

Influencia del espesor y la rugosidad interfacial en los esfuerzos longitudinales en un sistema recubierto

Influence of the thickness and interfacial roughness in the longitudinal stresses on a coated system

Eduardo-A. Pérez-Ruiz^I, Luis-Iván Negrín-Hernández^{II}, Roberto Martins-de-Souza^{III}

I. Universidad de Ibagué. Ibagué, Colombia

II. Universidad Central Marta Abreu de las Villas, Facultad de Ingeniería Mecánica. Santa Clara. Cuba

III. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Engenharia Mecânica. São Paulo. Brasil

Correo electrónico: eduardo.perez@unibague.edu.co

Recibido: 26 de diciembre de 2015 Aceptado: 2 de abril de 2016

Resumen

Un método para la evaluación del comportamiento mecánico de sistemas recubiertos es el ensayo de rayado, el cual permite el análisis de la resistencia a la adhesión y los modos de falla generados durante el contacto. En el ensayo se consideran parámetros como propiedades y geometría del indentador, tasa de carga, tasa de deslizamiento, dureza, resistencia a la fractura, microestructura, rugosidad superficial, espesor del recubrimiento, esfuerzos residuales, entre otros. El presente trabajo analizó vía elementos finitos, los esfuerzos longitudinales (S_{xx}) obtenidos durante la simulación del ensayo de rayado, en donde fue

considerado el efecto del espesor del recubrimiento (2 y 4 μm), así como la rugosidad (superficie/interface) con valores de R_a 0,16 μm y R_a 0,35 μm . Los resultados demuestran que altos espesores del recubrimiento favorecen la capacidad de carga, así mismo demostraron que la rugosidad en el sistema, favorece la posibilidad de agrietamiento del recubrimiento.

Palabras claves: sistema recubierto, ensayo de rayado, rugosidad, Simulación FEM

Abstract

A simple method for evaluating the mechanical behavior of coated systems is the scratch test, which allows the analysis of the adhesion strength and the failure modes generated during contact. In this test should be considered parameters and properties as indenter geometry, loading rate, sliding rate and the system properties as hardness, fracture toughness, microstructure, surface roughness, coating thickness, residual stresses, among others. This paper analyzed via finite element, the longitudinal stresses (S_{xx}) obtained during the computational simulation of scratch test, where was considered the effect of coating thickness, which was

considered as 2 μm and 4 μm , and the surface and interface roughness R_a 0,16 μm and 0,35 μm . The results suggest that thicker coatings, favoring the load carrying capacity, also demonstrated the importance of roughness of the system in the computer simulation. The increased roughness in the system increases the possibility of cracking of the coating.

Key words: coated system, scratch test, roughness, FEM Simulation.

Introducción

El estudio tribológico de dos superficies es un asunto de análisis y discusión, especialmente cuando son utilizadas capas como recubrimientos resistentes al desgaste en la superficie de los materiales. Gracias al avance y uso de técnicas para deposición de materiales, *Physical Vapour Deposition*, *PVD* y *Chemical Vapor Deposition*, *CVD*, ha sido posible el diseño de sistemas recubiertos con el fin de buscar el mejoramiento del comportamiento mecánico del conjunto [1-3].

Para la evaluación de esfuerzos y deformaciones obtenidos en los sistemas recubiertos, son comúnmente utilizados los ensayos de indentación [4-6], así como de rayado [7-10]. Este último ensayo, regido por norma ASTM C1624 [11], es utilizado para analizar la resistencia a la adhesión y los modos de falla que se presentan en recubrimientos duros $HV \geq 5\text{GPa}$ y finos $\leq 30 \mu\text{m}$ depositados sobre materiales dúctiles. El método de ensayo se fundamenta en el contacto y deslizamiento de un indentador de diamante con geometría Rockwell C, bajo la acción de una fuerza normal constante o incremental.

El ensayo de rayado permite la obtención de información cualitativa de la adhesión del recubrimiento al sustrato, la cual depende de la interacción de parámetros propios del ensayo como las propiedades y geometría del indentador, la tasa de carga, la tasa de deslizamiento entre otras, así como de las propiedades del sistema a ser evaluado como dureza, resistencia a la fractura, microestructura, rugosidad superficial, espesor del recubrimiento, esfuerzos residuales, entre otros [7, 9].

