

SIMULACION DE PROPIEDADES MECANICAS DE PELICULAS DELGADAS DE WC A PARTIR DEL MODELO MONTECARLO

L.C. Agudelo-Morimitsu^(1,2), E. Restrepo-Parra⁽¹⁾, R. Ospina-Ospina⁽¹⁾, P.J. Arango⁽¹⁾, C. M. Bedoya- Hincapié, J. M. Velez-Restrepo⁽²⁾.

(1) Laboratorio de Física del Plasma, Universidad Nacional de Colombia-Sede Manizales, COLOMBIA.

(2) Laboratorio de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad Nacional de Colombia-Sede Medellín, COLOMBIA.

E-mail: ixtina@gmail.com

RESUMEN

El objetivo de este trabajo es estudiar a partir de simulaciones el comportamiento mecánico de un sistema sustrato/recubrimiento. Se analizan los esfuerzos de contacto y la deformación elástica, al aplicar una carga normal a la superficie de un sistema compuesto por una película delgada resistente al desgaste de Carburo de Tungsteno (WC) y un sustrato de acero inoxidable. El análisis se basa en simulaciones utilizando el método Montecarlo a partir del algoritmo de Metropolis; el fenómeno fue simulado a partir de una estructura cristalina centrada en las caras fcc, tanto para el recubrimiento como para el sustrato, asumiendo el plano de deformación uniaxial en el eje z. Los resultados fueron obtenidos para diferentes valores de carga normal aplicada a la superficie del recubrimiento y llevando a cabo una gran cantidad de iteraciones en los pasos de Montecarlo, con el fin de encontrar un posible estado de equilibrio (estado de menor energía), para hallar curvas de Esfuerzo Vs Deformación.

Palabras claves: Películas Delgadas, WC, Montecarlo, Metrópolis.

ABSTRACT

The aim of this paper is to study using simulation the mechanical behavior of a system substrate / coating. We analyze the contact stresses and the elastic deformation by applying a normal load to the surface of a system consisting of a thin film wear resistant tungsten carbide (WC) and a stainless steel substrate. The analysis is based on Monte Carlo simulations using the method from the Metropolis algorithm, the phenomenon was simulated from a crystal structure fcc face-centered, for the coating to the substrate, respectively, assuming the plane strain uniaxial z-axis. Results were obtained for different values of normal load applied to the surface of the coating and carrying out a large number of loop iterations in Monte Carlo steps, in order to find a possible state of equilibrium (lowest energy state), to find Stress / deformation curves.

Keywords: Thin Films, WC, Monte Carlo, Metropolis.

Tópico: 4: Materiales Cerámicos

1. INTRODUCTION

Los recubrimientos superficiales son en la actualidad un método eficaz para mejorar la durabilidad de los materiales utilizados en ambientes agresivos, además de generar aumentos en el valor comercial de los productos [1]. Los materiales cerámicos son muy utilizados en la aplicación de recubrimientos, especialmente en los ámbitos relacionados con la ingeniería, ya que permiten mejorar la resistencia al desgaste y la corrosión de los elementos mecánicos involucrados, sin afectar las propiedades internas. De esta manera, el sistema sustrato/recubrimiento alcanza un mayor rendimiento y una mayor versatilidad en sus aplicaciones [2]. Entre los recubrimientos duros protectores se destaca el Carburo de Tungsteno (WC), debido a su alta temperatura de fusión, alta dureza, relativamente baja conductividad y excelente estabilidad química [3, 4 y 5], propiedades que son utilizadas para mejorar el rendimiento y durabilidad de piezas de materiales expuestas a prácticas de carga,

