

# Estudio del comportamiento mecánico de un sistema recubierto mediante simulación computacional del ensayo de rayado

# Mechanical Behavior study of a coated system by computer simulation of the scratch test

# Eduardo-A. Pérez-Ruiz<sup>I</sup>, Luis-Iván Negrín-Hernández<sup>II</sup>, Roberto Martins-de-Souza<sup>III</sup>

I. Universidad de Ibagué, Departamento de Ingeniería Mecánica. Ibagué, Colombia
II. Universidad Central Marta Abreu de las Villas, Facultad de Ing. Mecánica. Santa Clara. Cuba
III. Universidad de de São Paulo, Departamento de Engenharia Mecânica. São Paulo. Brasil
Correo electrónico: eduardo.perez@unibague.edu.co

Recibido: 15 de diciembre de 2014 Aceptado: 20 de marzo de 2015

#### Resumen

Una forma de evaluar un sistema recubierto es a través del ensayo de rayado. Los resultados obtenidos dependen de variables como: propiedades y geometría del indentador, tasa de carga, tasa de desplazamiento, propiedades de los materiales del sistema a evaluar como dureza, módulo elástico, microestructura, rugosidad superficial, espesor, entre otras. El presente trabajo analizó, a través de simulación computacional del ensayo de rayado, el efecto que tiene la geometría del indentador (cónica y esférica), la carga de rayado (20 N y 50 N), el espesor del recubrimiento (2,1 µm y 4,6

μm) y el coeficiente de fricción (0,3 y 0,5) en el comportamiento de los esfuerzos y la deformación plástica en la superficie de un sistema recubierto. Los resultados sugieren que el coeficiente de fricción como variable de ensayo tiene una alta importancia en el comportamiento mecánico del sistema recubierto.

Palabras claves: ensayo de rayado, simulación computacional, sistema recubierto.

#### Abstract

One way to evaluate a coated system is through the scratch test. The results obtained depend of the variables including mechanical properties and geometry of indenter, loading, displacement, material properties in the system as hardness, elastic modulus, microstructure, roughness surface, thickness, among others, which are indicated in ASTM C1624 / 05. This paper analyzes through scratch test simulation, the effect of the indenter geometry (conical and spherical), the loading (20 N and 50 N), the thickness coating

(2,1  $\mu m$  and 4,6  $\mu m)$  and the friction coefficient values (0,3 and 0,5) in the stresses and plastic deformation behavior at the surface of a coated system. The results suggest that the coefficient of friction has a high importance in the mechanical performance of the coated system.

Key words: scratch test, computacional simulation, coated system.

### Introducción

La obtención de sistemas resistentes al desgaste, mediante la deposición de películas delgadas sobre materiales dúctiles es un método bastante utilizado para el mejoramiento tribológico (fricción, desgaste, lubricación) de algunos componentes de máquina [1].

Un método bastante simple para la evaluación del comportamiento mecánico de estos sistemas es el ensayo de indentación [2, 3]. Durante este ensayo son desarrollados campos de esfuerzos y deformaciones, los cuales favorecen la deformación, surgimiento y propagación de fallas de forma puntual en el sistema. De la misma forma, para el estudio de los esfuerzos presentes en los sistemas recubiertos en condiciones de contacto y movimiento relativo es realizado el ensayo de rayado [4 -6]. Durante este último, son desarrollados campos de esfuerzos y deformaciones a lo largo de un surco. Este ensayo permite el estudio del tipo de falla (adhesiva o cohesiva) presente durante el contacto.

