

## **AVALIAÇÃO DOS PROCESSOS DE FRATURA EM FILMES FINOS ATRAVÉS DA SIMULAÇÃO DE ENSAIOS DE INDENTAÇÃO COM PENETRADORES ESFÉRICOS**

Ozias Ferreira Chaves Filho; Avelino Manuel da Silva Dias

Departamento de Engenharia Mecânica, UFRN, Natal, Rio Grande do Norte,  
Brasil

Centro de Tecnologia, UFRN, Lagoa Nova, Natal Rio grande do Norte, CEP  
59078-970

e-mail: oziasferr@gmail.com

### **RESUMO**

Recentes trabalhos propõem a utilização dos ensaios de indentação como uma ferramenta para avaliar as propriedades mecânicas de sistemas de filmes finos. Porém, em função das dificuldades na análise deste ensaio, o uso de metodologias numéricas capazes de avaliar os campos de tensões e deformações durante o ciclo de indentação, identificando possíveis áreas críticas, pode auxiliar na obtenção de resultados mais seguros. Este trabalho teve por objetivo utilizar o Método dos Elementos Finitos, com os conceitos da mecânica dos meios contínuos e da mecânica da fratura linear elástica para reproduzir modelos numéricos e analisar os processos de fratura que podem ocorrer durante o ciclo de indentação. Para isso, foram utilizadas duas diferentes metodologias numéricas, a primeira através de uma relação constitutiva baseada em modelos de bimodularidade e a segunda com o uso de elementos de delaminação. As simulações conseguiram identificar regiões críticas em todos os modelos.

Palavras-chave: elementos finitos, bimodularidade, mecânica da fratura.

## INTRODUÇÃO

A procura por melhorias nas propriedades tribológicas de componentes tem impulsionado o avanço na área de engenharia de superfícies. Esta área da engenharia trata da tecnologia de preparação e modificação das superfícies para cumprir funções específicas dentro de uma certa aplicação. Uma das opções utilizadas para melhorar estas propriedades é o uso de filmes finos cerâmicos, que, entre outras vantagens, podem conferir elevada resistência ao desgaste. Contudo, para otimizar o uso desses recobrimentos, é necessário estudar as propriedades mecânicas destes, do substrato, assim como da interface formada entre esses materiais. O ensaio de indentação instrumentada tem sido utilizado para avaliar as propriedades mecânicas destes conjugados.

Os ensaios de indentação têm sido amplamente utilizados para a determinação da dureza superficial em diferentes classes de materiais. Contudo, devido à sua versatilidade, numerosos trabalhos estão sendo desenvolvidos neste campo, avaliando novas metodologias e aplicações para este tipo de ensaio. Por exemplo, alguns trabalhos propõem o uso dos ensaios de indentação para determinar também o módulo de elasticidade ( $E$ ), coeficiente de Poisson ( $\nu$ ), tenacidade à fratura ( $K_{IC}$ ) e uma possível curva de tensão em função da deformação do comportamento elastoplástico sob compressão.<sup>1, 2</sup> Portanto, torna-se justificada a utilização do ensaio de indentação para estudar as propriedades mecânicas do conjugado (filme fino e substrato).

Entretanto, a implementação desta técnica de indentação encontram algumas dificuldades, ocasionando dúvidas no meio científico. Segundo a literatura, os ensaios apresentam problemas mais intensos quando se pretende avaliar o comportamento mecânico de filmes finos depositados em substratos macios.<sup>3</sup> Além disso, para a realização do ensaio de indentação instrumentada é necessário equipamentos de alta precisão para monitorar baixíssimas cargas e sensíveis deformações para avaliar com confiabilidade as propriedades mecânicas utilizando grandezas em micro e nano escalas.<sup>4</sup> Então, devido a

estas limitações, o uso de uma técnica numérica confiável e capaz de simular o ciclo de indentação, permitindo avaliar os campos de tensões e de deformações gerados, pode auxiliar o estudo desses ensaios e apresentar uma interpretação mais segura deles, sendo assim, muito necessária e bem-vinda.

