bonne corrélation aux résultats expérimentaux néanmoins cet outil n'est pas sans inconvénients :

- il s'applique uniquement aux problèmes 2D ;
- les chemins de propagation des fissures doivent être prédéfinis à l'avance.

Compte tenu de ce dernier point, nous avons prédéfinis différents chemins de propagation de fissure dans la couche d'oxyde afin de relier la fissure à l'interface TGO/BC avec celle à l'interface TBC/TGO. Malgré tout, ces chemins ne sont pas forcément ceux où la propagation se produit dans la réalité et ne correspondent pas forcément aux zones de contraintes maximum ce qui n'a pas permis leur propagation à travers la couche d'oxyde. Par conséquent, nous n'avons pas obtenu un écaillage total selon les contraintes formées dans le système. Ainsi, l'outil « *Debond* » n'est pas forcément l'unique outil pour simuler tous types de fissuration. Il faudrait probablement considérer d'autres méthodes telles l'utilisation des éléments cohésifs pour une modélisation en 3D ou d'autres techniques telles la VCCT ou la XFEM. Ces méthodes doivent permettre de déterminer une nouvelle direction de fissuration à chaque pas de calcul.

Enfin il sera utile de signaler que dans ce travail et afin de simplifier la modélisation de l'endommagement nous n'avons considéré que la propagation des fissures en mode I. Cependant, la propagation de fissures en mode II peut jouer un rôle important dans la dégradation des BT. D'autres étapes de recherche doivent prendre en compte la possibilité de fissuration multidirectionnelle afin de s'approcher de plus en plus de la réalité du fonctionnement des BT en service.





# *Bibliographie*

---

[Aba-V6.7] Hibbiitt, Karlsson and Sorensen, ABAQUS v6.7 analysis user's manual, Pawtucket, USA, 2007.

[AHC\*-06] G. Antou, F. Hlawka, A. Cornet, C. Becker, D. Ruch, A. Riche, « In the laser remelted thermal barrier coatings: thermophysical properties », *Surface & Coatings Technology* 200 (2006), p 6062-6072.

[ALV\*-04] M. Ahrens, S. Lampenscherf, R. Vassen, D. Stöver “Sintering and creep processes in plasma-sprayed thermal barrier coatings.” *Journal of Thermal Spray Technology*, 33 (2004), p 432-442.

[ANN-01] M. Y. Ali, S. Q. Nusier, G. M. Newaz, “Mechanics of damage initiation and growth in a TBC/superalloy system”, *International Journal of Solids and Structures* 38 (2001), p 3329-3340.

[Ant-04] G. Antou, «Améliorations de revêtements barrières thermiques par un procédé de refusion laser in situ utilisant un laser à diodes », *Sciences pour L'ingénieur, Strasbourg*», Université Louis Pasteur- Strasbourg1, Thèse soutenue 2004, N° d'ordre : 4574, 280P.

[ASM-05] J. Aktaa, K. Sfar, D. Munz, “Assessment of TBC systems failure mechanisms using a fracture mechanics approach.”, *Acta Materialia* 53(2005), p 4399-4413.

[ASW-00] A. Atkinson, A. Selçuk, S. J. Webb, « Variability of stress in alumina corrosion layers formed in thermal barrier coatings. », *Oxidation of metals*, 2000, vol. 54-5/6, p. 371-384.

[AVM-04] S. Ahmaniemi, P. Vuoristo, T. Mäntylä, “Mechanical and elastic properties of modified thick thermal barrier coatings”, *Materials Science and Engineering A366* (2004), p 175–182.

[AVS-02] M. Ahrens, R. Vaßen, D. Stöver, “Stress distributions in plasma-sprayed thermal barrier coatings as a function of interface roughness and oxide scale thickness.”, *Surface and Coatings Technology* 161 (2002), p 26-35.

[Bed-07] P. Bednarz , “Finite Element Simulation of stress evolution in thermal barrier coating systems” PhD thesis, Forschungszentrum Jülich 2007.

[Bia-05] M. Białas, P. Majerus, R. Herzog, Z. Mróz, “Numerical simulation of segmentation cracking in thermal barrier coatings by means of cohesive zone elements”, *Materials Science and Engineering. A* 412 (2005), p 241-251.

[Bia-08] M. Białas, "Finite element analysis of stress distribution in thermal barrier coatings", *Surface & Coatings Technology*, 202 (2008), p 6002-6010.

[BLS-01] E.P. Busso, J. Lin, S. Sakurai. “A mechanistic study of oxidation-induced degradation in a plasma-sprayed thermal barrier coating system. Part II: life prediction model.” *Acta Mater.*, 49 (2001), p 1529–1536.

[BP-97] P. Bengtsson, C. Person, “Modelled and measured residual stresses in plasma sprayed thermal barrier coatings.”, *Surface and Coating technology* 92 (1997), p 78-86.

[BRA-04] M. Bäker, J. Rösler, K. Aufzug, “ A parametric study of the stress state of thermal barrier coatings, Part I: creep relaxation”, *Acta Materialia*, 52 (2004), p 4809–4817.

[BRH-05] M. Bäker, J. Rösler, G. Heinze, "A parametric study of the stress state of thermal barrier coatings Part II: cooling stresses.", *Acta Materialia* 53 (2005), p 469-476.

[Bür-98] R. Bürgel, “Handbuch Hochtemperaturwerkstofftechnik“, Vieweg Verlag; 1998.

[CAL-01] M. Caliez, «Approche locale pour la simulation de l'écaillage des barrières thermiques EBPVD» Thèse 2001.

[CAM-97] L. Chang, O. Akira, R. Mcpherson, «The relationship between microstructure and young's modulus of thermally sprayed ceramic coatings» *Materials Science* 32 (1997), p 997-1004.

[CKT-01] D. B. Choules, K. Kokini, T.A. Taylor, "Thermal fracture of ceramic thermal barrier coatings under high heat flux with time-dependent behaviour. part 1: Experimental results.", *Materials Science and Engineering A299* (2001), p 296–304.

[CPM-87] G. C. CHANG, W. PHUCHAROEN, M. MILLER, "Behaviour of thermal barrier coatings for advanced gas turbine blades.", *Surface and Coatings Technology*, 30 (1987), p 13–28,.

[CVF-06] J. Cedelle, M. Vardelle, P. Fauchais, "Influence of stainless steel substrate preheating on surface topography and on millimetre-sized splat formation.", *Surface & Coatings Technology* 201 (2006), p 1373-1382.

[EL-84] H. E. Evans, R. C. Lobb, "Conditions for the initiation of oxide-scale cracking and spallation.", *Corrosion Science*, 1984, vol. 24-3, p. 209-222.

