

有限元模拟 TiN 膜 / 碳钢基材体系的摩擦磨损试验

杨洪刚, 李 曙, 刘 阳, 王 鹏

(中国科学院 金属研究所, 辽宁 沈阳 110016)

摘 要: 对 TiN 膜 / 碳钢基材体系摩擦磨损过程的有限元模拟表明: 磨痕边缘的多种应力集中、磨痕内外的张应力、膜 / 基界面切应力, 都将影响体系的摩擦学行为. 用销 / 盘试验验证了有限元模拟结果, 根据对膜层中裂纹的萌生、扩展和体系的损伤、破坏情况分析, 摩擦磨损过程分为磨合、稳定磨损、膜层失稳、体系失效阶段. 提出了小载荷摩擦磨损下过软基材的膜 / 基体系失效机制, 即膜层在集中应力和张应力作用下发生裂纹萌生和扩展的脆性破坏, 其中, 由于体系变形引起的磨痕边缘应力集中对膜层早期损伤进而导致体系磨损失效具有最重要作用.

关键词: 膜 / 基体系; 摩擦磨损; 有限元模拟; 应力集中

中图分类号: TH117.1

文献标识码: A

文章编号: 1004 - 0595 (2009) 04 - 0293 - 06

采用 PVD 技术沉积硬质薄膜于材料表面以提高耐磨性已成为广泛应用的手段, 电弧离子镀 TiN 薄膜常被用作金属的耐磨防护层^[1-2]. 目前对膜 / 基体系的评价通常采用硬度测试和划痕试验方法, 以检测膜层性能及膜 / 基结合^[3], 但基材性能、膜层厚度等均对测量结果有较大影响^[4-6]. 通过摩擦磨损试验评价膜 / 基体系, 尤其是对于用划痕试验难以测得临界载荷的过软基材的膜 / 基体系来说, 更具有实际工程意义.

在摩擦磨损过程中, 由于是基材与膜层两种性能不同材料的组合, 使膜 / 基体系的行为更加复杂, 应力的大小、状态和分布特征, 特别是界面结合的性能及破坏, 对导致其早期失效均具有重要影响. 有限元模拟已被广泛用于体系受力的分析和计算, Wang 等人采用有限元模拟分析了磨损条件下块体材料的破坏机理^[7], 而对于膜 / 基体系摩擦学的分析多集中于体系应力应变和预置裂纹的扩展研究^[8-12], 紧密联系摩擦磨损试验条件来讨论膜 / 基体系失效机理的工作不多. 本文结合试验验证, 考虑到多次滑动、接触面下移及膜 / 基体系变形等特征, 运用有限元模拟方法, 分析 TiN 薄膜 / 低碳钢基材体系在小载荷摩擦磨损中的破坏机制, 讨论其摩擦学行为和工程应用条件.

1 模拟模型及摩擦磨损试验方法

利用有限元软件 ANSYS 对以低碳钢为基材的 TiN 膜 / 基体系的摩擦磨损过程进行模拟分析. 中心对称型建模, 运用 8 节点、多线性、各向同性的块体单元划分体网格, 对中心接触区和膜 / 基结合区进行细化处理; 采用 CONTA174 和 TARGE170 单元定义三维面 - 面接触对偶; 由 TiN 膜层和低碳钢基材组成膜 / 基体系, 膜 / 基界面设定为理想结合, 即在界面处膜层与基材变形时的位移量相同; 设膜层为完全弹性体, 弹性模量 400 GPa, 泊松比 0.21, 膜层厚度 5.12 μm; 基材为半无限大弹 - 塑性体, 弹性模量为 206 GPa, 屈服强度为 235 MPa, 抗拉强度为 460 MPa, 泊松比 0.289; 定义对摩副为理想刚性球体, 半径 600 μm, 恒定载荷 (法向力) 2 N, 摩擦力 (切向力) 由给定摩擦系数确定, 以 0.15 m/s 匀速水平位移并多次经过, 采用 ANSYS 中的生死单元定义膜层的剥落, 描述每次经过后的接触面下移. 图 1 为模拟摩擦磨损过程所建立的有限元模型.