El método de los elementos finitos, a través de modelos en 2D y 3D es bastante utilizado para el modelamiento y análisis de los esfuerzos que se generan durante el ensayo de rayado. Según Bull [9], a pesar 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, siempre que estos consideren valores de propiedades mecánicas de los materiales y condiciones de ensayo como defectos, esfuerzos residuales, grietas, coeficiente de fricción entre el indentador y sistema, rugosidad del sistema (superficie e interface), entre otros.

Algunos trabajos [11-16] han utilizado la simulación numérica por elementos finitos para la obtención y análisis de mapas de distribución de esfuerzos en el interior y en el exterior del surco desarrollado en el rayado durante el ensayo. Es así como Holmberg *et al* [11, 12] ha comprobado, que el incremento en el surco generado durante el deslizamiento de una partícula rígida, está directamente relacionado con el aumento en la carga normal y con la fricción generada, lo que trae como consecuencia altos valores de esfuerzos de tracción en la superficie por la acumulación de material (*pile-up*) en la parte delantera y lateral del surco, así como la presencia de esfuerzos compresivos en la interface sustrato/recubrimiento. De la misma forma, se ha evidenciado 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 del recubrimiento, lo que favorece mayor capacidad de resistencia de carga normal antes de la presencia de grietas.

Li [13] revela que el pandeo o curvatura de la capa (recubrimiento) es producido por la acumulación de los esfuerzos de compresión generados en el frente del contacto con la partícula (indentador), así como los esfuerzos de tracción son los responsables de la iniciación de grietas transversales en el borde del surco, lo que puede ser utilizado para el estudio de la tenacidad del recubrimiento. Pérez R, [14] establece que al analizar el efecto del coeficiente de fricción, esta variable al compararse con las variables carga aplicada, geometría de indentador y espesor del recubrimiento, es la que presenta la mayor importancia en el momento de estudiar el comportamiento de los esfuerzos en el sistema recubierto. Al analizar algunas de las variables del ensayo de rayado, se observa que cada una de ellas afecta directamente el nivel de esfuerzos obtenido en la superficie, sin embargo, el coeficiente de fricción afecta de forma marcada, siendo la principal variable en el comportamiento de los esfuerzos superficiales en el sistema recubierto.

Holmberg *et al* [15] establece que en sistemas con espesor de recubrimiento de 2 μm y de 5 μm , los esfuerzos de tracción en la superficie alcanzan valores similares en cada caso, sin embargo, en el caso del recubrimiento más grueso, son obtenidos esfuerzos de tracción en la interface del sistema y en el caso del recubrimiento más fino, son obtenidos esfuerzos compresivos en la misma región interfacial. Esta diferencia en esfuerzos puede llevar al surgimiento de grietas y posterior falla en la interface del sistema.

Finalmente, Pérez R [16] concluyó que el uso de acabados superficiales finos (valores de rugosidad media R_a , muy bajos) son favorables en el comportamiento de los esfuerzos, ya que en particular, la superficie con mayor grado rugosidad media R_a , alcanza valores superiores a los obtenidos en el caso de una superficie idealmente lisa. Sin embargo, gran parte de la literatura relacionada con la investigación del comportamiento de los sistemas recubiertos, considera sus análisis en condiciones de superficies idealmente lisas, lo cual reduce los valores de esfuerzos generados en las superficies, y genera análisis de resultados que no corresponden con las variables físicas naturales de los materiales.

Como evidenciado en la literatura, los análisis del comportamiento mecánico de los sistemas recubiertos han sido modelados y simulados considerando variables como carga normal, geometría de indentador, propiedades mecánicas, espesor de recubrimiento, coeficiente de fricción y rugosidad superficial, esta última considerada por Pérez [16] únicamente en la superficie del sistema. Por esta razón, es necesario dar continuidad al análisis de incidencia de variables no tradicionales para estudiar el verdadero efecto que estas generan sobre el comportamiento a la falla de los sistemas recubiertos. Es por esto que el presente estudio se centra en simular vía elementos finitos a través del software ABAQUS un modelo 2D y analizar la influencia de la rugosidad en la superficie y en la interface del sistema recubierto, en el comportamiento de los esfuerzos principales a lo largo de la dirección longitudinal (S_{xx}), lo que permite analizar la posibilidad del surgimiento de grietas superficiales en el interior del surco durante el rayado.

