

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

**ANÁLISE NUMÉRICA DAS TENSÕES DESENVOLVIDAS EM SISTEMAS
REVESTIDOS COM FILMES FINOS SOB AÇÃO DE ESFORÇOS DE TRAÇÃO**

Cristiane Martins Angelo

São Paulo

2009

ESCOLA POLITÉCNICA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

**ANÁLISE NUMÉRICA DAS TENSÕES DESENVOLVIDAS EM SISTEMAS
REVESTIDOS COM FILMES FINOS SOB AÇÃO DE ESFORÇOS DE TRAÇÃO**

Trabalho de formatura apresentado à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo para
obtenção do título de Graduação em Engenharia

Cristiane Martins Angelo

Orientador: Prof. Dr. Roberto Martins de Souza

Área de Concentração:
Engenharia Mecânica

São Paulo
2009

FICHA CATALOGRÁFICA

Angelo, Cristiane Martins

**Análise numérica das tensões desenvolvidas em sistemas revestidos com filmes finos sob ação de esforços de tração / C.M. Angelo. – São Paulo, 2009.
46 p.**

Trabalho de Formatura - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecânica.

1. Método dos elementos finitos (Simulação) 2. Mecânica da fratura 3. Tensão dos materiais (Análise) I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecânica II. t.

*Para meus pais Antonio e Eli, para
minha irmã Isabela e para meu noivo Ives.*

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Roberto Martins de Souza, pela excelente orientação no decorrer desse trabalho.

A minha família, pelo apoio durante todo o período de graduação.

Aos engenheiros Newton Fukumasu e Carlos Eduardo Mady, pela ajuda prestada no desenvolvimento deste trabalho.

A todos os colegas, docentes e funcionários da Escola Politécnica.

RESUMO

Existem muitas técnicas para a caracterização das propriedades mecânicas de filmes finos e revestimentos. Entre essas técnicas, a realização de ensaios de tração em sistemas revestidos é capaz de fornecer não somente as propriedades do filme, mas também as da interface entre filme e substrato. Neste trabalho, análises bidimensionais por elementos finitos foram feitas para caracterizar a distribuição de tensões em sistemas revestidos. Tais sistemas foram submetidos a carregamentos trativos e a inclusão de duas, três e quatro trincas perpendiculares à interface filme/substrato. Os materiais usados foram definidos como elástico-linear para o filme e elástico perfeitamente plástico para o substrato. As análises compreenderam a variação da distância entre trincas. Foi estudado também um modelo analítico para o case de duas trincas, cujos resultados foram comparados aos do modelo numérico. Os resultados, que apresentaram boa correlação com os dados da literatura, demonstraram a existência de um valor de espaçamento entre trincas crítico, a partir do qual não há a formação de novas trincas entre as já existentes.

ABSTRACT

Many techniques exist to characterize the mechanical properties of thin films and coatings. Among these techniques, the conduction of tensile tests on coated specimens is able to provide not only the properties of the film, but also of the film/substrate interface. In this work, a two-dimensional Finite Element Modeling (FEM) analysis was conducted to analyze the stress distribution in coated systems under tensile load, with the presence of two, three and four cracks perpendicular to the film/substrate interface. The system was composed of an elastic thin film and of an elastic-plastic substrate and the analysis simulated systems varying the distance between the two cracks along the entire film thickness. An analytical model was also studied for the case with two cracks, and the results were compared with those of the numerical model. Results were analyzed in terms of the distribution of the normal stresses parallel to the loading direction, which confirmed the models available in the literature, including the identification of the sites prone for the occurrence of further film fracture.

Sumário

1. Introdução	12
2. Revisão bibliográfica	13
2.1 Deposição de filmes finos	13
2.2 Caracterização mecânica de sistemas revestidos	14
3. Materiais e métodos	23
3.1 Geometria	23
3.2 Material	25
3.3 Modelo das trincas	26
3.4 Simulação	26
4. Resultados	28
4.1 Modelo 2D de duas trincas	28
4.2 Modelo 2D de três trincas	32
4.3 Modelo 2D de quatro trincas	35
4.4 Tensão de cisalhamento na interface filme/substrato	38
4.5 Resultados do modelo analítico	41
5. Conclusões	43
6. Referências Bibliográficas	45

Lista de Figuras

Figura 1: Diagrama do processo sputtering [3].....	14
Figura 2: Esquema do ensaio de microindentação.....	14
Figura 3: Representação esquemática de ensaio de tração.	15
Figura 4: (a) Formação de trinca em um filme fino submetido à tensão de tração; (b) Deformação plástica do substrato no fim da trinca; (c) Desvio da trinca na interface; (d) Formação de trinca no substrato [6].	16
Figura 5: Evolução típica da densidade de trincas com a força longitudinal aplicada. A ocorrência de quatro estágios de dano é indicada [6].	17
Figura 6: Distribuição da tensão de cisalhamento na interface filme/substrato na região entre duas trincas. A distância entre trincas adjacentes é representada por d. A relação de equilíbrio entre as trações é mostrada no canto inferior direito. [7].....	18
Figura 7: Distribuição de tensões em filme solicitado por esforços de tração [8].....	18
Figura 8: Curva tensão-deformação obtida em um ensaio de tração. As micrografias correspondem à evolução de trincas com o aumento da tensão na amostra, formada por uma camada de Al e uma de Ti, depositadas sobre um substrato de Ti [9].....	19
Figura 9: Ensaio de tração em um sistema coberto por uma camada de tungstênio (W). A figura indica um estágio próximo ao ponto de saturação. (a) Camada trincada (b) Seção transversal do sistema fraturado: as trincas paralelas são perpendiculares à interface [10].	20
Figura 10: Geometria usada por Hsueh [16] para o desenvolvimento de seu modelo analítico. ..	21
Figura 11: Geometria do modelo 2D com duas trincas.	23
Figura 12: Geometria dos modelos 2D com três e quatro trincas.....	24
Figura 13: Comportamento de um material elasto-plástico perfeito.	25
Figura 14: Detalhe da malha na região próxima à trinca.....	25
Figura 15: Distribuição de tensões σ_{II} na região entre as trincas para a razão d/e igual a: (a) 0,5; (b) 1,0; (c) 2,0; (d) 3,0; (e) 4,0; (f) 5,0; (g) 10,0; (h) 20,0; (i) 40,0.....	28
Figura 16: Distribuição das tensões σ_{II} na superfície do filme para a região entre trincas.	30

Figura 17: Distribuição das tensões σ_{11} na superfície do filme para a região entre trincas de acordo com [10].	30
Figura 18: Gráfico dos valores máximos da tensão σ_{11} em função da razão d/e.....	30
Figura 19: Valores máximos da tensão σ_{11} em função da razão d/e de acordo com [10].....	30
Figura 20: Distribuição de tensões σ_{11} na região entre as trincas para a razão d/e de 3, 10 e 20, respectivamente.....	32
Figura 21: Detalhe da região próxima à trinca mais à esquerda para o caso em que d/e é igual a 10.....	34
Figura 22: Distribuição das tensões σ_{11} na superfície do filme para a região entre trincas.	34
Figura 23: Distribuição de tensões σ_{11} na região entre as trincas para a razão d/e de 3 e 10, respectivamente.....	36
Figura 24: Detalhe da região próxima à trinca mais à esquerda para o caso em que d/e é igual a 10.....	36
Figura 25: Distribuição das tensões σ_{11} na superfície do filme para a região entre trincas.	37
Figura 26: Distribuição das tensões σ_{12} na interface entre filme e substrato na região entre trincas para o modelo de duas trincas no caso em que d/e é igual a 20.....	39
Figura 27: Distribuição das tensões σ_{12} na interface entre filme e substrato na região entre as duas trincas da esquerda para o modelo de três trincas no caso em que d/e é igual a 20.	39
Figura 28: Distribuição das tensões σ_{12} na interface entre filme e substrato na região entre as duas trincas da esquerda para o modelo de quatro trincas no caso em que d/e é igual a 10.....	40
Figura 29: Distribuição da tensão de cisalhamento na interface entre filme e substrato na região entre duas trincas consecutivas de acordo com [7].	40
Figura 30: Distribuição de tensões trativas entre duas trincas de acordo com o modelo analítico de Hsueh.....	42
Figura 31: Tensão entre trincas resultante do modelo numérico.	43

Lista de Tabelas

Tabela 1: Valores dos parâmetros utilizados na análise com duas trincas.....	23
Tabela 2: Propriedades mecânicas dos materiais utilizados.	25
Tabela 3: Dados de entrada do modelo analítico	41

1. Introdução

Fenômenos como atrito, desgaste e lubrificação podem estar associados a grandes perdas econômicas, como o demonstrado por Zum Gahr [1].

A fim de estudar tais fenômenos, desenvolveu-se, dentro da engenharia, uma área chamada “engenharia de superfícies”, cujo objetivo é promover o aperfeiçoamento das propriedades superficiais. Entre as técnicas usadas para melhorar essas propriedades e, conseqüentemente, o desempenho de materiais sujeitos aos fenômenos tribológicos, tem-se a deposição de revestimentos, dentre os quais se destacam os filmes finos (filmes com dimensões da ordem de micrometros¹).

Neste trabalho, será feita uma análise da distribuição de tensões em sistemas filme/substrato submetidos a tensões de tração, com a presença de trincas que sejam no filme e perpendiculares à interface filme/substrato. Com esta análise, espera-se identificar as regiões com maior probabilidade de propagação de trincas já existentes ou de propagação de novas. Tal análise será feita por intermédio de simulações pelo método dos elementos finitos, utilizando-se o software ABAQUS®. Para as análises, o material do filme será considerado elástico e o do substrato, elástico perfeitamente plástico.

Neste texto, serão apresentados os resultados de simulações de um modelo 2D com a presença de duas, três e quatro trincas, onde a variável de estudo será o espaçamento entre estas, e também resultados provenientes de um modelo analítico com a presença de duas trincas.

¹ A ordem de grandeza da espessura foi adotada com base em inúmeros trabalhos da literatura, relacionados aos filmes finos. Entende-se que certos setores do conhecimento, principalmente da física, definem como filmes finos apenas aqueles que têm espessura da ordem de poucas camadas atômicas.

2. Revisão bibliográfica

2.1 Deposição de filmes finos

Os filmes finos são utilizados em diversas aplicações, como, por exemplo, em processos de manufatura de peças, como camada protetora de componentes, ou na obtenção de superfícies com determinadas propriedades ópticas ou magnéticas.

Os dois métodos mais usados na deposição de filmes finos são: a deposição física a vapor (Physical Vapor Deposition) e a deposição química a vapor (Chemical Vapor Deposition). O CVD ocorre por uma reação química entre gases (exemplo: hidrogênio, cloreto de titânio e metano) em atmosfera gasosa (exemplo: nitrogênio), para criar um recobrimento, geralmente em temperaturas elevadas [2].

O processo PVD consiste em vaporizar o material do recobrimento, ou um de seus elementos, e expor o componente a ser revestido a esse vapor em temperaturas relativamente baixas (150 a 450 °C). Dentre os tipos de PVD, pode-se citar o sputtering, que consiste na deposição de filmes finos pelo “arrancamento” atômico de átomos de um alvo pelo impacto de íons, como mostrado na Figura 1[3]. De modo controlado, são introduzidos gases, geralmente argônio, em uma câmara inicialmente sob vácuo. Forma-se então um plasma, que é o agente físico na produção dos íons energéticos em torno do alvo, feito de um dos elementos que se deseja depositar. O arrancamento de partículas do alvo ocorre quando os íons positivos são acelerados e bombardeiam o mesmo. Parte das partículas arrancadas vão recobrir o substrato [4].