基于 Von - Mises 屈服准则, 定义材料屈服条件为:

$$\sigma_M = \left[\frac{3}{2} S_{ij} S_{ij} \right]^{1/2} = \sigma_0 \quad (1)$$

其中, σ_M 为 Von - Mises 等效应力, σ_0 为单向拉

收稿日期: 2009 - 02 - 10; 修回日期: 2009 - 04 - 22; 联系人: 李曙, e-mail: shuli@imr.ac.cn

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (50475159).

作者简介: 李曙 (1950 -), 男, 博士, 研究员, 博士生导师, 目前主要从事改性表面的摩擦学研究.

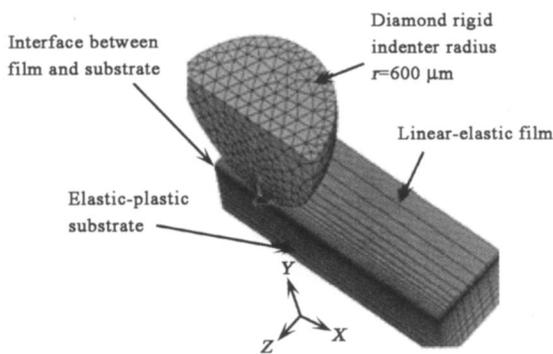


Fig 1 Finite element model for simulating friction and wear on film/substrate system

图 1 模拟膜/基体系摩擦磨损的有限元模型

伸屈服应力, S_{ij} 为材料偏应力张量。

采用增强拉格朗日法 (Augmented Lagrangian Method) 计算膜层表面与对磨副的接触, 该算法得出的接触力 (即拉格朗日乘子) 精确, 容易获得良态条件, 接触刚度敏感性低, 并可对罚函数进行一系列修正迭代。ANSYS 中内置的拉格朗日法对接触压力 P 的定义为:

$$P = \begin{cases} 0 & \text{if } \mu > 0 \\ K_n \mu_n + i_{i+1} & \text{if } \mu_n = 0 \end{cases} \quad (2)$$

其中:

$$i_{i+1} = \begin{cases} i + K_n \mu_n & \text{if } |\mu_n| > \\ i & \text{if } |\mu_n| < \end{cases} \quad (3)$$

K_n 为接触刚度; μ_n 为接触间隙; 为 ANSYS 模拟接触对之间的最大容许穿透值; i_i 为第 i 次迭代中采用的拉格朗日乘子。

采用 DH-4 型电弧离子镀设备在退火态 Q235 钢表面制备 TiN 薄膜, 镀膜工艺参数分别为偏压 -450 V, 氮气压 1.5 Pa, 膜层厚度 5.12 μm 。

膜/基体系的摩擦学试验采用 UMT-2 型多功能摩擦磨损试验机进行。将膜/基体系制备成盘状样品, 销样选用尖端半径 600 μm 的金刚石压头作对磨副, 运动方式为销/盘式接触旋转滑动, 销样上施加恒定载荷 2 N, 配合不同磨痕直径和转速以保持滑动速度为 0.15 m/s, 分别进行不同磨程的小载荷摩擦磨损试验。采用扫描电镜观察磨痕表面和截面的形貌。

2 有限元模拟结果与分析

2.1 磨痕边缘的多种应力集中

尽管是小载荷的摩擦磨损过程, 但由于基材过

软导致膜/基体系变形, 接触面 (磨痕) 下凹, 磨痕边缘隆起并被向两侧挤压, 对磨副与磨痕边缘的接触方式特殊, 多种应力的分布均具有在磨痕边缘形成应力集中的特点。图 2 为膜/基体系表面几种应力分布的有限元模拟结果。