Materiales y Métodos

Para el respectivo estudio se utiliza el software de elementos finitos ABAQUS/Standard, en el cual se realizan 5 modelos de simulación considerando para todos los casos una partícula idealmente rígida con geometría cónica con punta circular de radio 200 μm y ángulo de apertura de 120°, indentador Rockwell C, la cual desliza 3 mm aplicando una carga incremental de 0-20 N sobre un sistema compuesto por un sustrato dúctil y un recubrimiento con comportamiento rígido. En la tabla 1 se presentan las características de cada modelo.

Tabla 1. Características de cada modelo de simulación

Modelo	Sustrato	Rugosidad Sustrato	Recubrimiento	Rugosidad Recubrimiento	Coefficiente fricción	Espesor
Modelo 1	AISI 1045	liso	TiN	liso	0,15	4um
Modelo 2	AISI 1045	0,16 um	TiN	0,16 um	0	2um
Modelo 3	AISI 1045	0,35 um	TiN	0,35 um	0	2um
Modelo 4	AISI 1045	0,16 um	TiN	0,16 um	0	4um
Modelo 5	AISI 1045	0,35 um	TiN	0,35 um	0	4um

Características del sustrato

Para el sustrato se utilizaron las características de un acero AISI 1045. Las propiedades elásticas $E = 205$ GPa; $\nu = 0,29$ y plásticas $\sigma_y = 380$ MPa fueron obtenidas directamente de ensayos experimentales de tracción presentes en la literatura [17].

Características del recubrimiento

Para el recubrimiento se utilizaron las características de una capa de Nitruro de Titanio (TiN) con comportamiento elástico $E = 280$ GPa y $\nu = 0,3$ [9] y plástico $\sigma_y = 5000$ MPa.

Los acabados superficiales considerados para el sustrato y para el recubrimiento $0,16$ y $0,35 \mu\text{m}$ son característicos en procesos de deposición PVD [18]. La medición de la rugosidad media R_a fue obtenida de forma experimental desbastando y puliendo una superficie metálica hasta alcanzar los valores requeridos. La medición de la rugosidad media R_a , se obtuvo utilizando un rugosímetro Mitutoyo SJ201. En la figura 1 se presentan tres modelos de simulación con las rugosidades de estudio.