5-9

Um tópico muito importante a ser estudado acerca dos ensaios de indentação é o aparecimento de falhas durante este processo, pois assim é possível compreender melhor os limites do uso do conjugado em aplicações práticas. Falhas em sistemas que conjugam recobrimentos de alta dureza com substratos de baixa dureza em serviço, durante solicitações tribológicas, raramente acontecem por desgaste convencional, mas podem acontecer principalmente por delaminação do recobrimento do substrato (falha adesiva), ou fratura do recobrimento (falha coesiva) ou, ainda, por fratura sub-superficial (falha do substrato) dependendo de diversos fatores como tamanho do indentador, propriedades do filme, entre outras.<sup>10</sup>

Para estudar estas falhas de componentes conjugados torna-se essencial determinar a distribuição do campo de tensões que levam a ocorrência de deformações plásticas nestes conjugados, assim como determinar a região onde se dá o início e desenvolvimento desta zona plástica.<sup>10</sup> Portanto, o uso de métodos numéricos que simulem o ciclo de indentação também seriam úteis para analisar falhas que podem ocorrer durante o processo, e uma boa alternativa a ser usada é o Método dos Elementos Finitos.

O Método dos Elementos Finitos (MEF) é uma técnica bastante versátil, podendo ser usada em análises nos mais variados campos, resolvendo problemas não lineares nas áreas de instabilidade estrutural, de sistemas dinâmicos, termodinâmicos, sistemas fluidos, de mecânica do dano, de conformação mecânica, entre outras.<sup>11</sup>

Porém, a utilização desta técnica numérica para avaliar o ensaio de indentação em recobrimentos superficiais finos, também tem apresentado problemas devido às limitações computacionais, à dificuldade na implementação de critérios de falhas, à dificuldade encontrada para a

caracterização destes recobrimentos e, principalmente, na obtenção das propriedades mecânicas para a interface recobrimento/substrato<sup>12</sup>.

Este trabalho tem como objetivo usar o Método dos Elementos Finitos (MEF) em conjunto com os conceitos da mecânica dos meios contínuos e da mecânica da fratura linear elástica (MFLE) para reproduzir modelos numéricos dos ensaios de endentação com penetradores esféricos e analisar processos de fratura que podem ocorrer durante esses ensaios através do modelo de trinca difusa e do modelo com elementos de delaminação, analisando suas vantagens e limitações. Por fim, este trabalho também tem como proposta comparar os resultados obtidos com os resultados apresentados na literatura especializada.

Os nitretos de cromo são muito utilizados em recobrimentos devido a sua alta resistência e dureza e estudos comprovam que a adição de alumínio a esta cerâmica aumentam essas propriedades.<sup>13</sup> Assim, o CrAlN demonstra ser um material interessante para ser estudado e foi simulado como um filme fino de várias espessuras diferentes revestindo um substrato de aço liga AISI 1040.

## MATERIAIS E MÉTODOS

As simulações foram feitas utilizando o software MARC™ e em todas as simulações os materiais utilizados são os mesmos, sendo o filme composto de Nitreto de Cromo e Alumínio (CrAlN) e o substrato de AISI 1040 cujas propriedades utilizadas estão mostradas na tabela abaixo:

| Material  | Módulo de Elasticidade (GPa) | Coeficiente de Poisson | Tensão Última (MPa) |
|-----------|------------------------------|------------------------|---------------------|
| AISI 1040 | 238                          | 0,29                   | 565                 |
| CrAlN     | 350                          | 0,22                   | 3790                |

Tabela 1 - Propriedades dos materiais.<sup>12</sup>

Em todas as malhas, o filme e substrato foram modelados através de elementos axissimétricos com quatro nós e o indentador esférico foi simulado

através de uma curva como mostrado na Figura 1. Todas as simulações aproveitaram a axissimetria do problema.