[EMH<sup>\*</sup>-01] A.G. Evans, D. R. Mumm, J. W. Hutchinson, G. H. Meier, F. S. Pettit "Mechanisms controlling the durability of thermal barrier coatings." *Progress in Materials Science*, 46 (2001), p 505-553.

[FFB<sup>\*</sup>-98] A. M. Freborg, B. L. Ferguson, W. J. Brindley, G. J. Petrus "Modeling oxidation induced stresses in thermal barrier coatings", *Materials Science and Engineering*, A245 (1998), p 182–190.

[GAS-06] S. Grandjean, J. Absi, D.S. Smith, "Numerical calculations of the thermal conductivity of porous ceramics based on micrographs.", *Journal of the European Ceramic Society*, 26 (2006), p 2669–2676.

---

[GVS-04] H. B. Guo, R. Vaßen, D. Stöver, "Atmospheric plasma sprayed thick thermal barrier coatings with high segmentation crack density.", *Surface & Coatings Technology*, 186 (2004), p 353-363.

[HEH-00] M.Y. He, A. G. Evans, J. W. Hutchinson, «The ratcheting of compressed thermally grown thin films on ductile substrates.», *Acta Materialas*, 2000, vol. 48, p. 2593-2601.

[HF-00] C. H. Hsueh, E. R. Fuller, "Analytical modeling of oxide thickness effects on residual stresses in thermal barrier coatings", *Scripta Materialia*, Volume 42, Issue 8, 31 March 2000, p 781-787.

[HFJ-00] Chun-Hway Hsueh, Edwin R. Fuller, Jr., "Residual stresses in thermal barrier coatings: effects of interface asperity curvature/height and oxide thickness" *Materials Science and Engineering*, A283 (2000), p 46-55.

[HHL\*-99] C.H. Hsueh, J.A. Haynes, M.J. Lance, P.F.Becher, M.K. Ferber, E.R. Fuller, Jr., S.A. Langer, W. C. Carter, W. R. Cannon, "Effects of interface roughness on residual stresses in thermal barrier coatings", *J. Am. Ceram. Soc.*, 82 [4] (1999), p 1073-75.

[JAH\*-08] Y. Joliff, J. Absi, M. Huger, J.C. Glandus, "Experimental and numerical study of the elastic modulus vs temperature of debonded model materials", *Computational Materials Science*, 44 (2008), p 826-831.

[KC-91] S. Kuroda, T.W. Clyne, "The quenching stress in thermally sprayed coatings.", *Thin Solid Film*, Vol.200 (1991), p 49-66.

[KS-01] A. M. Karlsson, A. G. Evans, «A numerical model for the cyclic instability of thermally grown oxides in thermal barrier systems.», *Acta Mater.*, 2001, vol. 49, p. 1793-1804.

[LCF-98] S.A. Langer, W.C. Carter, E.R.Fuller, "Object Oriented Finite Element Analysis for Materials Science: Version 1.0.", National Institute of Standards and Technology, Nov. 1998.

- [LRH\*-92] J.D. Lee, H.Y. Ra, K.T. Hong, S.K. Hur, "Analysis of deposition phenomena and residual stress in plasma spray coatings.", *Surface and Coatings Technology*, 56 (1992), p 27-37.
- [LWH-01] A. M. Limarga, S. Widjaja, T. Hon Yip, "Finite element analysis of residual stress in a plasma-sprayed functionally graded thermal barrier coating.", *Thermal Spray Technology*, 2001, p.943-950.
- [LWH-05] A. M. Limarga, S. Widjaja, T. Hon Yip, "Mechanical properties and oxidation resistance of plasma-sprayed multilayered Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/ZrO<sub>2</sub> thermal barrier coatings." *Surface and Coatings Technology*, 197 (2005), p 93-102.
- [Maj-04] P. Majerus, *Neue Verfahren zur Analyse des Verformungs- und Schädigungsverhaltens von MCrAlY-Schichten im Wärmedämmschichtsystem*. Schriften des Forschungszentrums Jülich, *Energy Technology*, Volume 34, 2004.
- [Man-95] W. Mannsmann, *Keramische Wärmedämmschichtsysteme: Eigenschaften und Verhalten unter mechanischer, thermischer und thermomechanischer Beanspruchung*, Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 1995.
- [MB-06] P. Michlik, C. Bernd "Image-based extended finite element modeling of thermal barrier coatings", *Surface & Coatings Technology*, 201 (2006), p 2369–2380.
- [MBF\*-06] M. Martena, D. Botto, P. Fino, S. Sabbadini, M.M. Gola, C. Badini, "Modelling of TBC system failure: Stress distribution as a function of TGO thickness and thermal expansion mismatch", *Engineering Failure Analysis*, 13 (2006), p 409-426.
- [ML-82] R.A. Miller, C.E. Lowell, *Thin Solid Film* 95 (1982) 265-296.
- [MS-03] J. Matejicek, S. Sampath, *In situ measurement of residual stresses and elastic moduli in thermal sprayed coatings, part I: apparatus and analysis.*", *Acta Materialia*, 51 (2003), p 863-872.

[NPM-02] P. Nitin, Padture, G. Maurice, "Thermal barrier coatings for gas-turbine engine applications.", *Science's Compass*, Vol 296 (2002).

[PAA-00] M-J. Pindera, J. Aboudi, S. M. Arnold, "The effect of interface roughness and oxide film thickness on the inelastic response of thermal barrier coatings to thermal cycling." *Material Science and Engineering A*, 284 (2000), p 158–175.

[PCW\*-03] D. Pan, M. W. Chen, P. K. Wright, K. J. hemker, "Evolution of a diffusion aluminide bond-coat for thermal barrier coatings during thermal cycling.", *Acta Materialia*, 51 (2003), p 2205-2217.

[PM-93] P.Y. Pekshev, I.G. Murzin, "Modelling of porosity of plasma sprayed materials.", *Surface and Coatings Technology*, 56 (1993), p 199-208.

[RBA-04] J. Rösler, M. Bäker, K. Aufzug, "A parametric study of the stress state of thermal barrier coatings: Part I: creep relaxation." *Acta Materialia* 52 (2004), p 4809-4817.

[RE-00] Rabiei A. et Evans A. G., « Failure mechanisms associated with the thermally grown oxide in plasma-sprayed thermal barrier coatings. », *Acta Mater.*, 2000, vol. 48, p 3963-3976.