Para el estudio de los esfuerzos y las deformaciones generados en materiales durante el ensayo de rayado, es utilizada la simulación numérica, particularmente a través del método de los elementos finitos [7-9], el cual ha permitido el desarrollo de modelos 2D y 3D de un ensayo de rayado en sistemas recubiertos (sustrato+recubrimiento). Según Bull [5], a pesar de que los modelos de simulación no reproducen la totalidad de fenómenos que ocurren en el ensayo físico de rayado, estos pueden ser utilizados para analizar el comportamiento mecánico (esfuerzos y deformaciones) siempre que estos consideren valores de propiedades mecánicas de los materiales, condiciones iniciales del sistema recubierto (defectos, esfuerzos residuales, grietas, etc.), coeficiente de fricción entre el indentador y sistema y rugosidad del sistema (superficie e interface).

Algunos autores como Wredenberg y Larsson [10, 11], han desarrollado modelos de simulación con el fin de analizar la distribución de esfuerzos en el interior y en el exterior del surco generado durante el rayado de una

partícula rígida, sobre un sistema compuesto por sustrato metálico duro y una capa de baja dureza como recubrimiento, obteniendo resultados que indican que altos valores de esfuerzos cortantes son los encargados de dar inicio a la de laminación interfacial del sistema, asi como altos esfuezos normales creados en el contacto entre el indentador y el sistema son los encargados de la aparición de grietas superficiales en esta región.

De otro lado, en cuanto al estudio de sistemas compuestos por un sustrato y una capa de alta dureza, Li [8] revela que el modelo en 3D permite demostrar la gran acumulación dada por el material en contacto con la partícula deslizante, en la medida que esta se aleja del punto inicial de contacto, lo que trae como consecuencia la aparición de esfuerzos compresivos en el material acumulado y esfuerzos de tracción en el interior del surco creado al paso de la partícula. M. Tkaya, *et al* [12], evidencia correlación entre la acumulación de material y el coeficiente de fricción, en donde el aumento de este último, así como el del ángulo de ataque de la partícula rígida, provoca alta deformación del material en los costados del surco. Estos resultados sugieren que el coeficiente de fricción tiene alta incidencia en el agrietamiento del recubrimiento, especialmente en la parte trasera del contacto con el indentador, siendo una variable de gran responsabilidad en la aparición de grietas de tracción en arco.

Por otra parte, Holmberg, *et al* [13], comprueba que el incremento de esfuerzos en el surco está directamente relacionado con el aumento en la carga normal aplicada y con la fricción generada. Altos valores de esfuerzos de tracción en los bordes del surco son consecuencia de la acumulación de material (*pile-up*) en la parte delantera y lateral del surco. De la misma forma, identifica esfuerzos compresivos en la interface recubrimiento/sustrato en el punto de contacto con la partícula rígida. En sus estudios los autores evidencian que el espesor y el módulo elástico de la capa utilizada como recubrimiento son los principales parámetros que afectan la magnitud de los esfuerzos en el sistema recubierto, en donde el espesor afecta directamente la rigidez y el módulo elástico del material favorece el flujo plástico del sustrato en el sistema.

Actualmente se ha incrementado el interés por conocer el comportamiento de materiales utilizados en sistemas recubiertos y para esto se realizan simulaciones computacionales a través del método de los elementos finitos del ensayo de rayado, considerando los parámetros de la norma ASTM C1624/05 [14], en donde la partícula rígida de rayado es un indentador cónico Rockwell C. Sin embargo, el estudio del comportamiento de los materiales en condiciones reales debe considerar el efecto de otras geometrías para la partícula en contacto (indentador), ya que si bien el ensayo de rayado se utiliza para analizar la resistencia a la adhesión y los modos de falla que se presentan en recubrimientos delgados (<  $30 \mu m$ ) y de alta dureza, depositados sobre sustratos de material dúctil, también ha sido utilizado para analizar fenómenos de contacto involucrando estudios de desgaste.

Por lo anterior, este estudio se centra en la simulación por elementos finitos, a través de un modelo de rayado, del efecto que tiene la forma del indentador, el coeficiente de fricción y el espesor del recubrimiento, en el comportamiento mecánico (esfuerzos Von Mises y deformación plástica equivalente) de un sistema recubierto. Del presente estudio se concluye que la variable de rayado llamada coeficiente de fricción presenta la mayor incidencia en el comportamiento de los esfuerzos en el sistema recubierto en estudio.

