

УДК 004.94 : 539.62

DOI 10.17223/19988621/48/9

А.Ю. Смолин, Г.М. Еремина

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МАТЕРИАЛА ПОДЛОЖКИ НА ДЕФОРМИРОВАНИЕ И РАЗРУШЕНИЕ СИСТЕМЫ «ПОКРЫТИЕ – ПОДЛОЖКА»

Для исследования механических свойств систем «покрытие – подложка» обычно применяют такие методы, как измерительное индентирование и царапание. Техническая ограниченность современных приборов создает определённые трудности при исследовании таких композиций. Изучался численно методом подвижных клеточных автоматов процесс измерительного индентирования и царапания упрочняющего покрытия на различных подложках. В результате моделирования были установлены особенности влияния материала подложки на извлекаемые указанными методами механические характеристики и процессы деформирования и разрушения системы.

Ключевые слова: *наноиндентирование, измерительное царапание, моделирование, метод подвижных клеточных автоматов, упрочняющие покрытия.*

Особый интерес сегодня вызывает использование ультратонких покрытий, которые зачастую находятся в наноструктурном состоянии. Исследовать материалы таких покрытий стандартными тестами невозможно, так как они существуют только на подложках, которые оказывают существенное влияние на механический отклик всей системы. Для исследования свойств систем «покрытие – подложка» применяют специальные экспериментальные методики, такие, как измерительное индентирование, царапание и т.д.

С помощью измерительного индентирования обычно определяется твёрдость, модуль Юнга, упругое восстановление. Наиболее распространённым способом обработки результатов измерительного наноиндентирования является методика Оливера – Фарра [1]. Данная методика предполагает, что материал подложки не оказывает существенного влияния на извлекаемые характеристики при глубине внедрения менее 1/10 от толщины покрытия, однако экспериментальные данные [2–4], а также результаты численных расчётов опровергают это предположение [5–7]. Стоит отметить, что большое влияние на результаты натурного эксперимента могут оказывать дефекты поверхностного слоя материала покрытия, наличие переходного слоя, особенности структуры материалов (размер зерна, наличие включений). С помощью измерительного царапания определяются такие характеристики, как коэффициент трения, адгезия и т.д.

Отсутствие необходимой чувствительности и разрешающей способности современных приборов создаёт определённые ограничения для экспериментального исследования таких систем. Решением этой проблемы может стать компьютерное моделирование. С помощью континуальных методов исследуется макроскопический отклик материала, а с помощью дискретных методов – процессы, протекающие на микроуровне, такие, как зарождение и движение дислокаций и т.д. Наибольшее распространение для численного исследования адгезии покрытия полу-

чили континуальные методы. Следует отметить, что моделирование разрушения с образованием новых поверхностей в методах, основанных на законах механики сплошных сред, – трудоёмкий процесс. Для этих целей используют расширенный метод конечных элементов (XFEM) [8–9], который предполагает использование весьма больших вычислительных мощностей. Для упрощённого описания процесса разрушения используют модель когезионной зоны (cohesive zone) [10], главным недостатком которой является то, что расположение трещин уже заранее предопределено, а это, в свою очередь, даёт неточную картину деформирования и разрушения системы «покрытие – подложка».

Для корректного численного исследования механического поведения материала при измерительном индентировании и царапании необходимо использовать метод, позволяющий описывать процессы, протекающие как на макроуровне (отклик системы в целом), так и на мезоуровне (с учётом структурных элементов образца), не локализуя повреждённую область в изначально заданном месте, и учитывающий особенности структуры материалов. На наш взгляд, таким методом является метод подвижных клеточных автоматов, основанный на дискретном представлении материала, так как данный метод позволяет имитировать неоднородности структуры материала (размер автомата выбирается соответствующим среднему размеру зерна, и разрушение идёт вдоль границ «зёрен»), а также процесс разрушения в любом месте модельного образца с учётом взаимодействия получающихся фрагментов.

1. Математическая модель

1.1. Описание метода

ПОДВИЖНЫХ КЛЕТОЧНЫХ АВТОМАТОВ

Метод подвижных клеточных автоматов (далее используется общепринятая аббревиатура от английского МСА – movable cellular automata) [11] является численным методом, основанным на концепции частиц, которая имеет существенные отличия от численных методов, основанных на решении уравнений классической механики сплошных сред.

В методе подвижных клеточных автоматов предполагается, что материал состоит из определённого количества элементарных объектов конечного размера (автоматов), которые взаимодействуют друг с другом и могут перемещаться в пространстве, тем самым моделируя реальные процессы деформации. Движение ансамбля частиц описывается уравнениями Ньютона – Эйлера:

$$\begin{cases} m_i \frac{d^2 \mathbf{R}_i}{dt^2} = \sum_{j=1}^{N_i} \mathbf{F}_{ij}^{\text{pair}} + \mathbf{F}_i^{\Omega}, \\ \hat{J}_i \frac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N_i} \mathbf{M}_{ij}, \end{cases} \quad (1)$$

где \mathbf{R}_i , $\boldsymbol{\omega}_i$, m_i и \hat{J}_i – радиус-вектор, скорость вращения, масса и момент инерции автомата i соответственно, $\mathbf{F}_{ij}^{\text{pair}}$ – парная сила механического взаимодействия автоматов i и j , \mathbf{F}_i^{Ω} – объёмнозависящая сила, действующая на автомат i и обусловленная взаимодействием его соседей с другими автоматами. В последнем уравне-

нии $\mathbf{M}_{ij} = q_{ij}(\mathbf{n}_{ij} \times \mathbf{F}_{ij}^{\text{pair}}) + \mathbf{K}_{ij}$, здесь q_{ij} – расстояние от центра i -го автомата до точки его взаимодействия (контакта) с j -м автоматом (рис. 1), $\mathbf{n}_{ij} = (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i)/r_{ij}$ – единичный вектор ориентации пары и r_{ij} – расстояние между центрами автоматов (рис. 1), \mathbf{K}_{ij} – крутящий момент, обусловленный относительным вращением.