[SAM-02] K. Sfar, J. Aktaa, D. Munz, "Numerical investigation of residual stress fields and crack behavior in TBC systems.", *Mat. Science and Engineering*, A333 (2002), p 351-360.

[SSB\*-00] E. Schumann, C. Sarioglu, J. R. Blachere, F. S. Pettit et G. H. Meier, "Hightemperature stress measurements during the oxidation of NiAl.", *Oxidation of Metals*, 2000, vol. 53-3/4, p 259-272.

[Sta-00] D.M. Staicu, "Conductivité thermique des combustibles nucléaires hétérogènes", *Thermique et Energétique*, Institut National des Sciences Applications de Lyon, Thèse soutenue 2000, N° d'ordre 2000 ISAL 0018.

[TBH\*-08] O. Trunova, T. Beck, R. Herzog, R.W. Steinbrech, L. Singheiser, "Damage mechanisms and lifetime behavior of plasma sprayed thermal barrier coating systems for gas

turbines—Part I: Experiments.”, *Surface & Coatings Technology*, Volume 202 (2008), p 5027-5032.

[TDC-98] V. K. Tolpygo, J. R. Drydenet, D. R. Clarke, « Determination of the growth stress and strain in  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> scales during the oxidation of Fe-22Cr-4.8Al-0.3Y alloy. », *Acta Mater.*, 1998, vol. 46-3, p 927-937.

[Tei-01] V. Teixeira, « Mechanical integrity in PVD coatings due to the presence of residual stresses », *Thin Solid Films*, (2001), p 276-281.

[Tei-02] V. Teixeira, “Residual stress and cracking in thin PVD coatings.” *Vacuum*, 64 (2002), p 393-399.

[Tri-05] A. Tricoire, «Barrières thermiques fissurées verticalement par projection plasma pour applications aéronautiques : compréhension des phénomènes, réalisation et caractérisation des dépôts», *Matériaux Céramique et Traitement de Surface*, Limoges : Université de Limoges, Thèse soutenue 2005, 131P.

[VKS-01] R. Vaßen, G. Kerkhoff, D. Stöver, “Development of a micro-mechanical life prediction model for plasma sprayed thermal barrier coatings”, *Materials Science and Engineering*, A303 (2001), p 100-109.

[WEL\* -00] E. Wei-nan, B. Engquist, X. Li, W. Ren, E. Vanden-Eijnden, “The Heterogeneous Multiscale Method : A Review”, Department of Mathematics, Princeton University (2000).

[WLH-02] S. Widjaja, A. M. Limarga, T. Hon Yip, “Oxidation behavior of a plasma-sprayed functionally graded ZrO<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> thermal barrier coating.”, *Materials Letters*, 57 (2002), p 627-634.

[WLH-03] S. Widjaja, A. M. Limaraga, T. Hon Yip, "Modeling of residual stresses in a plasma-sprayed zirconia/alumina functionally graded-thermal barrier coating" *Thin Solid Films*, 434(2003), p 216-227.

[XJG-06] W. Xie, E. Jordan, M. Gell, "Stress and cracking behavior of plasma sprayed thermal barrier coatings using an advanced constitutive model.", *Materials Science and Engineering, A* 419 (2006), p 50-58.

[Yam-00] HIRO Yamamoto, *Multi Thin Layer coating Modelling*, California Institute of Technology (2000).

[ZXW\*-06] X.C. Zhang, B.S. Xu, H.D. Wang, Y.X. Wu, "Effects of oxide thickness, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> interlayer and interface asperity on residual stresses in thermal barrier coatings.", *Materials & Design*, 27(2006), p 989-996.



## Appendix A. User subroutine Creep

The implementation of formula (2-7) in ABAQUS code has been done using the “*creep subroutine*”. This equation was implanted by the following program in the Abaqus code. Reference of data values is [Bed-07].

```

C
  SUBROUTINE CREEP(DECRA,DESWA,STATEV,SERD,EC,ESW,P,QTILD,
1 TEMP,DTEMP,PREDEF,DPRED,TIME,DTIME,CMNAME,LEXIMP,LEND,
2 COORDS,NSTATV,NOEL,NPT,LAYER,KSPT,KSTEP,KINC)
C
  INCLUDE 'ABA_PARAM.INC'
C
  CHARACTER*80 CMNAME
C
  DIMENSION DECRA(5),DESWA(5),STATEV(*),PREDEF(*),DPRED(*),TIME(2),
1 COORDS(*),EC(2),ESW(2)
C
  REAL*8 T,TT,TTT
  INTEGER TP
C
  character*80 nomfich
  character*20 aba
  character*20 test
  character*20 test2

  aba = CMNAME
  test = "SOUS-COUCHE"
  test2 = "CERAMIC"
  TP = TEMP
  IF (aba .EQ. test) THEN
    IF (TP.GE.25 .AND. TP.LT.700)THEN
      A= 0
      N= 4.5
      AA= 0
      EE= 0.09
      NN= 4.5
      AAA= 0
      EEE= 0.24
      NNN= 4.5
      T= A*QTILD**N
      TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
      TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN
      DECRA(1)= (TTT+T)*DTIME
    ELSEIF (TP.GE.700 .AND. TP.LT.750)THEN
      A= 1.25E-14
      N= 4.5
      AA= 1.25E-9
      EE= 0.09
      NN= 4.5
      AAA= 1.25E-12
      EEE= 0.24
      NNN= 4.5
      T= A*QTILD**N
      TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
      TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN

```

```

DECRA(1)=(TTT+T)*DTIME

ELSEIF (TP.GE.750 .AND. TP.LT.850) THEN
  A= 1.4E-11
  N= 3.8
  AA= 1.4E-6
  EE= 0.08
  NN= 3.8
  AAA= 1.4E-9
  EEE= 0.23
  NNN= 3.8
  T= A*QTILD**N
  TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
  TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN
  DECRA(1)= (TTT+T)*DTIME
ELSEIF (TP.GE.850 .AND. TP.LT.3000)THEN
  A=2.3E-9
  N= 3.1
  AA= 2.3E-4
  EE= 0.07
  NN= 3.1
  AAA= 2.3E-7
  EEE= 0.22
  NNN= 3.1
  T= A*QTILD**N
  TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
  TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN
  DECRA(1)= (TTT+T)*DTIME
ENDIF
ELSEIF (aba .EQ. test2) THEN
  IF (TP.GE.25 .AND. TP.LT.700)THEN
    A= 0
    N= 4.5
    AA= 0
    EE= 0.01
    NN= 4.5
    AAA= 0
    EEE= 0.05
    NNN= 4.5
    T= A*QTILD**N
    TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
    TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN
    DECRA(1)= (TTT+TT+T)*DTIME
  ELSEIF (TP.GE.700.AND. TP.LT.750)THEN
    A= 2E-22
    N= 4.5
    AA= 1E-10
    EE= 0.01
    NN= 4.5
    AAA= 2.2E-18
    EEE= 0.05
    NNN= 4.5
    T= A*QTILD**N
    TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
    TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN
  ELSEIF (TP.GE.950 .AND.
TP.LT.1050)THEN
    A= 3.77E-16
    N= 3.98
    AA= 3.77E-11
    EE= 0.04

