

## FEM MICROMECHANICAL MODELLING OF A POROUS SURFACE COATING SYSTEM

**Joanna Włodarczyk**

*Military University of Technology, Faculty of General Mechanics  
Kaliskiego Str. 2, 00-908 Warsaw, Poland  
e-mail: j.wlodarczyk@wme.wat.edu.pl*

**Wiesław Szymczyk**

*Military University of Technology, Faculty of General Mechanics  
Kaliskiego Str. 2, 00-908 Warsaw, Poland  
e-mail: w.szymczyk@wme.wat.edu.pl*

### **Abstract**

*Multilayered coatings established on parts of internal combustion as well as jet engines may be used as TBC systems providing their better thermal-mechanical efficiency, tribological properties, wear resistance and ability to withstand the influence of aggressive media.*

*FEM micromechanical models of a chosen surface coating system are presented which take into consideration the influence of porosity onto distribution of residual stresses. The example coating system was established on a beryllium copper substrate and consisted of the NiCr midsurface and TiN external layers. The system was analyzed as a functionally gradient material (FGM) with an assumed linear gradient function of material properties in transition zones between volumes of the pure materials of the substrate, midsurface and the external layer. The porosity influence on the distribution of residual stresses was investigated, and the clustering effect influence in particular. Micromechanical models for appointing of effective properties of porous materials with the effect convergence pores and without convergence pores, effective values of Young's modulus appointed from micromechanical models with the effect and without the effect concentrating convergence pores, models surface layer, with the micromechanical simulation of the microstructure, residual stresses in the function of the porosity, the example of results of calculations of residual strains and the example of results of calculations of residual strains are presented in the paper.*

**Keywords:** *surface coatings, FEM, micromechanical modelling, functionally graded materials, porosity, clustering effect*

## MODELOWANIE MIKROMECHANICZNE POROWATYCH WARSTW POWIERZCHNIOWYCH

### **Streszczenie**

*Pokrycia wielowarstwowe wykonywane na częściach silników zarówno wewnętrznego spalania jak i odrzutowych, mogą być używane jako bariera cieplna, która będzie zapewniać ich większą sprawność cieplną i mechaniczną, lepsze własności tribologiczne, odporność na zużycie i na oddziaływanie agresywnych mediów.*

*Prezentowane są mikromechaniczne modele MES wybranego systemu warstwy powierzchniowej, które uwzględniają wpływ porowatości na rozkład naprężeń resztkowych. Przykładowe pokrycie powierzchniowe było wykonane na podłożu z brązu berylowego i składało się z międzywarstwy NiCr i zewnętrznej warstwy TiN. Pokrycie było analizowane jako materiał funkcjonalnie gradientowy, z założoną liniową funkcją gradientu własności materiałowych w strefach przejściowych pomiędzy warstwami czystych materiałów podłoża, międzywarstwy i warstwy zewnętrznej. Badano wpływ porowatości na rozkład naprężeń resztkowych, a w szczególności wpływ efektu skupiania się i łączenia porów. Mikromechaniczne modele do wyznaczania efektywnych własności materiałów porowatych z efektem łączenia się porów i bez łączenia się porów, efektywne wartości modułu Younga wyznaczone z modeli mikromechanicznych, z efektem i bez efektu skupiania łączenia się porów, modele warstwy powierzchniowej, z mikromechaniczną symulacją*

*mikrostruktury, naprężenia resztkowe w funkcji porowatości, przykład wyników obliczeń naprężeń resztkowych oraz przykład wyników obliczeń naprężeń resztkowych są prezentowane w artykule.*

**Słowa kluczowe:** warstwy powierzchniowe, MES, modelowanie mikromechaniczne, materiały funkcjonalnie gradientowe, porowatość, efekt skupiania się i łączenia porów

## 1. Wstęp

Jednym z zasadniczych problemów wytworzonej warstwy powierzchniowej jest powstawanie stanu naprężeń własnych. Korzystną redystrybucję energii wewnętrznej, a w konsekwencji zmianę rozkładu naprężeń resztkowych i zmniejszenie ich gradientów można osiągnąć przez wytworzenie warstwy powierzchniowej jako wielowarstwowego materiału gradientowego lub funkcjonalnie gradientowego.