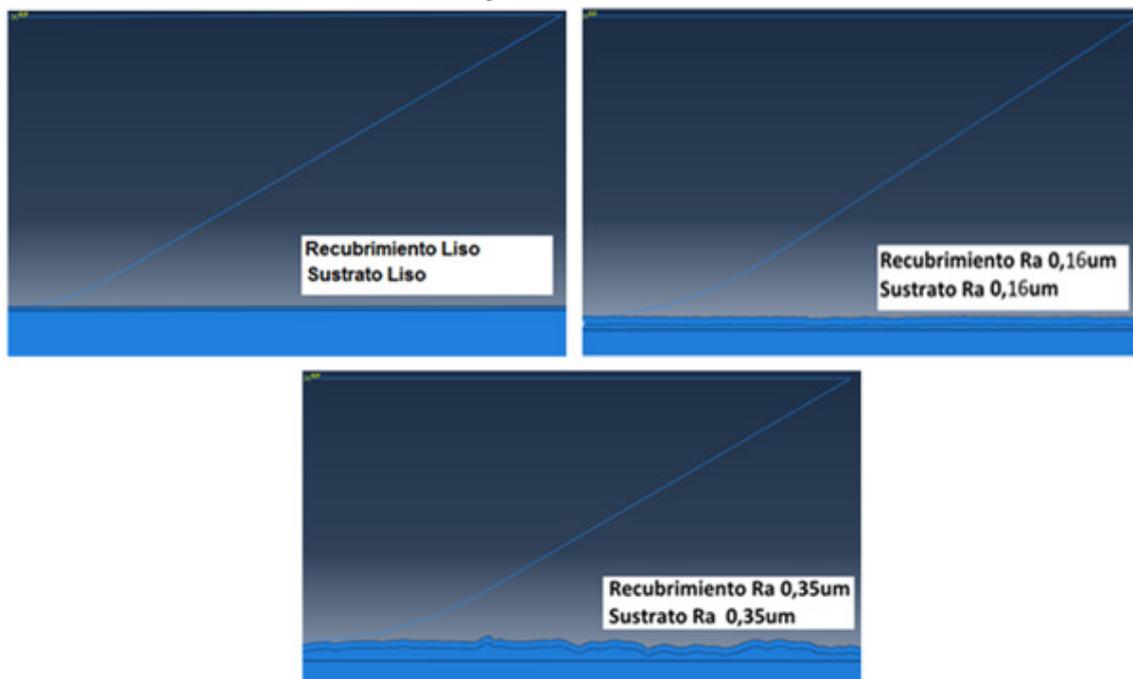


Fig. 1. Modelo de simulación según combinación de rugosidad

Finalmente, la malla para la discretización y simulación, el modelo consideró elementos del tipo cuadrilátero bidimensional CPS4R, estado plano de esfuerzos.

Resultados y Discusión

En la figura 2 se presenta la distribución del esfuerzo principal en la dirección longitudinal (S_{xx}), en la superficie de un sistema compuesto por sustrato idealmente liso y recubrimiento idealmente liso con espesor de recubrimiento de $4 \mu\text{m}$.



Fig. 2. Distribución de esfuerzo (S_{xx}) en la superficie del sistema liso-liso

En la figura 3 se presenta el esfuerzo S_{xx} en la interface, lado del recubrimiento, del sistema analizado.

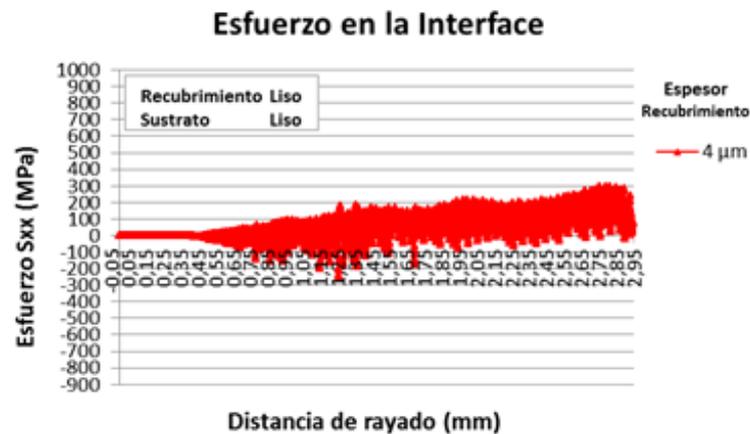


Fig. 3. Distribución de esfuerzo (S_{xx}) en la interface del sistema liso-liso

De la misma forma, en la figura 4 se presenta la influencia del espesor del recubrimiento, en la distribución del esfuerzo en la dirección longitudinal S_{xx} , en la superficie del sistema compuesto por sustrato con rugosidad $R_a 0,16 \mu\text{m}$ y recubrimiento con rugosidad $R_a 0,16 \mu\text{m}$.

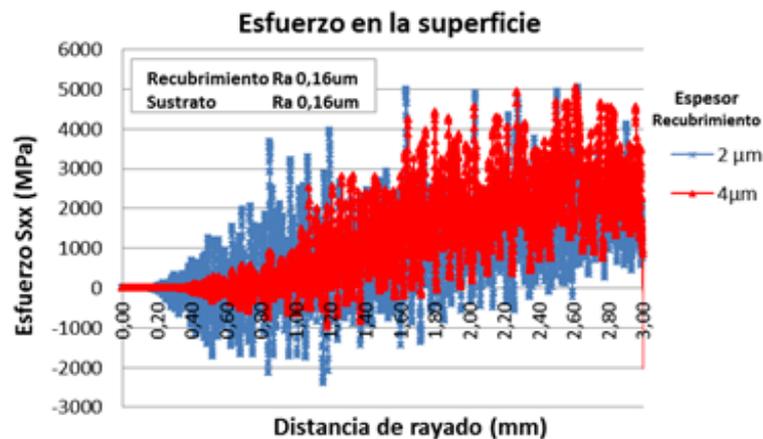


Fig. 4. Influencia del espesor en la distribución de esfuerzo (S_{xx}) en la superficie, del sistema con $R_a 0,16 \mu\text{m}$ - $0,16 \mu\text{m}$

En la figura 5 se presenta la distribución del esfuerzo S_{xx} en la interface (lado del recubrimiento) del sistema.