```

```

NN= 3.98
AAA= 3.02E-13
EEE= 0.18ELSEIF (TP.GE.950 .AND. TP.LT.1050)THEN
A= 3.77E-16
N= 3.98
AA= 3.77E-11
EE= 0.04
NN= 3.98
AAA= 3.02E-13
EEE= 0.18
NNN= 3.98
T= A*QTILD**N
TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN
DECRA(1)= (TTT+TT+T)*DTIME
NNN= 3.98
T= A*QTILD**N
TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN
DECRA(1)= (TTT+TT+T)*DTIME
DECRA(1)=(TTT+TT+T)*DTIME
ELSEIF (TP.GE.750 .AND. TP.LT.850) THEN
A= 2E-20
N= 4.32
AA= 1E-10
EE= 0.02
NN= 4.32
AAA= 2E-16
EEE= 0.08
NNN= 4.32
T= A*QTILD**N
TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN
DECRA(1)= (TTT+TT+T)*DTIME
ELSEIF (TP.GE.850 .AND. TP.LT.950) THEN
A= 3E-18
N= 4.15
AA= 3E-10
EE= 0.03
NN= 4.15
AAA= 9E-15
EEE= 0.12
NNN= 4.15
T= A*QTILD**N
TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN
DECRA(1)= (TTT+TT+T)*DTIME
ELSEIF (TP.GE.950 .AND. TP.LT.1050)THEN
A= 3.77E-16
N= 3.98
AA= 3.77E-11
EE= 0.04
NN= 3.98
AAA= 3.02E-13
EEE= 0.18
NNN= 3.98
T= A*QTILD**N
TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN
DECRA(1)= (TTT+TT+T)*DTIME

```

```
ELSEIF (TP.GE.1050.AND. TP.LT.3000)THEN
  A= 4.8E-14
  N= 3.8
  AA= 1.44E-10
  EE= 0.05
  NN= 3.8
  AAA= 4.8E-12
  EEE= 0.25
  NNN= 3.8
  T= A*QTILD**N
  TT= AA*DEXP((-EC(2))/EE)*QTILD**NN
  TTT= AAA*DEXP((-EC(2))/EEE)*QTILD**NNN
  DECRA(1)= (TTT+TT+T)*DTIME
ENDIF
ENDIF
C
RETURN
END
```

## Appendix B. Convergence conditions

An homogenous temperature model, using the finite element code ABAQUS, has proposed to study the thermo-mechanical behaviour of the thermal barrier coatings system. Fully coupled thermal-stress analysis is needed when the stress analysis is dependent on the temperature distribution and temperature distribution depends on the stress solution. Coupled thermal-displacement elements are provided for this purpose in ABAQUS/Standard.

In ABAQUS/Standard the non-linear coupled system is solved using Newton's method and it offers an exact as well as an approximate implementation of Newton's method for fully coupled temperature-displacement analysis. In our models, we have used the exact implementation by default.

An exact implementation of Newton's method involves a non-symmetric Jacobian matrix [Aba-V6.7]. The mechanical and thermal equation must be solved simultaneously. The method provides quadratic convergence when the solution estimate is within the radius of convergence of the algorithm.

Each field,  $\alpha$ , that is active in the problem is tested for convergence of the field equation which is displacement,  $u$ , and temperature,  $\theta$ , for thermo-mechanical models. The following measures are used in deciding if an increment has converged:

$r_{\max}^{\alpha}$ , the largest residual in the balance equation for field  $\alpha$ ,

$\Delta u_{\max}^{\alpha}$ , the largest change in a nodal variable of type  $\alpha$  in the increment,

$c_{\max}^{\alpha}$ , the largest correction to any nodal variable of type  $\alpha$  provided by the current Newton iteration,

$q^{-\alpha}(t)$ , the instantaneous magnitude of the flux for field  $\alpha$  at time  $t$ , averaged over the entire model (spatial average flux),

$\tilde{q}^{-\alpha}(t)$  an overall time-averaged value of the typical flux for field  $\alpha$  so far during this step including the current increment. Normally,  $\tilde{q}^{-\alpha}(t)$  is defined as  $q^{-\alpha}$  averaged over all the increments in the step in which  $q^{-\alpha}$  is nonzero.

Our models work with an homogenous temperature on the whole of the system which induces a zero heat flux on the system. Zero flux is defined as  $q^{-\alpha} \leq \epsilon^{\alpha} \tilde{q}^{-\alpha}$ , where,  $q^{-\alpha}$ ,  $\epsilon^{\alpha}$  have a default value of  $10^{-2}$  and  $10^{-5}$ , respectively and the solution for field  $\alpha$  is accepted if  $r_{\max}^{\alpha} \leq \epsilon^{\alpha}$

$q^{\sim\alpha}$ . If not,  $c_{\max}^{\alpha}$  is compared to  $\Delta u_{\max}^{\alpha}$ , and convergence for field  $\alpha$  is accepted when  $c_{\max}^{\alpha} \leq C_{\varepsilon}^{\alpha} \Delta u_{\max}^{\alpha}$ . The default value of  $C_{\varepsilon}^{\alpha}$  is  $10^{-3}$ .

This mathematical convergence is presented in the flow chart of **Fig.Appendix-1**. Where  $t$  is the time,  $N$  is the number of increment,  $i$  is the counter to control more repetition number for current increment  $N$  if necessary to convergence. To accelerate the calculation in ABAQUS one can declare the parameter of *time increment* in order to avoid very small gap of time calculation that depends on the convergence facility set by user (in our case *time increment* is between 0.001 s and 10 s).