# Métodos y Materiales

Para el respectivo estudio se utiliza el software de elementos finitos ABAQUS/Standard, en el cual, se realiza un modelo de simulación considerando una partícula idealmente rígida con geometría esférica de diámetro 1,59 mm (1/16") y una partícula con geometría cónica de diámetro 400 µm y ángulo de abertura de 120°. La malla para la discretización del modelo consideró elementos del tipo cuadrilátero bidimensional CPS4R (estado plano de esfuerzos).

La figura 1 presenta un esquema de los modelos utilizados para cada geometría de indentador.



Fig. 1. Esquema de modelo de simulación

Debido a que en un ensayo de rayado el desplazamiento puede llegar a ser de 10 mm [14] y teniendo en cuenta que para condiciones de contacto entre cuerpos sólidos el espesor de la muestra debe ser:

- Mínimo, 8 o 10 veces la profundidad de la huella.

- La distancia inicial de contacto desde el borde de la muestra no debe ser menor de 3 o 4 veces el diámetro de la huella [7, 8].

Entonces se considera un modelo 2D, compuesto por un sustrato de acero con dimensiones de 6 mm de largo por 1 mm de espesor (6x1 mm) y un recubrimiento de TiN con espesor de 2,1 µm y 4,6 µm sometido a deslizamiento a lo largo de 4 mm.

#### Características del sustrato y del recubrimiento

El modelo de simulación considera como material del sustrato, acero AISI 1045 con un comportamiento elastoplastico: E = 205 GPa, v = 0,29,  $\sigma_f$  = 380 MPa, así como TiN para el recubrimiento con comportamiento elástico E = 280 GPa, v = 0,3. Los valores de las propiedades mecánicas fueron obtenidos de la literatura [15-17]. El espesor considerado para el recubrimiento fue de: R1 = 2,1 µm y R2 = 4,6 µm.

Para las condiciones del contacto y deslizamiento fue considerada una distancia de rayado de 4 mm, carga normal incremental hasta 20 N y hasta 50 N, así como coeficiente de fricción de 0,3 y de 0,5.

#### Característica del indentador

La partícula que se considera como indentador presenta el dimensionamiento de un indentador Rockwell, cono de diamante con radio en la punta de 200 µm, y es modelada como cuerpo rígido y sobre ella es aplicada la carga normal y el desplazamiento durante la simulación

#### Resultados

#### Esfuerzos con carga incremental 0,20 N

La figura 2, presenta la distribución de esfuerzos de Von Mises, generados por una partícula cónica y una esférica a lo largo de un recorrido de 4 mm sobre una superficie idealmente lisa sin recubrimiento (sustrato). La distribución de esfuerzos se presenta para coeficientes de fricción de 0,3 y 0,5.



Fig. 2. Distribución de esfuerzos de Von Mises en la superficie del sustrato

La figura 3 presenta la distribución de esfuerzos de Von Mises sobre la superficie del sistema recubierto (sustrato y recubrimiento) considerando en el caso a), un recubrimiento de 2,1 µm de espesor y en el caso b), un recubrimiento de 4,6 µm de espesor. Al igual que en la figura 2, en cada caso se considera un indentador cónico y uno esférico, así como valores de coeficiente de fricción de 0,3 y 0,5.



Fig. 3. Distribución de esfuerzos de Von Mises en la superficie del sistema recubierto

#### Esfuerzos con carga incremental 0-50 N

La figura 4, presenta el comportamiento de esfuerzos generados por una partícula esférica y cónica a lo largo de la superficie estudiada para una carga de 50 N con un coeficiente de fricción de 0,3 y 0,5.