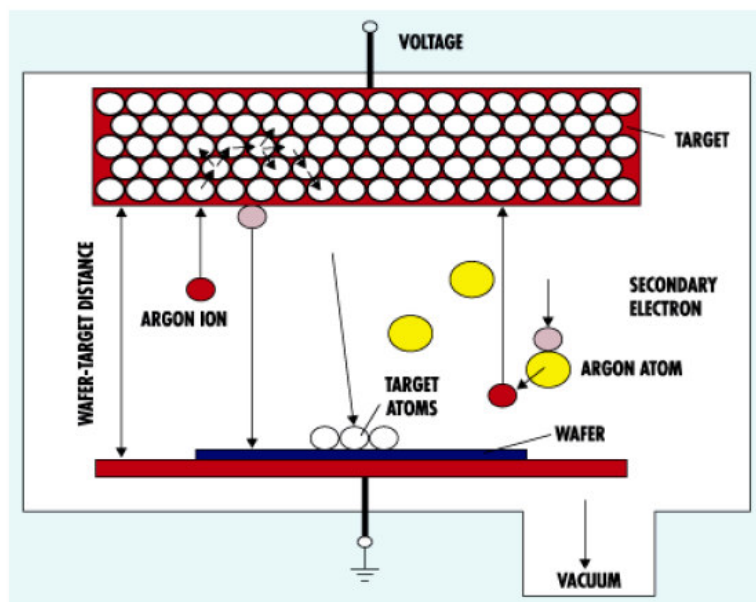


Figura 1: Diagrama do processo sputtering [3].

2.2 Caracterização mecânica de sistemas revestidos

Vários métodos têm sido desenvolvidos para determinar as propriedades mecânicas dos filmes finos, condição necessária na escolha de materiais para a fabricação de um determinado componente revestido. Dentre esses trabalhos, incluem-se os ensaios de indentação (Figura 2) e de tração (Figura 3).

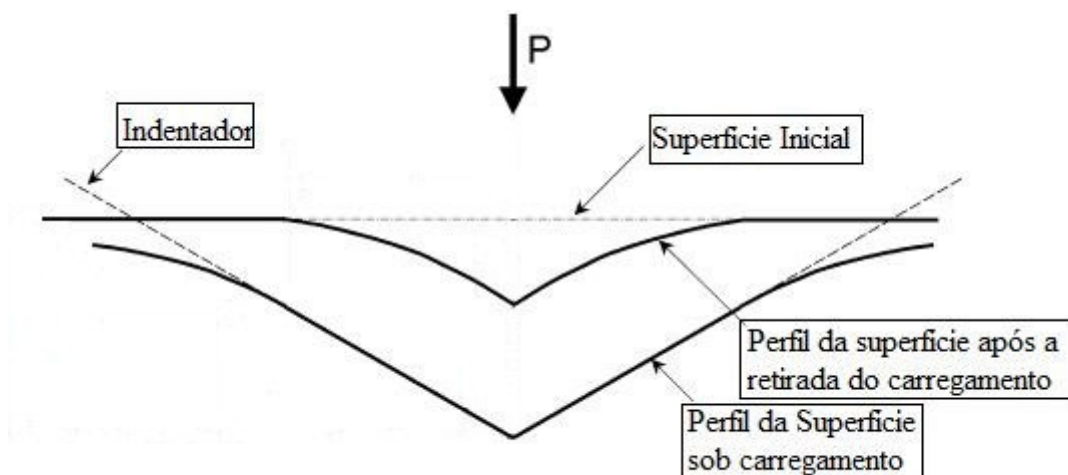


Figura 2: Esquema do ensaio de microindentação.

Na indentação, o indentador é pressionado sobre o filme, provocando deformação plástica e elástica no mesmo. A deformação elástica é recuperada com a remoção gradual da carga. Caso haja monitoramento de força e da penetração ao longo do ensaio, como no caso da indentação instrumentada (nanoindentação), é possível obter informações da dureza e das características elásticas e plásticas dos filmes finos [2].

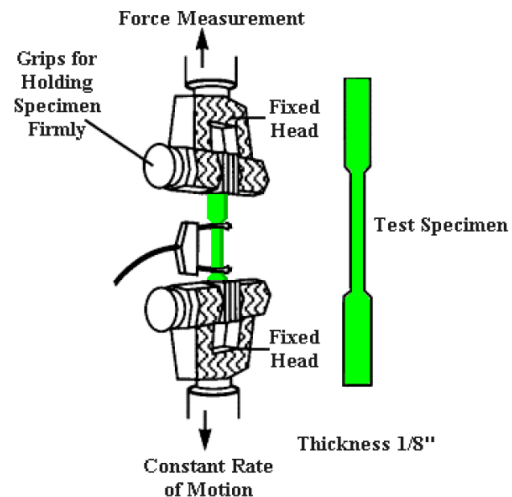


Figura 3: Representação esquemática de ensaio de tração [5].

No ensaio de tração, uma amostra é deformada, geralmente até a sua fratura, mediante uma carga de tração aplicada de maneira uniaxial e paralela ao eixo mais comprido de um corpo-de-prova [6].

Os tipos de falhas comumente observados quando sistemas revestidos são submetidos a esforços de tração estão representados na Figura 4 [6], onde se pode observar a formação de trincas transversais (perpendiculares à interface filme/substrato) e interfaciais (ao longo da interface).

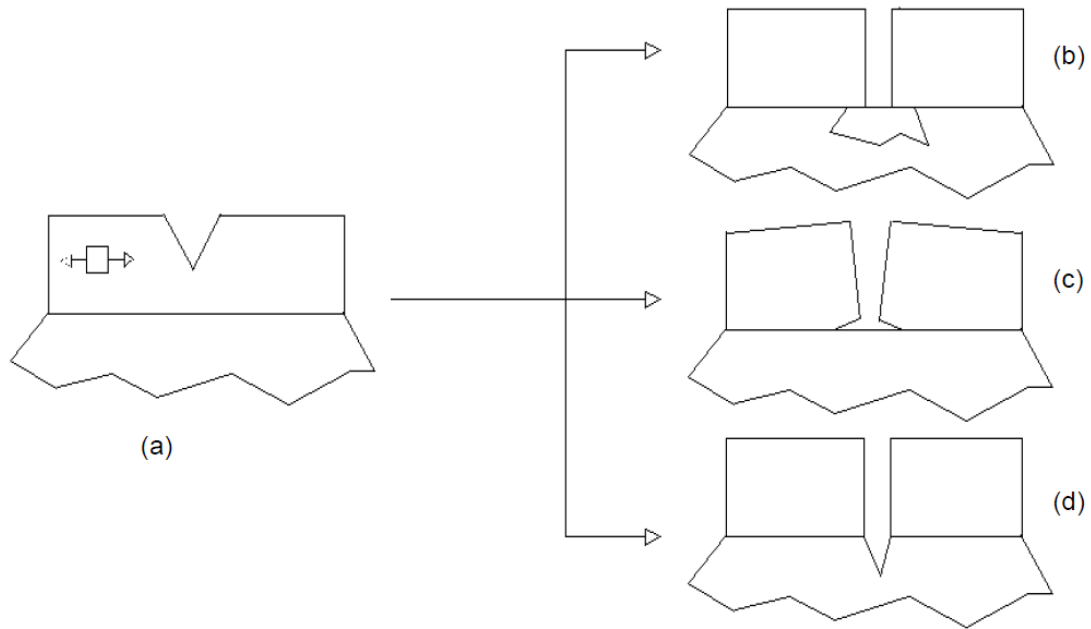


Figura 4: (a) Formação de trinca em um filme fino submetido à tensão de tração; (b) Deformação plástica do substrato no fim da trinca; (c) Desvio da trinca na interface; (d) Formação de trinca no substrato [6].

A Figura 5 [6] apresenta a evolução típica da densidade de trincas transversais com o aumento de deformação de um sistema filme/substrato.

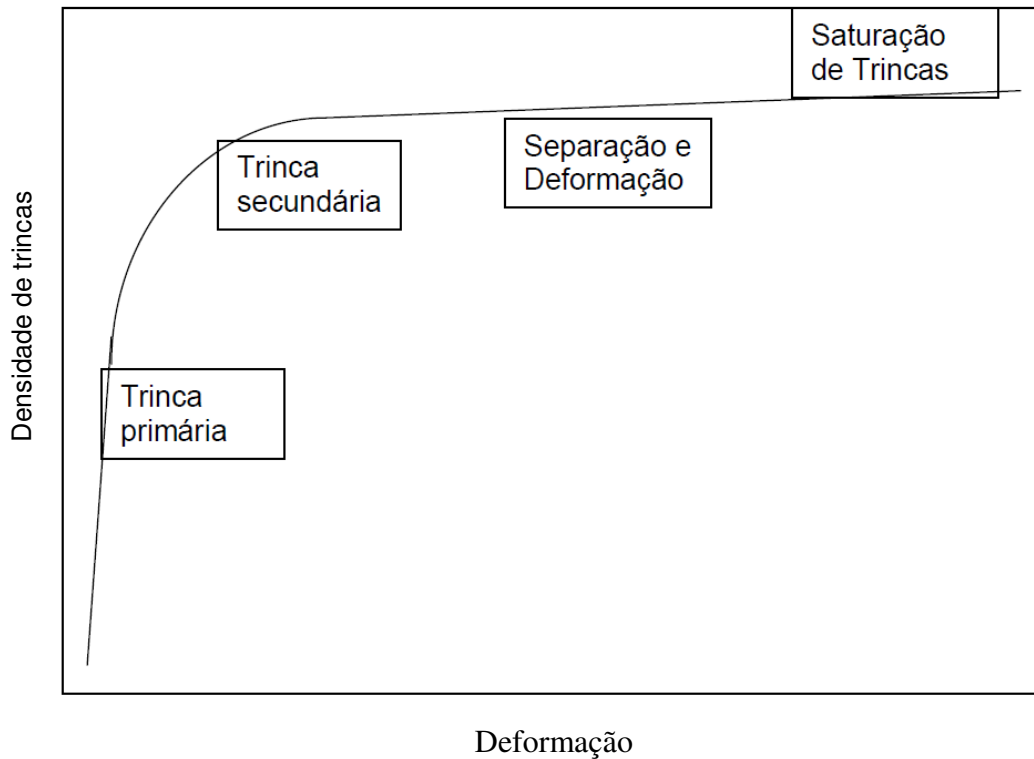


Figura 5: Evolução típica da densidade de trincas com a força longitudinal aplicada. A ocorrência de quatro estágios de dano é indicada [6].

Para valores baixos de deformação, formam-se trincas primárias, retas, regularmente espaçadas e, geralmente, paralelas. A presença de duas trincas, separadas por uma distância L uma da outra, impede que os esforços aplicados sobre o sistema transfiram-se diretamente para o filme, na região entre as duas trincas. Porém, nessa região ainda há esforços sobre o filme, pois as tensões de cisalhamento transferem tensões do substrato para o filme [6].

A distribuição das tensões de cisalhamento na interface na região próxima à superfície livre da trinca foi estudada por Yanaka et al [7] e pode ser vista na Figura 6 [7], onde τ é a tensão de cisalhamento, σ é a tensão normal na direção do carregamento e d é a distância entre duas trincas adjacentes. Nota-se que as tensões estão relacionadas pela condição de equilíbrio mostrada no canto inferior direito da figura.