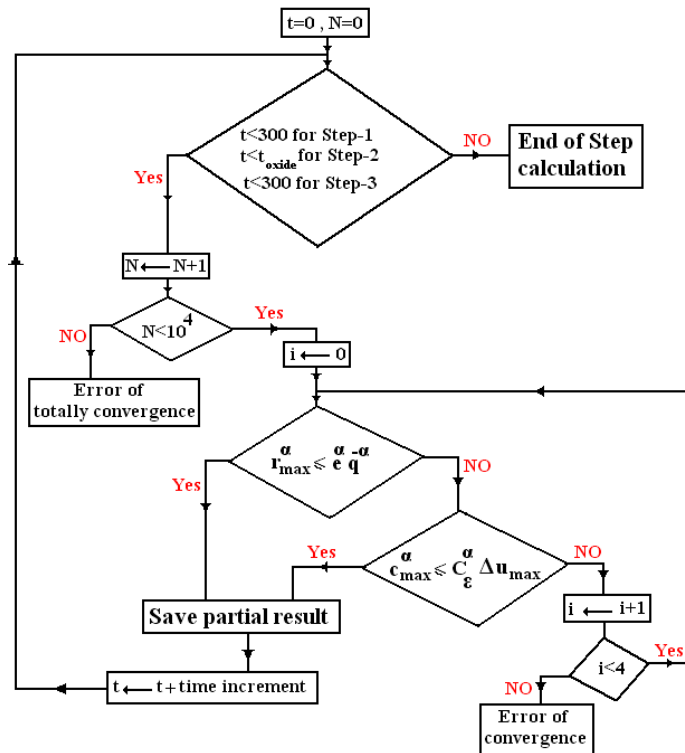


Figure Appendix-1. Convergence conditions.

*Valorisation des compétences*

«Un nouveau chapitre de la thèse ®»

Maryam RANJBAR FAR

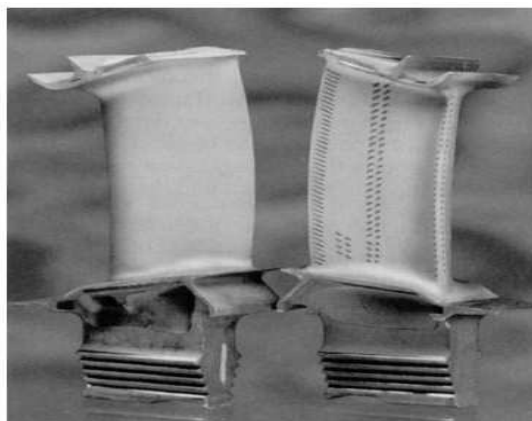
*Ecole doctorale : ED 258 Sciences Technologie et Santé*

*Matériaux Céramiques et Traitement de surface*

*Université de Limoges*

*Nom du "mentor" : Jacques CHRISTEN*

**« Simulation numérique du comportement  
thermomécanique de systèmes multicouches »**



# I. Cadre général et enjeux de la thèse

## 1. Présentation succincte

Mon projet de recherche concerne la modélisation des phénomènes thermomécaniques intervenants dans les barrières thermiques. Il est basé sur le développement d'une procédure numérique par la méthode des éléments finis comportant : élaboration des modèles, résolution numérique, interprétation des résultats et validation expérimentale.

A l'aide de l'outil de calcul des structures *ABAQUS* et des lois de comportement adéquates, j'ai effectué la modélisation des contraintes thermomécaniques sur différents modèles afin d'obtenir les zones les plus propices à la formation des fissures et à leur propagation. Durant le service, ces fissures coalescentes peuvent entraîner un écaillage partiel de la barrière thermique ou la ruine totale du système.

En conclusion, le but de ce projet est d'améliorer des performances des couches et à l'augmentation de la durée de vie de système barrière thermique.

## 2. Enjeux scientifiques de mon projet de recherche

Durant les cinquante dernières années, le développement d'alliages opérant à hautes températures a entraîné l'augmentation des températures de fonctionnement des turbines à gaz et des turbines aéronautiques. Le système Barrière Thermique (**BT**) est largement utilisé pour protéger les pièces métalliques situées dans les parties chaudes des turbines à gaz aéronautiques et terrestres ainsi que dans les moteurs à combustion diesel. Ce système BT permet ainsi, soit une augmentation de la température des gaz de combustion, soit une réduction de la quantité d'air nécessaire au refroidissement des pièces, ce qui résulte en une amélioration de la performance de la turbine, ou en une augmentation de la durée de vie de la pièce à la température de fonctionnement. Comme l'étude expérimentale coûte de plus en plus chère et prend beaucoup de temps, la simulation numérique est apparue comme étant un outil efficace pour remplacer certaines expériences. Le temps et l'argent gagnés grâce à ces études donnent les moyens d'améliorer encore les systèmes barrières thermiques qui deviennent alors plus efficace et adapté aux exigences du marché.



### 3. Ma thèse dans son contexte

#### a) **Place de la thèse dans le projet global de l'équipe**

Le GEMH est un laboratoire de recherche dans le secteur des matériaux hétérogènes employant plusieurs thésards. Je suis l'unique thésard qui travaille sur la simulation numérique du système multicouche. Mon sujet de recherche est donc un nouveau thème qui commence au sein du GEMH et il y aura donc, après ma soutenance, beaucoup de travail à fournir sur cette étude pour les prochains thésards.

Au regard des résultats obtenus et attendus, la thèse est primordiale dans le projet de recherche globale de l'équipe. Elle est dirigée par le professeur Joseph Absi, responsable de l'activité calcul numérique au sein du laboratoire GEMH de l'ENSCI. Concernant la partie expérimentale, notamment l'analyse et validation des résultats numériques, je suis encadrée par monsieur Gilles Mariaux, maître de conférence à l'ENSIL et chercheur au SPCTS. La partie numérique a nécessité un ordinateur de bureau de capacité de calcul élevée.

Outre une thèse supplémentaire qui sera soutenue dans les délais acceptables, le laboratoire et l'équipe de recherche ont gagné en communications scientifiques. Ci-dessous, une liste de la valorisation de mon travail en terme de communication scientifique.

Quatre **publications** acceptées :

- M. Ranjbar-Far, J. Absi, G. Mariaux, F. Dubois, "Simulation of the effect of material properties and interface roughness on the stress distribution in thermal barrier coatings using finite element method", **Materials and Design**, 2009, 31, p 772-781
- M.Ranjbar-Far, J. Absi, G.Mariaux, S. Shahidi, "Effect of residual stresses and prediction of possible failure mechanisms on thermal barrier coating system by finite element method", **Thermal Spray Technology**, 2010
- M.Ranjbar-Far, J. Absi, G.Mariaux, S. Shahidi, "Modeling of the residual stresses and their effect on the TBC system after thermal cycling using finite element method", **journal of the Polish Ceramic**, 2010
- M. Ranjbar-Far, J. Absi, S. Shahidi, G. Mariaux, "Impact of the non-homogenous temperature distribution and the coatings process modeling on the thermal barrier coatings system", **Materials and Design**, 2010

Trois congrès internationaux et conférences avec comité de lectures :

- ICC2 congress – Verona, Italy –June 2008
- IWAC03- Limoges, France- November 6-8, 2008
- XI<sup>th</sup> ECerS conference proceedings-Krakow, Poland- June 2009

En plus, deux autres **publication** sur la propagation des fissures dans les matériaux poreux en cours.