Materiał o strukturze wielowarstwowej, w którym własności zmieniają się skokowo, z warstwy na warstwę, (dzięki zastosowaniu różnych materiałów lub poprzez zmiany udziałów objętościowych kilku materiałów w kolejnych warstwach) jest określany jako materiał gradientowy. Natomiast w materiale funkcjonalnie gradientowym zmiana własności następuje w sposób ciągły i daje się opisywać przy pomocy gładkiej funkcji (w statystycznie uśrednionym ujęciu).

Obserwuje się ekspansję zastosowań metod numerycznych do badań warstw powierzchniowych. Zdarza się, że metody numeryczne stanowią samodzielne narzędzie badawcze, gdyż pozwalają szybko i tanio zbadać (np. na drodze numerycznych symulacji porównawczych), czy nowo sformułowane hipotezy przynoszą wystarczające wyjaśnienie efektów obserwowanych w rzeczywistości, czy zasymlowana numerycznie zmiana parametrów modelu projektowanego układu materiałowego powoduje zanik niekorzystnych efektów a pojawienie się i wzmocnienie efektów pożądaných. Może to stanowić wskazówkę dla technologów, jak modyfikować proces konstituowania nowej warstwy powierzchniowej, aby osiągnąć podobnie korzystny efekt w rzeczywistości.

Przegląd metod analizy naprężeń resztkowych w materiałach gradientowych można znaleźć w opracowaniach [1÷10].

W niniejszej pracy autorzy analizują rozkład naprężeń resztkowych w przykładowej warstwie powierzchniowej, z uwzględnieniem porowatości. Zastosowali modele, w których mikrostruktura wszystkich stref w warstwie jest symulowana mikromechanicznie oraz modele, w których nie uwzględniono budowy mikrostrukturalnej. Modele mikromechaniczne pozwoliły uwzględnić wpływ wzajemnego przenikania się materiałów w strefach przejściowych i rozważenie porowatości zarówno ze skupiskami porów jak też w postaci rozproszonej.

W przypadku modeli, które nie uwzględniają mikrostruktury niezbędne było posłużenie się zastępczymi, efektywnymi wartościami własności materiałowych: modułów Younga, współczynników Poissona i współczynników rozszerzalności cieplnej. Dla TiN wyznaczono je dla porowatości 5, 10, 15 i 20%, na drodze numerycznych eksperymentów jednoosiowego ściskania, z zastosowaniem mikromechanicznych modeli porowatości. Definiowanie porowatości w modelach odbywało się na drodze losowania. Użyto 2 sposobów losowania. Jeden dopuszczał bliskie sąsiedztwo porów i ich łączenie się w większe pustki. Drugi wykluczał łączenie się porów i prowadził do otrzymania porowatości równomiernie rozproszonej,

## 2. Własności materiałowe a porowatość

Z przeprowadzonych badań literaturowych wynika, że rozrzut danych dotyczących takich materiałów jak TiN, TiCN, TiC - jest bardzo duży. Ważą na tym różne sposoby przygotowania próbek w różnych ośrodkach badawczych, różne metody pomiarów, przyjmowanie różnych podstaw teoretycznych do przeliczeń, różny skład stechiometryczny materiałów badanych warstw.

Metody pomiarowe są często złożone i subtelne, zwłaszcza w przypadku materiałów typowo stosowanych na cienkie powłoki. Skutkuje to tym, że publikowane wyniki pochodzą z pomiarów przeprowadzonych przez autorów specyficznymi metodami, w przyjętych przez nich specyficznych warunkach. Charakterystyki chemiczne i mikrostrukturalne badanych materiałów są często niekompletne. Charakterystyki materiałowe podawane są dla określonej porowatości próbek. Stąd wynikają trudności w porównywaniu danych i ich uogólnianiu. Podawane są różne wartości dla materiałów w stanie nieporowatym, otrzymane po zastosowaniu różnych metod korekcji.

