



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS
Diretoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

VITOR FERREIRA VIEIRA

**ESTUDO DA SIMULAÇÃO DO ENSAIO DE
NANOINDENTAÇÃO EM SUBSTRATO DE AÇO RÁPIDO
COM FILME DLC PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS
FINITOS**

Orientador: Prof. Dr. Yukio Shigaki

Coorientador: Prof. Dr. Paulo Sérgio Martins

Linha de Pesquisa: Eficiência em Sistemas e Processos Mecânicos

Belo Horizonte

2023

V658e Vieira, Vitor Ferreira
Estudo da simulação do ensaio de nanoindentação em substrato de aço rápido com filme DLC pelo método dos elementos finitos / Vitor Ferreira Vieira. – 2023.
100 f. : il., grafs., tabs.

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.
Orientador: Yukio Shigaki.
Coorientador: Paulo Sérgio Martins.
Banca examinadora: Yukio Shigaki, Paulo Sérgio Martins, Jânes Landre Jr., Sandro Cardoso Santos.
Bibliografia: f. 93-100.
Dissertação (mestrado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais.

1. Método dos elementos finitos – Teses. 2. Filmes finos de diamantes – Teses. 3. Nanotecnologia – Teses. I. Shigaki, Yukio. II. Martins, Paulo Sérgio. III. Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais. IV. Título.

CDD 621.82

VITOR FERREIRA VIEIRA

**ESTUDO DA SIMULAÇÃO DO ENSAIO DE NANOINDENTAÇÃO EM SUBSTRATO DE
AÇO RÁPIDO COM FILME DLC PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS**

Defesa de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais – CEFET-MG, na área de concentração de Energia e Processos Mecânicos na Linha de Pesquisa em Eficiência em Sistemas e Processos Mecânicos, como parte integrante dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Yukio Shigaki

Coorientador: Prof. Dr. Paulo Sérgio Martins

Linha de Pesquisa – Eficiência em Sistemas e Processos Mecânicos

Belo Horizonte

Maio de 2023

**ESTUDO DA SIMULAÇÃO DO ENSAIO DE NANOINDENTAÇÃO EM SUBSTRATO DE
AÇO RÁPIDO COM FILME DLC PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS**

Defesa apresentada em 24 de maio de 2023 por Vitor Ferreira Vieira, ao Curso de Mestrado em Engenharia Mecânica do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais – CEFET-MG, na área de concentração Energia e Processos Mecânicos, na Linha de Pesquisa em Eficiência em Sistemas e Processos Mecânicos, aprovada pela banca examinadora constituída dos professores:

Prof. Dr. Yukio Shigaki

Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Prof. Dr. Paulo Sérgio Martins - Coorientador

Centro Universitário Una

Prof. Dr. Jánes Landre Jr.

Pontifícia Universidade Católica de Minas Gerais

Prof. Dr. Sandro Cardoso Santos

Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

Belo Horizonte

24 de Maio de 2023

Dedico este trabalho a todos que contribuíram na minha formação pessoal e profissional, que possibilitou minha chegada até o presente momento.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente à minha família pela educação que me foi dada, o apoio e a compreensão durante toda a trajetória de formação acadêmica.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais e ao Departamento de Engenharia Mecânica por me receber de braços abertos.

Ao professor Yukio Shigaki, meu orientador, primeiramente por aceitar a proposta de trabalho de um aluno que sequer havia conhecido e pisado nos arredores do CEFET-MG. Em segundo, por todo gabarito profissional doado, flexibilidade e companheirismo.

Ao professor Paulo Sérgio Martins, coorientador deste trabalho, tutor durante meu período de estágio na indústria, incentivador em minha carreira acadêmica e grande amigo.

Ao mestre Elhadji Cheikh Ba, meu companheiro de pesquisa e braço amigo nos momentos de dificuldade.

A Oerlikon Balzers Revestimentos Metálicos, em especial Rodrigo Bernardinelli, responsável por revestir a ferramenta de corte e a amostra do aço-rápido AISI M35 com o DLC.