#### **b) Situation face à la concurrence**

La France est un pays bien connu dans le secteur aéronautique. Au niveau national, il y a beaucoup de laboratoires et d'industries aéronautiques qui travaillent sur la simulation numérique des systèmes barrières thermiques. A l'échelle mondiale, l'Allemagne et les Etats-Unis par exemple, s'intéressent énormément au comportement thermomécanique du système BT. Nos travaux se focalisent d'une part sur l'amélioration des performances du système, qui passe par l'optimisation des fonctions de chaque couche et, d'autre part, sur le prolongement de la durée de vie. En comparaison avec les travaux menés, au niveau national et international, nous nous situons à un niveau très acceptable du fait que nos valorisations scientifiques sont publiées dans les journaux fréquents par la concurrence.

### **4. Nous dans ce contexte**

De nombreux outils numériques et expérimentaux ont été développés dans le but d'optimiser le système barrière thermique. Ils permettent de vérifier les différentes propriétés de chaque couche et prévoient les formations de fissures.

J'ai avancé bien dans ce domaine. J'ai réussi à proposer un nouveau modèle de simulation qui prend en compte une structure lamellaire pour la couche céramique et j'ai introduit les microfissures capables de se propager aux interfaces et à la couche céramique. J'ai modélisé des systèmes plus proches de la réalité en comparaison aux anciens travaux réalisés dans ce domaine.

Les premiers résultats ont été valorisés par un article accepté au congrès « The 2<sup>nd</sup> international conference on ceramic, Verona » dont le titre est "Numerical modeling of thermo-mechanical behavior of TBC system".

### **5. Les raisons qui m'intéressaient pour choisir cette thèse**

Après l'obtention d'un Master Recherche en matériaux céramique et traitement de surface, j'avais trois possibilités de sujet de thèse. Mon choix s'est porté sur la simulation numérique du système multicouche car après cette thèse, deux compétences s'établiront. Premièrement, le sujet de cette thèse me pousse vers le domaine aéronautique et l'application de matériaux céramiques, et donc à ma formation de Master Recherche, était en parfaite adéquation avec les problèmes de fatigue thermique, oxydation, vieillissement, érosion,

développement des fissures et écaillage de la couche céramique puisqu'il vise à diminuer la vitesse de ces problèmes en proposant une structure lamellaire pour la couche céramique au but d'augmenter sa durée de vie.

Deuxièmes, le travail avec le logiciel de calcul ABAQUS est profitable pour une future carrière professionnelle. Il est largement utilisé dans les industries automobiles et aéronautiques en raison du large spectre de ses capacités d'analyse et de sa bonne ergonomie. Il est également très populaire dans les milieux universitaires, pour la recherche et l'éducation. J'ai pensé que ces compétences seront une étape nécessaire pour rechercher un emploi.

## II. Déroulement, gestion et coût de mon projet

### 1. Préparation et cadrage du projet

La première année consistait à faire une recherche bibliographique et à connaître l'outil de calcul des structures ABAQUS et les lois de comportement adéquates. Pendant la deuxième année, l'outil numérique a été implanté pour modéliser le système barrière thermique. Ce travail a donné lieu à une publication et à la participation à deux congrès internationaux. Cette année est consacrée à la finalisation de la partie numérique, à la participation à un autre congrès international, à la réalisation de deux publications et à la rédaction du mémoire.

Afin de respecter le cahier des charges que l'on s'est imposé, nous avons, à chaque fois, proposé des résumés dans des congrès internationaux, ce qui nous a obligé à progresser dans l'obtention des résultats numériques et à valider les résultats expérimentaux.

Le choix des partenaires nationaux, en l'occurrence le GCD-Egletons, s'est fait en raison de leur expérience avérée dans le domaine de la simulation numérique du système multicouche.

Toutefois, la majorité des travaux générés par ma thèse est en train d'être publiée. Il n'y a donc pas de résultats confidentiels ou financements extérieurs.

### 2. Conduite du projet

D'une manière générale, j'ai mené mon projet de façon autonome. J'ai proposé un certain nombre d'axes de recherche à mon directeur et mon encadrant qui les ont validé ou

non et m'ont laissé libre pour leur réalisation. J'ai établi, en collaboration avec mes encadrements de thèse, la planification du projet.

Le projet a consisté à établir, dans un premier temps, les outils numériques du comportement thermomécanique du système multicouche. Ce sujet était très nouveau au sein de notre équipe. Pour cela, nous (directeur de ma thèse, mon encadrant et moi) avons eu plusieurs rencontres par semaine au cours de la première année de thèse. Ces rencontres consistaient essentiellement, à vérifier les différentes techniques d'élaboration du système multicouche, choisir une technique comme référence, trouver et fixer des caractéristiques expérimentales et repérer les problèmes en fonction et finalement réaliser des modèles numériques dans un objectif d'optimisation numérique. Ces travaux n'étaient pas faciles et nous avons rencontré plusieurs difficultés durant cette phase.

La deuxième année, nous avons fixé nos objectifs et nous avons obtenu un modèle a propre et bien réalisé. A ce moment là, le directeur de thèse était présent quand j'avais quelques difficultés de programmation numérique. Mais un des objectifs visé était d'acquérir une certaine autonomie dans la maîtrise du logiciel (ABAQUS). Cependant, certaines complexités, inhérentes à la programmation et à la durée du traitement numérique, étaient à déplorer.

Des réunions du GEMH avaient lieu tous les six mois afin de vérifier l'avancée du projet et faire le bilan des résultats obtenus par chaque thésard.

D'autre part, j'ai étudié certains sujet parallèle au mien (recherche sur la Mécanique des Fluides Numériques, apprendre les Langages C /C++ et Fortran qui m'a permis d'apprendre à travailler sur plusieurs projets en simultané et à organiser mon planning pour pouvoir consacrer à chacun le temps nécessaire. J'ai donc du travailler sur différents sujets touchant à des domaines différents de la simulation numérique.

### 3. Evaluation et prise en charge du coût du projet

D'un point de vue financier, ma thèse est assurée par la région limousin, à la hauteur de 58 k€ pendant 3 ans. A cela, s'ajoutent le coût d'un ordinateur très puissant en calcul (7 k€) et le coût du logiciel ABAQUS (9 k€) pendant trois ans.