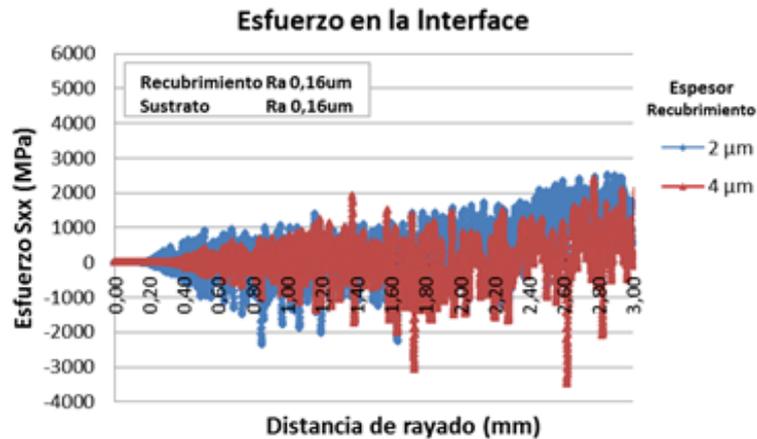


Fig. 5. Influencia del espesor en la distribución de esfuerzo (S_{xx}) en la interfase del sistema con $Ra\ 0,16\ \mu\text{m}-0,16\ \mu\text{m}$

En las figuras 6 y 7 se presenta la influencia del espesor del recubrimiento en la distribución del esfuerzo longitudinal S_{xx} en la superficie y en la interfase del sistema recubierto, considerando una combinación de rugosidad media Ra de $0,35\ \mu\text{m}-0,35\ \mu\text{m}$.

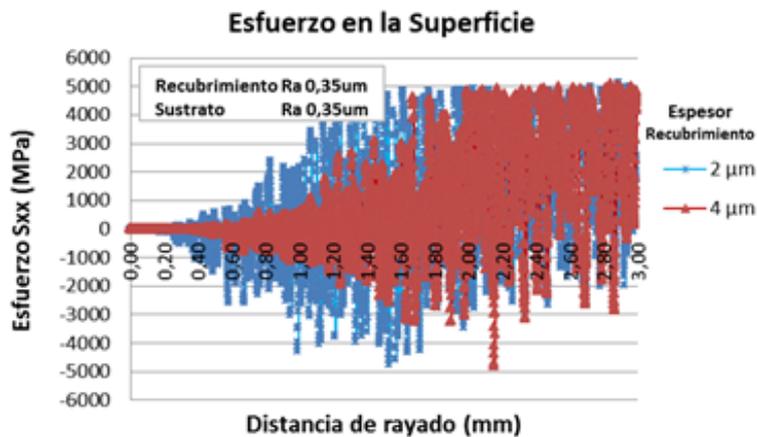


Fig. 6. Influencia del espesor en la distribución de esfuerzo (S_{xx}) en la superficie, del sistema con $Ra\ 0,35\ \mu\text{m}-0,35\ \mu\text{m}$

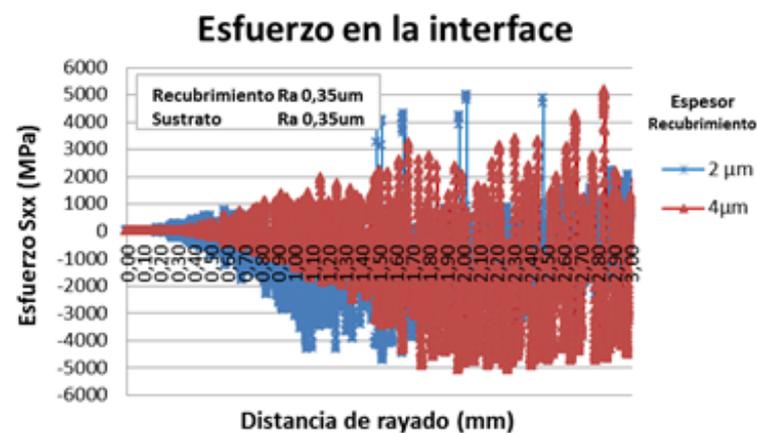


Fig. 7. Influencia del espesor en la distribución de esfuerzo (S_{xx}) en la interfase del sistema con $Ra\ 0,35\ \mu\text{m}-0,35\ \mu\text{m}$