Fig. 4. Distribución de estuerzos de Von Mises en la superficie del sustrato

La figura 5 presenta la distribución de los esfuerzos sobre la superficie del sistema recubierto



Fig. 5. Distribución de esfuerzos de Von Mises en la superficie del sistema recubierto

#### Deformación Plástica con carga incremental 0-20 N

La figura 6 presenta la distribución de la deformación plástica equivalente generada para la simulación del rayado de una superficie idealmente lisa sin recubrimiento con un recorrido de 4mm. La carga aplicada es incremental hasta 20 N con coeficientes de fricción de 0,3 y 0,5.



equivalente en la superficie del sustrato

La figura 7 presenta la distribución de la deformación plástica sobre la superficie del sistema recubierto.



#### Deformación Plástica con carga incremental 0,50 N

La figura 8, presenta la distribución de la deformación plástica equivalente generada al considerar un indentador esférico y uno cónico para la simulación del rayado de una superficie idealmente lisa sin recubrimiento con un recorrido de 4 mm. La carga aplicada es incremental hasta 50 N con coeficientes de fricción de 0,3 y 0,5.



Fig. 8. Distribución de la deformación plástica equivalente en la superficie del sustrato

La figura 9 presenta la distribución de la deformación plástica sobre la superficie de un sistema recubierto.



Fig. 9. Distribución de deformación plástica en la superficie del sistema recubierto

# Discusión

#### Comportamiento de los esfuerzos

De los resultados anteriores, se observa la influencia de la forma del indentador, ya que una geometría cónica favorece los mayores valores de esfuerzo desde el contacto inicial. Igualmente, se observa que el aumento del valor del coeficiente de fricción en los dos casos (indentador cónico e indentador esférico) genera un aumento en el valor de los esfuerzos obtenidos a lo largo del rayado siendo el valor de fricción de 0,5 el responsable por los mayores valores de esfuerzos volumétricos (Mises), así como de la mayor deformación plástica equivalente del sistema.

La combinación indentador cónico con coeficiente de fricción 0,5 alcanza valores de esfuerzo próximos al valor del límite de fluencia del sustrato (380 MPa) al recorrer 1,4 mm aproximadamente para el caso de carga incremental 0-20 N, mientras que para el caso del sustrato sometido a carga de 0-50 N el valor de esfuerzo que alcanza al valor del límite de fluencia del material es obtenido en los primeros 0,5 mm de desplazamiento. Este resultado demuestra y ratifica la influencia que tiene la carga aplicada en la distribución de esfuerzos.

Es importante observar el papel que presenta el recubrimiento. Para el caso de carga de 0-20 N con recubrimiento de espesor de 2,1 µm se presenta una región comprendida entre los 2,1 a 2,4 mm de longitud de rayado, en la cual se observa una acumulación de picos de esfuerzo, los cuales alcanzan valores próximos a 370 MPa. Sin embargo, a partir de los 2,5 mm los valores de esfuerzo se reducen e incrementan a partir de los 3,5 mm, adquiriendo una tendencia ascendente hasta los 4 mm, en donde se alcanzan valores próximos a 1000 MPa. En el caso del recubrimiento con espesor de 4,6 µm entre los 2,6 mm hasta los 3,3 mm se presenta acumulación de picos de esfuerzo con valores inferiores al valor del límite de fluencia del sustrato, sin embargo, a partir de los 3,6 mm y hasta los 4 mm, se presenta una tendencia ascendente en el valor de los esfuerzos, alcanzando valores próximos a 680 MPa. La diferencia en las distancias en las cuales se presentan acumulaciones de picos de esfuerzos, así como los valores alcanzados demuestran el papel que tiene el recubrimiento, lo cual corrobora el planteamiento de Holmberg *et al* [13], quienes concluyen que un recubrimiento duro y grueso depositado sobre un sustrato dúctil tiene mejor capacidad de soportar carga durante el contacto que uno de menor espesor.