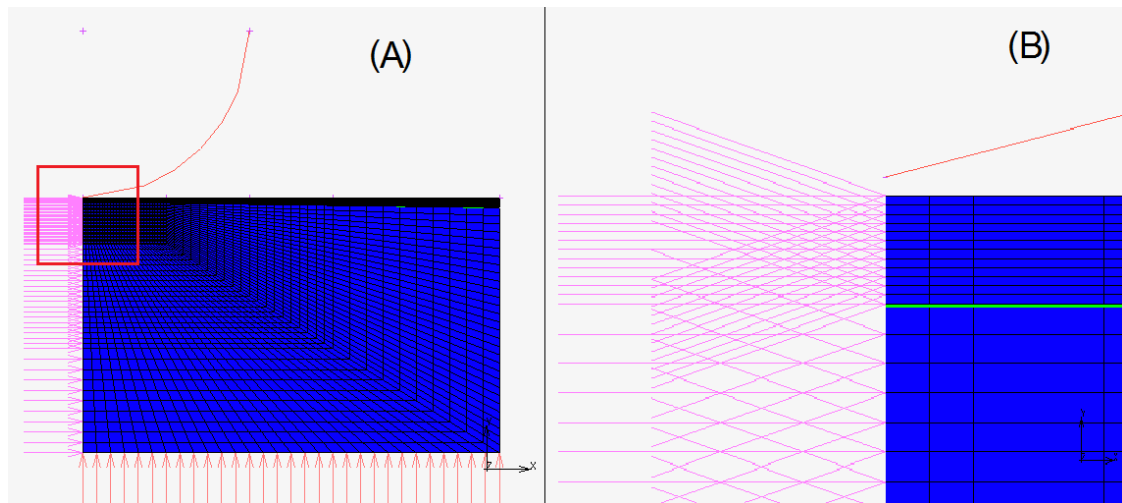


Figura 1 – Malha utilizada nas simulações. (A) visão geral da malha; (B) zoom na ponta da malha onde haverá o primeiro contato com o indentador.

Para obter mais informações tanto sobre o funcionamento do modelo de bimodularidade como do modelo com elementos de delaminação, foram feitas simulações com as seguintes espessuras do filme de revestimento: 2, 4, 6, 8 e 9  $\mu\text{m}$ . O raio dos indentadores utilizados nas simulações foram de 200 e 400  $\mu\text{m}$ . Esses valores foram escolhidos baseados em outros trabalhos publicados da mesma área, permitindo, assim, fazer uma comparação de resultados.

As malhas usadas para analisar o modelo de bimodularidade são iguais à mostrada na Figura 1.

O parâmetro de bimodularidade utilizado nas análises é 10% do módulo de elasticidade do material visto que já foram feitos estudos que comprovam que esta estimativa funciona de forma bastante satisfatória em diversos materiais.<sup>14</sup>

O modelo de trinca difusa foi desenvolvido para materiais frágeis então ele somente deve ser ativado para os elementos que compõem os filmes finos, já que é um material cerâmico.<sup>14</sup>

As malhas usadas para analisar o modelo com elementos de delaminação foram semelhantes à mostrada na Figura 1, mas possuem a

diferença de possuir uma camada de elementos coesivos entre o revestimento e o substrato.

Os valores adotados para os elementos coesivos estão mostrados na Figura 2. O valor da energia coesiva (*Cohesive Energy*) que seria igual a taxa de liberação de energia ( $G_{IC}$ ), para o CrAlN não foi encontrado na literatura especializada e por isso foi estimado utilizando simulações do ensaio de mecânica da fratura com corpos de prova compacto, cujos ensaios são feitos para o estudo comportamento de materiais baseado na mecânica da fratura.

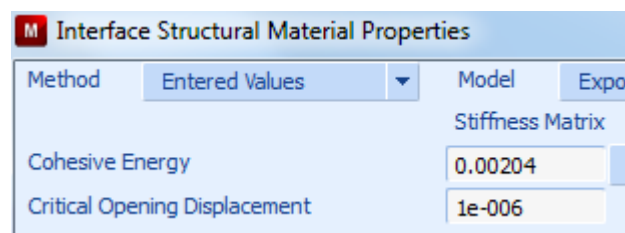


Figura 2 – Caixa de entrada das propriedades de delaminação dos elementos no software comercial Marc™.

A norma ASTM E 399 permite cinco tipos de corpos de prova: compacto, SENB (flexão de três pontos), painel, em forma de arco e em forma de disco.<sup>15</sup> Espécimes fabricados para o ensaio normalmente possuem comprimento,  $W$ , igual ao dobro da espessura,  $B$  (Figura 3). Uma pré-trinca é colocada por meio mecanismos de fadiga no corpo de prova para que a razão do comprimento da trinca em função do comprimento do corpo de prova ( $a/w$ ) fique entre 0,45 a 0,55. Então, a geometria do corpo de prova deve ser feito de tal forma que as dimensões críticas,  $a$ ,  $B$  e  $W-a$ , sejam aproximadamente iguais.<sup>15</sup>