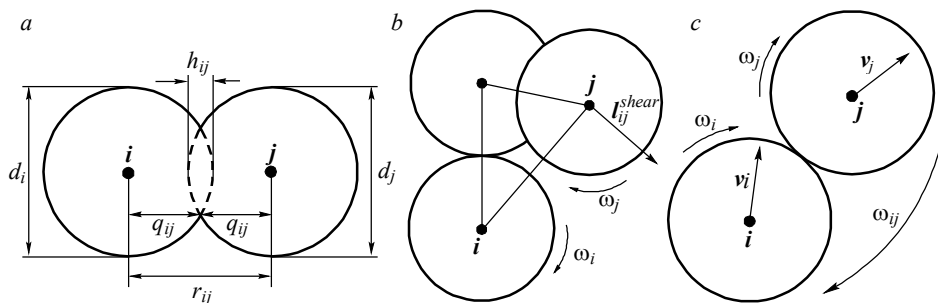


Рис. 1. Схематическое представление пары подвижных клеточных автоматов, их размерные и кинематические параметры

Fig. 1. Schematic representation of a movable pair of cellular automata with their dimensional and kinematic parameters

С помощью процедуры осреднения для тензора напряжений в объёме произвольной частицы, изложенной в работах [12, 13], осуществляется переход от сил к напряжениям, и выражение для компонент усреднённого тензора напряжений в автомате i принимает вид

$$\bar{\sigma}_{\alpha\beta}^i = \frac{1}{V_i} \sum_{j=1}^{N_i} q_{ij} n_{ij,\alpha} F_{ij,\beta} \quad (2)$$

где α и β обозначают оси X , Y , Z лабораторной системы координат, V_i – текущий объём автомата i , $n_{ij,\alpha}$ – α -компонента единичного вектора \mathbf{n}_{ij} и $F_{ij,\beta}$ – β -компонента полной силы, действующей в точке «контакта» между автоматами i и j .

Знание компонент тензора напряжений позволяет вычислять все его инварианты в объёме автомата, в частности давление P_i (или, что то же самое, среднее напряжение $\bar{\sigma}_{\text{mean}}^i$)

$$P_i = -\bar{\sigma}_{\text{mean}}^i = -\frac{\bar{\sigma}_{xx}^i + \bar{\sigma}_{yy}^i + \bar{\sigma}_{zz}^i}{3} \quad (3)$$

и интенсивность напряжений

$$\bar{\sigma}_{\text{int}}^i = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(\bar{\sigma}_{xx}^i - \bar{\sigma}_{yy}^i)^2 + (\bar{\sigma}_{yy}^i - \bar{\sigma}_{zz}^i)^2 + (\bar{\sigma}_{zz}^i - \bar{\sigma}_{xx}^i)^2 + 6[(\bar{\sigma}_{xy}^i)^2 + (\bar{\sigma}_{yz}^i)^2 + (\bar{\sigma}_{xz}^i)^2]}. \quad (4)$$

Для описания упругопластического поведения в рамках метода МСА предлагается использовать теорию пластического течения, а именно модель пластичности с линейным упрочнением с критерием Мизеса. Для этого к методу МСА был адаптирован известный алгоритм Уилкинса [11]. Этот алгоритм состоит в решении упругой задачи на каждом временном шаге и последующем «сбросе» компо-

нент девиатора тензора напряжений $D_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta} - 1/3 \sigma_{kk} \delta_{\alpha\beta}$ на поверхность текучести Мизеса в случае, когда интенсивность напряжений превышает заданную предельную величину:

$$D'_{\alpha\beta} = D_{\alpha\beta} \cdot M, \quad (5)$$

где $M = \sigma_{pl} / \sigma_{int}$, σ_{int} – интенсивность напряжений, σ_{pl} – радиус круга текучести Мизеса.

Этот алгоритм, в применении к автомату i , может быть записан в следующих обозначениях:

$$\begin{cases} (\bar{\sigma}_{\alpha\alpha}^i)' = (\bar{\sigma}_{\alpha\alpha}^i - \bar{\sigma}_{mean}^i) M_i + \bar{\sigma}_{mean}^i, \\ (\bar{\sigma}_{\alpha\beta}^i)' = \bar{\sigma}_{\alpha\beta}^i M_i, \end{cases} \quad (6)$$

где $\alpha, \beta = X, Y, Z$ и $\alpha \neq \beta$, $(\bar{\sigma}_{\alpha\beta}^i)'$ – скорректированные компоненты осреднённого тензора напряжений, $\bar{\sigma}_{\alpha\beta}^i$ – компоненты тензора напряжений, которые получают-ся в результате решения упругой задачи на текущем временном шаге, $M_i = \sigma_{pl}^i / \bar{\sigma}_{int}^i$ – текущее значение коэффициента «сброса», σ_{pl}^i – текущее значение радиуса круга текучести Мизеса для автомата i .

Таким образом, реологические свойства материала автомата i определяются заданием единой кривой упрочнения $\bar{\sigma}_{int}^i = \Phi(\bar{\epsilon}_{int}^i)$ (здесь $\bar{\epsilon}_{int}^i$ – интенсивность осреднённого тензора деформаций, компоненты которого могут быть вычислены аналогично $\bar{\sigma}_{\alpha\beta}^i$ [14]), эта зависимость также называется в МСА функцией отклика автомата.

Для вычисления сил, действующих между автоматами, в данном исследовании предлагается использовать две функции отклика: функцию упругого взаимодействия (рис. 2, a), служащую для описания механического поведения хрупких оксидных подложек, а функцию упругопластического поведения материала (рис. 2, b), использующуюся для описания покрытия и подложки из наноструктурного титана.

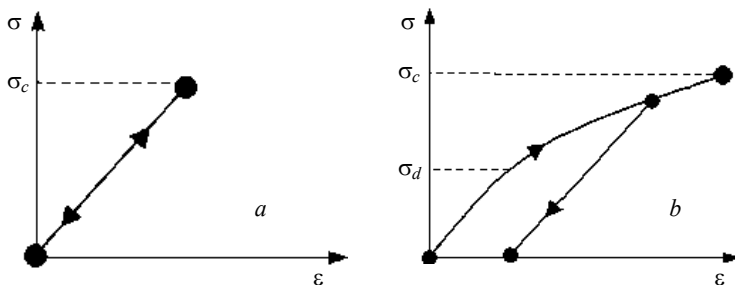


Рис. 2. Типы функций отклика, описывающие механическое поведение материала: a – упругое; b – упругопластическое

Fig. 2. Types of the response functions describing the mechanical behavior of the material: (a) elastic and (b) elastoplastic

Пару элементов метода МСА можно рассматривать как виртуальный бистабильный автомат (у него существуют два состояния: связанная и несвязанная пара), что позволяет явно моделировать процессы разрушения в методе МСА. Задаaniem правил перехода пары из состояния связанной в состояние несвязанной формулируется критерий разрушения моделируемого материала, который, вообще говоря, определяется физическими механизмами деформации материала. Заметим, что переключение пары автоматов в несвязанное состояние приводит к изменению сил, действующих на элементы, в частности они не будут сопротивляться взаимному удалению друг от друга. В данной работе процессы разрушения моделировались с использованием критерия, основанного на достижении в паре порогового значения интенсивности деформаций.