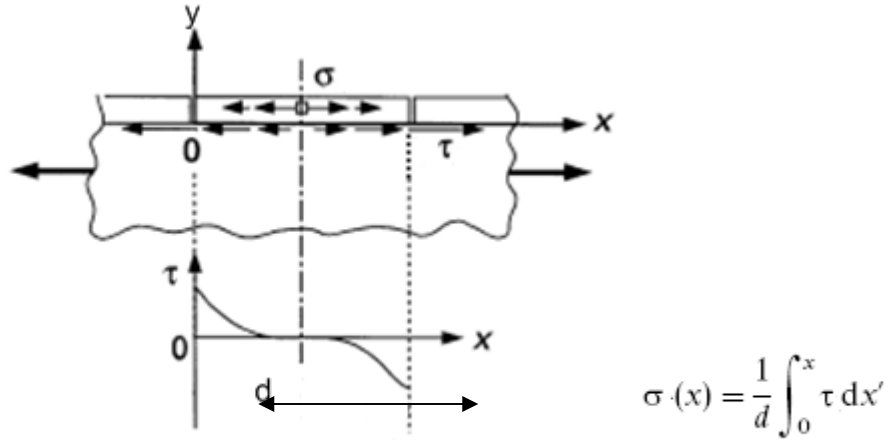


Figura 6: Distribuição da tensão de cisalhamento na interface filme/substrato na região entre duas trincas. A distância entre trincas adjacentes é representada por d . A relação de equilíbrio entre as trações é mostrada no canto inferior direito. [7].

A distribuição de tensões trativas sobre o filme em sistemas com trincas transversais está representada na Figura 7 [8].

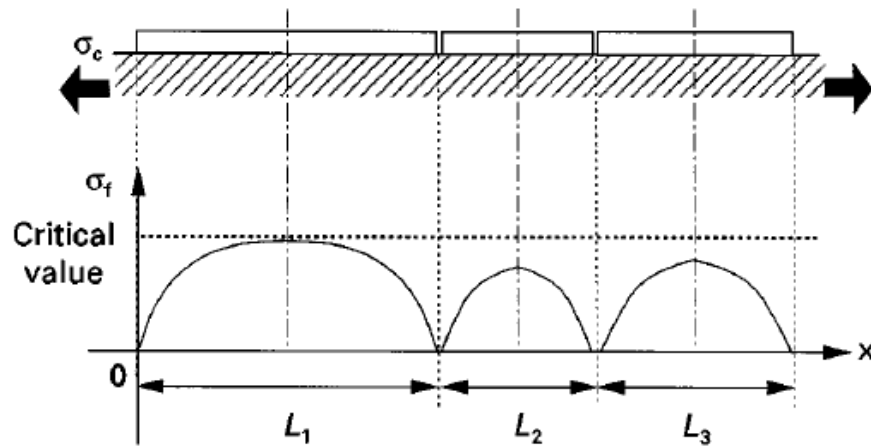


Figura 7: Distribuição de tensões em filme solicitado por esforços de tração [8].

Como esquematizado na Figura 7, com o aumento dos esforços de tração, o trecho do filme que tiver o maior espaçamento entre trincas fica submetido a maiores valores de tensões trativas.

O máximo ocorre no ponto médio entre as duas trincas, onde aparecem novas trincas, as secundárias, reduzindo o valor médio de espaçamento entre duas trincas no filme (Figura 5).

Se os esforços de tração forem aumentados ainda mais, podem ocorrer dois fenômenos. Se houver boa adesão entre o filme e o substrato, o espaçamento entre trincas diminui gradativamente, até as tensões transmitidas ao filme pelo substrato não serem mais suficientes para a propagação de novas trincas (saturação do espaçamento entre trincas). Se a adesão for ruim, o aumento de carga leva ao destacamento do filme.

Na Figura 8 [9] e na Figura 9 [10], podem ser vistas algumas micrografias da formação de trincas em diferentes materiais.

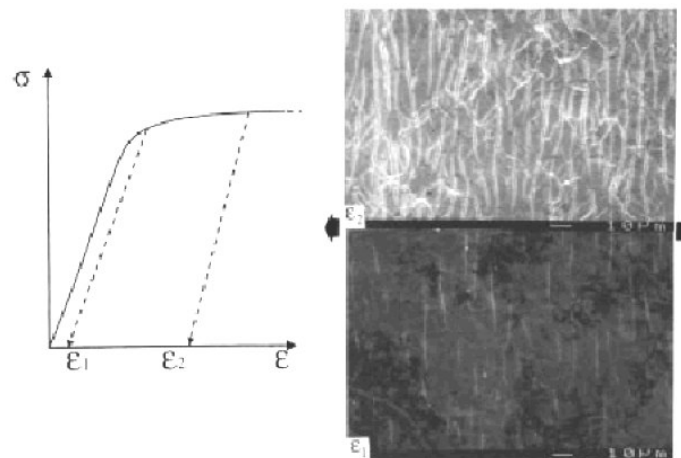


Figura 8: Curva tensão-deformação obtida em um ensaio de tração. As micrografias correspondem à evolução de trincas com o aumento da tensão na amostra, formada por uma camada de Al e uma de Ti, depositadas sobre um substrato de Ti [9].

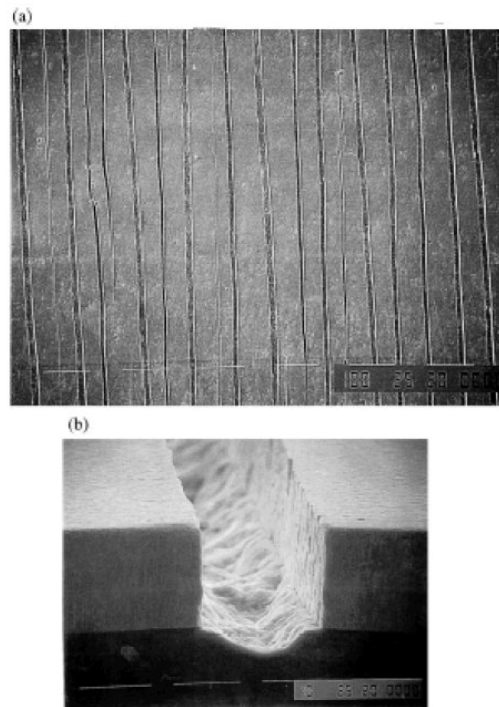


Figura 9: Ensaio de tração em um sistema coberto por uma camada de tungstênio (W). A figura indica um estágio próximo ao ponto de saturação. (a) Camada trincada (b) Seção transversal do sistema fraturado: as trincas paralelas são perpendiculares à interface [10].

De acordo com Latella et. al. [11], Harry et. al. [10] e Hu e Evans [12], existe um valor de espaçamento entre trincas no qual ocorre a saturação da densidade de trincas, de modo a não se formarem novas trincas entre as já existentes. Esse espaçamento crítico pode ser estimado pela Equação 1, descrita por Hu e Evans [12], em que σ_c é a tensão mínima para que ocorra fratura do filme, dada pela Equação 2, descrita por Latella et. al. [11].

$$\sqrt{3} < \frac{\sigma_y d}{\sigma_c e} < 2\sqrt{3}$$

Equação 1

$$\frac{k_{Ic}}{\sigma_c} = \left[\sqrt{3} \frac{\sigma_c}{\sigma_y} e + \pi e F \left(\frac{E_{film}}{E_{substrate}} \right) \right]^{\frac{1}{2}}$$

Equação 2

Na Equação 2, $F\left(\frac{E_{film}}{E_{substrate}}\right)$ é uma função dependente da razão entre os módulos de elasticidade do filme e do substrato.

São vários os trabalhos da literatura que relatam estudos sobre sistemas filme/substrato submetidos à tração.

Hu e Evans [12] analisaram a formação de trincas e a delaminação de filmes finos de Cr depositados em substratos de Al e aço inoxidável; Delannay e Warren [13] estudaram a interação entre trincas paralelas; Hutchinson e Suo [14] e Ye et al [15] também estudaram a formação de trincas em sistemas filme/substrato.

Hsueh e Yanaka [16] desenvolveram um modelo analítico para o cálculo da distribuição de tensões trativas entre duas trincas presentes em um filme fino recobrindo um substrato. A geometria estudada por eles está representada na Figura 10.

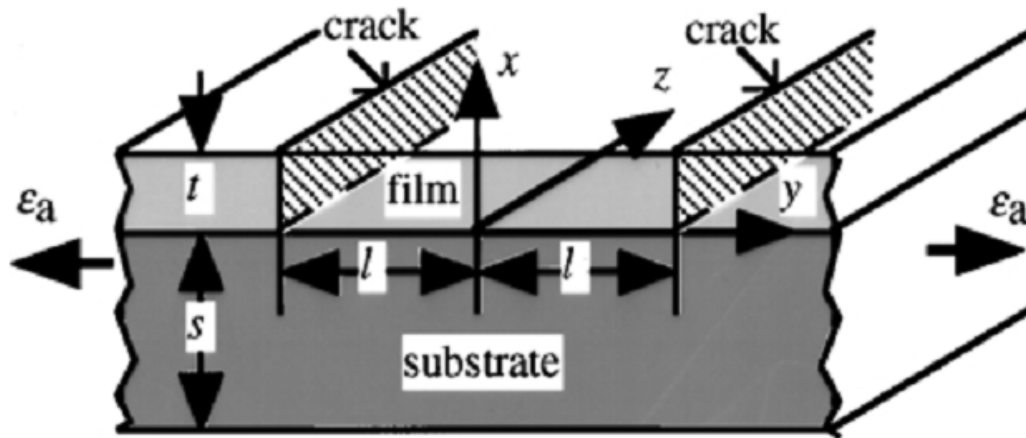


Figura 10: Geometria usada por Hsueh [16] para o desenvolvimento de seu modelo analítico.

Para tal desenvolvimento, foram consideradas as seguintes hipóteses simplificadoras:

- Não há variação de tensões na direção z .
- Ignora-se a variação de σ_y com a espessura.
- A variação de σ_y é uma função da coordenada y , ou seja: $\frac{\partial \sigma_y}{\partial y} = f(y)$.
- A tensão de cisalhamento (τ) varia linearmente com x , sendo igual a 0 em $x = t$.

Dessa forma, a equação resultante para a distribuição média de tensões de tração no filme é:

$$\sigma_f = \frac{E_f}{1 - \nu_f} \cdot \left[\frac{(1 - \nu_f \nu_s) \varepsilon_a}{1 + \nu_f} - \frac{\Delta \varepsilon}{1 + \frac{t(1 - \nu_f \nu_s) E_f}{s(1 - \nu_f^2) E_s}} \right] \cdot \left[1 - \frac{\cosh(\alpha y)}{\cosh(\alpha l)} \right]$$

Equação 3

Onde:

σ_f é a tensão trativa no filme;

E_f e E_s são, respectivamente, os módulos de elasticidade do filme e do substrato;

ν_f e ν_s são, respectivamente, os coeficientes de Poisson do filme e do substrato;

ε_a é a deformação aplicada ao sistema filme/substrato;

$\Delta \varepsilon$ é a deformação devida às tensões residuais no sistema;

t é a espessura do filme;

s é a espessura do substrato

l é o espaçamento entre trincas e

$$\alpha = \left[\frac{3}{2st(1 + \nu_s)} \left(\frac{t}{s} + \frac{(1 - \nu_f^2) E_s}{(1 - \nu_f \nu_s) E_f} \right) \right]^{1/2}$$

3. Materiais e métodos

3.1 Geometria

A geometria do modelo 2D com duas trincas estudada neste trabalho está apresentada na Figura 11. As dimensões principais são a espessura do filme (e), a altura total (h), o comprimento (L) e a distância entre trincas perpendiculares ao carregamento (d). A Tabela 1 apresenta os valores utilizados nas análises para esses parâmetros. O comprimento das trincas foi definido como a espessura do filme.