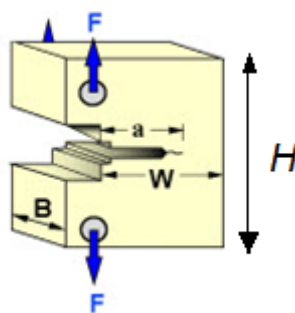


Figura 3 - Corpo de prova compacto.<sup>14</sup>

Devido aos requisitos impostos para as dimensões do corpo de prova, a ASTM E 399 (1984) recomenda que essas medidas sejam verificadas através das Equações (1) e (2):

$$B, a \geq 2.5 \left( \frac{K_{IC}}{\sigma_Y} \right)^2 \quad (1)$$

$$0.45 \leq \frac{a}{W} \leq 0.55 \quad (2)$$

Então, a malha resultante apresentou a configuração mostrada na Figura 4, representando apenas a parte superior do corpo de prova compacto já que a outra metade seria simétrica, economizando esforço computacional.

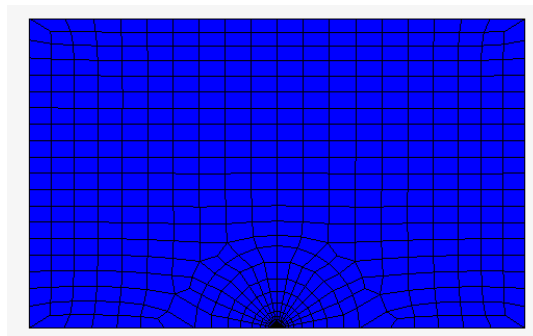


Figura 4 - malha utilizada para as simulações de corpo de prova compacto.

Para determinar as medidas do corpo de prova se faz necessário uma primeira estimativa de  $K_{IC}$  (Fator de Intensificação de Tensão Crítico) do material. Esta estimativa pode ser feita através de uma avaliação qualitativa com materiais similares. Porém, na falta de dados para esta estimativa, a ASTM E 399 apresenta uma tabela que contém espessuras recomendadas para os mais variados tipos de materiais.<sup>15</sup>

Inicialmente, o modelo de bimodularidade foi aplicado a esta malha para estimar o limite de ruptura do CrAlN fazendo diversas simulações variando o valor deste limite e verificando para quais valores o programa apontaria a existência de uma área crítica na ponta da trinca do corpo de prova (Figura 5).

Após obter uma estimativa do valor do limite de ruptura foi calculada a taxa de liberação de energia ( $G_{IC}$ ) para o material e então aplicá-lo no modelo com elementos de delaminação.

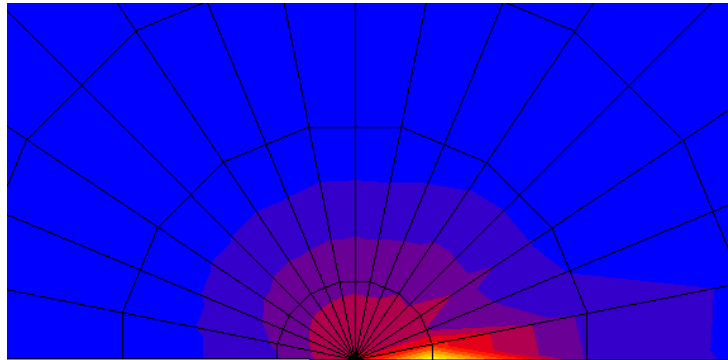


Figura 5 -Área crítica apontada pela simulação na ponta da trinca.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

O valor de  $G_{IC}$  para os elementos de delaminação, obtido através das simulações de corpo de prova compacto foi 0.00204 .

O modelo de bimodularidade em todas as simulações apontou a extremidade da marca do indentador como uma região crítica, propensa a falhas (Figura 6). Porém, este modelo não apontou como área crítica a interface entre o filme e o substrato, que é uma região bastante propensa a falhas, como já apontado por estudos.