RESUMO

O recobrimento de carbono tipo diamante (DLC) é um filme fino que apresenta grande dureza, inércia química e baixo coeficiente de atrito, características que podem aperfeiçoar a performance de ferramentas de corte e componentes mecânicos. Para identificar essas características é de grande importância a realização de ensaios mecânicos, como a nanoindentação, que podem revelar informações de grande valia no que se trata do entendimento e melhoria de técnicas de recobrimento e, quando combinadas ao método dos elementos finitos, leva a resultados detalhados do comportamento do corpo de prova durante o ensaio. Tendo isso em vista, o presente trabalho teve como objetivo a elaboração de um modelo em elementos finitos para o ensaio de nanoindentação de uma amostra composta de aço rápido com um recobrimento de um filme fino de DLC, de forma a verificar a viabilidade da utilização do modelo como substituto do ensaio de nanoindentação. Para isso, foi criado um modelo em elementos finitos para o ensaio. Foram avaliados o impacto da simplificação de somente uma indentação, a variação do raio de ponta do indentador, a utilização de um modelo bidimensional para o ensaio e a influência do atrito durante o ensaio. Notou-se que a utilização de somente uma indentação para descrever o ensaio de indentações parciais causa grande impacto para os resultados. A variação do raio de ponta para o ensaio de nanoindentação não apresenta impacto expressivo na curva de força de indentação x deslocamento do indentador ou dureza obtida para o material. A simplificação do modelo para bidimensional apresenta como impacto a simplificação do indentador Berkovich de piramidal para cônico, impactando também de forma expressiva no tempo de processamento do modelo do ensaio, 17 horas e 50 minutos no modelo tridimensional comparado a 3 minutos e 13 segundos no modelo bidimensional. O modelo bidimensional elaborado apresentou resultados semelhantes ao modelo tridimensional, o que validou a utilização do modelo bidimensional. A variação do coeficiente de atrito não foi relevante para os resultados. Após isso a espessura do filme foi variada de 1,5 μm para 1,0 μm e 2,0 μm . Observou-se melhores características mecânicas de dureza, de comportamento das tensões e de deformações durante o ensaio para o filme fino de 2,0 μm . Foi possível verificar a viabilidade da utilização de um modelo matemático pelo método dos elementos finitos para simulação do ensaio de nanoindentação de forma a complementar os ensaios experimentais.

Palavras-chave: Método dos elementos finitos, DLC, Nanoindentação

ABSTRACT

The diamond-like carbon (DLC) coating is a thin film that has high hardness, chemical inertia and low coefficient of friction, characteristics that can improve the performance of cutting tools and mechanical components. In order to identify these characteristics, it is of great importance to carry out mechanical tests, such as nanoindentation, which can reveal valuable information regarding the understanding and improvement of coating techniques and, when combined with the finite element method, lead to detailed results of the behavior of the specimen during the test. Taking this into consideration, the present work aimed to develop a finite element model for the nanoindentation test of a sample composed of high-speed steel coated with a thin film of DLC, in order to verify the feasibility of using the model as a substitute for the nanoindentation test. For this, a finite element model was elaborated for the test. The impact of simplifying only one indentation, the variation of the indenter tip radius, the use of a two-dimensional model for the test and the influence of friction during the test were evaluated. It was noted that the use of only one indentation to describe the partial indentation test has a great impact on the results. Changing the tip radius for the nanoindentation test does not have a significant impact on the curve of indentation force x displacement of the indenter or the hardness obtained for the material. The simplification of the model to two-dimensional has the impact of simplifying the Berkovich indenter from pyramidal to conical, also significantly impacting the test processing time. The variation in the coefficient of friction was not relevant to the results. After that, the film thickness was varied from 1.5 μm to 1.0 μm and 2.0 μm . Better mechanical characteristics of hardness, stress behavior and deformation were noted during the test for the 2.0 μm thin film. It was possible to verify the feasibility of using a mathematical model using the finite element method to simulate the nanoindentation test in order to complement or replace the performance of experimental tests, having as a limiting factor the purpose for carrying out the tests.