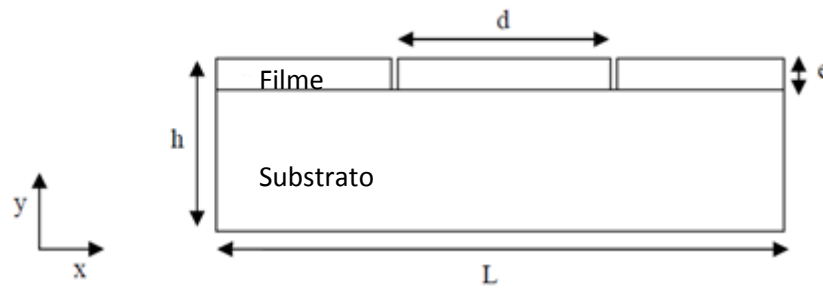


Figura 11: Geometria do modelo 2D com duas trincas.

Tabela 1: Valores dos parâmetros utilizados na análise com duas trincas.

Parâmetro/Caso	1	2	3	4	5	6	7	8	9
d/e	0,5	1	2	3	4	5	10	20	40
E	0,0046 mm								
H	0,1 mm								
L	0,38 mm								

Para os modelos com três e quatro trincas as geometrias são apresentadas na Figura 12.

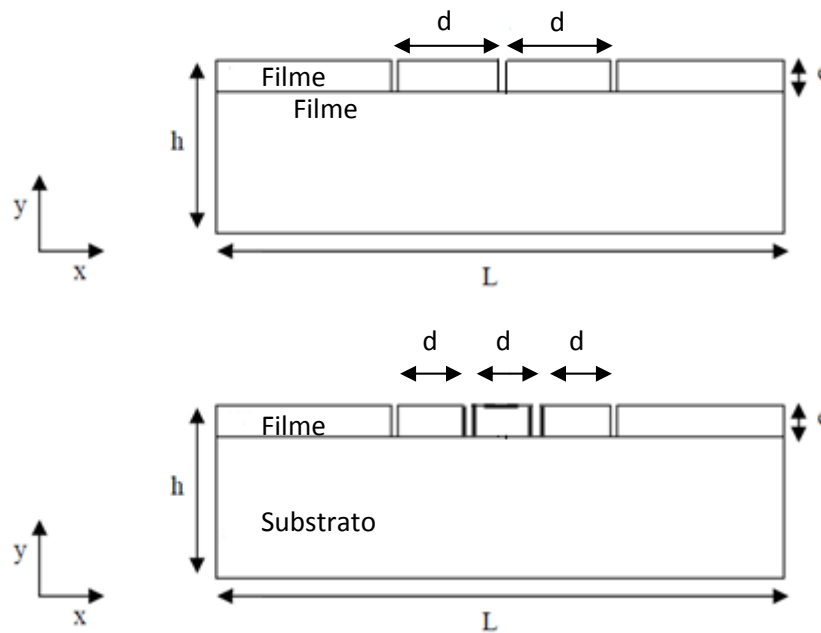


Figura 12: Geometria dos modelos 2D com três e quatro trincas.

Para o modelo com três trincas foram feitas análises dos casos 4, 7 e 8 da Tabela 1, com relações d/e de 3, 10 e 20, respectivamente. Já para o modelo com quatro trincas, foram analisados os casos 4 (d/e igual a 3) e 7 (d/e igual a 10), já que, para o caso 8, em que d/e é igual a 20, as trincas exteriores ficariam muito próximas às extremidades do modelo filme/substrato, o que originaria efeitos de borda no resultado. Os valores de espessura do filme (e), altura total (h) e comprimento (L) foram os mesmos do caso com duas trincas.

3.2 Material

As propriedades dos materiais empregados na simulações foram definidas com base em valores da literatura, como os apresentados por Souza [17]. As propriedades mecânicas do substrato correspondem à liga de alumínio AA 6061-T6 e as do filme são típicas de materiais cerâmicos aplicados como revestimentos. Essas propriedades estão apresentadas na Tabela 2. O substrato foi considerado elástico-perfeitamente plástico, como mostrado na Figura 13, e o filme, elástico-linear.

Tabela 2: Propriedades mecânicas dos materiais utilizados.

Propriedade	Substrato	Filme
Módulo de Elasticidade (E) [GPa]	68,9	280,0
Coefficiente de Poisson (ν)	0,3	0,3
Tensão de Escoamento (σ_y) [MPa]	295,0	-

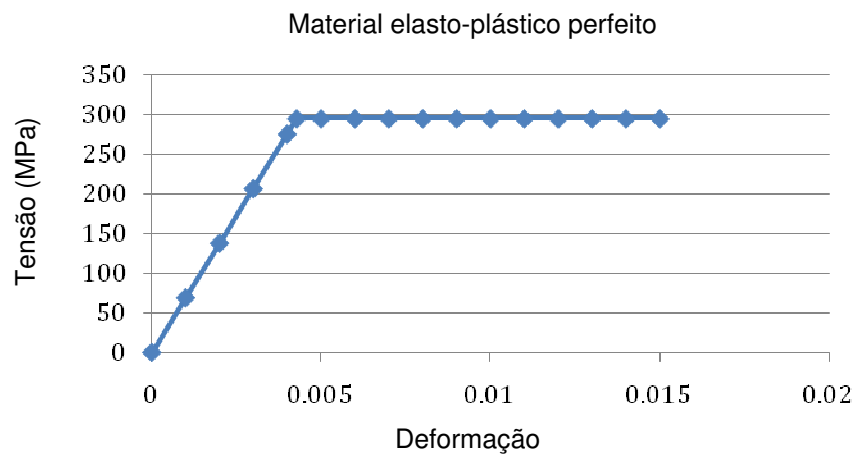


Figura 13: Comportamento de um material elasto-plástico perfeito.

3.3 Modelo das trincas

As trincas foram modeladas como superfícies livres, de forma a não considerar propriedades de nucleação e propagação das mesmas. Considerou-se como restrição à abertura da trinca que sua ponta (“crack tip”) esteja em um único nó da malha, localizado ao longo da interface filme/substrato.

3.4 Simulação

As simulações foram realizadas utilizando o software de elementos finitos ABAQUS®, no qual a geometria estudada foi discretizada, em média, por 400.000 elementos retangulares, dos quais cerca de 70% foram concentrados ao redor das trincas, por se tratar de uma região de concentração de tensões. A Figura 14 mostra, em detalhe, a malha utilizada na região próxima à trinca. Foi utilizado o estado plano de deformações para melhor representar as condições devido ao uso de uma geometria bidimensional.

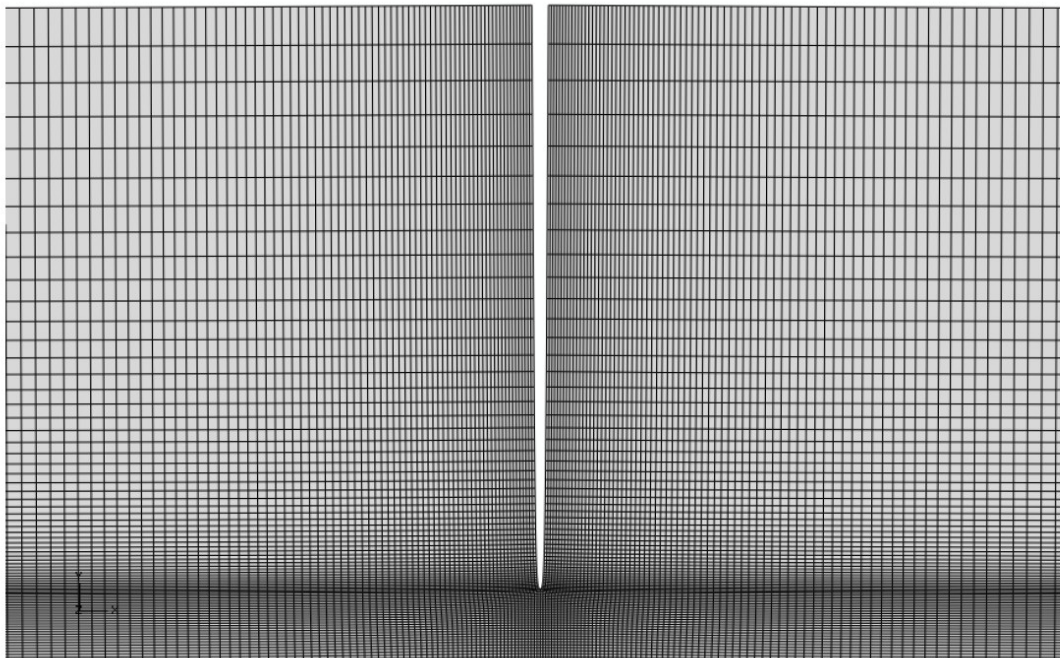


Figura 14: Detalhe da malha na região próxima à trinca.

As condições de contorno empregadas foram:

- Deslocamento efetivo de $1\mu\text{m}$ aplicado nas faces laterais do sistema filme/substrato, a fim de deformá-lo uniaxial e horizontalmente;
- Restrição do movimento vertical e de rotação na base do substrato, para que só haja movimento horizontal.

4. Resultados

Primeiramente, serão mostrados os resultados para o modelo 2D de duas trincas e, a seguir, para os modelos 2D de três e quatro trincas.

4.1 Modelo 2D de duas trincas

Na Figura 15 é apresentada a distribuição de tensões horizontais (σ_{II}) para os casos analisados. De acordo com essa figura, verificou-se que a superfície do filme na região entre trincas apresenta tensões trativas para espaçamentos a partir de valores entre 4 e 5 vezes a espessura do filme. Para valores abaixo desses, as tensões são compressivas.

Na Figura 16 é apresentada a distribuição dessas tensões na superfície do filme na região entre as trincas. Essa figura possui formato semelhante ao apresentado por Harry et. al. [10] para valores maiores que d/e igual a 10, como mostrado na Figura 17 [10]. Entretanto, deve-se observar que os resultados normalmente apresentados na literatura referem-se às tensões no filme, mas imediatamente acima da interface filme/substrato e não na superfície do filme, como na Figura 16. Provavelmente, esta diferença de local de análise explica as tensões compressivas nas regiões próximas às superfícies da trinca (Figura 16), que não são observadas na literatura. Ainda da Figura 16, notou-se que o máximo valor de compressão alcançado na superfície do filme ocorre para a razão d/e igual a 2. Abaixo desse valor, a curva da tensão σ_{II} tende a zero devido à proximidade entre as superfícies descarregadas das trincas.

Na Figura 18 são apresentados os valores máximos da tensão σ_{II} em função da razão d/e , válida apenas para os valores positivos. Nota-se, analisando a Figura 18 e a Figura 19 [10], que o formato da curva encontrada neste trabalho é compatível com o presente na literatura.

Pela Figura 18, verificou-se que para valores da razão d/e acima de 10, a curva das máximas tensões σ_{II} tende assintoticamente a um valor máximo, o que implica na nucleação de novas trincas. Para valores abaixo deste, notou-se que a curva apresenta rápida queda das tensões σ_{II} , de forma que não há formação de novas trincas.