laminación o diferentes condiciones tribológicas (fricción, desgaste y lubricación). Además el WC también cuenta con otras propiedades como alta resistencia a la corrosión, alta resistencia al desgaste y relativo bajo coeficiente de fricción [6, 7]. Recientemente, este material ha aumentado su interés tecnológico debido a su uso en recubrimientos de materiales nanoestructurados WC-C [8]. Hoy en día, gracias al interés de la industria por hacer más eficientes los sistemas tribológicos, se hace necesario el estudio del comportamiento mecánico de los materiales de los elementos de máquina que intervienen en estos sistemas; el análisis de esfuerzos y deformaciones bajo condiciones de contacto y deslizamiento juega un papel importante, ya que mediante estudios experimentales y recientemente de simulación, se puede llegar a analizar características mecánicas de sustratos y de materiales de protección superficial para una determinada aplicación industrial. De otro lado, se han empleado diferentes métodos de simulación numérica, para el entendimiento de los procesos de deformación, generados en los materiales metálicos durante procesos de conformación [9, 10]. Así mismo, la simulación numérica ha sido utilizada en el estudio del comportamiento de determinadas propiedades mecánicas de materiales y recubrimientos, para lo cual se ha estudiado la simulación del proceso de indentación [11] y de indentación y rayado simultáneo [12]. A pesar del gran número de trabajos que realizan estudios de propiedades mecánicas para sistemas sustrato/recubrimiento reportados en la literatura, empleando métodos como elementos finitos, no existen reportes en estudios de este tipo empleando la técnica Monte Carlo.

En el presente trabajo se desarrolla un modelo y se llevan a cabo simulaciones para estudiar del fenómeno de deformación que se presenta al ser aplicada una carga variable sobre la superficie del sistema sustrato/recubrimiento (Acero/WC), usando simulación numérica por medio del método Monte Carlo y el algoritmo de metrópolis.

2. METODO MONTE CARLO

Monte Carlo es uno de los métodos numéricos más utilizados para solucionar problemas físico-estadísticos. La idea básica de este método es simular aleatoriamente las fluctuaciones térmicas del sistema de interés, pasando de un estado a otro por medio de una cadena de Markov a través del espacio de configuraciones. En el método de Monte Carlo se simula directamente el proceso en estudio, creando un modelo del sistema y haciéndolo pasar sobre una gran cantidad de estados posibles que se calculan estadísticamente. Esto se hace de acuerdo a una cierta distribución probabilística que calcula los valores esperados de los observables físicos deseados. Para encontrar la distribución probabilística, se exige que esta modele al sistema en el caso real, es decir cuando el sistema se encuentre en equilibrio termodinámico [13]. Para nuestro estudio de películas delgadas la distribución probabilística, en el equilibrio, está dada por la distribución de Boltzmann, ecuación (1).

$$\rho_{\mu} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (1)$$

Donde Z es la función de partición del sistema, $\beta=1/(k_B T)$ siendo k_B la constante de Boltzmann, T la temperatura y E_{μ} la energía del estado μ .

Una gran ventaja del uso del método Monte Carlo, consiste en que no es necesario recorrer todos los estados de un sistema para llevarlo al estado de equilibrio y así encontrar estimativos de los observables físicos. Sin embargo este método conlleva a errores estadísticos y otros generados por la correlación entre los datos consecutivos cuando se genera una cadena de Markov [13].

3. DESCRIPCION DEL MODELO

Inicialmente, el sistema de muestra fue construido como se aprecia en la Figura 1. Este sistema está compuesto por una capa de sustrato de acero inoxidable con una estructura cubica FCC, y una capa de la película delgada de WC en la parte superior del sustrato, igualmente, con estructura cubica FCC. Para el modelo planteado se usó como energía potencial de interacción entre las partículas del sistema, un potencial de tipo Lennard-Jones (2).

$$H = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] - F\delta \quad (2)$$

Donde ε es la profundidad del pozo (energía), σ es el diámetro característico de las partículas y r es la distancia entre dos átomos vecinos, para la cual el valor del Hamiltoniano es cero, F es la fuerza aplicada y δ es el desplazamiento respecto a la posición de equilibrio de cada partícula.

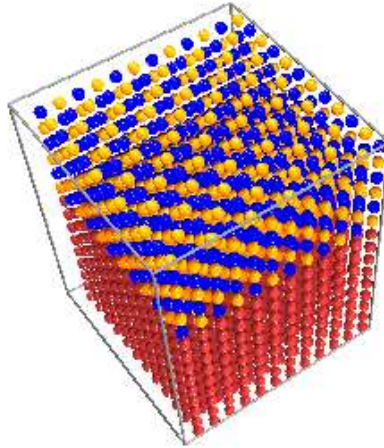


Figura 1. Esquema de la construcción de la muestra Acero/WC.