Il est difficile de comptabilise avec exactitude la totalité et de temps des personnels mis à la disposition du projet, d'autant plus qu'il reste quelques essais à réaliser. Toutefois, je peux citer mon directeur de thèse (Joseph Absi), un maître de conférence (Gilles Mariaux),

deux techniciens informatiques et deux secrétaires de GEMH, et aussi la secrétaire de l'Ecole Doctorale STS (M. Leconte).

Les frais de mission, qui concernent trois congrès internationaux (hébergement, repas, inscription) peuvent être évalués à (4 k€). Il apparaît aussi complexe de quantifier les coûts des consommables, ainsi que ceux des formations (y compris le NTC) et les séminaires de l'Ecole doctorales (y compris les formations du CIES). Ainsi le coût total de la thèse peut être estimé dans le Tableau qui suit :

	Nature de la dépense	Détails	Coûts totaux (euros TTC)			
			Nombre D'unités	Coût Unitaire moyen	Quote-part utilisation	Total
<b>1</b>	<b>Ressources Humaines</b>					
1.1	Doctorant		36			58000
1.2	Encadrement	108000	36	3000	0.1	10800
1.3	Autre personnel	5040	36	140	0.3	1512
<b>2</b>	<b>Consommables</b>					
2.1	Fournitures expérimentales					
2.2	Fournitures de bureau	720	36	20		720
2.3	Autres achats					
<b>3</b>	<b>Infrastructures</b>					
3.1	Entretien, gardiennage, secrétariat	19800	36	550	0.4	7920
3.2	Loyer des locaux	97200	36	2700	0.4	38880
3.3	Electricité, eau, chauffage,...	14940	36	415	0.4	5976
<b>4</b>	<b>Matériel (amortissements)</b>					
4.1	Ordinateur de bureau	6900	3	2300		6900
4.2	Logiciels de bureau	9000	3	3000		9000
4.3	Autre					
<b>5</b>	<b>Déplacements</b>					
5.1	Missions en France		1	300		300
5.2	Mission à l'étranger					
5.3	Congrès en France		1	400		400
5.4	Congrès à l'étranger		2	1800		3600
<b>6</b>	<b>Formation</b>					
6.1	Formations	5495	36	153	0.07	366
6.2	Autre frais	1040	36	29	1	1044
<b>7</b>	<b>Documentation et communication</b>					
7.1	Affranchissements, Internet, téléphone	4526	36	126	0.4	1810
7.2	Publicité, communication, impressions	1800	36	50	1	1800
7.3	Documentation	30	36	0.8	1	30
<b>8</b>	<b>Charges financières</b>					0
<b>9</b>	<b>Charges exceptionnelles</b>					0
<b>10</b>	<b>TOTAL</b>					<b>149058</b>

Tableau. Estimation du coût consolidé de la thèse.

### III. Compétence, savoir-faire, qualités professionnelles et personnelles illustrées par des exemples

#### 1. Mes compétences scientifiques

Ces trois années de thèses m'ont permis d'acquérir des connaissances dans des domaines divers et variés. Scientifiquement :

- Etude de différents procédés d'élaboration du **système barrière thermique** au but de choisir un procédé plus intéressant au niveau **d'industriel** et à réaliser les modèles numériques. L'ensemble des étapes d'étude a été rigoureusement respecté. Après une étude bibliographique détaillée tirée des publications existantes sur les propriétés des barrières thermiques, notamment sur les interactions entre les différentes couches, leur endommagement, j'ai rédigé le premier chapitre et choisi le procédé plus économique d'un point de vue d'industriel ;
- Caractérisation des **propriétés thermomécaniques** des matériaux qui m'apporte bonne connaissance sur les phénomènes telles que le fluage, la plasticité, la croissance de la couche d'oxyde, la mécanique de la rupture ;
- Cherche les outils numériques utilisés dans la prédiction du comportement thermomécanique du système multi-couche et l'optimisation les modèles déjà existés ;
- Création de **modèles numériques** thermomécaniques plus proche de la réalité. Puis obtenir l'endommagement formés sur le système durant le service et donner les conseil efficaces aux industriels pour augmenter la durée de vie du système barrière thermique ;
- Simulation numérique de l'endommagement par **méthodes des éléments finis** qui me donne une parfaite maîtrise du logiciel de calcul **ABAQUS** et cette connaissance me permettra d'apprendre rapidement les autres logiciels comme **NASTRAN** et **PATRAN** ;
- Analyse et validation des résultats numériques par les images obtenues en **MEB** qui déclare un bon accord entre les résultats numériques et expérimentaux.

Les travaux de thèse doivent être diffusés le plus possible afin d'assurer, non seulement, la visibilité du travail, mais aussi, celle du laboratoire d'accueil et de l'Ecole

Doctorale. A ce titre, j'ai participé à plusieurs congrès (nationaux et internationaux), à des réunions de groupes de travail et à l'encadrement d'un stagiaire.

Parallèlement, l'utilisation des logiciels de traitement de texte (Word, Open Office) de présentation (Power Point), tout comme la rédaction et la mise en page des posters, ont encore renforcé mes connaissances en matière.

## 2. Mes compétences transverses

### a) Gestion d'un projet dans sa globalité

A partir de la fiche institutionnelle du projet, j'ai défini les différents axes de recherche qui allaient être abordés et leur planification que ce soit sur les trois ans mais aussi de façon mensuelle afin de programmer mes réservations d'instruments à l'ENSCI. J'ai planifié ces différentes étapes, déterminé les dates butoir auxquelles les essais devaient réaliser, dépouillé et présentés à mes supérieurs universitaires les résultats obtenus. J'ai réalisé l'ensemble des essais nécessaires à mon étude, je les dépouillé et présenté.

J'ai donc du établir des ordres du jour de réunion, convoquer les personnes concernées et faire des comptes rendus de réunion. A ceci s'ajoute la gestion du budget du projet. En effet, j'ai établi des budgets prévisionnels.

### b) Encadrement

Lors de mes travaux de thèse, j'ai encadré un élève en Stage de Master Recherche 2<sup>ème</sup> année. Je l'ai enseigné les pratiques techniques relatives à mon étude, je l'ai impliqué dans le sujet, je l'ai délégué et confié des essais numériques et son analyse tout en les supervisant. J'ai transféré mon savoir et mon savoir-faire, je les conseillé, écouté et fais preuve de patience. J'ai suivi son travail sans m'imposer ni le réaliser à sa place et j'ai continué en parallèle mes travaux de thèse. J'ai donc du gérer mes disponibilités et que organiser mon planning selon ces différentes exigences (l'encadrement de stagiaire ou projet simultanément était courant).