Таким образом, метод МСА позволяет моделировать механическое поведение твёрдого тела, в том числе пластическое и вязкоупругое деформирование, разрушение, фрагментацию и дальнейшее взаимодействие фрагментов как сыпучей (гранулированной) среды.

1.2. Геометрическая модель процесса наноиндентирования

Геометрически модель процесса индентирования состоит из образца в форме параллелепипеда и индентора. Внизу образца находится основание, которое представляет собой пластину со сторонами, равными сторонам образца, и высотой, равной размеру автомата. На этом основании сверху располагается блок основного материала, далее могут следовать блоки различных слоёв покрытия. Сверху такой сборки располагается индентор. В задаче индентирования использовался трёхгранный индентор Берковича, в качестве материала которого использовался алмаз.

Изначально геометрия задачи задавалась в виде полигональной сетки для всех основных её элементов. На основе заданной полигональной сетки в пакете программ генерировалась клеточно-автоматная модель в виде ГЦК-упаковки частиц (автоматов). На рис. 3 представлена такая модель, на которой автоматы изображены сферами.

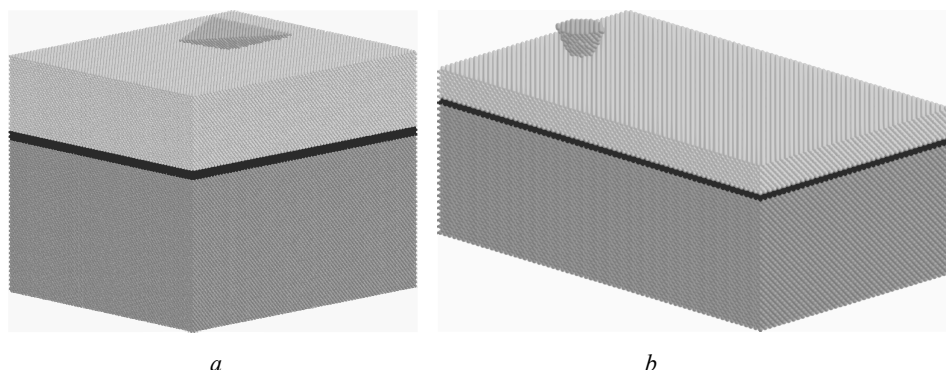


Рис. 3. Геометрическая модель в виде упаковки автоматов для: *a* – индентирования, *b* – царапания

Fig. 3. Geometrical model represented as an automata packing for (a) indentation and (b) scratch-test

В данном исследовании моделировались покрытия толщиной 1800 нм. При этом учитывался переходный слой между материалом покрытия и подложкой (тёмный слой на рис. 3). Эта зона имела механические характеристики, соответствующие средним величинам между значениями для покрытия и подложки. Толщина подложки варьировалась в зависимости от задаваемой глубины погружения так, чтобы общая толщина модельного образца была не менее 1/10 от глубины внедрения индентора и в среднем составляла около 200 нм.

В расчётах скругление вершины индентора, имеющее место в реальных экспериментальных установках, учитывалось усечением вершины пирамиды так, чтобы сторона получающейся треугольной грани на вершине равнялась радиусу скругления. Высота индентора в модели определялась максимальной глубиной вдавливания.

Процесс нагружения при индентировании и царапании имитировался заданием скоростей верхнему слою автоматов индентора. В случае индентирования скорость прикладывалась к индентору в вертикальном (ось Z) направлении. Для уменьшения динамических эффектов на начальном этапе скорость плавно увеличивалась от нуля до максимального значения. В случае измерительного царапания скорость прикладывалась в вертикальном (ось Z) и горизонтальном (ось Y) направлениях, при погружении контртела на заданную глубину прекращалось приложение скорости в вертикальном направлении. При этом нижняя поверхность образца была закреплена, а его боковые поверхности свободны.

Для моделирования процесса измерительного царапания использовался индентор в виде усечённого конуса с углом образующей 60° (рис. 3, b).

Размер подвижного клеточного автомата (элемента модели) не может превышать минимальный размер задачи, т.е. толщину покрытия или переходного слоя. Чтобы моделировать разрушение в покрытии, оно должно состоять как минимум из двух автоматов в толщину. Исходя из этих общих требований и возможности получать достаточно детальную картину процесса при допустимом времени расчёта, размер клеточного автомата варьировался в диапазоне от 10 до 100 нм. Толщина подложки составляла 3.5 мкм. Высота контртела в задаче царапания составляла 1.9 мкм.

1.3. Параметры модельных материалов

Для численного исследования влияния свойств материала подложки на механический отклик систем с упрочняющим покрытием рассматривались композиции, экспериментальное изучение которых представлено в работах [15–17]. Упрочняющее покрытие представляло собой многокомпонентную плёнку TiC-Ca-P-O-N многофункционального назначения. За основу была взята модель, ранее разработанная для моделирования такого покрытия на титане [18].

Динамика упругого тела характеризуется следующими параметрами: плотностью ρ , упругим модулем сдвига G , упругим модулем объёмной деформации K . Модель линейно упрочняющегося тела помимо этих параметров характеризуется пределом текучести σ_y , пределом прочности σ_B и деформацией, соответствующей пределу прочности ϵ_B .

Модельным образцам, имитирующим покрытие [15–17], были присвоены следующие физико-механические характеристики: $\rho = 4700 \text{ кг/м}^3$, $G = 80 \text{ ГПа}$, $K = 175 \text{ ГПа}$ (соответствующий модуль Юнга $E = 220 \text{ ГПа}$), $\sigma_y = 9.5 \text{ ГПа}$, $\sigma_B = 10.5 \text{ ГПа}$ и $\epsilon_B = 0.075$. Предел текучести покрытия был оценён с помощью методики обрат-

ного анализа экспериментальной диаграммы измерительного индентирования [19]. Для определения предела прочности покрытия был проведён ряд тестовых расчётов по измерительному царапанию с различными значениями предела прочности модельного материала. Результаты расчётов сравнивались с данными натурного эксперимента, при этом начало разрушения поверхностных слоёв покрытия в численном эксперименте определялось резким увеличением количества несвязанных автоматов, а в эксперименте – по пикам акустической эмиссии [20].

По данным из литературных источников [21] для образцов наноструктурного титана были выбраны следующие значения параметров: $\rho = 4500 \text{ кг/м}^3$, $G = 41 \text{ ГПа}$, $K = 100 \text{ ГПа}$ (соответствующий модуль Юнга $E = 120.2 \text{ ГПа}$), $\sigma_y = 1.0 \text{ ГПа}$, $\sigma_B = 1.25 \text{ ГПа}$ и $\varepsilon_B = 0.15$.