## 2.1 Metody ekstrapolacji własności na stan nieporowaty

Jest wiele dostępnych formuł, które pozwalają na dokonanie korekcji modułu Younga zmierzonego dla materiału o znanej porowatości. Poniżej prezentowane są dwa przykłady:

- dla pustek o kształtach kulistych Hasselman podaje [11]:

$$E = E_0 \left[ 1 + \frac{AP}{1 - (A+1)P} \right] \quad (1)$$

gdzie:

- $E$  - moduł Younga kompozytu,
- $E_0$  - moduł Younga dla materiału litego,
- $P$  - udział objętościowy porowatości,
- $A$  - stała wyznaczona statystycznie.

- dla pustek o dowolnych kształtach Ondracek [12] wyprowadził następujący wzór:

$$E_p^{(1)} = E_m \left[ 1 - \pi^3 \sqrt{\frac{9P^2 z}{16\pi^2 x}} \sqrt{1 + \left[ \left( \frac{x}{z} \right)^2 - 1 \right]} \cos^2 \alpha_D \right] \quad (2)$$

gdzie:

- $E_p^{(1)}$  - moduł Younga materiału porowatego,
- $E_m$  - moduł Younga przy zerowej porowatości,
- $z, x$  - zastępcze osie sferoidalnych porów,
- $z/x$  - współczynnik kształtu,
- $P$  - porowatość (współczynnik koncentracji),
- $\cos^2 \alpha_D$  - współczynnik orientacji sferoidalnych porów.

## 3. Własności przykładowych materiałów

Własności warstw wzięte do obliczeń zestawiono w tabeli 1.

Tab. 1. Własności materiałowe  
Table 1. Material properties

		brąz berylowy	warstwa pośrednia NiCr	TiN*
E	GPa	130	220	600
$\nu$		0,3	0,29	0,25
$\alpha$	$e^{-6} K^{-1}$	16,7	11,7	9,4

$E$  – moduł Younga (\*dla stanu nieporowatego (Bull et al. [13].),  
 $\nu$  – współczynnik Poissona,  $\alpha$  - współczynnik rozszerzalności cieplnej.

Bull et al. [13] podaje, że moduł Younga dla TiN wynosi 600 GPa, a dla TiC 540 GPa (w stanie nieporowatym, litym).

Kral et al. [14], analizując dane wielu innych autorów podaje na podstawie tego przeglądu, że wartość modułu Younga wytworzonego pokrycia silnie zależy od porowatości. Przykładowo, dla TiN zmienia się od 550 GPa dla stanu nieporowatego do ok. 250 GPa dla porowatości 20%.

### 3.1. Numeryczne wyznaczanie efektywnych własności parametrów materiału porowatego przy zastosowaniu modeli mikromechanicznych

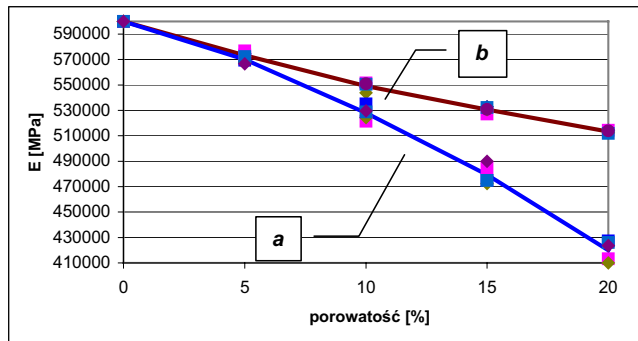
Do wyznaczenia zastępczych własności TiN o porowatościach 5, 10, 15 i 20% użyto modelu numerycznego o siatce złożonej z elementów 2D o regularnym, kwadratowym kształcie. Definiowanie porów w modelach odbywa się losowo, dwiema metodami. Pierwsza metoda losowania dopuszcza skupianie się i łączenie porów (Rys. 1a). Druga wyklucza takie zjawisko i prowadzi do uzyskania równomiernego rozmieszczenia pojedynczych porów (Rys. 1b).