Keywords: Finite element method, DLC, Nanoindentation

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Microestrutura do aço rápido em MEV.....	23
Figura 2 – Diagrama de fases do DLC	25
Figura 3 – Falha coesiva no filme de DLC.....	26
Figura 4 – Deformação gerada pelo ensaio de nanoindentação.....	27
Figura 5 – Força de carregamento (mN) com relação à profundidade(nm) para o aço rápido	28
Figura 6 – Força de carregamento (mN) com relação ao tempo (s) (a) e força de carregamento com relação ao deslocamento para o ensaio de nanoindentação.....	29
Figura 7 – Módulo de elasticidade (GPa) e dureza (GPa) por profundidade de penetração (nm) para o ensaio de nanoindentação.	30
Figura 8 – Filme de DLC depositado em um substrato de metal duro visualizada por meio da técnica de AFM.....	31
Figura 9 – Concentração de tensões durante o ensaio da nanoindentação	32
Figura 10 – Calota gerada sobre a superfície de um corpo de prova no ensaio caloteste	34
Figura 11 – Escala de falha de adesão do filme fino.....	35
Figura 12 – Tensões para o ensaio de nanoindentação (MPa).....	37
Figura 13 – Força de indentação para várias profundidades de penetração	38
Figura 14 – Simplificação axissimétrica de um corpo tridimensional.....	39
Figura 15 – Indentador tipo Berkovich.....	40
Figura 16 – Aproximação do indentador Berkovich ao indentador cônico por: (a) área da base (b) volume de penetração (c) área lateral de penetração	41
Figura 17 – Resultados de carga (mN) e área de contato (μm^2) por deslocamento do indentador (μm) para modelo tridimensional e axissimétrico com raio de ponta de $70,3^\circ$	43
Figura 18 – Resultados da dureza de indentação (H^2) pela profundidade ($1/h$) em GPa^2 e $\mu\text{m} - 1$ respectivamente para os ângulos de (a) $35,3$, 45 , 55 , $65,3$, 75 , and 85 e $65,3$, 75 , e 85° comparando modelo bidimensional e tridimensional.....	44
Figura 19 – Dureza (GPa) X Profundidade de penetração (μm) para um indentador cônico de ponta reta, cônico de ponta arredondada e esférico	45
Figura 20 – Distribuição da pressão de contato para uma superfície lisa e outra rugosa	46

Figura 21 – Representação de um corpo de prova com superfície sem efeito da rugosidade (a) e com rugosidade (b)	47
Figura 22 – Carga em N/m X penetração (Å) para o ensaio de nanoindentação	48
Figura 23 – Nanodureza (GPa) X diâmetro do indentador (Å) para o ensaio de nanoindentação variando o diâmetro do indentador	48
Figura 24 – Perfil de rugosidade gerado para o corpo de prova	49
Figura 25 – Carga em mN X penetração (nm) para o ensaio de nanoindentação para os valores de R_a de 2 nm, 20 nm e 42 nm.	50
Figura 26 – Resultados de deformação no corpo de prova após o ensaio de nanoindentação para cargas de penetração de 1.5 mN (a, c) e 5 mN (b, d) para os valores de R_a de 42 nm (a, b) e 2 nm (c, d).....	51
Figura 27 – Representação da CZM na interface recobrimento substrato	52
Figura 28 – Força de penetração x Deslocamento para diferentes coeficientes de atrito entre substrato e recobrimento para uma profundidade de avanço do penetrador maior de 70 μm	53
Figura 29 – Fluxograma para o procedimento experimental	54
Figura 30 – Análise em MEV da deposição do DLC sobre o aço rápido M35.....	56
Figura 31 – Ensaio de pino sobre disco realizado.....	57
Figura 32 – Modelo para nanoindentação.....	58
Figura 33 – Gráfico de tensão (GPa) x deformação para o filme de DLC	62
Figura 34 – Modelo em elementos finitos gerado para somente uma indentação	64
Figura 35 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real (preto) e a simulação em elementos finitos com uma indentação (vermelho)....	65
Figura 36 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real (preto) e a simulação em elementos finitos com diversas indentações parciais (vermelho).....	67
Figura 37 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real e a simulação em elementos finitos com raio de ponta de 0, 100, 150, 175, 200, 225 e 250 nm	68
Figura 38 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real e a simulação em elementos finitos com raio de ponta de 0, 100, 150, 175, 200, 225 e 250 nm em escala aumentada	69
Figura 39 – Resultados experimentais de dureza e módulo de elasticidade.....	72