По данным из литературных источников [22] для образцов плавленого кварца были выбраны следующие значения параметров: $\rho = 2201 \text{ кг/м}^3$, $G = 31 \text{ ГПа}$, $K = 36.9 \text{ ГПа}$ (соответствующий модуль Юнга $E = 73 \text{ ГПа}$), следует отметить, что материал рассматривался как упруго-хрупкий с пределом прочности $\sigma_B = 1.1 \text{ ГПа}$.

Для образцов сапфира задавались следующие параметры [23]: $\rho = 3970 \text{ кг/м}^3$, $G = 148 \text{ ГПа}$, $K = 240 \text{ ГПа}$ (соответствующий модуль Юнга $E = 365 \text{ ГПа}$), материал рассматривался как упруго-хрупкий с пределом прочности $\sigma_B = 2.0 \text{ ГПа}$.

Для определения адекватности выбранных параметров функции отклика подвижных клеточных автоматов, моделирующих материалы подложки и покрытия, строился трёхмерный кубический образец с ГЦК-упаковкой автоматов, который подвергался одноосному сжатию. Размер подвижного клеточного автомата выбирался в соответствии с минимальным размером зерна и составлял $d = 10 \text{ нм}$. Размер стороны кубического образца h варьировался от $10 d$ до $30 d$ для того, чтобы определить представительный объём модельного образца, то есть такой объём, начиная с которого дальнейшее увеличение размеров не приводит к существенному изменению модуля упругости и предела текучести образцов на одноосное сжатие.

На основе расчётных данных был проведён анализ сходимости упругих и прочностных свойств образцов с увеличением их размеров. Для этого рассчитывались модули упругости на сжатие (наклон первого линейного участка диаграммы нагружения) и пределы текучести (точка пересечения двух прямых, отвечающих за упругое и пластическое поведение) для каждого из образцов. Относительное отклонение расчётных модулей упругости E_i всех образцов от модуля Юнга E приведено на рис. 4. Относительное отклонение расчётных пределов текучести σ_i всех образцов от заданного значения σ_y приведено на рис. 5. Результаты анализа показали, что представительными (отклонение упругого модуля не превышало 5 %, отклонение предела текучести не превышало 3 %) можно считать образцы с размером основания 200 нм (т.е. $20 d$).

Таким образом, можно сделать вывод, что построенная модель достаточно хорошо описывает поведение реальных материалов при сжатии, поскольку результаты расчётов на представительных образцах показывают следующие свойства: 1) линейный вид диаграммы нагружения модельных образцов в упругой области деформирования; 2) линейный вид диаграммы, соответствующий линейному деформационному упрочнению в состоянии пластичности; 3) совпадение упругого модуля на одноосное сжатие (определяется углом наклона диаграммы в упругой области) с модулем Юнга E и значения напряжения при переходе в состояние пластичности расчётной диаграммы с пределом текучести σ_y с заданной точностью (5%).

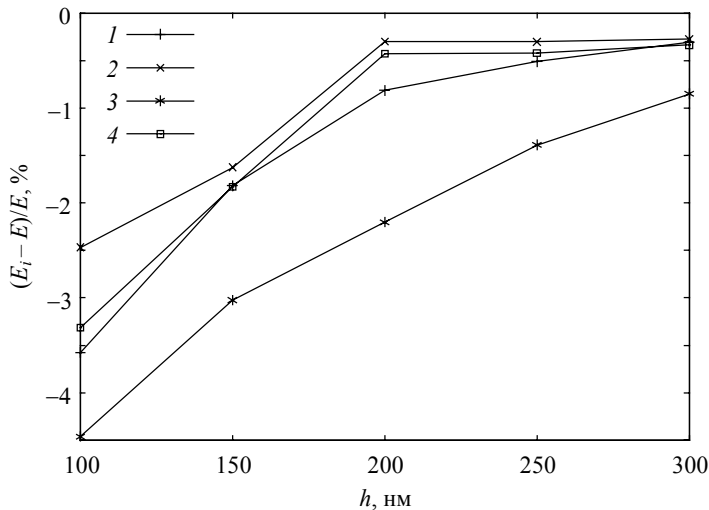


Рис. 4. Сходимость упругого модуля для образцов титана (кр. 1), покрытия (кр. 2), сапфира (кр. 3) и плавленого кварца (кр. 4)
Fig.4. Convergence of elastic modulus for the samples of Ti (1), TiCCaPON coating (2), sapphire (3), and fused silica (4)

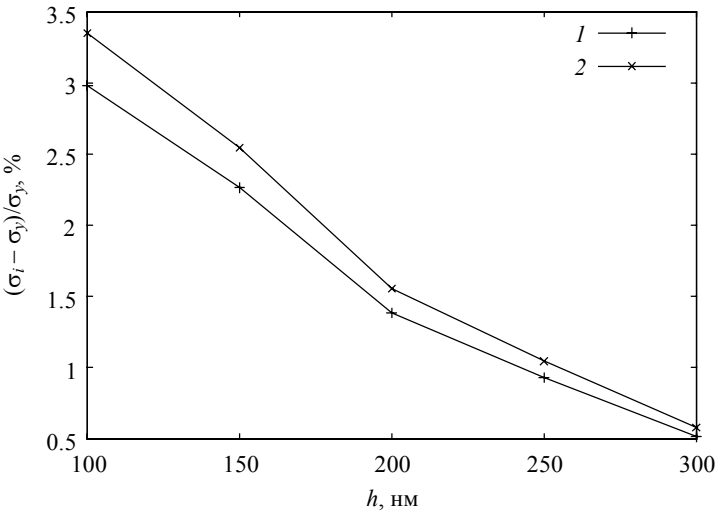


Рис. 5. Сходимость предела текучести для образцов титана (кр. 1) и покрытия (кр. 2)
Fig.5. Convergence of yield limit observed for the samples of Ti (1) and TiCCaPON coating (2)

2. Результаты моделирования

Как указано выше, существует гипотеза о том, что при глубине индентирования менее 1/10 от толщины покрытия подложка не оказывает влияние на извлекаемые механические характеристики. Однако как показали эксперименты это предположение неверно. При натурном эксперименте большое влияние может

оказывать шероховатость поверхности, неоднородность структуры поверхностного слоя материала, наличие примесей, пор и других дефектов структуры. В данной работе предполагается, что с помощью компьютерного моделирования можно абстрагироваться от этих факторов и провести численный эксперимент по индентированию системы «покрытие – подложка», состоящей из бездефектных материалов.

Для исследования влияния свойств материала подложки на механические характеристики всей системы было проведено моделирование индентирования покрытия TiCCaPON толщиной 1800 нм на следующих различных подложках: наноструктурном титане, сапфире и плавленом кварце. По результатам обработки данных моделирования методом Оливера – Фарра были получены зависимости модуля упругости и твёрдости рассматриваемых систем от глубины проникновения индентора (рис. 6).