正应力 σ_{yy} 的方向垂直于膜层表面 [图 2(a)], 在磨痕边缘接触区内为压应力, 最大 2.16 GPa, 在接触区外则为张应力, 最大 0.38 GPa。在磨痕边缘产生的集中压应力易使凸起的膜层沿垂直方向产生裂纹, 甚至断裂; 接触区外的张应力尽管较小, 但由于 TiN 膜层脆性较大, 抗张能力较差, 容易造成膜层开裂。

图 2(b) 为沿磨痕宽度方向的正应力 σ_{zz} 分布, 在磨痕边缘接触区内的集中压应力 σ_{zz} 的最大值为 0.97 GPa, 在磨痕边缘以外张应力值为 0.14 GPa, 在磨痕内也有张应力的大面积分布。对磨副对边缘的凸起施加横向挤压, 而凸起的边缘又阻碍磨痕加宽, 在压应力和张应力共同作用下, 磨痕边缘变形曲率较大的地方易发生断裂。

σ_{yz} 为 XZ 面上沿 Z 轴方向的切向应力 [图 2(c)], 主要作用于磨痕边缘外膜层表面, 最大应力值为 0.35 GPa。脆性材料抗剪切变形能力较差, 尽管该水平切应力的值不大, 但膜层表面萌生的裂纹将在其作用下沿层间水平面扩展, 促使膜层发生层状剥落。

σ_{xz} 为 YZ 面上沿 Z 轴方向的切应力 [图 2(d)], 在磨痕边缘外的膜层中近似以接触中心对称分布, 最大值为 0.16 GPa。其剪切作用能够使磨痕边缘萌生的裂纹沿膜层厚度方向扩展, 到达膜/基界面处, 沿界面扩展时导致膜/基结合失效。

图 2(e) 为膜层表面综合应力强度分布情况, 其中, 磨痕边缘是应力强度最为集中的地方。此外, 切应力 σ_{xy} , 正应力 σ_{xx} 也均在磨痕边缘出现最大值。

由上述分析可知, 在小载荷的摩擦磨损条件下, 磨痕边缘的各种应力集中尽管方向、大小和程度有所不同, 但其相互叠加的综合作用极易导致膜层在磨痕边缘发生破坏。

2.2 磨痕中的张应力

图 3 为有限元模拟得到的磨痕中心区域水平正应力 σ_{xx} 分布。其主要特点是, 沿对磨副滑动方向, 在接触区后部产生了张应力, 最大值为 0.34 GPa; 接触中心附近则有较大的压应力, 最大值为 1.14 GPa。对磨副每次滑动经过时, 磨痕内各区域的应力状态都经历一个从最大压应力到最大张应力的变化过程。