Figura 40 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real (preto) a simulação sem atrito (azul), atrito de 0,1 (vermelho) e atrito de 0,3 (verde)	73
Figura 41 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real, modelo com regime elastoplástico ideal e detalhado	74
Figura 42 – Tensões de Von Mises no ponto de maior penetração do indentador (MPa) para o regime elastoplástico ideal (a) e para o regime plástico detalhado (b)	75
Figura 43 – Deformação plástica no ponto de maior penetração do indentador para o regime elastoplástico ideal (a) e para o regime plástico detalhado (b).....	76
Figura 44 – Tensões de Von Mises residuais no retorno do indentador (MPa) para o regime elastoplástico ideal (a) e para o regime plástico detalhado (b).....	77
Figura 45 – Deformações plásticas residuais no retorno do indentador para o regime elastoplástico ideal (a) e para o regime plástico detalhado (b)	78
Figura 46 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real (preto) a simulação em elementos finitos bidimensional (vermelho) e tridimensional (verde).....	79
Figura 47 – Tensões de Von Mises no ponto de maior penetração do indentador (MPa) para o ensaio de nanoindentação tridimensional	81
Figura 48 – Deformações plásticas no ponto de maior penetração do indentador para o ensaio de nanoindentação tridimensional	82
Figura 49 – Tensões de Von Mises residuais no retorno do indentador (MPa) para o ensaio de nanoindentação tridimensional	83
Figura 50 – Deformações plásticas residuais no retorno do indentador para o ensaio de nanoindentação tridimensional.....	83
Figura 51 – Força do indentador X Profundidade de penetração para espessura de 1,0 μm (preto), 1,5 μm (vermelho) e 2,0 μm (rosa)	85
Figura 52 – Tensões de Von Mises no ponto de maior penetração do indentador (MPa) para espessura de filme de 1,0 μm (a) e 2,0 μm (b)	86
Figura 53 – Deformações plásticas no ponto de maior penetração do indentador para espessura de filme de 1,0 μm (a) e 2,0 μm (b).....	87
Figura 54 – Tensões de Von Mises residuais no retorno do indentador (MPa) para espessura de filme de 1,0 μm (a) e 2,0 μm (b).....	88
Figura 55 – Deformações plásticas residuais no retorno do indentador para espessura de filme de 1,0 μm (a) e 2,0 μm (b).....	89

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Classificação da adesão de revestimentos segundo VDI 3198.....	35
Tabela 2 – Composição química do aço AISI M35.....	55
Tabela 3 – Características dos materiais e revestimentos utilizados	57
Tabela 4 – Pontos do ensaio de nanoindentação	60
Tabela 5 – Dureza (GPa) e módulo de elasticidade (GPa) com a variação da espessura para o aço inoxidável, liga de alumínio e cobre	63
Tabela 6 – Resultado final de força de indentação para diversos raios de ponta	70
Tabela 7 – Dureza em GPa para cada simulação realizada e o ensaio real	71
Tabela 8 – Resultado de força final de indentação e dureza para o modelo bidimensional, tridimensional e resultado experimental	80
Tabela 9 – Resultado de força final de indentação e dureza para as espessuras de camada de DLC de 1,0 1,5 e 2,0 μm	85

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas
AFM	Microscopia de força atômica (<i>Atomic Force Microscopy</i>)
AISI	Instituto Americano de Ferro e Aço (<i>American Iron and Steel Institute</i>)
CEFET-MG	Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais
CVD	Deposição Química à Vapor (<i>Chemical Vapor Deposition</i>)
CZM	Modelo de zona coesiva, <i>cohesive zone model</i>
DLC	Carbono tipo diamante (<i>Diamond-Like Carbon</i>)
FIB	microscopia de feixes de íons focalizados
HSC	Usinagem em altas velocidades de corte ou HSM (<i>High Speed Cutting</i>)
HSM	Usinagem em altas velocidades de corte ou HSM (<i>High Speed Machining</i>)
MEF	Método dos elementos finitos
NBR	Norma Brasileira
PVD	Deposição Física à Vapor (<i>Physical Vapor Deposition</i>)
ABNT	Associação Brasileira de Normas Técnicas