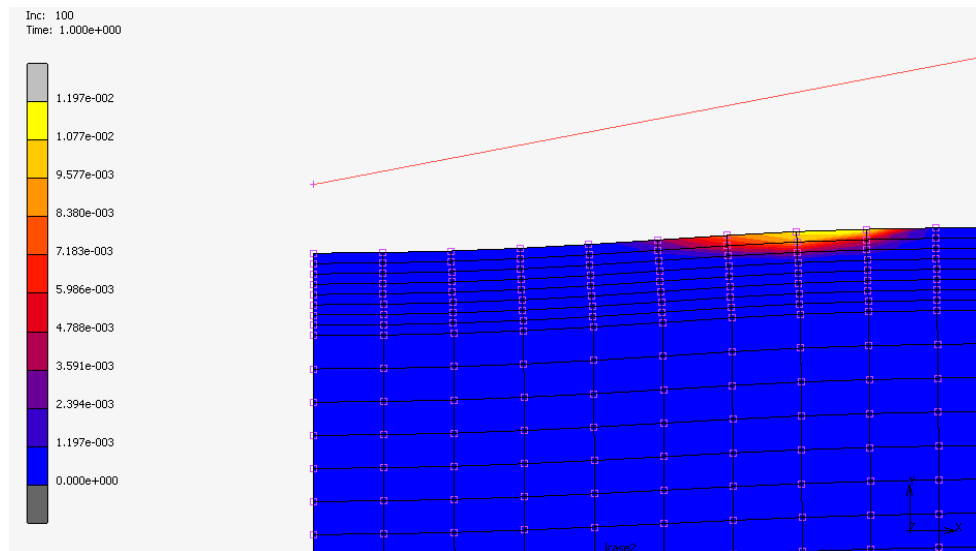


Figura 6- área crítica da malha, apontada pelo modelo de bimodularidade.

Utilizando o modelo com elementos de delaminação, as simulações conseguiram identificar a região de interface entre o filme e o substrato como uma região crítica (Figura 7) para todos os valores de espessura do filme fino e também para todos os indentadores usados.

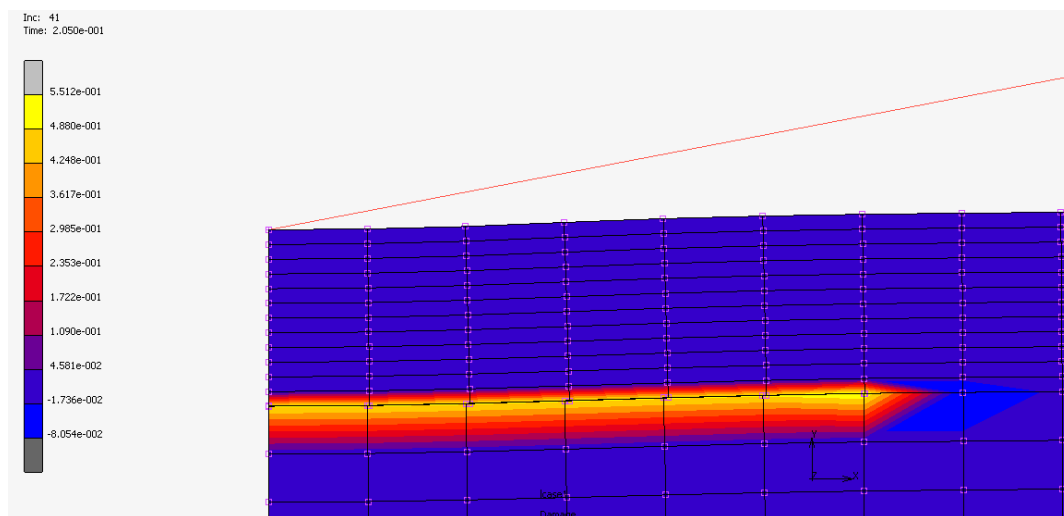


Figura 7 - área crítica identificada pelo modelo com elementos de delaminação.

## CONCLUSÕES

Ambos os modelos foram capazes de identificar possíveis áreas críticas, mas cada um apontou áreas diferentes devido às suas limitações. O modelo de bimodularidade apontou apenas a região superficial do filme como crítica. Já o

modelo com elementos de delaminação está limitado à região em que esses elementos são inseridos e por isso só apontou uma determinada região como crítica.

Portanto, o uso desses modelos de forma integrada é capaz de englobar todas as áreas apontadas pela literatura especializada, que são propensas à falha, mostrando-se, assim, uma boa alternativa para o estudo de falhas em filmes finos durante os ensaios de indentação.