Na rysunku 2 pokazano wyniki wyznaczenia efektywnych wartości modułu Younga przy pomocy modeli mikromechanicznych porowatego TiN, dla porowatości 5, 10, 15 i 20 %, otrzymanych obiema metodami. Dla każdej porowatości losowano po 5 różnych modeli.



Rys. 1. Mikromechaniczne modele do wyznaczania efektywnych własności materiałów porowatych – porowatość 20% z efektem łączenia się porów (a), bez łączenia się porów

Fig. 1. Micromechanical models for the assessment of effective properties of the porous materials - porosity of 20% porosity with the clustering effect (a), with no clustering effect



Rys. 2. Efektywne wartości modułu Younga dla TiN, wyznaczone z modeli mikromechanicznych, dla porowatości: 0, 5, 10, 15 i 20 – z efektem (krzywa a) i bez efektu skupiania łączenia się porów (krzywa b)

Rys. 2. Effective values of Young's module for TiN, obtained from micromechanical models, for porosities: 0, 5, 10, 15, 20%, with (curve a) and without clustering effect (curve b)

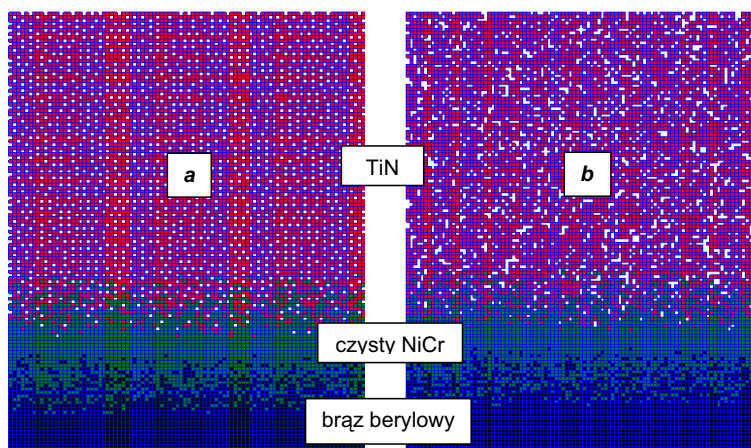
Dla porowatości 20% otrzymano wartość modułu 420 GPa. Wartości podawane w literaturze, na podstawie badań eksperymentalnych wynosiły 250 GPa (Kral et. al. [14]). Różnica ta może być zmniejszona przez zastosowanie innych modeli porowatości, które będą uwzględniały rozkłady kształtu, wielkości i rozproszenia w materiale. Na obecnym etapie badań pory mają zuniformizowany kształt i wielkość.

#### 4. Modele numeryczne warstwy powierzchniowej z uwzględnieniem porowatości

Przeprowadzono numeryczne badania porównawcze wyznaczenia rozkładów naprężeń reszkowych w warstwie powierzchniowej TiN, na podłożu z brązu berylowego, z uwzględnieniem międzywarstwy NiCr. Obliczenia przeprowadzono w 4 seriach.

W modelach użytych w pierwszej i drugiej serii obliczeń, dla porowatości 5, 10, 15 i 20%, stosowano własności efektywne, które wyliczono na podstawie dodatkowych symulacji z użyciem modeli mikromechanicznych, bez uwzględnienia i z uwzględnieniem efektu skupiania się i łączenia porów (por. Rys. 3 a i b).

W trzeciej i czwartej serii obliczeń użyto modeli, w których porowatości warstwy TiN (odpowiedni z efektem i bez efektu skupiania się i łączenia porów) i wzajemne przenikanie się materiałów w strefach przejściowych, były symulowane mikromechanicznie. Porowatość w warstwie TiN ma stałą uśrednioną wartość, a w strefie przejściowej między TiN a międzywarstwą NiCr, zanika zgodnie z liniową funkcją gradientu. Rozkłady faz materiałowych TiN i NiCr w strefie przejściowej były definiowane w sposób losowy a ich udziały zmieniają się zgodnie z liniową funkcją gradientu.