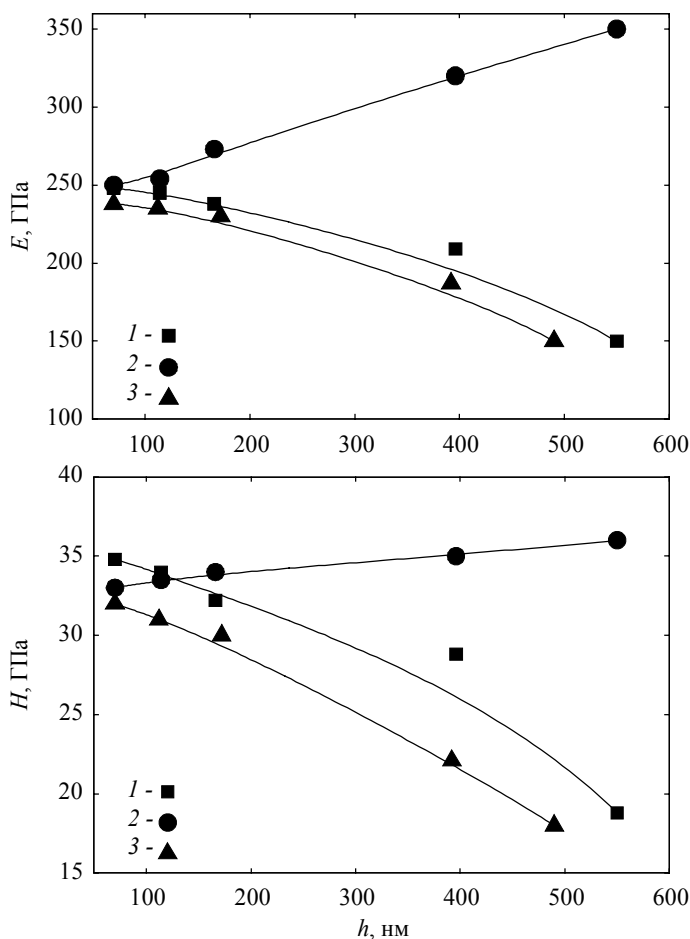


Рис. 6. Зависимости модуля упругости (а) и твёрдости (б) покрытия TiCCaPON на подложках из наноструктурного титана (1), сапфира (2), плавленого кварца (3), полученные в результате моделирования

Fig. 6. Dependences of the modulus of (a) elasticity and (b) hardness of a TiCCaPON coating on the substrates made of 1, Ti; 2, sapphire; and 3, fused silica obtained in the modeling.

Полученные результаты сравнивались с данными натурального эксперимента, представленными в работе [24]. Для больших глубин индентирования (больше 200 нм) результаты численного моделирования показывают хорошее соответствие с результатами эксперимента, разница значений модуля Юнга и твёрдости не превышает 15 %. При малых глубинах внедрения (до 200 нм) имеется некоторое несоответствие данным натурального эксперимента в силу того, что численная модель не учитывает шероховатость рельефа и структуру приповерхностного слоя исследуемого образца (материал покрытия полагался однородным и изотропным).

Полученные результаты свидетельствуют о том, что материал подложки оказывает существенное влияние на извлекаемые механические характеристики систем с покрытиями даже при глубинах индентирования меньше рекомендованных для определения упругих и прочностных свойств материала покрытия (1/10 от толщины покрытия). Таким образом, имеющиеся экспериментальные факты, подтверждённые нашими расчётами, свидетельствуют о том, что необходимо разрабатывать новые и модифицировать существующие методики определения свойств покрытий с помощью измерительного индентирования.

Кроме индентирования при экспериментальном изучении свойств покрытий используется измерительное царапание. Поэтому следующей задачей настоящей работы являлось моделирование процесса измерительного царапания покрытий на различных подложках для определения его адгезионной прочности и характера разрушения под действием прогрессивного нагружения.

Полученные в результате расчётов данные показали, что при измерительном царапании покрытия на различных подложках можно выделить несколько этапов. На первом этапе, характерном для всех систем, наблюдается разрушение поверхностных слоёв покрытия. Для системы с подложкой из титана на втором этапе характерно появления шевронных трещин до переходного слоя, а на третьем – происходит локальное отслоение покрытия путём образования герцевских и шевронных трещин до материала подложки (рис. 7, а).

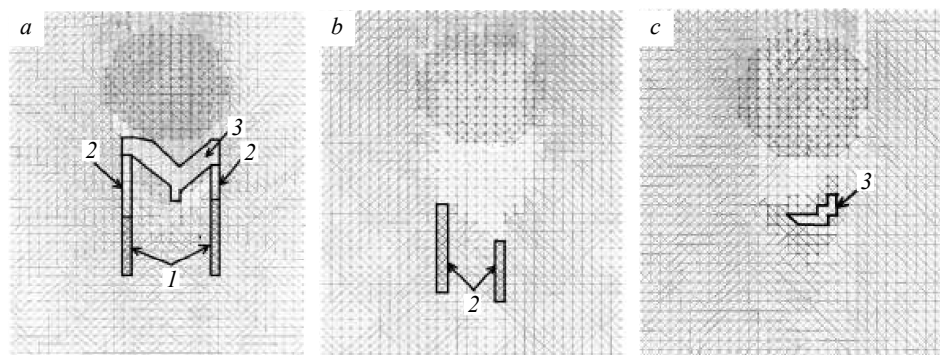


Рис. 7. Разрушение покрытия TiCCaPON, представленное в виде сетки связанных автоматов, на подложке из титана (а), сапфира (b) и плавленого кварца (c); стрелками помечены трещины разного типа: 1 – шевронные трещины до материала переходного слоя, 2 – шевронные трещины до материала подложки, 3 – герцевские трещины до материала подложки

Fig. 7. Fracture of the TiCCaPON coating represented as a grid of bonded automata on the substrates made of (a) titanium, (b) sapphire, and (c) fused silica; the arrows indicate the cracks of different types: 1, chevron cracks down to the interface layer; 2, chevron cracks down to the substrate; and 3, Hertz cracks down to the substrate

При анализе результатов моделирования измерительного царапания системы с подложкой из сапфира (рис. 7, *b*) на втором этапе наблюдаются шевронные трещины до материала переходного слоя с последующим полным отслоением покрытия от материала подложки при силе 42 мН на третьем этапе. В случае системы с подложкой из плавящего кварца (рис. 7, *c*) на втором этапе наблюдаются локальные сколы покрытия до переходного слоя с образованием герцевской трещины до материала подложки, а третьем этапе происходит полное отслоение покрытия при силе 44 мН.