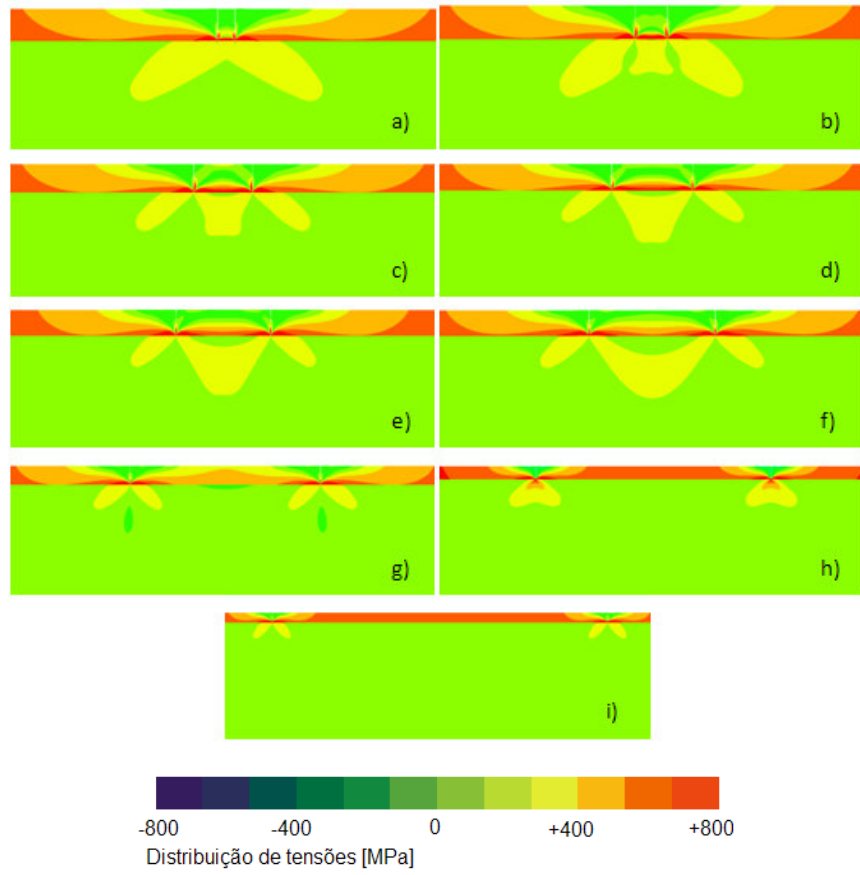


Figura 15: Distribuição de tensões σ_{11} na região entre as trincas para a razão d/e igual a: (a) 0,5; (b) 1,0; (c) 2,0; (d) 3,0; (e) 4,0; (f) 5,0; (g) 10,0; (h) 20,0; (i) 40,0.

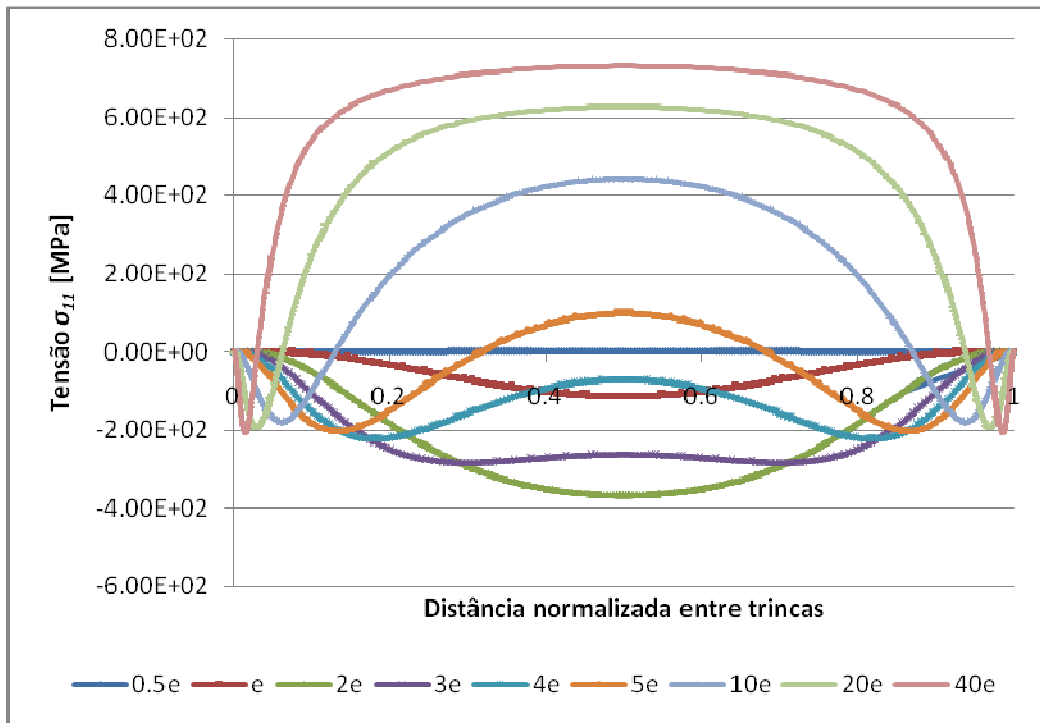


Figura 16: Distribuição das tensões σ_{II} na superfície do filme para a região entre trincas.

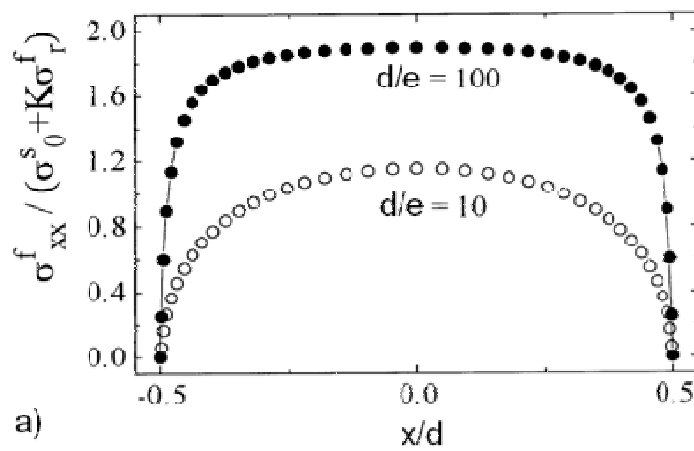


Figura 17: Distribuição das tensões σ_{II} na superfície do filme para a região entre trincas de acordo com [10].

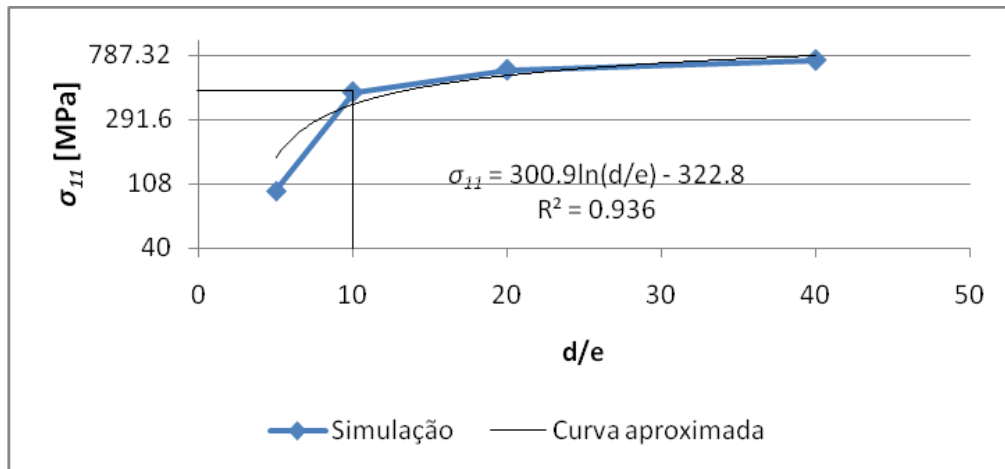


Figura 18: Gráfico dos valores máximos da tensão σ_{11} em função da razão d/e .

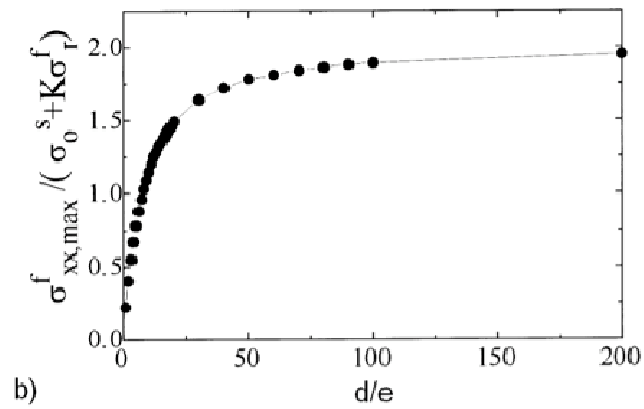


Figura 19: Valores máximos da tensão σ_{11} em função da razão d/e de acordo com [10].

4.2 Modelo 2D de três trincas

Na Figura 20 é apresentada a distribuição de tensões horizontais (σ_{11}) para o modelo com três trincas, para os espaçamentos entre trincas de 3, 10 e 20 vezes a espessura do filme. É possível verificar que, para espaçamentos entre trincas de 10 e 20 vezes a espessura do filme, a superfície do filme na região entre trincas apresenta tensões trativas. Já para o espaçamento entre trincas de 3 vezes a espessura do filme, as tensões são compressivas. Esses resultados estão de acordo com os apresentados na Figura 15.

Ainda da Figura 20, para os casos onde d/e é igual a 10 e 20, é possível verificar que a distribuição de tensões nas regiões próximas às duas trincas exteriores não é simétrica como a distribuição existente na região próxima à trinca central. Tal fato pode ser melhor observado na Figura 21, que mostra em detalhe a região da trinca mais à esquerda do caso em que d/e é igual a 10. Esse fenômeno explica-se pelo fato da tensão ser maior nas regiões próximas às extremidades do sistema filme/substrato, já que a existência de uma trinca entre as duas exteriores faz o nível de tensão ser menor entre tais trincas.

Na Figura 22 é apresentada a distribuição das tensões trativas na superfície do filme na região entre as trincas. Esse gráfico está de acordo com a literatura e também com a tendência demonstrada na Figura 16 (para o caso de duas trincas), sendo que o valor máximo de tensão encontra-se entre duas trincas consecutivas. Novamente, vale ressaltar que os resultados normalmente apresentados na literatura referem-se às tensões no filme, mas imediatamente acima da interface filme/substrato e não na superfície do filme, como na Figura 20, o que, por hipótese, explica as tensões compressivas nas regiões próximas às superfícies da trinca (Figura 22), que não são observadas na literatura. Observando-se a Figura 22 nota-se que para a razão d/e igual a 3, as tensões entre trincas sempre são compressivas, não havendo probabilidade do surgimento de novas trincas. Já para as razões d/e iguais a 10 e 20, as tensões entre trincas são trativas (exceto pela compressão próxima da superfície da trinca, já explicada anteriormente), o que indica a possibilidade de surgimento de novas trincas.

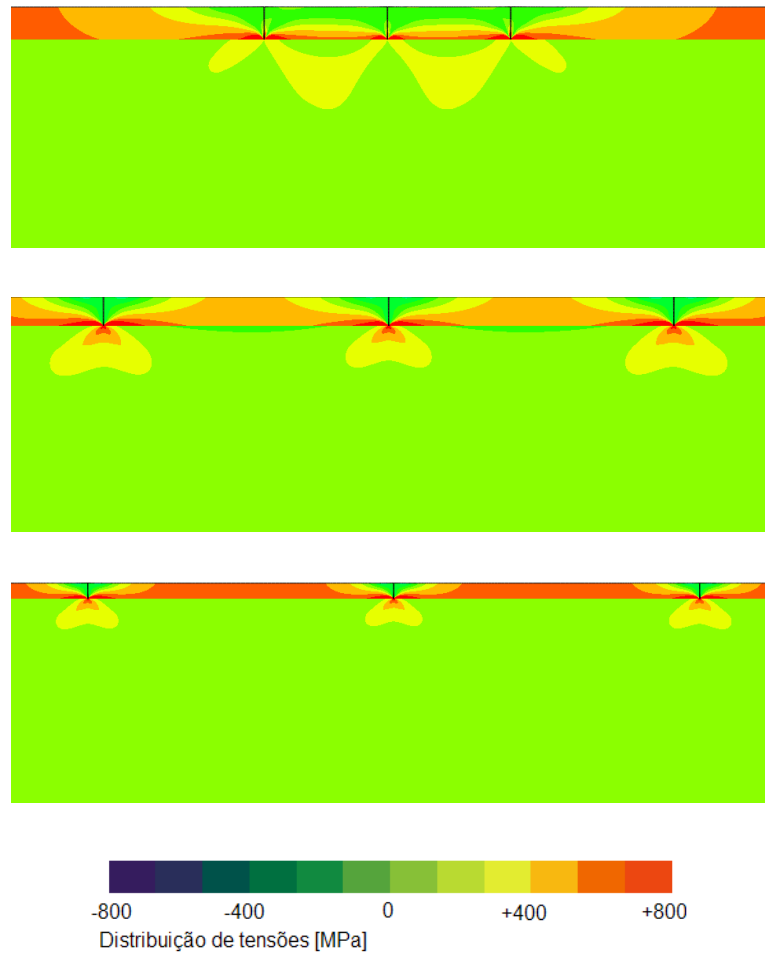


Figura 20: Distribuição de tensões σ_{II} na região entre as trincas para a razão d/e de 3, 10 e 20, respectivamente.