Como presentado en la literatura, a través de la simulación numérica, se ha obtenido la distribución de esfuerzos en el interior y exterior del surco durante el rayado. Estos esfuerzos son los responsables por el surgimiento y/o propagación de defectos llevando al surgimiento de grietas cohesivas, a través del espesor del recubrimiento o adhesivas, figura 8, (desprendimiento del recubrimiento del sustrato en la interfase). En las figuras 2, 3, 4, 5, 6 y 7 se evidencia que con el aumento de la distancia de rayado y de la carga normal aplicada, los valores de esfuerzo presentes en la dirección “x” en la superficie y en la interfase se van incrementando, particularmente alcanzando valores próximos a 5 GPa en la superficie de los sistemas

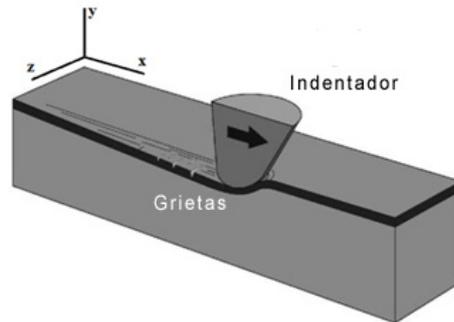


Fig. 8. Representación de grietas en el interior del surco de rayado

Simulados con $0,16 \mu\text{m}$ y $0,35 \mu\text{m}$, figuras 6 y 8, así como $2,7 \text{ GPa}$ y 5 GPa en la interface de estos sistemas respectivamente, figuras 5 y 7.

En la figuras 4, 5, 6 y 7 se evidencia la influencia del espesor del recubrimiento, permitiendo identificar para los 4 casos, superficie e interface, que en el recubrimiento de $2 \mu\text{m}$ los valores de esfuerzo S_{xx} empiezan a incrementar su magnitud a partir de los $0,2 \text{ mm}$ de rayado, mientras que en el recubrimiento de $4 \mu\text{m}$ este incremento se presenta a partir de los $0,4 \text{ mm}$. Igualmente se evidencia en la figura 6 que el recubrimiento de $2 \mu\text{m}$ en el primer milímetro de rayado facilita la obtención de valores que sobrepasan los 4 GPa en la superficie, mientras que en el recubrimiento de $4 \mu\text{m}$ los esfuerzos alcanzan 4 GPa solo después de $1,6 \text{ mm}$ de rayado. Así mismo, el máximo valor alcanzado en la superficie del sistema fue de 5 GPa , el cual es obtenido en la superficie del recubrimiento de $2 \mu\text{m}$ a los $1,6 \text{ mm}$, mientras que el mismo valor de esfuerzo es obtenido, en el recubrimiento de $4 \mu\text{m}$, a los $2,6 \text{ mm}$ de rayado. Lo anterior ratifica parte de las conclusiones de Holmberg *et al* [11, 12], quienes indican que el espesor de la capa utilizada como recubrimiento es un parámetro que afecta la magnitud de los esfuerzos en el sistema recubierto, lo que favorece mayor capacidad de resistencia de carga normal.

En el caso de los esfuerzos en la interface del sistema recubierto, en la figura 5 (sistema con rugosidad media $R_a 0,16 \mu\text{m}$) se observa que el recubrimiento de $2 \mu\text{m}$ lleva a la obtención de esfuerzos predominantemente de tensión, mientras que el recubrimiento de $4 \mu\text{m}$ lleva a la obtención de esfuerzos predominantemente de compresión. En la figura 9 se presenta la distribución de esfuerzos en la interface, lado del sustrato, del sistema recubierto $R_a 0,16 \mu\text{m}-0,16 \mu\text{m}$. En la figura se observa que, al igual que los esfuerzos en la interface del lado del recubrimiento, los esfuerzos son de tracción en el caso del recubrimiento de $2 \mu\text{m}$ y de compresión en el caso del recubrimiento de $4 \mu\text{m}$.