El programa que aplica el método Monte Carlo para hallar la configuración de mínima energía, va seleccionando de manera aleatoria cada una de las partículas para desplazarlas. El movimiento de una partícula se hace en la dirección de la fuerza resultante que actúa sobre ella. Los desplazamientos son iguales a una fracción de la deformación (ε) que ha sufrido el sistema, ponderada por el valor de la fuerza resultante; y el movimiento de una partícula se hace efectivo, si y sólo si, dicho desplazamiento hace disminuir la energía de deformación del sistema. El proceso se repite hasta que se observe que un movimiento en cualquiera de ellas aumenta la energía de deformación, en cuyo caso, se considera que se ha alcanzado el mínimo de energía. En este punto de equilibrio la fuerza resultante sobre cada partícula ha de ser cero [14].

Las simulaciones se llevaron a cabo siguiendo los siguientes pasos:

1. Construcción de la muestra
2. Designar un estado inicial e_i con energía E_i
3. Designar un estado temporal e_f con energía E_f
4. Si $\Delta E < 0$ el sistema permanece en el estado final
5. se obtiene un numero aleatorio r
6. Calcular $w = e^{-\Delta E/kT}$
7. Si $r \leq w$ el sistema configura el estado actual como estado final

Por otro lado, la Teoría Matemática de Elasticidad, desarrollada para cuerpos que se deforman gradualmente, a temperatura constante, desde un estado inicial de cero esfuerzo hasta un estado final que difiere infinitesimalmente del estado inicial, explica la respuesta mecánica de un sólido a través del tensor de constantes de rigidez elástica (C_{ijkl}), el cual constituye la constante de proporcionalidad entre el tensor de esfuerzos (σ_{ij}) y el tensor de deformaciones específicas (ε_{kl}) en la Ley de Hooke generalizada [15], ecuación (3):

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (3)$$

Donde σ es el esfuerzo, ε la deformación y C la constante de rigidez elástica que depende del material.

En los cálculos efectuados se condicionó el sistema para que únicamente se aplicara una deformación normal en una dirección arbitraria, impidiendo cualquier otra deformación normal o cortante en otra dirección, por lo que la expresión (3) se reduce a (4). Este análisis abre la posibilidad de usar las relaciones de la teoría matemática de la elasticidad en el cálculo del módulo de elasticidad mediante simulación computacional.

$$\sigma = C\varepsilon \quad (4)$$

Siendo C la constante equivalente al modulo de elasticidad E del material.

4. DISCUSION DE RESULTADOS

Utilizando el método Monte Carlo, por medio del algoritmo Metrópolis se obtuvo una curva de esfuerzo-deformación para temperatura ambiente y se calculó el módulo de elasticidad del sistemas sustrato/recubrimiento (Acero/WC), que fue modelado como un sistema en capa con estructura cubica FCC, respectivamente, para un número total de partículas $N=1728$; a este se le aplico una carga variable normal a la superficie de la capa de WC. Los parámetros empleados se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1. Parámetros empleados para la simulación MCS

	TEMPERATURA REDUCIDA (T*)	FUERZA REDUCIDA MAX (F*)	σ_{IJ}	ε_{IJ}	MODULO POISSON
SUSTRATO	0,07	1000	1	1	0.28
INTERFACE	0,07	1000	1	1,4142	---
RECUBRIMIENTO	0,07	1000	1	2	0.29

Inicialmente, se obtuvo una curva para la energía de relajación del sistema Acero/WC en función de los pasos máximos de Monte Carlo (MCS), Figura 2. Para este caso no se aplico ningún valor de fuerza externa al sistema, únicamente se realizaron iteraciones, en función del potencial de Lenard-Jones, para asegurar que el sistema estuviera en el estado de menor energía, antes de aplicar una carga a la superficie de la capa. En esta figura se observa que el sistema se estabiliza aproximadamente a 15000 pasos de Monte Carlo