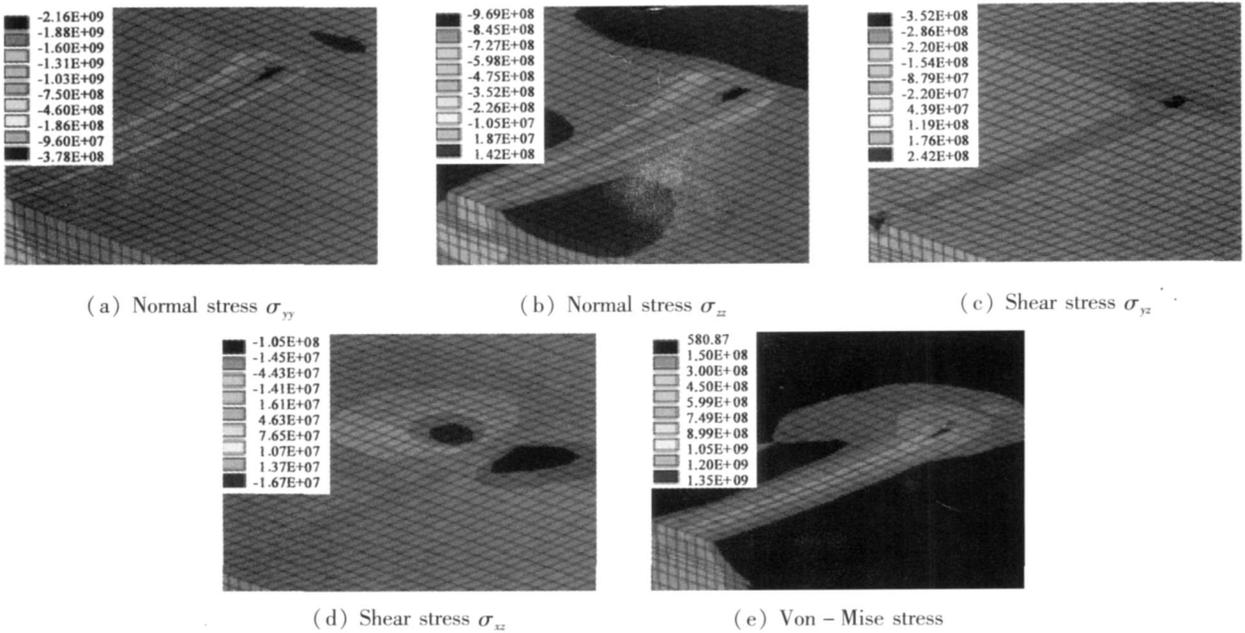


Fig 2 Finite element map for stress concentration at the edge of grinding - trace under deformation

图 2 变形条件下磨痕边缘应力集中的有限元模拟结果

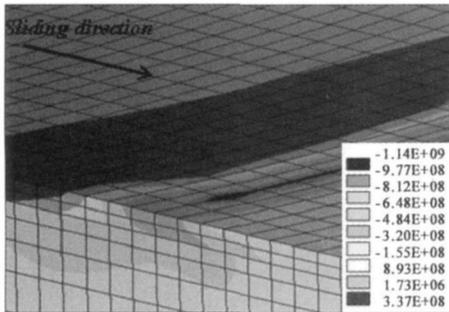


Fig 3 The map for stress σ_{xx} distribution near the center of grinding - trace

图 3 磨痕中心区域正应力 σ_{xx} 的分布

TN为脆性材料,膜层的抗张能力差.从模拟计算得到的应力分布和状态变化可以推断,尽管是在小载荷摩擦磨损条件下,对摩擦副多次滑过致使磨痕内膜层承受反复压缩和拉伸作用,易于萌生裂纹并促进扩展;沿磨痕宽度方向扩展的裂纹与磨痕边缘由应力集中产生的各类裂纹相遇,易导致膜层碎裂、层间剥落;由表面向膜层内部扩展的裂纹触及膜/基界面并沿界面扩展,会造成膜/基结合失效,膜层呈片状脱落.

2.3 膜/基界面处的切应力

图 4为在不同磨损程度(膜层厚度减薄)下膜/基体系表面和剖面的切应力分布, σ_{xy} 是 YZ面上沿 Y轴方向的切应力.与赫兹接触推导出的结果类似,

最大切应力并非出现在接触面上而是位于膜/基体系的内部.

当膜层较厚时 [图 4(a)],体系变形量较小,最大切应力在膜层内部,约为 0.37 GPa,有可能引起层间剥落;随着膜层逐渐变薄,最大切应力移至膜/基界面处 [4图(b)],应力值增加到 0.6 GPa,可能破坏膜层与基材的结合;如果膜层进一步减薄,最大切应力越过界面,由于基材的塑性变形而使切应力变小,仅为 0.24 GPa

由磨痕边缘集中应力或磨痕中张应力引发的裂纹扩展到膜/基界面时,出现在膜/基界面的最大切应力将促进膜层与基材结合的剪切破坏,使膜层成片剥离基材,在硬膜层的耐磨作用远未发挥时,导致膜/基体系早期磨损失效.

有限元模拟结果表明,对于过软基材的膜/基体系,磨痕边缘的多种应力集中、磨痕内外的张应力、膜/基界面的切应力及共同作用,都将影响体系的摩擦学行为;其中,磨痕边缘的应力集中对膜层早期损伤进而导致体系磨损失效具有最重要作用.