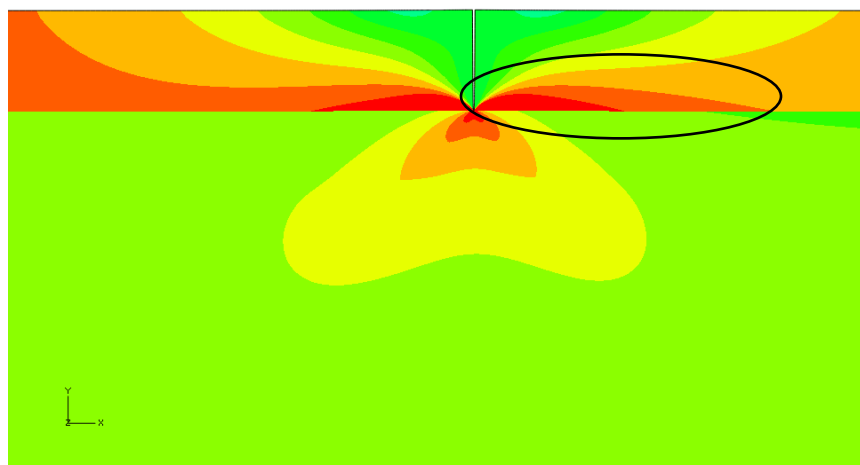


Figura 21: Detalhe da região próxima à trinca mais à esquerda para o caso em que d/e é igual a 10.

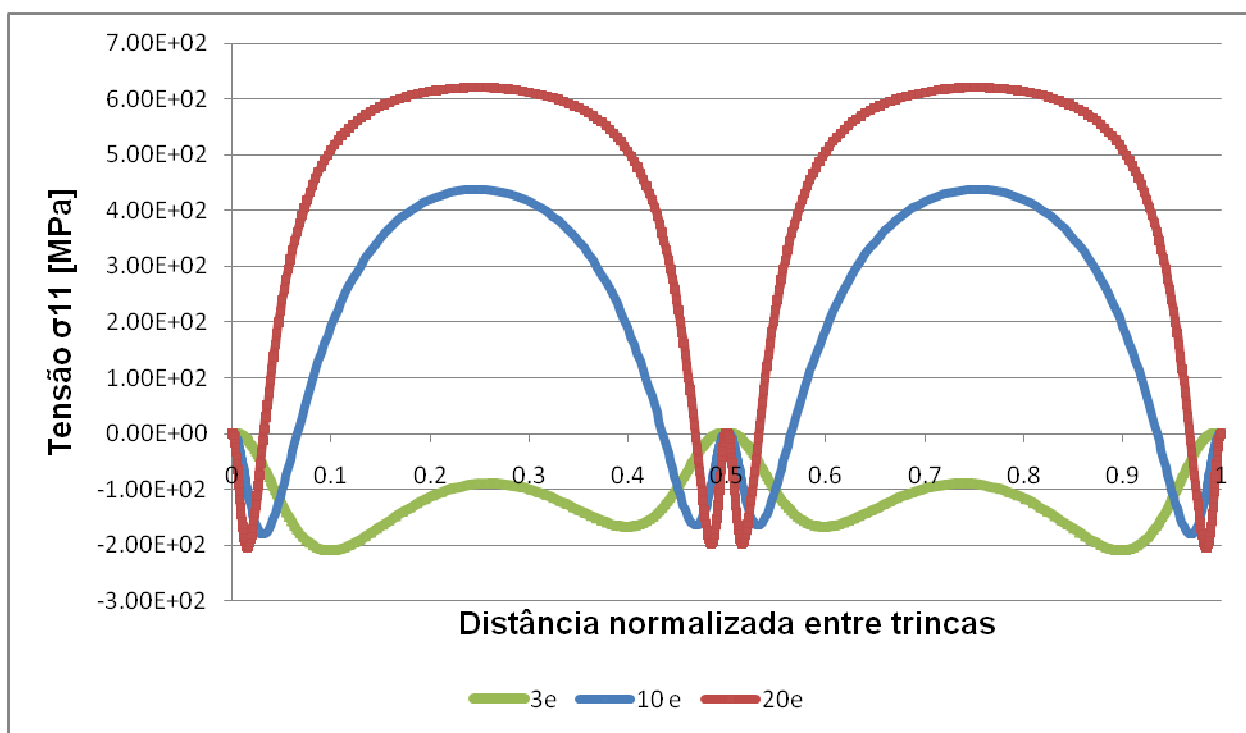


Figura 22: Distribuição das tensões σ_{11} na superfície do filme para a região entre trincas.

4.3 Modelo 2D de quatro trincas

Neste caso, não foi feita a análise para o caso de espaçamento igual a 20 vezes a espessura do filme, pois, para tal espaçamento, as trincas exteriores ficariam muito próximas das extremidades do sistema filme/substrato, o que geraria efeitos de borda que prejudicariam os resultados.

A Figura 23 apresenta a distribuição de tensões horizontais (σ_{11}) para o modelo com quatro trincas, para os espaçamentos entre trincas de 3 e 10 vezes a espessura do filme. Assim como nos modelos de duas e três trincas, para o espaçamento entre trincas de 10 vezes a espessura do filme a superfície do filme na região entre trincas apresenta tensões trativas, enquanto que o espaçamento entre trincas de 3 vezes a espessura do filme, as tensões são compressivas.

Na Figura 23, também é possível observar que a distribuição de tensões nas regiões próximas às duas trincas exteriores não é simétrica, enquanto a simetria ocorre nas regiões próximas às duas trincas centrais, como ocorria para o modelo de três trincas. Tal assimetria pode ser melhor observada na Figura 24, que mostra em detalhe a região da trinca mais à esquerda para o caso em que d/e é igual a 10. Assim como ocorre para o modelo com três trincas, tal fenômeno explica-se pelo fato da tensão ser maior nas regiões próximas às extremidades do sistema filme/substrato, já que a existência de trincas entre as duas exteriores faz o nível de tensão ser menor entre estas últimas.

A Figura 25 apresenta a distribuição da tensão trativa na superfície do filme na região entre as trincas. Esse gráfico está de acordo com a literatura e também com a tendência demonstrada na Figura 16 (para o caso de duas trincas) e na Figura 22 (para o caso de três trincas), sendo que o valor máximo de tensão encontra-se no ponto médio entre duas trincas consecutivas. Mais uma vez vale lembrar que os resultados normalmente apresentados na literatura referem-se às tensões no filme, mas imediatamente acima da interface filme/substrato e não na superfície do filme, como na Figura 23, o que, por hipótese, explica as tensões compressivas nas regiões próximas às superfícies da trinca (Figura 25), que não são observadas na literatura.

Pela Figura 25 vê-se que para a razão d/e igual a 3, as tensões entre trincas sempre são compressivas, não havendo probabilidade do surgimento de novas trincas. Já para a razão d/e igual a 10, as tensões entre trincas são trativas (exceto pela compressão próxima da superfície da trinca), o que indica a possibilidade de surgimento de novas trincas.

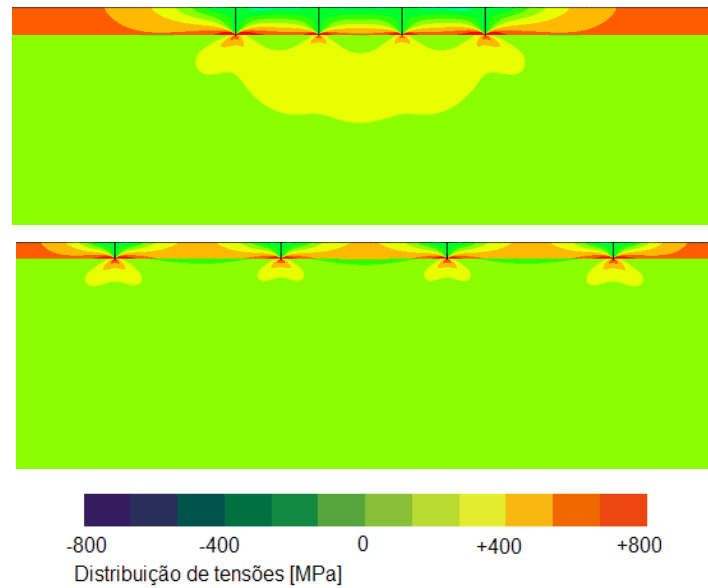


Figura 23: Distribuição de tensões σ_{II} na região entre as trincas para a razão d/e de 3 e 10, respectivamente.

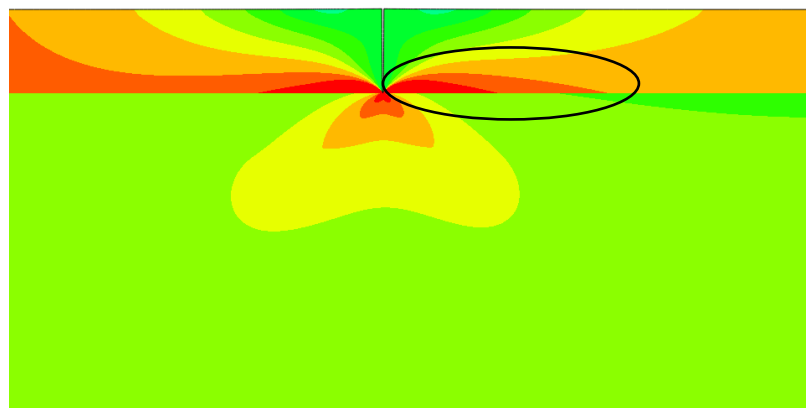


Figura 24: Detalhe da região próxima à trinca mais à esquerda para o caso em que d/e é igual a 10.