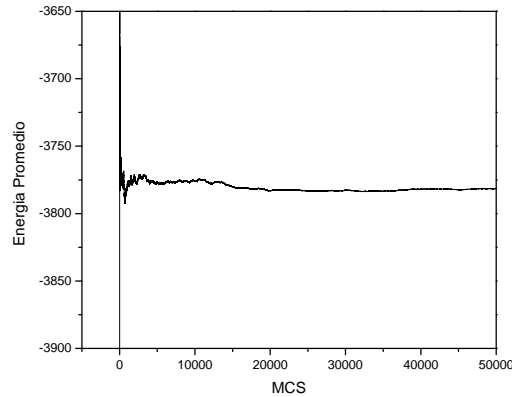


Figura 2. Grafica de equilibrio del sistema Acero/WC, con $F^*=0$

Una vez alcanzada encontrado el punto en el que se alcanza la estabilidad, se aplicó una fuerza normal a la superficie de la muestra, que varó en pasos de $100 F^*$, durante proceso de iteraciones de Monte Carlo. Como era de esperarse la muestra presentó una deformación súbita a lo largo de sus ejes, proporcional a la fuerza reducida normal aplicada. Para obtener las deformaciones en el plano xy se consideró el módulo de Poisson (5).

$$\nu = -dz/dx \text{ o } \nu = -dz/dy \quad (5)$$

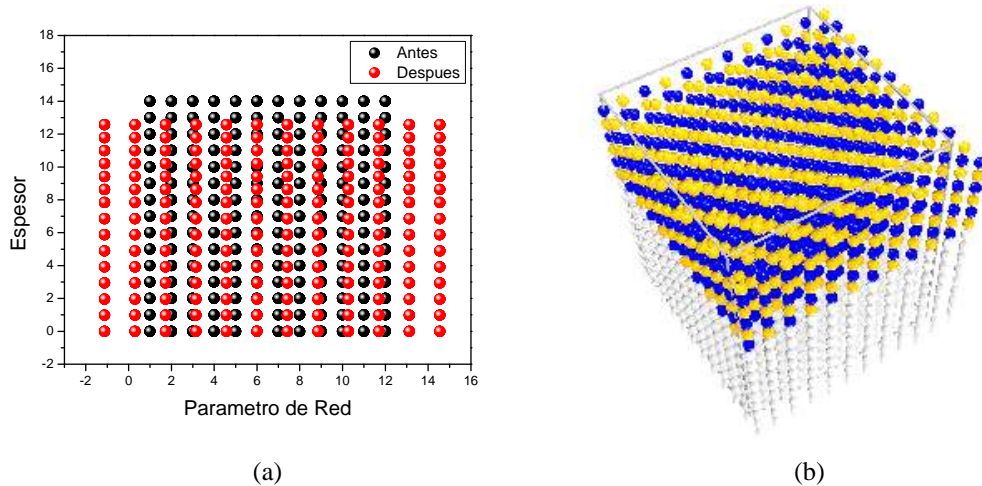


Figura 3. (a) Sección transversal de la muestra antes y después de aplicar la fuerza. (b) Esquema de la muestra Acero/WC, posterior a la deformación, producto de la F^* normal aplicada.

La figura 3(a) presenta una imagen en dos dimensiones del sistema muestra sustrato en el que se observa la deformación tanto vertical, debida a la fuerza de compresión, como horizontal, debido al coeficiente de Poisson. La figura 3(b) presenta el esquema tridimensional de la misma muestra. El paralelepípedo se refiere a las dimensiones iniciales del sistema.

La Figura 4 muestra la curva de esfuerzo-deformación, obtenida para el sistema sustrato/recubrimiento, de acuerdo con los datos utilizados en el método Monte Carlo. Los resultados coinciden con las curvas obtenidas en algunos ensayos experimentales. Se puede observar inicialmente una zona elástica, presentando una dependencia lineal. Después de cierta fuerza aplicada, aparece la zona plástica del material, la cual es una característica de

este tipo de sistemas. A partir de la pendiente de la parte lineal de la curva se puede obtener el módulo de elasticidad del sistema. El valor obtenido es de 117 Gpa aproximadamente.