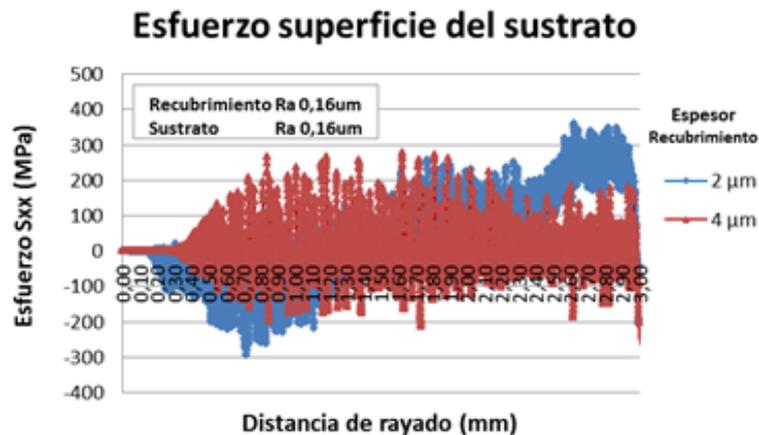


Fig. 9. Influencia del espesor en la distribución de esfuerzos (S_{xx}) en la superficie del sustrato (interface) del sistema $R_a 0,16 \mu\text{m}-0,16 \mu\text{m}$

Sin embargo, el resultado obtenido es contrario a los resultados que se presentan en la figura 5, en donde al igual que los resultados publicados por Holmberg *et al* [15] para el recubrimiento más grueso son obtenidos esfuerzos de tracción y en el caso del recubrimiento más fino, son obtenidos esfuerzos compresivos. Lo anterior, sugiere el efecto que presenta la rugosidad en la interface ya que los resultados de Holmberg y los obtenidos en la figura 5 se dan en condiciones idealmente lisas. Una posible hipótesis para estos resultados sugiere que, para el caso del recubrimiento de $2 \mu\text{m}$, el espesor es lo suficientemente bajo para presentar una alta resistencia ante el movimiento del indentador en la superficie lo que hace que el esfuerzo de tracción en la superficie se propague, en su condición de tracción, hasta la superficie del sustrato. En el caso del recubrimiento de $4 \mu\text{m}$, su espesor genera mayor resistencia y permite soportar mayor carga, de esta forma, los picos y valles presentes en la interface sirven de soporte y fijación al recubrimiento, haciendo que en dicha región los esfuerzos no sean de tracción y por el contrario mayoritariamente de compresión.

Finalmente, con el aumento de la rugosidad en el sistema (superficie e interface), aumentan los valores de esfuerzo obtenidos, es así como en la figura 9 se observa que es alcanzado el valor de 5 GPa de esfuerzo de tracción en la interface. En el caso del recubrimiento con 2 μm el valor de 5 GPa es obtenido en por lo menos dos oportunidades, mientras que en el caso del recubrimiento de 4 μm el mismo valor es obtenido en una oportunidad. Lo anterior sugiere que, es probable que en el caso del aumento de la rugosidad en el conjunto, sistema recubierto, el recubrimiento presente fracturas cohesivas en los dos espesores analizados, ya que el valor de esfuerzo alcanzado en la superficie y en la interface 5 GPa es un valor que según Tabor corresponde a una dureza de indentación $H = 3\sigma_y$ de aproximadamente 15 GPa. Esta dureza se encuentra dentro de los valores reportados por Wang *et al* [19] 8, 4-27, 7 GPa para las durezas de recubrimientos de TiN depositados sobre acero.

Conclusiones

Durante el análisis de la resistencia a la adhesión y capacidad de falla de los sistemas recubiertos, compuestos por sustrato dúctil y recubrimiento rígido, es importante considerar la rugosidad superficial e interfacial de los sistemas junto con el espesor de los recubrimientos.