Para el estudio del efecto de la carga aplicada, se observa que al comparar las figuras 3 y 5 los valores de esfuerzo en el sustrato (sin recubrimiento) son mayores en la condición de carga 0-50 N. Para carga 0-20 N el valor del esfuerzo de fluencia se alcanza en 1,4 mm mientras que para este caso se alcanza en 0,5 mm. De la misma forma, al aplicar carga de 0-50 N sobre un sistema con recubrimiento de 2,1  $\mu$ m, los máximos valores de esfuerzo que se obtienen son próximos a los 1200 MPa, a diferencia de los 1000 MPa que se obtenían en 4mm para el caso de 0-20 N. En el caso del recubrimiento de 4,6  $\mu$ m, los valores máximos alcanzaron 730 MPa aproximadamente.

#### Comportamiento de la Deformación Plástica

Al igual que el comportamiento de la distribución de los esfuerzos, la deformación plástica adquiere los mayores valores en el caso del rayado con indentador de geometría cónica. De la misma forma, al analizar el sustrato sin recubrimiento, se evidencia que la mayor deformación plástica se encuentra con la combinación de indentador cónico y coeficiente de fricción de 0,5.

Se observa que el grado de deformación se obtiene gracias a la geometría del indentador sin importar el valor del coeficiente de fricción. Para este caso, el coeficiente de fricción no demuestra diferencias entre los valores de 0,3 y 0,5. De la misma forma se evidencia la influencia que tiene el espesor del recubrimiento, ya que para el caso de 2,1 µm se alcanza un valor de deformación próximo a 0,35; mientras que para el caso del recubrimiento de 4,6 µm el valor máximo se encuentra próximo a 0,25.

Al comparar las figura 7 y 9 se evidencia la influencia de la carga aplicada en el comportamiento de la deformación plástica ya que para el caso de 0-20 N (Ver Fig. 7) la máxima deformación alcanzada fue de 0,35 y 0,25 para recubrimientos de 2,1 µm y 4,6 µm respectivamente, mientras que para el caso de 0-50 N (ver Fig. 9) la máxima deformación alcanzada fue de 1,15 y 0,8 para los recubrimientos de 2,1 µm y 4,6 µm respectivamente. Los resultados de la simulación confirman los resultados reportados en la literatura, que indican que el aumento de los valores de esfuerzo en la superficie del surco generado durante el deslizamiento del indentador, está directamente relacionado con el aumento de la carga normal aplicada

# Conclusiones

De los resultados obtenidos se concluye que la geometría cónica del indentador posibilita la obtención de los mayores valores de esfuerzo en la superficie del sistema alcanzado valores próximos a 600 MPa en la superficie del sustrato bajo carga de contacto incremental de 0-20 N, así como de 650 MPa aproximadamente en el caso de carga de 0-50 N. Para la deformación plástica del sistema, el uso de indentadores cónicos aumenta en 6 veces aproximadamente el nivel de deformación plástica del sistema recubierto con 2,1 µm y en 4 veces aproximadamente en el caso de sistema con recubirimiento de 4,6 µm.

De la misma forma, los resultados permitieron ratificar que el espesor del recubrimiento tiene influencia en el comportamiento de los esfuerzos y de la deformación plástica, indicando que mientras mayor es el espesor mayor es la capacidad para soportar carga y por consiguiente menores valores de esfuerzo alcanzados en la superficie del sistema.

Después de analizado el efecto del coeficiente de fricción, se concluye que esta variable al compararse con las otras que fueron consideradas es la que presenta la mayor importancia en el momento de estudiar el comportamiento de los esfuerzos en el sistema recubierto. Al analizar las variables consideradas en este estudio (carga aplicada, geometría de indentador, coeficiente de fricción y espesor del recubirimiento) se observa que cada una de ellas afecta directamente el nivel de esfuerzos obtenido en la superficie, sin embargo, el coeficiente de fricción afectó de forma marcada el comportamiento de los esfuerzos superficiales en el sistema recubierto, indicando que para el caso del coeficiente de fricción de 0,5 los valores de esfuerzos fueron los mayores en todos los casos.