При сравнительном анализе структурных особенностей царапин, а также зависимостей от времени вертикальной составляющей силы и относительного числа несвязанных автоматов было установлено, что в силовом отклике присутствуют скачки сброса силы, характерные для разрушения и отслоения покрытия. Так, на примере указанных зависимостей для системы с подложкой из титана (рис. 8) показано, что начало роста относительного количества несвязанных автоматов, которое характеризует поверхностное разрушение, сопровождается скачком силы. Образование шевронных и герцевских трещин сопровождается ещё большим скачком силы и резким увеличением числа несвязанных автоматов.

Качественно полученные изображения, показанные на рис. 8, соответствуют начальной стадии разрушения покрытия в натурных экспериментах по измерительному царапанию наноструктурных покрытий на различных подложках, описанному в работе [20].

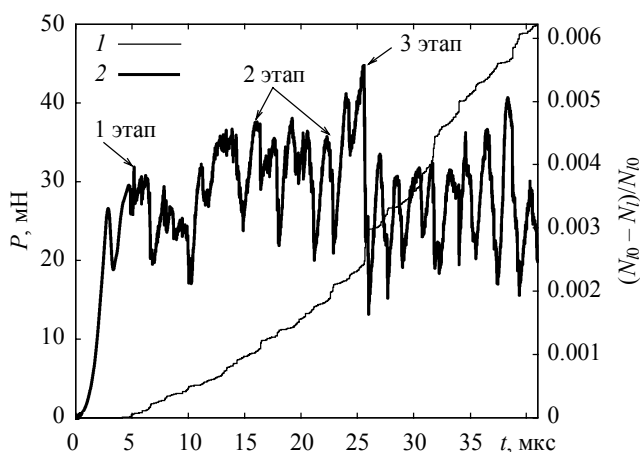


Рис. 8. Зависимости от времени относительного числа несвязанных автоматов $N_0 - N_i$ (кр. 1) и силы P (кр. 2), действующей на индентор со стороны покрытия, расположенного на подложке из наноструктурного титана

Fig. 8. Time dependences of both the relative amount of unlinked automata $N_0 - N_i$ (1) and force P (2) acting on the indenter from the side of the coating deposited on the substrate made of nanostructured titanium

Одной из важных извлекаемых характеристик, получаемых при измерительном царапании, является коэффициент трения. В рамках моделирования процесса измерительного царапания значение коэффициента трения между покрытием и индентором определялось на начальной стадии процесса, до разрушения и образования крупных трещин и отслоения покрытия.

Установлено, что на начальной стадии коэффициент трения упрочняющего покрытия на подложках из титана, сапфира и кварца равен 0.04–0.05 (рис. 9), с увеличением глубины царапины коэффициент трения возрастает. В момент начала разрушения поверхностного слоя ($t = 5$ мкс) коэффициент трения для системы, состоящей из упрочняющего покрытия и титановой подложки, составляет 0.25, для системы с сапфировой подложкой – 0.28 и для подложки из плавленого кварца – 0.22 (рис. 9). Рассчитанные значения коэффициента трения соответствуют значениям, полученным в ходе натурального эксперимента [15].

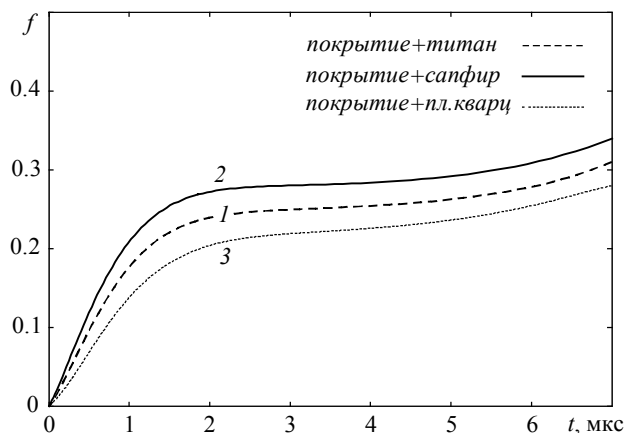


Рис. 9. Зависимость коэффициента трения от времени расчёта для покрытия на различных подложках: наноструктурный титан (кр. 1), сапфир (кр. 2); плавленый кварц (кр. 3)

Fig. 9. Time dependences of the friction coefficients for the coating deposited on different substrates: 1, Ti; 2, sapphire; and 3, fused silica

Заключение

В результате трёхмерного численного моделирования процесса измерительно-го индентирования системы «покрытие – подложка» было установлено, что свойства материала подложки достаточно существенно влияют на извлекаемые по методу Оливера – Фарра механические характеристики системы «покрытие – подложка» даже при глубинах индентирования менее 1/10 толщины покрытия. Например, значения твёрдости могут отличаться на величину до 10 %. Установлено, что при измерительном царапании системы «покрытие – подложка» в случае оксидных подложек возникает отслоение покрытия, причём при меньшей силе в случае более твёрдой подложки. При царапании упрочняющего покрытия на титановой подложке отслоение не наступает. Значение коэффициента трения между материалом покрытия и контртелом при измерительном царапании зависит от материала подложки и соответствует 0.25 для наноструктурного титана, 0.28 для сапфира и 0.22 для плавленого кварца.

Таким образом, моделирование методом подвижных клеточных автоматов может значительно помочь в интерпретации получаемых данных при исследовании механического поведения систем «покрытие – подложка» при измерительном индентировании и царапании. Применение данного метода численного исследования в сочетании с натурным экспериментом может способствовать разработке новых