3 摩擦磨损试验结果与讨论

图 5为膜/基体系试样表面经历不同磨程的磨痕形貌.图 5(a)显示从上至下不同磨程的环状磨痕,随着磨程的增加,磨损程度逐步加重,在磨痕变宽的同时其边缘出现膜层碎裂并逐渐增多;最下面

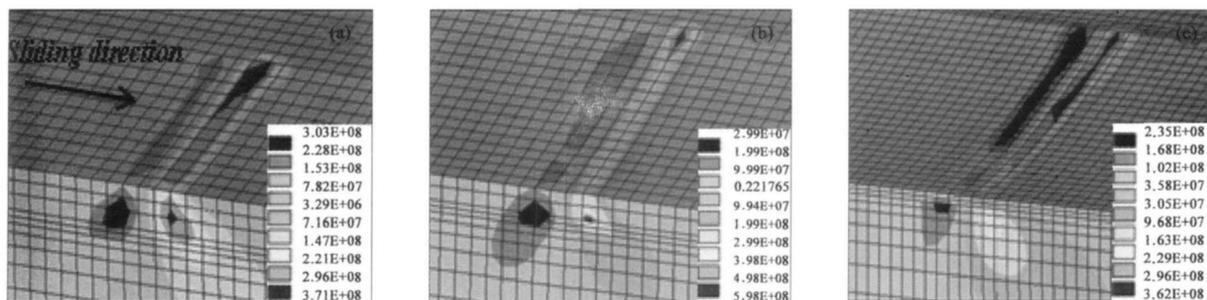


Fig. 4 The map for stress σ_{xy} distribution in film/substrate system with film thinning down

图 4 膜层减薄下膜/基体系的切应力 σ_{xy} 分布

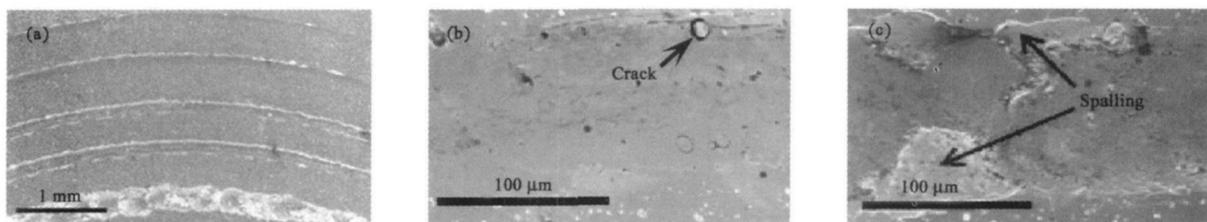


Fig. 5 Grinding - trace surface morphology after different wear distance

图 5 不同磨程磨痕的表面形貌

的磨痕内膜层破碎,表明体系磨损失效.图 5(b)显示当磨程较短时,磨痕内的 TN 膜保持较好,摩擦状态比较平稳,但磨痕边缘出现微小裂纹,方向平行于痕槽.随着磨程增加,磨痕边缘裂纹不断扩展并与膜层内其他裂纹汇合,出现垂直裂纹或层间片状剥落[图 5(c)],剥落区一般由磨痕边缘向磨痕中心扩展,使磨痕内表面粗糙度增加,致使摩擦状态不稳定.

图 6 为试验测得的摩擦系数曲线.结合对磨痕

集中或张应力引发裂纹扩展,造成垂直裂纹或层间片状剥落,摩擦系数曲线出现锯齿波动;体系失效阶段——膜层大量剥离基材,发生混合型严重磨损,摩擦系数急剧上升.

对试验结果的详细分析,进一步验证了有限元模拟结果,即磨痕边缘应力集中对膜层早期损伤的重要作用.图 7 为稳定磨损阶段的磨痕截面扫描电镜照片.可见磨痕内的膜层表面仍相当光滑,但在磨痕边缘已经出现微裂并在膜层内横向扩展,易引起边缘损伤.