# Referencias

- Holmberg K, Matthews A y Ronkainen H. Coatings tribology contact mechanisms and surface design. Tribology International. 1998;31:107-20. ISSN 0301-679X.
- Lu P, Xiao X, Lukitsch M, et al. Interface characterizations of diamond-coated tools by scratch testing and simulations Surface & Coatings Technology 2011;206:1860-6. ISSN 0257-8972.
- Pérez Ruiz EA, Muñoz Tovar G, M SR, et al. Simulación de un sistema tribológico formado por sustrato recubrimiento rugoso usando métodos numéricos. Revista Ingeniería Mecánica. 2014;17(1):48-56. ISSN 1815-5944.
- Ghabchi A, Sampath S, Holmberg K, et al. Damage mechanisms and cracking behavior of thermal sprayed WC– CoCr coating under scratch testing. Wear. 2014;313:97-105. ISSN 0043-1648.
- Bull SJ y Berasetegui EG. An overview of the potential of quantitative coating adhesion measurement by scratch testing. Tribology International. 2006;39:99–114. ISSN 0301-679X.
- Schwarzer N, Duong Q, Bierwisch N, et al. Optimization of the Scratch Test for specific coating designs. Surface & Coatings Technology. 2011;206:1327–35. ISSN 0257-8972.
- Sander T, Tremmel S y Wartzack S. A modified scratch test for the mechanical characterization of scratch resistance and adhesion of thin hard coatings on soft substrates. Surface & Coatings Technology. 2011;206:1873–8. ISSN 0257-8972.
- Li J y Beres W. Three-dimensional finite element modelling of the scratch test for a TiN coated titanium alloy substrate. Wear. 2006;260:1232–42. ISSN 0043-1648.
- Holmberg K, Laukkanen A, Ronkainen H, et al. Tribological contact analysis of a rigid ball sliding on a hard coated surface Part II: Material deformations, influence of coating thickness and Young's modulus. Surface & Coatings Technology. 2006;200:3810-23. ISSN 0257-8972.

- Wredenberg F y Larsson PL. On the stress distribution at scratching of thin film structures. Journal of Coatings Technology and Research. 2010;7:623-35. ISSN 1547-0091.
- Wredenberg F y Larsson PL. On the effect of substrate deformation at scratching of soft thin film composites. International Journal of Mechanical Sciences. 2010;52:1008– 14. ISSN 0020-7403
- 12.Tkaya M, Zahouani H y S M. The effect of damage in the numerical simulation of a scratch test. Wear. 2007;263:1533-9. ISSN 0043-1648.
- Holmberg K, Ronkainen H, Laukkanen A, et al. Tribological analysis of TiN and DLC coated contacts by 3D FEM modelling and stress simulation. Wear. 2008;264:877-84. ISSN 0043-1648.
- 14.American Society for Testing and Materials. ASTM. Standard Test Method for Adhesion Strength and Mechanical Failure Modes of Ceramic Coatings by Quantitative Single Point Scratch Testing ASTM C1624/05:2010. USA: American Society for Testing and Materials. 2010.
- 15.Agudelo LC, Restrepo E y De La Roche J. Simulación de propiedades mecánicas de películas delgadas de carburo de tungsteno a partir del Modelo Monte Carlo. Revista Tecno Lógicas. 2012 (29):105-17. ISSN 0123-7799.
- 16.Isaza J, Mariaka I y Ramirez J. Caracterización de propiedades mecánicas mediante análisis inverso del Método de los Elementos Finitos combinado con ensayo de indentación. Revista Dyna. 2013;80(179). ISSN 0012-7353.
- 17.Goel G, Cherukuri HP y Toro A. A Numerical Study of Abrasive Wear in Tillage Tools due to Soil-Tool Interaction 2012. [Citado: 14 de julio 2014] Disponible en: <u>http://www.simulia.com/SCCProceedings2012/content/papers/</u> <u>Goel UNC final 3252012.pdf</u>.