LISTA DE SIMBOLOS

μm	Micrômetro	10 ⁻⁶ mm
μN	Micronewton	10 ⁻⁶ N
Å	Angström	10 ⁻¹⁰ mm
Ac	Área de contato	
Al	Alumínio	
Al ₂ O ₃	Alumina	
Al-Mg	Liga Alumínio-Magnésio	
Al-Mg-Si	Liga Alumínio-Magnésio-Silício	
Al-Zn	Liga Alumínio-Zinco	
C	Carbono	
C	Parâmetro de ajuste 1	
C - sp ²	Ligação entre átomos de carbono em configuração de grafite, sp ²	
C - sp ³	Ligação entre átomos de carbono em configuração de diamante, sp ³	
Co	Cobalto	
Cr	Cromo	
CrN	Nitreto de cromo	
CrN	Nitreto de cromo	
Cu	Cobre	
E	Módulo de Elasticidade	
<i>E_{eff}</i>	Módulo de elasticidade efetivo	GPa
Fe	Ferro	
GPa	Giga Pascal	10 ⁹ Pa
h	Profundidade do indentador	
H	Dureza	
H _c	Profundidade de contato	
h _c	Profundidade de penetração	
hf	Profundidade residual	
HO-P	Dureza de nanoindentação	GPa
KIC	Tenacidade à Fratura	
M	Parâmetro de ajuste 2	
Mg	Magnésio	

Mn	Manganês	
Mo	Molibdênio	
Mo	Molibdênio	
MoS ₂	Bissulfeto de molibdênio	
MPa	Mega Pascal	10 ⁶ Pa
ν	Coeficiente de Poisson	
Nb	Nióbio	
Ni	Níquel	
nm	Nanômetro	10 ⁻⁹ mm
P	Carga	mN
P_0	pressão de Hertz	
p	Pressão de contato	
Pmax	Carga máxima do ensaio	mN
R _a	Parâmetro bidimensional de média aritmética	μm
R _t	Parâmetro bidimensional rugosidade total	μm
R _z	Parâmetro bidimensional de altura máxima média	μm
s	Segundos	
S	Rigidez no descarregamento	
Si	Silício	
SiC	Carbeto de silício	
SiO ₂	Oxido de silício	
sp ²	Hibridização 2 do carbono	
sp ³	Hibridização 3 do carbono	
ta-C	Carbono amorfo tetraédrico	
ta-C:H	Carbono amorfo tetraédrico hidrogenado	
Ti	Titânio	
TiAlN	Nitreto de alumínio titânio	
TiCN	Carbonitreto de titânio	
TiN	Nitreto de titânio	
V	Vanádio	
W	Tungstênio	
W	Tungstênio	
WC	Carboneto de tungstênio	
WC	Carboneto de tungstênio	

WC/C	Carboneto de tungstênio com carbono amorfo a-C
Zn	Zinco
ZrN	Nitreto de zircônio
θ	Ângulo de ponta indentador cônico
σ_e	Tensão de escoamento
ψ	Ângulo de ponta indentador piramidal

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	18
1.1 Justificativa.....	20
1.2 Objetivo Geral.....	20
1.3 Objetivos Específicos.....	21
2 DESENVOLVIMENTO	22
2.1 Aço rápido	22
2.2 Revestimento de carbono tipo diamante.....	23
2.3 Caracterização do filme de DLC	26
2.3.1 Nanoindentação.....	26
2.3.2 Caloteste	33
2.3.3 Ensaio de adesão do filme fino ao substrato.....	34
2.4 Método dos elementos finitos	35
2.5 Nanoindentação por meio do método dos elementos finitos	37
2.6 Utilização de axissimetria para o indentador Berkovich	39
2.7 Efeitos da rugosidade no ensaio de nanoindentação.....	45
2.7 Interface substrato-recobrimento	51
3 METODOLOGIA.....	54
3.1 Experimento utilizado para validação do modelo	55
3.2 Propriedades dos materiais	56
3.4 Definição das condições de contorno do ensaio	58
3.5 Modelo de elementos finitos com somente uma indentação	59
3.6 Modelo de elementos finitos por meio de indentações parciais.....	60
3.7 Variação do raio de ponta do indentador	60
3.8 Verificação da influência do atrito no ensaio de nanoindentação	61
3.9 Comparação a um modelo tridimensional.....	61
3.10 Verificação das características mecânicas do DLC.....	62
3.11 Variação da espessura do filme de DLC.....	62

4 RESULTADOS	64
4.1 Modelo em elementos finitos com somente uma indentação	64
4.2 Modelo em elementos finitos com indentações parciais.....	66
4.3 Impacto da variação do raio de ponta na força final de indentação.....	67
4.4 Impacto da variação do raio de ponta na dureza do filme de DLC	70
4.5 Influência do atrito na simulação.....	72
4.6 Verificação das características mecânicas do DLC.....	73
4.7 Modelo de nanoindentação tridimensional	78
4.7.1 <i>Tensões e deformações no ensaio de nanoindentação tridimensional</i>	80
4.8 Variação da espessura do filme de DLC	84
5 CONCLUSÕES	90
6 TRABALHOS FUTUROS	92
REFERÊNCIAS	93