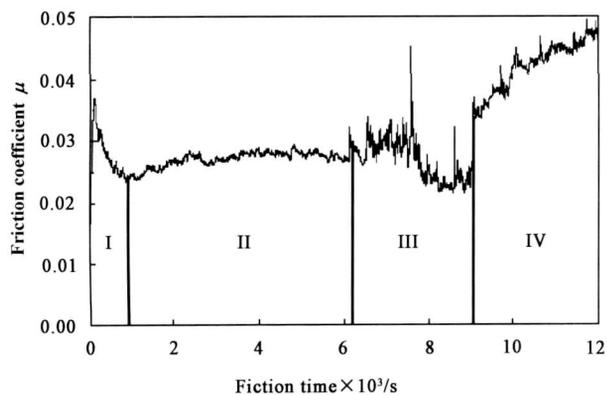


Fig 6 Friction coefficient for film /substrate system

图 6 膜 /基体系摩擦系数

形貌的观察分析,可以把膜 /基体系的摩擦磨损过程大致分为以下 4 个阶段: 磨合阶段; 稳定磨损阶段——磨痕边缘微损伤,高硬度的 TN 膜保持较好,摩擦系数较低; 膜层失稳阶段——边缘应力

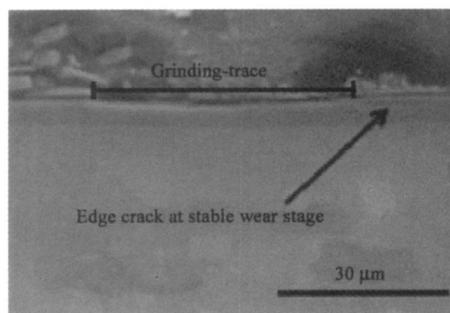


Fig 7 The morphology of edge crack on cross - section of grinding - trace at steady wear stage

图 7 稳定磨损阶段磨痕边缘裂纹形貌

图 8 给出膜 /基体系摩擦磨损过程的几个阶段在磨痕截面上观察到的膜层内裂纹发展变化情况.有研究认为,在脆性膜层中无论裂纹初始取向如何,

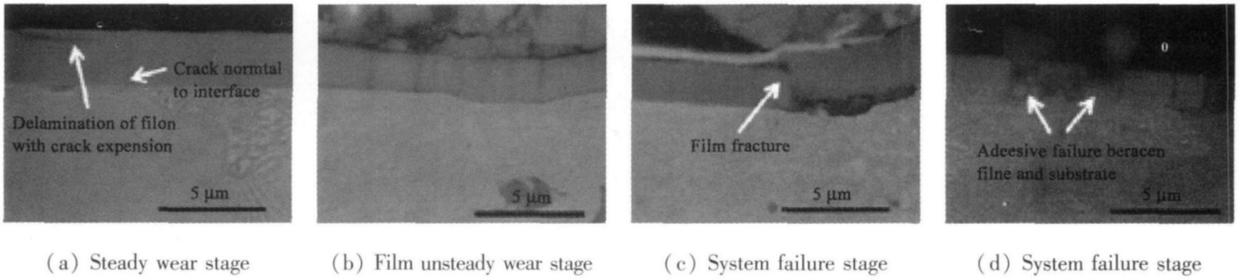


Fig 8 Crack morphologies in film on cross-section of grinding-trace at different wear stage

图 8 不同磨损阶段磨痕截面膜层内裂纹形貌

都优先向膜/基界面扩展^[13],造成界面结合失效,使膜层整体剥离基材。

在稳定磨损阶段 [图 8(a)],膜层基本保持整体完好,但已有源于磨痕边缘的裂纹在膜层内部发生了横向扩展,或从表面垂直扩展到膜/基界面处(如箭头所示),垂直裂纹还与摩擦过程中的张应力相关。在膜层失稳阶段,大量裂纹扩展到膜/基界面处,由于低强高塑的 Q235 钢基材变形下凹,致使扩展下来的裂纹与界面不再垂直 [图 8(b)];此外,膜层内横向扩展的裂纹若与垂直裂纹相遇,将导致层间剥落;这些变化引起摩擦系数剧烈变动,加速体系向失效发展。随着摩擦磨损的进程,裂纹在尖端集中应力和切应力作用下沿膜/基界面扩展,导致膜/基分离并发生膜层断裂 [如图 8(c)所示];磨痕内分布着残留的膜层,部分区域膜层剥离后基材暴露 [如图 8(d)所示];凹凸不平的表面和对磨副犁入基材使摩擦力不断上升,膜层破坏越发严重,导致