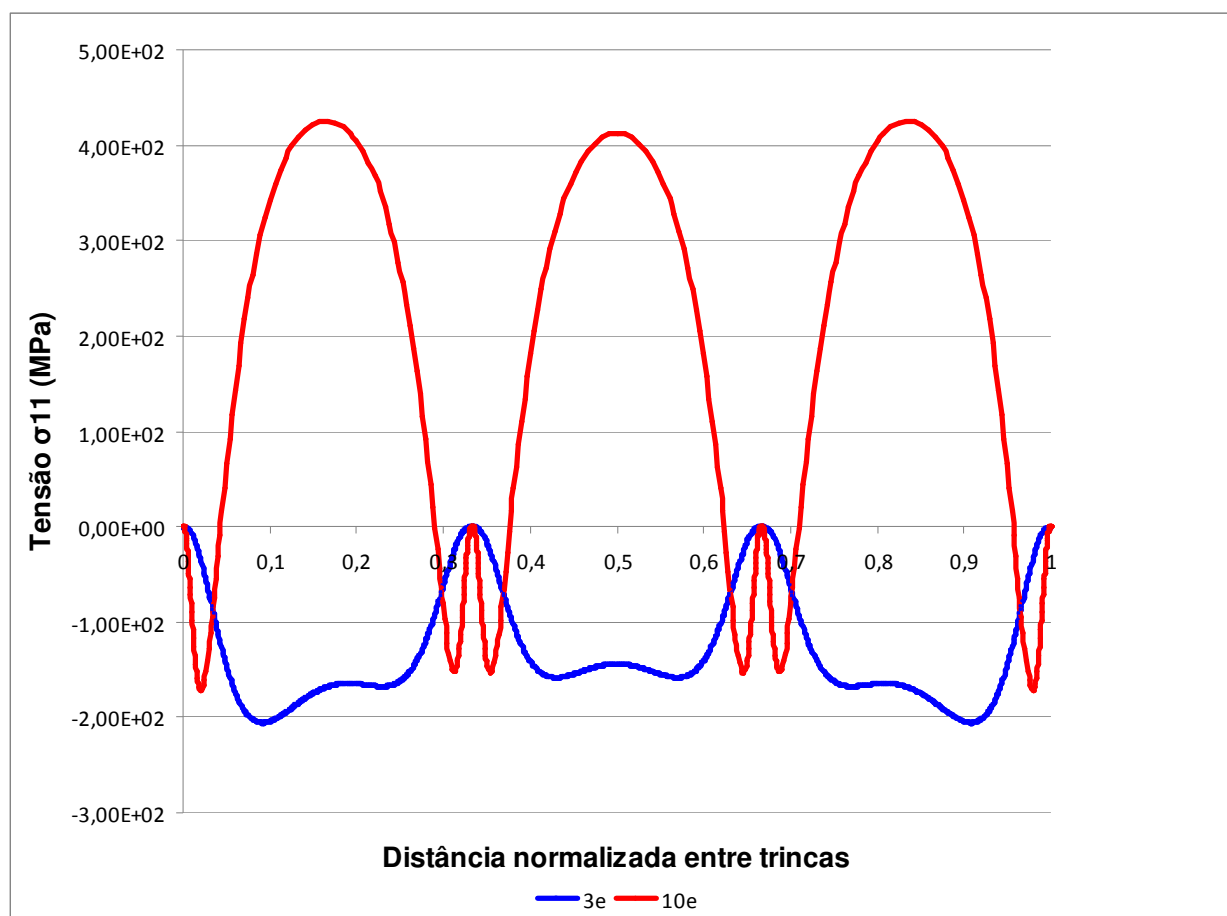


Figura 25: Distribuição das tensões σ_{11} na superfície do filme para a região entre trincas.

4.4 Tensão de cisalhamento na interface filme/substrato

A distribuição da tensão de cisalhamento na interface filme/substrato na região entre duas trincas adjacentes é mostrada nas Figuras 26, 27 e 28 para os casos com duas trincas e d/e igual a 20, três trincas e d/e igual a 20 e quatro trincas e d/e igual a 10, respectivamente. Os pontos onde x é igual a zero e x é igual ao espaçamento entre trincas são pontos de singularidade, por isso não foram consideradas as regiões ao seu redor para a plotagem dos gráficos. Pelas Figuras, vê-se que a tensão de cisalhamento tende a seu valor máximo em x igual a zero e tende a seu valor mínimo para x igual ao espaçamento entre trincas, sendo que tal tração é nula no ponto médio entre as duas trincas. Tal comportamento é compatível com a distribuição de tensões trativas, mostrada nos itens 4.1, 4.2 e 4.3, já que estas se relacionam pela equação de equilíbrio dada abaixo:

$$\sigma(x) = \frac{1}{d} \int_0^x \tau dx'$$

Equação 3

Tais resultados são compatíveis ao apresentado por Yanaka et al [7], como mostrado na Figura 29.

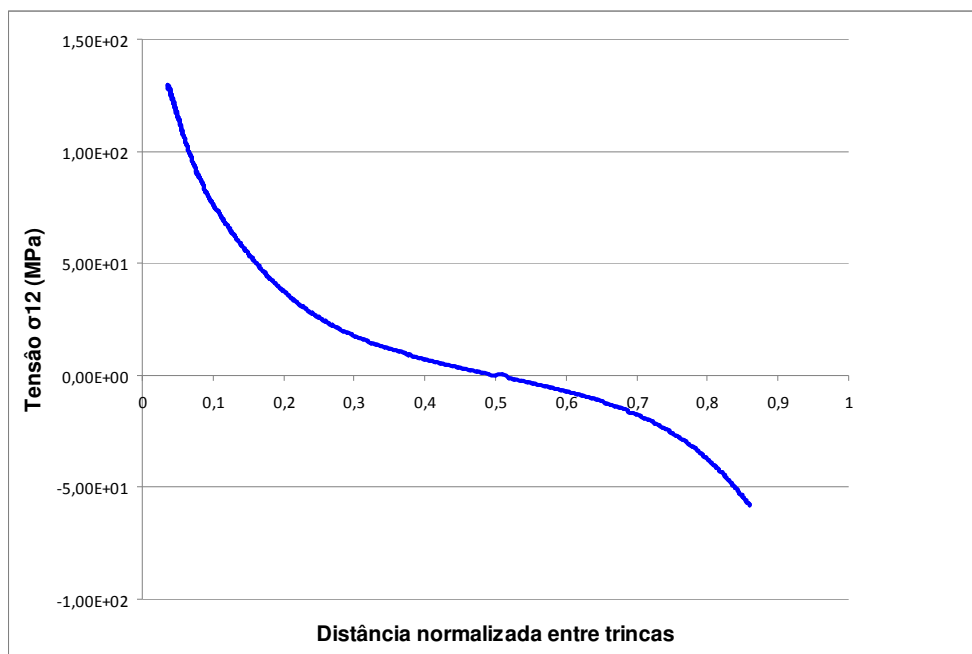


Figura 26: Distribuição das tensões σ_{12} na interface entre filme e substrato na região entre trincas para o modelo de duas trincas no caso em que d/e é igual a 20.

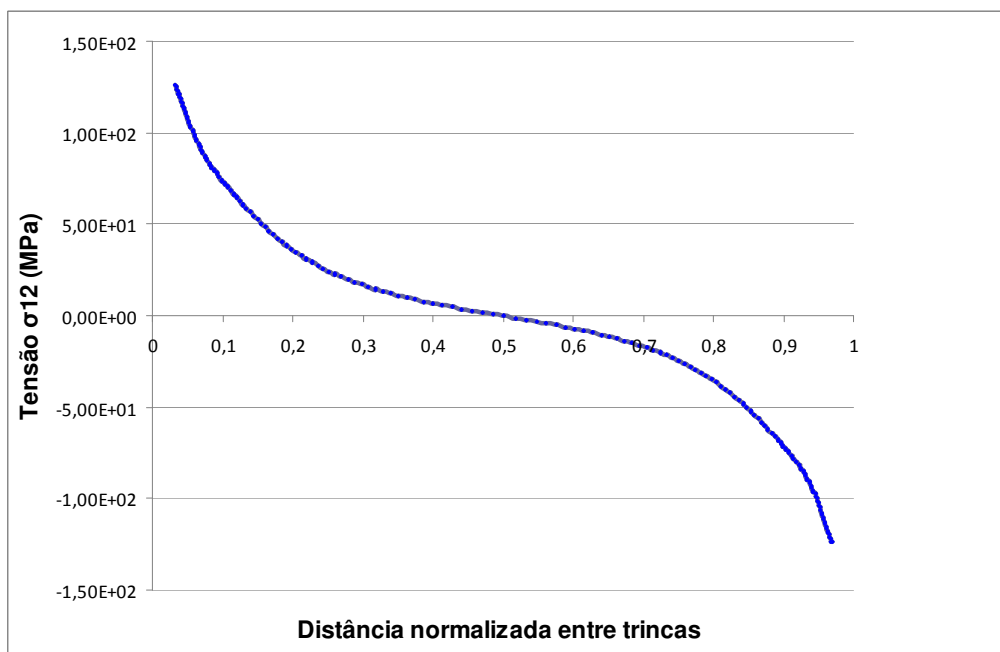


Figura 27: Distribuição das tensões σ_{12} na interface entre filme e substrato na região entre as duas trincas da esquerda para o modelo de três trincas no caso em que d/e é igual a 20.

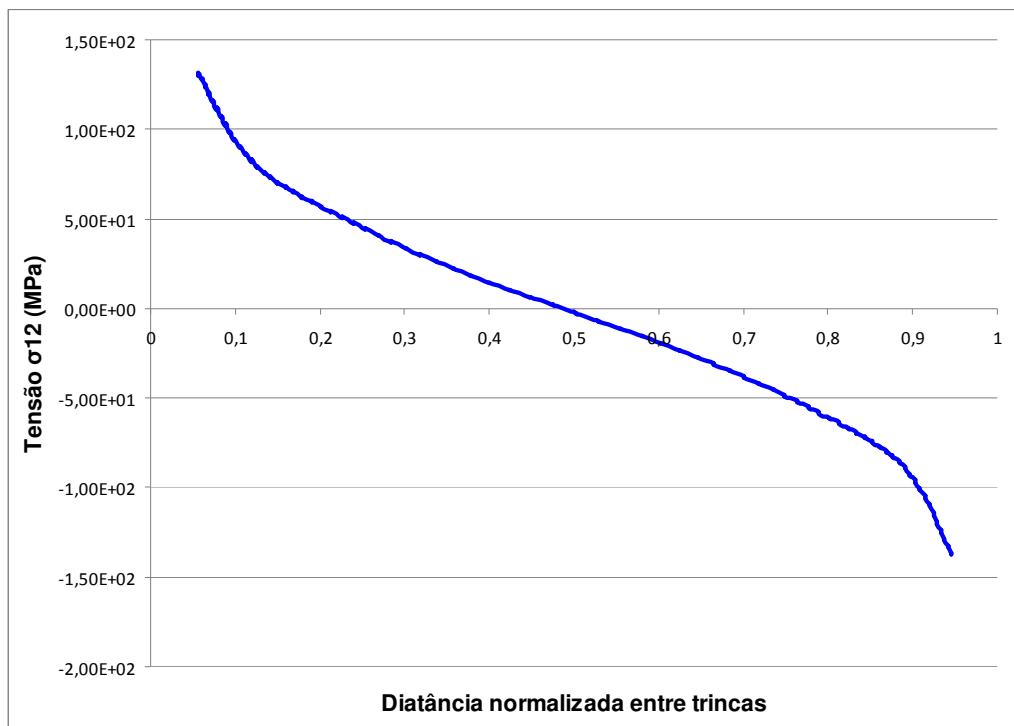


Figura 28: Distribuição das tensões σ_{12} na interface entre filme e substrato na região entre as duas trincas da esquerda para o modelo de quatro trincas no caso em que d/e é igual a 10.

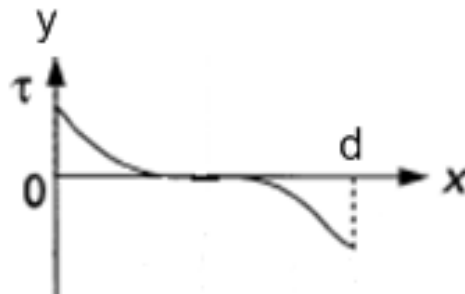


Figura 29: Distribuição da tensão de cisalhamento na interface entre filme e substrato na região entre duas trincas consecutivas de acordo com [7].