## REFERÊNCIAS

1. ZENG, K.; CHIU, C-H. An Analysis of Load-Penetration Curves from Instrumented Indentation. *Acta Materialia*, v. 49, p. 3539-3551, 2001.
2. LEE, H.; LEE, J. H.; PHARR, G. M. A Numerical Approach to Spherical Indentation Techniques for Material Property Evaluation. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 53, p. 2073-2069, 2005.
3. FISCHER-CRIPPS, A. C. Critical Review of Analysis and Interpretation of Nanoindentation Test Data. *Surface & Coatings Technology*, v. 200, p. 4153-4165, 2006.
4. HUANG, X., PELEGRI, A. A. Finite element analysis on nanoindentation with friction contact at the film/substrate interface. *Composites Science and Technology*, v. 67, p. 1311–1319, 2007.
5. SUN, Y., BLOYCE, A., BELL, T. Finite Element Analysis of Plastic Deformation of Various TiN Coating/Substrate Systems under Normal Contact with a Rigid Sphere. *Thin Solid Films*, v. 271, p. 122-131, 1995.
6. SOUZA, R. M., MUSTOE, G. G. W., MOORE, J. J. Finite Element Modeling of the Stresses, Fracture and Delamination During the Indentation of Hard Elastic Films on Elastic-Plastic Soft Substrates. *Thin Solid Films*, v. 392, p. 65-74, 2001.
7. ANTUNES, J. M., MENEZES, L. F., FERNANDES, J. V. 3-dimensional Numerical Simulation of Vickers Indentation Testing. *International Journal of Solids and Structures*, v. 43, p. 784-806, 2006
8. DIAS, A. M. S., MODENESI, P. J., CRISTINA, G. C. Computer Simulation of Stress Distribution During Vickers Hardness Testing of WC-6Co. *Materials Research*, v. 9, n. 1, p. 73-76, 2006.
9. DIAS, A. M. S., GODOY, G. C. D. Determination of Stress-Strain Curve through Berkovich Indentation Testing. *Materials Science Forum*, v. 636-637, p. 1186- 1193, 2010.

10. SUN, Y.; BLOYCE, A.; BELL, T. Finite Element Analysis of Plastic Deformation of Various TiN Coating/Substrate Systems under Normal Contact with a Rigid Sphere. *Thin Solid Films*, v. 271, p. 122-131, 1995.
11. LOTTI, R. S.; MACHADO, A. W.; MAZZIEIRO, E. T.; JÚNIOR, J. L. Aplicabilidade científica do método dos elementos finitos. *R Dental Press Ortop Ortop Facial*, Maringá, PR, v. 11, n. 2, p. 35-43, 2006. Disponível em: <http://www.scielo.br/pdf/%0D/dpress/v11n2/a06v11n2.pdf>
12. ARAÚJO R, DIAS AMS. Numerical Evaluation of Strength in the Interface during Indentation Spherical Testing in Thin Films. *Materials Science and Applications*, v. 5, p. 149-157, 2014.
13. BENLATRECHE, Y.; NOUVEAU, C.; AKNOUCHE, H.; IMHOFF, L.; MARTIN, N.; GAVOILLE, J.; ROUSSELOT, C.; RAUCH, J. Y.; PILLOUD, D. Physical and Mechanical Properties of CrAlN and CrSiN Ternary Systems of Wood Machining Applications. Wiley InterScience, v. 6, 2009.
14. FILHO, O. F. C. Avaliação de Modelo de Bimodularidade em Ensaios da Mecânica da Fratura, 2014, 42 p. Monografia (Graduação em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, DEM-UFRN/RN, Natal.
15. ASTM E-399, 1984. Standard Test Method for Plane Strain Fracture Toughness of Metallic Materials.

## **AVALIATION OF THE FRACTURE PROCESS ON THIN FILMS BY THE SIMULATION OF INDENTATION HARDNESS TEST WITH SPHERICAL INDENTS**

### **ABSTRACT**

Recent papers propose the use of indentation hardness test to evaluate thin films' mechanical properties. But due to the difficulties of this test, the use of numerical methodologies capable of evaluate the stress and strain fields during the indentation cycle, identifying possible critical areas, may help to obtain more secure studies. This work's proposal is to use the Finite Elements Method (FEM) combined with Continuum Mechanics' concepts and the Linear Elastic Fracture Mechanics to produce numeric models and analyze fracture processes that may occur during the indentation cycle. For this, two methodologies were used, one of them uses a constitutive relation based on cracking strain model and the other one uses delamination elements. The simulations were able to identify critical regions using all models. So, these models can be used to study indentation tests.

Key-words: finite elements, cracking strain, fracture.