более точных методик определения механических и трибологических характеристик материала покрытия. В первую очередь это связано с возможностью данного метода адекватно моделировать разрушение материалов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Oliver W.C., Farr G.M. Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: Advanced in understanding and refinements to methodology // J. Mater. Res. 2004. V. 19. No. 1. P. 73–78. DOI: 10.1557/jmr.2004.19.1.3.
2. Шугуров А.Р., Панин А.В., Шестериков Е.В. Исследование гальванических покрытий AuNi и AuCo методом склерометрии // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. № 5. С. 64–71.
3. Lamovec J., Jović V., Aleksić R., and Radojević V. Micromechanical and structural properties of nickel coatings electrodeposited on two different substrates // J. Serb. Chem. Soc. 2009. V. 74 (7). P. 817–831. DOI: 10.2298/JSC0907817L
4. Jeng Y.-R., Tan C.-M., Su C.C., Cheng S.-C., and Cheng C.-Y. Experimental study on the nanoindentation of thin copper films from deep submicron to nano-scale // J. Mechanics. 2012. V. 28. P. 507–511. DOI:10.1017/jmech.2012.60
5. Vlachos D.E., Markopoulos Y.P., Kostopoulos V. 3-D Modeling of nanoindentation experiment on a coating-substrate system // Computational Mechanics. 2001. V. 27. P. 138–144. DOI:10.1007/s004660000222
6. Gamonpilas C., Busso E.P. On the effect of substrate properties on the indentation behaviour of coated systems // Materials Science and Engineering. 2004. A 380. P. 52–61. DOI: 10.1016/j.msea.2004.04.038.
7. Ronkainen H., Holmberg K., Laukkanen A., et al. the effect of coating properties on the performance of a-C:H and TA-C films // Tribologia. 2012. V. 31. No. 3–4. P. 3–35.
8. Sukumar N., Chopp D.L., and Moran B. Extended finite element method and fast marching method for three-dimensional fatigue crack propagation // Engineering Fracture Mechanics. 2003. V. 70. P. 29–48. DOI: 10.1016/S0013-7944(02)00032-2.
9. Perzyński K., Madej Ł. Numerical modeling of fracture during nanoindentation of the TiN coatings obtained with the PLD process // Bulletin of the Polish Academy of Science. 2013. V. 61. No. 4. P. 973–978. DOI: 10.2478/bpasts-2013-0104.
10. Abdul-Baqi A. Indentation-induced interface delamination of a strong film on a ductile substrate // Thin Solid Films. 2001. V. 381. P. 143–154.
11. Shilko E.V., Psakhie S.G., Schmauder S., et al. Overcoming the limitations of distinct element method for multiscale modeling of materials with multimodal internal structure // Comp. Mater. Sci. 2015. V.102. P. 267–285. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.02.026.
12. Cundall P.A., Strack D.L. A discrete numerical model for granular assemblies // Geotechnique. 1979. V. 29. No. 1. P. 47–165. DOI: 10.1680/geot.1979.29.1.47.
13. Potyondy D.O., Cundall P.A. A bonded-particle model for rock // Int. J. Rock Mech. Min. Sci. 2004. V. 41. P. 1329–1364. DOI: 10.1016/j.ijrmms.2004.09.011.
14. Psakhie S.G., Shilko E.V., Horie Y., et al. Development of a formalism of movable cellular automaton method for numerical modeling of fracture of heterogeneous elastic-plastic materials // Frattura ed Integrità Strutturale. 2013. V. 24. P. 26–59.
15. Левашов Е.А., Штанский Д.В., Кирюханцев-Корнеев Ф.В. и др. Многофункциональные наноструктурные покрытия: получение, структура и обеспечение единства измерений механических и трибологических свойств // Деформация и разрушение материалов. 2009. № 11. С. 19–36.
16. Левашов Е.А., Петржик М.И., Кирюханцев-Корнеев Ф.В. и др. Структура и механическое поведение при индентировании биосовместимых наноструктурированных титановых сплавов и покрытий // Металлург. 2012. № 5. С. 79–89.
17. Levashov E.A., Petrzhik M.I., Kiryukhantsev-Korneev F.V., et al. Nanostructured titanium alloys and multicomponent bioactive films: Mechanical behavior at indentation // Materials Science and Engineering. 2013. V. 570. P. 51–62. DOI: 10.1016/j.msea.2013.01.034.
18. Смолин А.Ю., Еремина Г.М., Сергеев В.В. и др. Трёхмерное моделирование методом подвижных клеточных автоматов упруго-пластического деформирования и разруше-

- ния покрытий при контактном взаимодействии с жестким индентором // Физическая мезомеханика. 2014. Т.17. №3. С. 75–76.
19. *Giannakopoulos A.E., Suresh S.* Determination of elastoplastic properties by instrumented sharp indentation // *Scripta Materialia*. 1999. V. 40. No. 10. P. 1191–1198.
 20. *Бычкова М.Я.* Создание государственных стандартных образцов и методик измерения модуля упругости и коэффициента трения для контроля и сертификации наноструктурных покрытий: дис. ... канд. тех. наук: 05.16.06. М., 2015. 131 с.
 21. *Elias C.N., Meyers M.A., Valiev R.Z., Monteiro S.N.* Ultrafine grained titanium for biomedical applications: An overview of performance // *J. Mater. Res. Technol.* 2013. V. 2. No. 4. P. 340–350. DOI: 0.1016/j.jmrt.2013.07.003.
 22. *Jong B.H.W.S., Beerkens R.G.C., Nijnatten P. A.* Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry // Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2000. 88 p. DOI: 10.1002/14356007.a12_365.
 23. *Dobrovinskaya E.R., Lytvynov L.A., Pishchik V.* Sapphire: material, manufacturing, applications. New York: Springer, 2009. 400 p.

Статья поступила 02.03.2017 г.

Smolin A. Yu., Eremina G. M. NUMERICAL STUDY OF THE INFLUENCE OF SUBSTRATE MATERIAL ON DEFORMATION AND FRACTURE OF THE COATING – SUBSTRATE SYSTEM. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 48. pp. 91–106

DOI 10.17223/19988621/48/9

The experimental techniques such as instrumented indentation and scratch-test are generally used to study mechanical properties of the "coating-substrate" systems. However, technical limitations of a modern equipment cause certain difficulties in the investigation of the systems under consideration. In this paper, the processes of indentation and scratch-testing of the hardened coatings on the various substrates have been studied numerically using the movable cellular automata. The convergence analysis for elastic modulus and yield stress has been carried out to determine the representative volume element. Numerical simulation included explicitly the transition layer and the coating of 200 and 1800 nm in thickness, respectively. The elastic modulus and hardness of the system have been performed as functions of indentation depth after analyzing the simulation results using the method of Oliver and Pharr. It has been found that the substrate has a significant impact on the obtained mechanical characteristics even at the depth of indentation less than 1/10 of the coating thickness. As a result, the modeling of the scratch testing of the coating-substrate system made possible to obtain the scratch images and the time dependences of friction coefficient. Analysis of the results showed that the coating delamination occurred both in the case of oxide substrate and in the case of harder substrate; less strength is required for the latter. Delamination does not occur during the scratching of the hardened coating of titanium substrate. The value of the friction coefficient between the coating material and indenter during the instrumented scratching depends on the substrate material and it is equal to 0.25, 0.28, and 0.22 for nanostructured titanium, sapphire, and fused silica, respectively.

Keywords: nanoindentation, scratch-test, modeling, movable cellular automata method, nanostructured titanium, coatings.

SMOLIN Alexey Yur'evich (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation).

E-mail: asmolin@ispms.ru

EREMINA Galina Maksimovna (Candidate of Physics and Mathematics, Institute of Strength Physics and Materials Science of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russian Federation).