4.5 Resultados do modelo analítico

Os dados considerados para o cálculo da tensão trativa entre trincas pelo modelo de Hsueh [16] são apresentados na Tabela 3.

Tabela 3: Dados de entrada do modelo analítico

Módulo de elasticidade do filme	E_f	280000 MPa
Módulo de elasticidade do substrato	E_s	68900 Mpa
Coeficiente do Poisson do filme	ν_f	0,3
Coeficiente do Poisson do substrato	ν_s	0,3
Deformação aplicada	ε_a	0,00263
Espessura do substrato	s	0,0954 mm
Espessura do filme	t	0,0046 mm
Metade da distância entre trincas 1	l_1	0,01725 mm
Metade da distância entre trincas 2	l_2	0,0345 mm
Metade da distância entre trincas 3	l_3	0,069 mm

Foi considerado sistema filme/substrato de duas trincas com espaçamentos entre trincas de 7,5e, 15e e 30e.

Os resultados obtidos pelo modelo analítico são mostrados na Figura 30 a seguir.

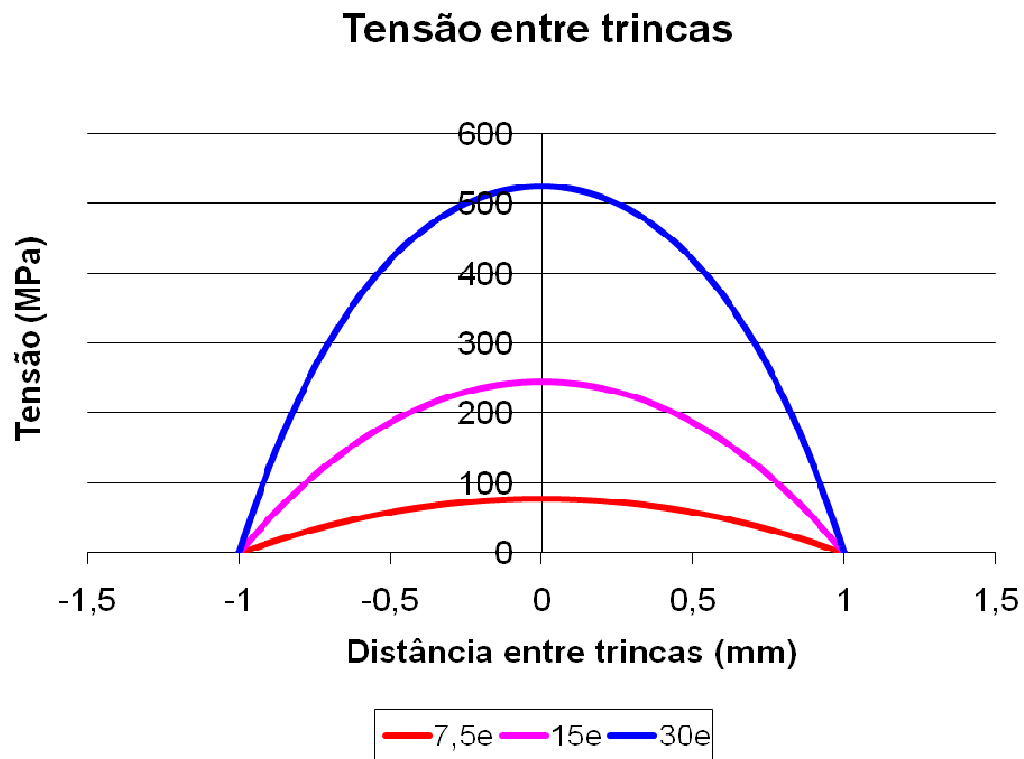


Figura 30: Distribuição de tensões trativas entre duas trincas de acordo com o modelo analítico de Hsueh.

Para os mesmos espaçamentos entre trincas, o modelo numérico apresentou os resultados mostrados na Figura 31.

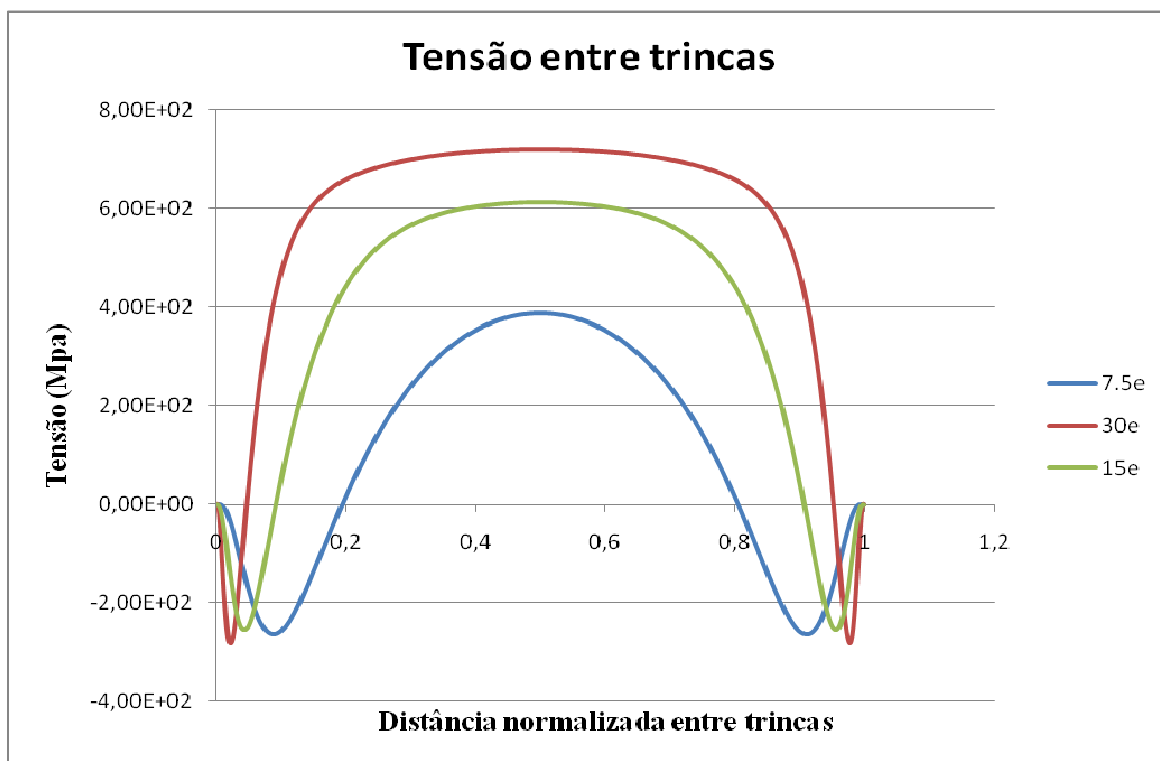


Figura 31: Tensão entre trincas resultante do modelo numérico.

Pela observação das Figuras 30 e 31, pode-se concluir que ambas as curvas apresentam o mesmo comportamento. Porém, para o modelo analítico, os resultados encontrados para os espaçamentos entre trincas de 15 e 30 vezes a espessura do filme não atingem um patamar como no modelo numérico. Além disso, os valores máximos de tensão são menores para o caso do modelo analítico para todos os espaçamentos considerados. Também não se observa no modelo analítico uma região de compressão próxima as trincas, como observado no modelo numérico.

Tais fatos podem ser explicados pelo fato de, no modelo numérico, a tensão de tração se refere à região da superfície do filme, enquanto no modelo analítico, a tensão de tração se refere à região da interface filme/substrato, sendo considerada uniforme em todo o filme. Além disso, o modelo analítico considera o comportamento da tensão entre trincas como uma função do cosseno hiperbólico, não sendo prevista a região de compressão existente no modelo numérico.

5. Conclusões

Os resultados obtidos se mostraram compatíveis aos apresentados na literatura em relação à distribuição das tensões de cisalhamento e de tração, que são relacionadas pela condição de equilíbrio na região entre trincas.

Pelos resultados, nota-se que quanto menor a distância entre duas trincas consecutivas, ou seja, quanto maior a interação entre as superfícies livres das duas trincas, menor é o nível de tensão entre elas. Tal fato indica a existência de uma razão d/e a partir da qual não ocorrem novas trincas, o que se deve ao fato de a tensão crítica para tal ocorrência não ser atingida, como demonstrado em trabalhos da literatura. Conclui-se também que, a partir de uma certa razão d/e , a tensão entre trincas limita-se a um certo valor. Tal valor é a tensão crítica.

O valor máximo de tensão trativa foi muito semelhante nos casos analisados (duas, três e quatro trincas para os espaçamentos considerados). As diferenças ficaram por conta da assimetria observada nos casos com três e quatro trincas.

Viu-se também que há boa correlação entre as curvas de tensão de cisalhamento encontradas na literatura e as obtidas numericamente neste trabalho.

Por último, constatou-se que a curva numérica e a analítica da tensão trativa entre trincas são semelhantes, apresentando diferenças atribuídas às hipóteses adotadas no modelo analítico, como a diferença no local de análise da tensão de cisalhamento.

6. Referências Bibliográficas

- [1] Zum Gahr, K.H., Microstructures and Wear of Materials, Ed. Elsevier (1987).
- [2] E. A. Perez Ruiz, Estudo das Tensões de Contato durante Sucessivas Indentações de Sistemas Contendo Filmes Resistentes ao Desgaste e Substratos com Diferentes Propriedades Mecânicas, Dissertação de Mestrado (2004).
- [3] <http://www.micromagazine.com/archive/02/07/rampf.html>, acessado em 05/04/2009.
- [4] D. L. Smith, Thin Film Deposition: principles and practice, McGraw Hill, New York, EUA (1995).
- [5] <http://www.matweb.com/reference/tensilestrength.asp>, acessado em 05/04/2007.
- [6] M. Ignat, Chemical Vapor Deposition, Capítulo 3 (Stresses and Mechanical Stability of CVD Thin Films), ASM International, Vol. 2, 45-80.
- [7] M. Yanaka, Y. Tsukahara, N. Nakaso (1998) Cracking phenomena of brittle films in nanostructure composites analysed by a modified shear lag model with residual strain. Journal of Materials Science 33, 2111-2119.
- [8] M. Yanaka, Y. Tsukahara, N. Nakaso, N. Takeda, Journal of Materials Science 33 (1998) 2111-2119.
- [9] M. Ignat, T. Marieb, H. Fujimoto, P.A. Flinn, Thin Solid Films 353 (1999) 201-207.
- [10] Harry, E., Rouzaud, A., Ignat, M., Juliet, P. (1998) Mechanical properties of W and W(C) thin films: Young's modulus, fracture toughness and adhesion. Thin Solid Films, 195-201.
- [11] Latella, B.A., Triani, G., Zhang, Z., Short, K.T., Bartlett, J.R., Ignat, M. (2007) Enhanced adhesion of atomic layer deposited titania on polycarbonate substrates. Thin Solid Films, 3138-3145.
- [12] Hu, M.S., Evans, A.G. (1989) The cracking and decohesion of thin films on ductile substrates. Acta Metall, 37, 917-925.

- [13] F. Dellanay, P. Warren, *Acta Metallurgica* 39 (1991) 1061-1070.
- [14] J. W. Hutchinson, Z. Suo, *Advanced Applied Mechanical* 29 (1992) 63-95.
- [15] T. Ye, Z. Suo, A.G. Evans, *International Journal of Solid Structures* 29 (1992) 2639.
- [16] Hsueh, C. H., Yanaka, M., *Journal of Materials Science* 38 (2003) 1809-1817.
- [17] Souza, R.M. (1999) Finite element modeling of contact stresses during indentation of wear resistant coatings on soft substrates. Tese de doutorado, Escola de Minas do Colorado, EUA.