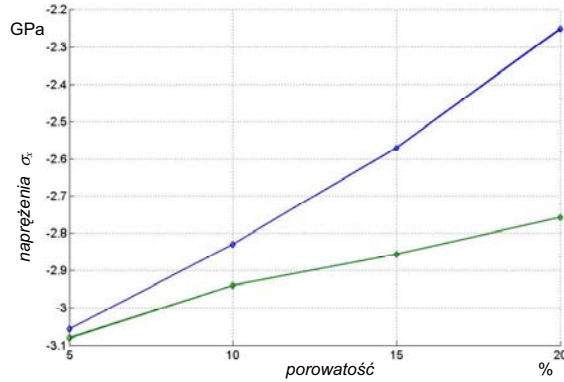


Rys. 3. Modele warstwy powierzchniowej, z mikromechaniczną symulacją mikrostruktury - symulacja 20% porowatości warstwy TiN: bez efektu (a) i z efektem łączenia się porów (b)

Fig. 3. Models of the coating system, with micromechanical simulation of the microstructure - simulation of 20% porosity of the TiN layer: without (a) and with clustering effect (b)

#### 5. Wyniki obliczeń i dyskusja

Na rysunku 4, przedstawiono efekt zmienności wartości naprężeń reszkowych w warstwie TiN wraz ze zmianą porowatości, na podstawie obliczeń na modelach z efektywnymi własnościami materiałowymi.

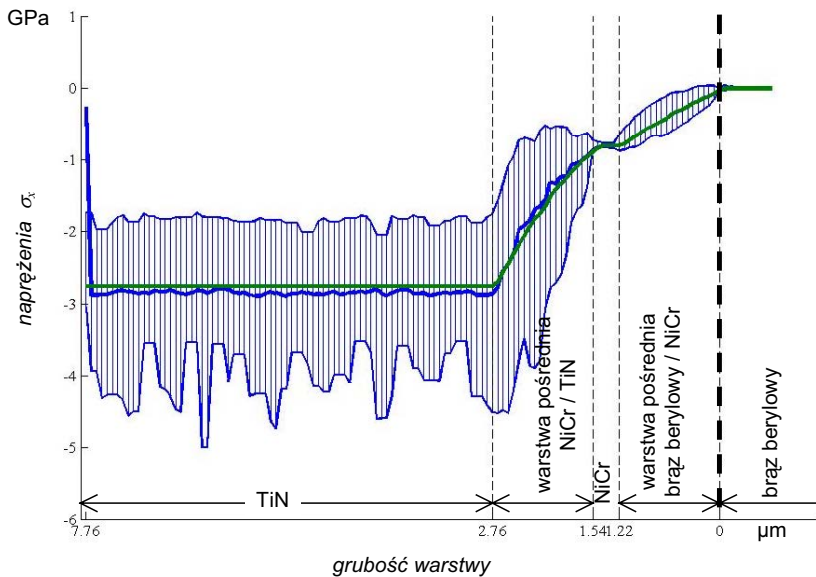


Rys. 4. Naprężenia resztkowe  $\sigma_x$  w warstwie TiN w funkcji porowatości: a) – z efektem u skupiania się i łączenia porów, b) – bez efektu skupiania się i łączenia porów

Fig. 4. Residual stresses  $\sigma_x$  in the TiN layer in function of porosity: a) – with clustering effect, b) – with no clustering effect