E-mail: anikeeva@ispms.ru

REFERENCES

1. Oliver W.C., Pharr G.M. (2004) Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: Advances in understanding and refinements to methodology. *J. Mater. Res.* 19(1). pp. 3–20. DOI: 10.1557/jmr.2004.19.1.3.
2. Shugurov A.R., Panin A.V., Shesterikov E.V. (2011) Sclerometric study of galvanic AuNi and AuCo coatings. *Technical Physics Letters.* 37(3). pp. 223–225. DOI: 10.1134/S1063785011030138.
3. Lamovec J., Jović V., Aleksić R. and Radojević V. (2009) Micromechanical and structural properties of nickel coatings electrodeposited on two different substrates. *J. Serb. Chem. Soc.* 74(7). pp. 817–831. DOI: 10.2298/JSC0907817L.
4. Jeng Y.R., Tan C.M., Su C.C., Cheng S.C., Cheng C.Y. (2012) Experimental study on the nanoindentation of thin copper films from deep submicron to nano-scale. *Journal of Mechanics.* 28. pp. 507–511. DOI:10.1017/jmech.2012.60.
5. Vlachos D.E., Markopoulos Y.P., Kostopoulos V. (2001) 3-D Modeling of nanoindentation experiment on a coating-substrate system. *Computational Mechanics.* 27. pp. 138–144. DOI: 10.1007/s004660000222.
6. Gamonpilas C., Busso E.P. (2004) On the effect of substrate properties on the indentation behaviour of coated systems. *Materials Science and Engineering.* A380. pp. 52–61. DOI:10.1016/j.msea.2004.04.038.
7. Ronkainen, H., Holmberg, K., Laukkanen, A., Andersson, T., Kano, M., Horiuchi, T., Suzuki T. (2012) The effect of coating properties on the performance of a-C:H and TA-C films. *Tribologia.* 31(3–4). pp. 3–35.
8. Sukumar N., Chopp D. L., Moran B. (2003) Extended finite element method and fast marching method for three-dimensional fatigue crack propagation. *Engineering Fracture Mechanics.* 70. pp.29–48. DOI: 10.1016/S0013-7944(02)00032-2.
9. Perzyński K., Madej Ł. (2013) Numerical modeling of fracture during nanoindentation of the TiN coatings obtained with the PLD process. *Bulletin of the Polish Academy of Science.* 61(4). pp. 973–978. DOI: 10.2478/bpasts-2013-0104.
10. Abdul-Baqi A. (2001) Indentation-induced interface delamination of a strong film on a ductile substrate. *Thin Solid Films.* 381. pp. 143–154.
11. Shilko E.V., Psakhie S.G., Schmauder S., Popov V.L., Astafurov S.V., Smolin A.Yu. (2015) Overcoming the limitations of distinct element method for multiscale modeling of materials with multimodal internal structure. *Comp. Mater. Sci.* 102. pp. 267–285. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.02.026.
12. Cundall P.A., Strack D.L. (1979) A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique.* 29(1). pp. 47–165. DOI: 10.1680/geot.1979.29.1.47.
13. Potyondy D.O., Cundall P.A. (2004) A bonded-particle model for rock. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* 41. pp. 1329–1364. DOI: 10.1016/j.ijrmms.2004.09.011.
14. Psakhie S.G., Shilko E.V., Horie Y., Smolin A.Yu., Astafurov S.V. (2013) Development of a formalism of movable cellular automaton method for numerical modeling of fracture of heterogeneous elastic-plastic materials. *Frattura ed Integrità Strutturale.* 24. pp. 26–59. DOI: 10.3221/IGF-ESIS.24.04.
15. Levashov E.A., Shtanskiy D.V., Kiryukhantsev-Korneev F.V., Petrzhiik M.I., Tyurina M.Ya., Sheveyko A.N. (2010) Multifunctional nanostructured coatings: Formation, structure, and the uniformity of measuring their mechanical and tribological properties. *Russian Metallurgy (Metally).* 10. pp. 917–935. DOI: 10.1134/S0036029510100113.
16. Levashov E.A., Petrzhiik M.I., Kiryukhantsev-Korneev F.V., Shtanskiy D.V., Prokoshkin S.D., Gunderov D.V., Sheveyko A.N., Korotitskiy A.V., Valiev R.Z. (2012) Structure and mechanical behavior during indentation of biocompatible nanostructure titanium alloys and coatings. *Metallurgist.* 2012. 56(5–6). pp. 395–407. DOI: 10.1007/s11015-012-9589-5.
17. Levashov E.A., Petrzhiik M.I., Kiryukhantsev-Korneev F.V., Shtanskiy D.V., Sheveyko A.N., Valiev R.Z., Gunderov D.V., Prokoshkin S.D., Korotitskiy A.V., Smolin A.Yu. (2013) Nanostructured titanium alloys and multicomponent bioactive films: Mechanical behavior at

- indentation. *Materials Science and Engineering*. 570. pp. 51–62. DOI: 10.1016/j.msea.2013.01.034.
18. Smolin A.Yu., Eremina G.M., Sergeev V.V., Shil'ko E.V., Psakhie S.G. (2014) Three-dimensional MCA simulation of elastoplastic deformation and fracture of coatings in contact interaction with a rigid indenter. *Physical Mesomechanics*. 17(4). pp. 292–303. DOI: 10.1134/S1029959914040067.
 19. Giannakopoulos A.E., Suresh S. (1999) Determination of elastoplastic properties by instrumented sharp indentation. *Scripta Materialia*. 40(10). pp. 1191–1198.
 20. Bychkova M.Ya. (2015) *Sozdanie gosudarstvennykh standartnykh obraztsov i metodik izmereniya modulya uprugosti i koeffitsienta treniya dlya kontrolya i sertifikatsii nanostrukturnykh pokrytiy* [Creation of state standard samples and measurement techniques for elastic modulus and friction coefficient in order to control and certificate nanostructured coatings]. Dissertation for Cand.Tech. Sciences. Moscow. 131 p.
 21. Elias C.N., Meyers M.A., Valiev R.Z., Monteiro S.N. (2013) Ultrafine grained titanium for biomedical applications: An overview of performance. *J Mater. Res. Technol.* 2(4). pp. 340–350. DOI: 0.1016/j.jmrt.2013.07.003.
 22. Jong B.H.W.S., Beerkens R.G.C., Nijnatten P.A. (2000) Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. *Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA*. 88 p. DOI: 10.1002/14356007.a12_365.
 23. Dobrovinskaya E.R., Lytvynov L.A., Pishchik V. (2009) *Sapphire: material, manufacturing, applications*. New York: Springer. 400 p.