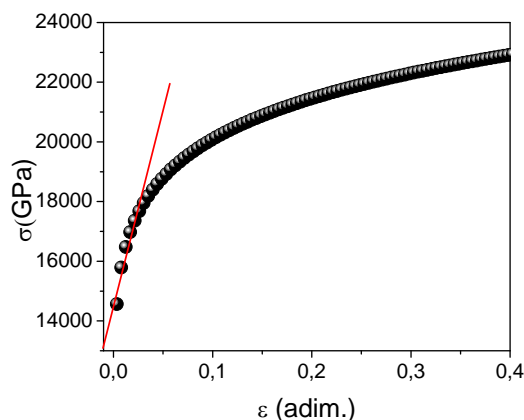


Figure 4 Curva esfuerzo-deformación del sistema Acero/WC, obtenida por el método Monte Carlo.

5. CONCLUSIONES

EL método de Monte Carlo fue utilizado para modelar el comportamiento esfuerzo-deformación de un sistema compuesto por un sustrato de acero inoxidable y una película de WC. El modelo se basó en el potencial de Lennard-Jones y la ley de Hook. Los resultados mostraron el efecto de compresión de la muestra en la dirección z y la expansión en el plano xy . La curva de esfuerzo-deformación obtenida evidencio tanto la zona elástica, como la zona plástica característica del sistema, lo cual esta en coherencia con el fenómeno que sucede normalmente en los materiales reales. Además, pudimos identificar el papel que desempeña la geometría de un cuerpo en sus propiedades efectivas tales como su respuesta mecánica, la cual permite explicar y predecir el comportamiento mecánico de un material conociendo su geometría o incluso sintetizar materiales con requerimiento de propiedades mecánicas específicas mediante el control de su geometría. Ya que tradicionalmente el estudio de la interacción entre las propiedades mecánicas y los parámetros texturales o geométricos de un medio se lleva a cabo a través de una gran cantidad y variedad de experimentos, pero el uso de sistemas modelos de geometría conocida permite analizar de forma sistemática los efectos de las diferentes propiedades texturales en el medio, por lo que se convierte en una alternativa eficaz para abordar el problema.

REFERENCIAS

- [1] D. F. Arias, Y.C. Arango, A. Devia, Appl. Surf. Sci. 253 (2006) 1683-1690.
- [2] J. Mateos, J.M. Cuetos, E. Fernández, R. Vijande, Wear. 239 (2000) 274-281.
- [3] K.A. Taylor, Thin Solid Films 40 (1977) 201.
- [4] S. Neuville, A. Matthews, Thin Solid Films. 515 (2007) 6619.
- [5] K. Bewilogua, G. Bräuer, A. Dietz, J. Gäbler, G. Goch, B. Karpuschewski, B. Szyszka, Ann. CIRP 58 (2009) 608.
- [6] A.A. Voevodin, J.P. O'Neill, S.V. Prasad, J.S. Zabinski, Vac. Sci. Technol. A17 (1999) 986.
- [7] M.D. Abad, et al., Surf. Coat. Technol. (2010) article In Press.
- [8] J. Esteve, E. Martínez, et. al. Superficies y Vacío. 9 (1999) 276-279.
- [9] M. Dejun, X. Kewei, H. Jiawen. Thin Solids Films. 323 (1998) 183-187.
- [10] R.M Souza, A. Sinatora, G. Mustoe, J. Moore Wear. 251 (2001) 1337-1346.
- [11] J. Malzbender, G. de With. Wear. 239 (2000) 21-26.
- [12] K. Holmberg, A. Laukkanen, H. Ronkainen, K. Wallin, S. Varjus. Wear 254 (2003) 278-291.

- [13] Pilar Cossio Tejada, simulación Monte Carlo de sistemas de películas delgadas magnéticas, tesis, Universidad de Antioquia Sede Medellín Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Instituto de Física, Agosto de 2007.
- [14] Liz Marina Áñez Borges, et. al. CIENCIA 17(1) (2009) 80 – 86.
- [15] KOERBER G. Properties of Solids. Editorial Prentice-Hall. Estados Unidos de América. 1962.