膜/基体系磨损失效。

4 小载荷摩擦磨损下膜/基体系失效机制

结合有限元模拟和试验结果,图 9 给出小载荷摩擦磨损下过软基材的膜/基体系失效机制简图。在摩擦磨损过程中,由于体系变形导致接触边缘凸起形成多种应力集中,以及磨痕内外均出现张应力;各个较大的正应力 ($\sigma_{yy}, \sigma_{zz}, \sigma_{xx}$)和集中应力强度的综合作用,易使磨痕边缘及磨痕内的膜层表面萌生裂纹;再加上切应力 (τ_{xy}, τ_{yz} 和 τ_{xz})的作用,裂纹在膜层内分别沿横向和纵向扩展;当横向裂纹与其他裂纹相遇,造成膜层脆性碎裂、层状剥落,抵达膜/基界面的纵向裂纹沿界面扩展 [如图 9(a)所示],造成薄膜从基材成片剥离 [如图 9(b)所示];膜层脆性破坏区表面不仅使摩擦系数波动,也使应力集中程度更加增大,促进磨痕边缘膜层进一步破坏,这种相互作用不断发展,最终导致膜/基体系完全失效。

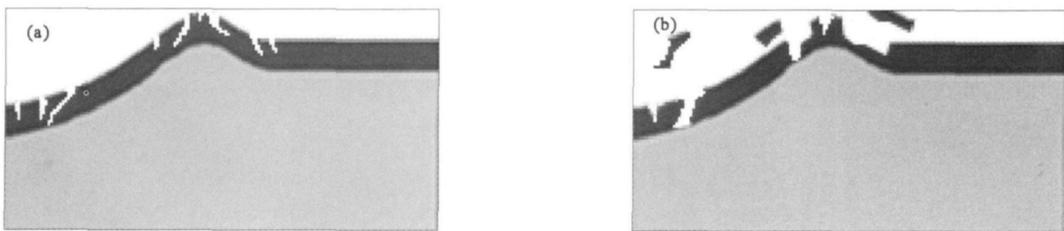


Fig 9 Failure mechanical sketch of film/substrate under friction and wear

图 9 摩擦磨损下膜/基体系失效机制示意图

由以上分析可以得出,软基材上沉积硬膜层体系获得摩擦学应用的关键条件是避免膜/基体系由于接触和加载方式而产生较大程度的变形。

5 结论

a 对 TN膜 碳钢基材体系摩擦磨损过程的有限元模拟表明:磨痕边缘的多种应力集中、磨痕内外的张应力、膜/基界面切应力及其共同作用,都将

影响体系的摩擦学行为。

b 小载荷销/盘试验验证了有限元模拟的结果,根据膜层中裂纹的萌生、扩展和体系的损伤、破坏情况分析,摩擦磨损过程大致可分为 磨合阶段;稳定磨损阶段;膜层失稳阶段;体系失效阶段。

c 提出了小载荷摩擦磨损下过软基材的膜/基体系失效机制,膜层在集中应力和张应力作用下发生裂纹萌生和扩展的脆性破坏,其中,由于体系变

形引起的磨痕边缘的应力集中对膜层早期损伤进而导致体系磨损失效具有最重要作用。

参考文献:

- [1] Zhou Z F, Li K Y, Bello I, *et al* Study of tribological performance of ECR - CVD diamond - like carbon coatings on steel substrates: Part 2. The analysis of wear mechanism [J]. *Wear*, 2005, 258 (10): 1 589 - 1 599.
- [2] Bienk E J, Reitz H, Mikkelsen N J. Wear and friction properties of hard PVD coatings [J]. *Surface and Coatings Technology*, 1995, 76 - 77 (2): 475 - 480.
- [3] Stallard J, PoulaS T, Teer D G. The study of the adhesion of a TiN coating on steel and titanium alloy substrates using a multi - mode scratch tester [J]. *Tribology International*, 2006, 39 (2): 159 - 166.
- [4] Kimura H, Rodrigo A. The correlation of scratch adhesion with composite hardness for TiN coatings [J]. *Surface and Coatings Technology*, 2000, 126 (2 - 3): 152 - 158.
- [5] Perez E A, Souza R M. Numerical and experimental analyses on the contact stresses developed during single and successive indentations of coated systems [J]. *Surface and Coatings Technology*, 2004, 188 - 189: 572 - 580.
- [6] Steinmann P A, Tardy Y, Hintemann H E. Adhesion testing by the scratch test method: The influence of intrinsic and extrinsic parameters on the critical load [J]. *Thin Solid Films*, 1987, 154 (1 - 2): 333 - 349.
- [7] Wang Y F, Yang Z G. Finite element model of erosive wear on ductile and brittle materials [J]. *Wear*, 2008, 256 (5 - 6): 871 - 878.
- [8] Jiang W G, Su J J, Feng X Q. Effect of surface roughness on nanoindentation test of thin films [J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2008, 75 (17): 4 965 - 4 972.
- [9] Kenneth Holmberg, Anssi Laukkanen, *et al* Tribological contact analysis of a rigid ball sliding on a hard coated surface: Part I Modelling stresses and strains [J]. *Surface and Coatings Technology*, 2006, 200 (12 - 13): 3 793 - 3 809.
- [10] Kenneth Holmberg, Anssi Laukkanen, *et al* Tribological contact analysis of a rigid ball sliding on a hard coated surface: Part II Material deformations, influence of coating thickness and Young's modulus [J]. *Surface and Coatings Technology*, 2006, 200 (12 - 13): 3 810 - 3 823.
- [11] Kenneth Holmberg, Anssi Laukkanen, *et al* A model for stresses, crack generation and fracture toughness calculation in scratched TiN - coated steel surfaces *Wear*, 2003, 254 (3 - 4): Pages 278 - 291.
- [12] Bucaille J L, Felder E, *et al* Mechanical analysis of the scratch test on elastic and perfectly plastic materials with the three - dimensional finite element modeling [J]. *Wear*, 2001, 249 (5 - 6): 422 - 432.
- [13] Oneil D A, Wayne S F. Numerical simulation of fracture in coated brittle materials subjected to tribo - contact [J]. *Trans ASME J. EngineerMaterial Technology* 1994, 116 (4): 471 - 478.

Finite Element Simulation of Friction and Wear Experiment on TiN Film /Carbon Steel Substrate System

YANG Hong - gang, LI Shu, LIU Yang, WANG Peng

(*Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110016, China*)

Abstract: The finite element simulation of friction and wear experiment on TiN film /carbon steel substrate system shows that several stress concentrations at edge of grinding - trace, tensile stress inside and outside grinding - trace, shear stress at film /substrate interface all affect tribological behavior of the system. The results calculated by FEM have been confirmed by pin/disc test. According to the analysis of crack initiation and propagation in film as well as damage and breakage of system, the process of friction and wear can be divided into several stages, such as wear - in, steady wear, film unsteady wear, and system failure. The failure mechanism of hard film /soft substrate system in friction and wear experiment under small loading has been suggested. The stress concentrations and tensile stress have important function on crack initiation and propagation, which can cause the brittle breakage in film. The stress concentrations at edge of grinding - trace due to deformation play most important role on early damage which results in wear failure of film /substrate system.

Key words: film /substrate system, friction and wear, finite element simulation, stress concentration

Author: LI Shu, male, born in 1950, Ph. D., Professor, e - mail: shuli@inr.ac.cn