De los resultados obtenidos se concluye que el espesor del recubrimiento es un factor de alta importancia en el comportamiento de los esfuerzos longitudinales (S_{xx}), los cuales dan origen a las grietas en el interior del surco de rayado. En el caso de recubrimientos con espesor de 2 μm y 4 μm son alcanzados valores cercanos a 5 GPa en la superficie del sistema, sin embargo, el espesor más grueso requiere de mayor distancia y carga de rayado para alcanzar dicho valor, lo cual indica que entre mayor es el espesor del recubrimiento mayor es su capacidad de resistencia y soporte de carga. Igualmente se concluye la necesidad de considerar la rugosidad superficial e interfacial en los estudios utilizando simulación numérica ya que el aumento en la rugosidad lleva al aumento en los valores de esfuerzo S_{xx} , permitiendo analizar las condiciones de fractura cohesiva y adhesiva en el sistema recubierto.

Referencias

- Mutyala K, Singh H, Evans R, et al. Deposition, characterization, and performance of tribological coatings on spherical rolling elements. *Surface & Coatings Technology*. 2015;284:302–9. ISSN 0257-8972.
- Pujante J, Vilaseca M, Casellas D, et al. High temperature scratch testing of hard PVD coatings deposited on surface treated tool steel. *Surface & Coatings Technology*. 2014;254:352-7. ISSN 0257-8972.
- Zhou D, Peng H, Zhu L, et al. Microstructure, hardness and corrosion behaviour of Ti/TiN multilayer coatings produced by plasma activated EB-PVD. *Surface & Coatings Technology*. 2014;258:102-7. ISSN 0257-8972.
- Fukumasu N, Souza RM. Numerical evaluation of cohesive and adhesive failure modes during the indentation of coated systems with compliant substrates. *Surface & Coatings Technology*. 2014;260:266-71. ISSN 0257-8972.
- Mao W, Wan J, Dai C, et al. Evaluation of microhardness, fracture toughness and residual stress in a thermal barrier coating system: A modified Vickers indentation technique. *Surface & Coatings Technology*. 2012;206:4455-61. ISSN 0257-8972.
- Hainsworth SV, Soh WC. The effect on the substrate on the mechanical properties of TiN coatings. *Surface & Coatings Technology*. 2003;163:515-20. ISSN 0257-8972.
- Bull SJ, 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 QH, Bierwisch N, et al. Optimization of the Scratch Test for specific coating designs. *Surface & Coatings Technology*. 2011;206:1327-35. ISSN 0257-8972.
- 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.
- 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.
- Holmberg K, Laukkanen A, Ronkainen H, et al. Tribological contact analysis of a rigid ball sliding on a hard coated surface Part I: Modelling stresses and strains. *Surface & Coatings Technology*. 2006;200:3793 – 809 ISSN 0257-8972.
- Holmberg K, Ronkainen H, Laukkanen A, et al. Residual stresses in TiN, DLC and MoS₂ coated surfaces with regard to their tribological fracture behavior. *Wear*. 2008; 267:2142–56. ISSN 0043-1648.
- Li J, 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.
- Pérez EA, Negrín L, Souza RM. Estudio del comportamiento mecánico de un sistema recubierto mediante simulación computacional del ensayo de rayado. *Ingeniería Mecánica*. 2015;18(2):80-6. ISSN 1815-5944.
- 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.
- Pérez EA, Muñoz G, Souza RM, et al. Simulación de un sistema tribológico formado por sustrato y recubrimiento rugoso usando métodos numéricos. *Ingeniería Mecánica*. 2014;17(1):48-56. ISSN 1815-5944.
- León JP. Determinación de la tenacidad a la fractura en acero 1045 mediante crecimiento de grieta por fatiga. Santiago de Cali: Universidad Autónoma de Occidente; 2007.
- Jaramillo HE, Alba NC, Zambrano G, et al. Síntesis y caracterización de recubrimientos de TiN, TiC y TiCN sobre acero AISI 4340. *DYNA*. 2004;71:93-102. ISSN 0012-7353.
- Wang AN, Huang JH, Hsiao HW, et al. Residual stress measurement on TiN thin films by combing nanoindentation and average X-ray strain (AXS) method. *Surface & Coatings Technology*. 2015;280:43-9. ISSN 0257-8972.