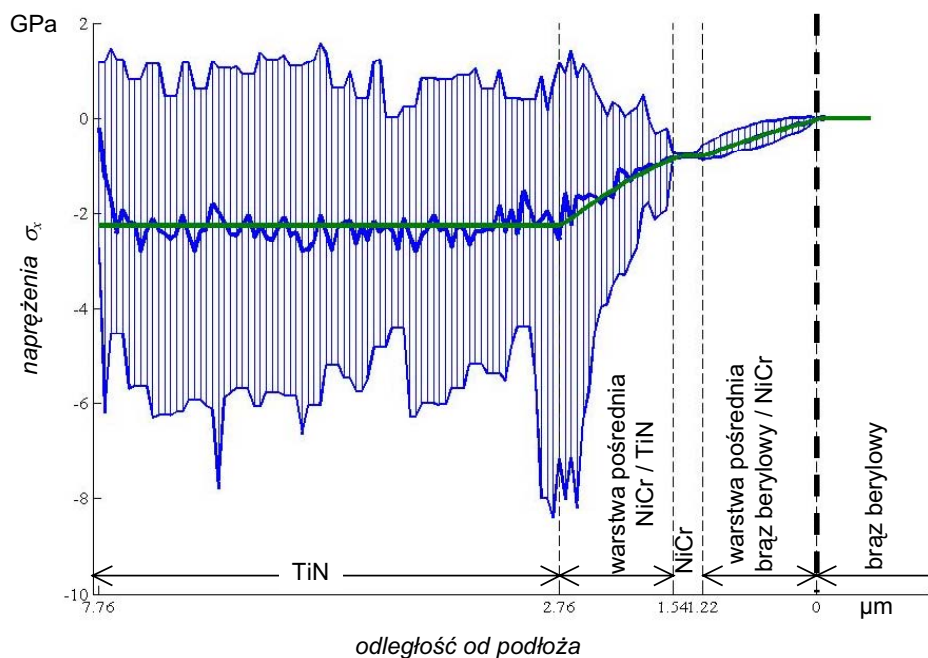
Wraz ze wzrostem porowatości obserwuje się przesunięcie wartości naprężeń resztkowych  $\sigma_x$  w warstwie powierzchniowej w kierunku rozciągania. Dla modeli z własnościami efektywnymi, które zostały wyznaczone z dopuszczeniem efektów skupiania się i łączenia porów, zakres przesunięcia jest większy i wyznaczony jest przez wartości: -3,0554 GPa i -2,2512 GPa, a dla modeli z wykluczeniem efektów skupiania się i łączenia porów: -3,0796 GPa i -2,7574 GPa - odpowiednio dla porowatości 5 i 20% (Rys. 4).

W kolejnych seriach obliczeń użyto modeli mikromechanicznych (wg Rys. 3 a i b).



Rys. 5. Przykład wyników obliczeń naprężeń resztkowych  $\sigma_x$  otrzymanych z modelu mikromechanicznego wg rysunku 3a – bez efektu skupiania się i łączenia porów

Fig. 5. Example of results of residual stresses  $\sigma_x$  calculations obtained from the micromechanical model as in the figure 3a – with no clustering effect



Rys. 6. Przykład wyników obliczeń naprężeń resztkowych  $\sigma_x$  otrzymanych z modelu mikromechanicznego wg rysunku 3b – z efektem skupiania się i łączenia porów – w funkcji odległości od podłoża

Fig. 6. Example of results of residual stresses  $\sigma_x$  calculations obtained from the micromechanical model as in the figure 3b – with clustering effect – in function of the distance from the substrate

Na rysunkach 5 i 6 przedstawiono obszary zmienności wartości naprężeń resztkowych  $\sigma_x$  (zakreskowane kolorem niebieskim). Porowatość powoduje silne oscylacje wartości naprężeń resztkowych  $\sigma_x$  wokół średniej wartości w funkcji odległości liczonej od powierzchni podłoża (Rys 5). Są one wzmacniane przez efekt skupiania się i łączenia porów (Rys. 6) do tego stopnia, że może następować lokalna zmiana znaków naprężeń, a efekt zmniejszenia średnich wartości naprężeń ściskających wraz ze wzrostem porowatości (por. Rys. 4) – staje się nieistotny w porównaniu ze wzrostem wartości ekstremalnych wartości naprężeń.

## 6. Podsumowanie

Badano wpływ porowatości na rozkłady naprężeń resztkowych w wybranej przykładowej warstwie powierzchniowej TiN na podłożu z brązu berylowego, z międzywarstwą NiCr. W badaniach uwzględniono dwa rodzaje porowatości: bardziej naturalnej, która wykazuje efekt skupiania się i łączenia porów w większe pustki oraz rozproszonej, która tego efektu nie wykazuje. Wykorzystano różne metody uwzględniania porowatości w modelu numerycznym.