### c) Compétences rédactionnelles

J'ai développé des compétences dans le domaine de la rédaction de rapports synthétisés d'essais numériques et d'analyse et de validation de résultats.

J'ai écrit plusieurs publications en anglais à comité de lectures parues dans des journaux internationaux et présenté deux posters. J'ai donc approfondi mes connaissances linguistiques et je me suis familiarisé avec la langue anglaise (plutôt en écrit).

#### **d) Communication orale**

J'ai communiqué, oralement, sur mes résultats par l'intermédiaire de deux congrès internationaux et un congrès nationale. J'ai réalisé mes supports de présentation que j'ai présentés en anglais. J'ai développé des compétences dans la réalisation de supports attrayants et interactifs permettant de présenter mes résultats à des gens concernés par le sujet ou à des novices. J'ai donc développé une expérience faisant appel à mon esprit de synthèse de demandant une adaptation à des publics différents et une gestion du stress.

#### **e) conduite de réunion**

Dans le cadre de ma thèse, j'ai présenté mon travail dans différents types de réunion (réunion de GEMH, de GCD- Egletons et de congrès) pour lesquelles, j'ai dirigé les temps de parole et en décision des sujets à aborder et des temps à y consacrer avant de faire une conclusion générale sur les décisions prises pour les périodes de travail suivantes. J'ai développé un sens de l'écoute, de la diplomatie et de pertinence d'argumentation.

#### **f) Compétences créations et innovantes**

Lors de ma thèse, j'ai étudié et adapté un certain nombre de techniques du logiciel *ABAQUS* afin de les mettre en adéquation avec mes axes de recherche. J'ai cherché à optimiser les modèles numériques déjà faits dans le monde sur le système BT. J'ai imaginé et proposé un nouveau modèle de simulation numérique du système multicouche (structure lamellaire). J'ai donc créé un modèle satisfaisant à mes attentes et j'ai développé des compétences de création, d'innovation et d'initiative.

De plus, je peux citer ma capacité à s'adapter à une équipe, et ma disposition à faire ce qui m'est demandé dans le cadre de mes attributions.

## **IV. Conclusion**

Faire une thèse était une bonne occasion pour moi de trouver et valoriser mes compétences. A la suite de mes travaux de thèse, je me sens, désormais, capable de finir et



mener des programmes de recherche, planifier et assurer leur suivi, développer des relations avec l'université et des laboratoires externes, assurer le suivi budgétaire et la maîtrise des coûts des projet et répartir les tâches de chacun en fonction de l'avancement des projet.

Je suis entrée dans un domaine très intéressant et important. Etant très courageuse et curieuse, j'ai travaillé très dure et sérieusement sur mon sujet et ai réussi à obtenir beaucoup de résultats, qui vont faire l'objet de six publications. Ces trois années m'ont permis de m'investir dans la Recherche et d'étendre mes résultats à un domaine industriel. Cette expérience a été très enrichissante, c'est pourquoi je souhaiterais, à court terme, trouver un post-doctorat afin de rester dans le monde de recherche. A moyen terme, je souhaiterais atteindre un poste de Maître de Conférence dans le domaine simulation numérique et ainsi appliquer mes connaissances. D'un autre côté, Je voudrais travailler dans l'industrie et plus particulièrement dans le domaine de la Recherche appliquée que ce soit dans le cadre de l'amélioration d'un produit, de la résolution de problème ou encore de l'élaboration et la création de nouveaux produits et enfin simulation numérique de ces produits.

Les compétences acquises lors de ma thèse, mises à disposition d'un poste de Recherche ou de Développement, sont gages de réussite.

---

## **Numerical simulation of thermo-mechanical behavior of the multi-layers system.**

### **Application in the thermal barrier system**

#### **Abstract**

Air plasma sprayed thermal barrier coatings protection is widely used to prolong the lifetime of turbine components. Due to the low thermal conductivity of the top-coat layer, the substrate temperature can decrease by some hundred degrees. A finite element model is developed to evaluate the stresses induced by the thermal cycling and crack development in a typical plasma sprayed thermal barrier coatings system. A new thermo-mechanical model has been designed to function using a non-homogenous temperature distribution and takes into account the effects of the residual stress generated due to coating process, the thermal and mechanical properties, the morphology of the top-coat/bond-coat interface, oxidation and creep deformation on the local stresses that are responsible of the micro-crack propagation during cooling, especially near the metal/ceramic interface. Crack propagation at the system is simulated as function of interface morphology and oxidation thickness, thanks to the contact tool "*Debond*" present in the ABAQUS finite element code. The results show that the system having homogenous and uniform interface supports well the stress in comparison to the one having a non-uniform interface morphology of the interface. In addition, in order to extend the lifetime and to improve the reliability of TBC systems, we have to control the growth of the oxide layer.

**Keywords:** Finite element model; Thermal barrier coatings; crack propagation

## **Simulation numerique du comportement thermomécanique de systèmes multicouches. Application au cas du système barrière thermique**

#### **Résumé**

Les barrières thermiques obtenues par procédé de projection plasma sont largement utilisées pour prolonger la durée de vie des composants de la turbine. En raison de la faible conductivité thermique de la couche céramique, la température du substrat peut diminuer de quelques centaines de degrés. Un nouveau modèle par éléments finis a été développé pour évaluer les contraintes induites par le cyclage thermique et le développement des fissures dans un système barrière thermique obtenue par procédé de projection plasma. Un calcul thermomécanique a été réalisé en utilisant une distribution de température non homogène et prend en compte les effets des contraintes résiduelles issues du procédé d'élaboration, les propriétés thermiques et mécaniques, la morphologie de l'interface, l'oxydation et la déformation par fluage sur les contraintes locales qui sont responsables de la propagation des micro-fissures au cours du refroidissement, en particulier, près de l'interface métal/céramique.

La propagation de fissures dans le système est simulée en fonction de la morphologie d'interface et de l'épaisseur de la couche d'oxyde, grâce à l'outil de contact "Debond" présent dans le code par éléments finis ABAQUS. Les résultats montrent que le système ayant une interface sinusoïdale uniforme supporte des contraintes plus élevées que celles supportées par un système à interface non-uniforme. En outre, afin de prolonger la durée de vie et d'améliorer la fiabilité des systèmes barrières thermiques, nous devons contrôler la croissance de la couche d'oxyde.

**Mots clés :** Modèle éléments finis, Barrière thermique, Propagation de fissure