Pierwsza, pośrednia, polegała na wprowadzeniu uśrednionych, efektywnych własności materiałów porowatych do modeli, które nie uwzględniały budowy mikrostrukturalnej warstwy wprost. Druga bazowała na modelach mikromechanicznych, w których w bezpośredni sposób modelowano efekty mikrostrukturalne: wzajemne przenikanie się materiałów w strefach przejściowych i porowatość obu rodzajów. Porównanie wyników wskazuje na przewagę modeli mikromechanicznych, zarówno pod względem jakościowym jak ilościowym. Istnieje potrzeba rozpoznania wpływu rozkładów kształtu i wielkości porów na efektywne wartości własności materiałowych.

## Literatura

- [1] Hirano, T., Teraki, J., Yamada, T., *On the design of functionally gradient materials*, Proc. 1<sup>st</sup> Int. Symp. on Functionally gradient Materials, ed. M. Yamanouchi, M. Koizumi, T. Hirai and I. Shiota, pp. 5-10, 1990.
- [2] Mori, T., Tanaka, K., *Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions*, Acta Metall. 21, pp. 571-574, 1973.
- [3] Tanaka, K., Tanaka, Y., Enomoto, K., Poterasu, V.F., Sugano, Y., *Design of thermoelastic materials using direct sensitivity and optimization methods. Reduction of thermal stresses in functionally gradient materials*, Comp. Meth. Appl. Mech. Engng, 106, pp. 271-284, 1993.
- [4] Tanaka, K., Tanaka, Y., Enomoto, K., Poterasu, V.F., Sugano, Y., *An improved solution to thermoelastic material design in functionally gradient materials: scheme to reduce thermal stress*, Comp. Meth. Appl. Mech. Engng, 109, pp. 377-389, 1993.
- [5] Hirano, T., Wakashima, K., *Mathematical modelling and design*, MRS Bull. Jan., 40-42, 1995.
- [6] Markworth, A.J., Saunders, J.H., *A model of structure optimization for a functionally graded material*, Mater. Lett., 22, pp. 103-107, 1995.
- [7] Markworth, A.J., Ramesh, K.S., Parks, W.P., *Review: modeling studies applied to functionally graded materials*, J. Mater. Sci., 30, pp. 2183-2193, 1995.
- [8] Williamson, R.L., Rabin, B.H., Drake, J.T., *Finite element analysis of thermal residual stresses at graded ceramic-metal interfaces. Part I. Model description and geometrical effects*, J. Appl. Phys. 74 (2), pp. 1311-1320, 1993.
- [9] Reiter, T., Dvorak, G. J., Tvergaard, V., *Micromechanical models for graded composite materials*, J. Mech. Phys. Solids, Vol. 45, No. 8, pp. 1281-1302, 1997.
- [10] Biner, S.B., *Thermo-elastic analysis of functionally graded materials using Voronoi elements*, Mat. Sci. Eng. A315, pp. 136-146, 2001.
- [11] Hasselman, D. P. H., *On the porosity dependence of the elastic moduli of polycrystalline refractory materials*, J. Am. Ceram. Soc., 45, 452-453, 1962.
- [12] Ondracek, G., *The basis of microstructure-property-correlations*, Proc. of the Colloquium Interfaces in Materials, KAW, pp.113-148, Brussels 1988.
- [13] Bull, S.J., Bhat, D.G., Staia, M.H., *Properties and performance of commercial TiCN coatings. Part 1: coating architecture and hardness modeling*, Surf. Coat. Techn., 163-164, pp. 499-506, 2003.
- [14] Kral, C., Lengauer, W., Rafaja, D., Ettmayer, P., *Critical review on the elastic properties of transition metal carbides, nitrides and carbonitrides*, Journal of Alloys and Compounds 265, pp. 215-233, 1998.