1 INTRODUÇÃO

A busca pela maior eficiência em processos de fabricação é uma das grandes metas da indústria, visando maior competitividade no mercado juntamente com menor impacto ao meio ambiente. Nesse aspecto o processo de usinagem, que é amplamente utilizado para transformação da forma, características mecânicas e tribológicas de diversos produtos, apresenta grandes oportunidades para inovação. Dessa forma vem surgindo novos materiais e técnicas de revestimento para ferramentas de corte buscando melhores propriedades mecânicas e tribológicas, que contribuem para o aumento da vida útil durante a usinagem, repetibilidade para o processo e redução da utilização de fluidos de corte que apresentam grande impacto ambiental. Dentre esses revestimentos destaca-se o processo de deposição de filmes de *Diamond-Like Carbon* (DLC), um filme fino de carbono amorfo composto por frações alotrópicas semelhantes ao grafite (C - sp²) e ao diamante (C - sp³), depositado sobre a ferramenta de corte ou componente mecânico que agrega características como alta dureza e baixo coeficiente de atrito à ferramenta (DAS; AGRAWAL, 2011; ILYUSCHENKO *et al.*, 2015; LU *et al.*, 2020; POPOV *et al.*, 2019).

A aplicação do DLC vem se mostrando vantajosa em diversas áreas da engenharia, tendo como exemplo a usinagem a seco de ligas de alumínio devido à sua capacidade de autolubrificação, dureza e inércia química (KUMAR, S SURESH *et al.*, 2020; SALAH *et al.*, 2016). A usinagem em altas velocidades de corte ou HSM (*High Speed Machining*) ou HSC (*High Speed Cutting*) é reconhecida como uma importante tecnologia de usinagem em desenvolvimento e implantação. Tem como principal vantagem a possibilidade de executar usinagem com velocidades de corte cinco a dez vezes maiores do que as normalmente utilizadas e com avanço e profundidade de corte menores do que os adotados na usinagem convencional. Embora possa ser utilizada em operações de desbaste, a sua aplicação é indicada para semiacabamento e acabamento (OLIVEIRA, 2003). Para Brandão e Coelho (2011), deve-se considerar que a usinagem em altas velocidades pode variar substancialmente dependendo do material a ser usinado, como no caso do fresamento ou torneamento de ligas de titânio, nos quais as velocidades de corte entre 100 e 500 m.min⁻¹ são consideradas altas.

MARTINS (2016) avaliou a usinagem dos furos realizados com brocas de aço rápido e metal duro sem e com revestimento de DLC visando suas características da superfície tribológicas (R_a, R_z e R_t), dimensional e erros de formas circularidade e cilindridade. Para análise do filme aplicado sobre as superfícies das amostras utilizaram-se algumas técnicas

de caracterização para verificar o comportamento do filme sobre substrato. Os procedimentos realizados para caracterizar o filme de DLC foram para avaliar o comportamento da adesão do filme sobre o substrato. Para análise da superfície dos substratos de aço rápido e metal duro sem e com filme de DLC, preparou-se uma amostra de cada material com as dimensões do equipamento, calibrado antes das medições. Com esse processo, os erros gerados no processo de medição são reduzidos. A calibração foi feita entre 10 a 20 minutos. As medidas de rugosidade foram realizadas a partir de imagens obtidas por microscopia de força atômica (*Atomic Force Microscopy* - AFM). Nos resultados, verificou-se que a utilização do filme de DLC em brocas de aço rápido no processo de furação de ligas de alumínio a altas velocidades de corte apresenta grandes vantagens em se tratando da vida útil da ferramenta de corte.

O filme de DLC é depositado usualmente pelos métodos de deposição física em fase vapor (PVD) ou deposição química em fase vapor (CVD). Por meio desses processos é possível determinar a espessura do filme aplicado e prever a estrutura química do filme, quantidade de carbono em fase grafite ou diamante. Essas características são chave para o rendimento da ferramenta de corte com o recobrimento em DLC em serviço. Fenômenos como deslocamento e trincamento do filme, baixa dureza ou elasticidade tendem a gerar falhas na ferramenta. Isso acarreta perda de peças no processo devido a erros geométricos e alto custo de troca de ferramenta de corte (SUGITA *et al.*, 2019; WIATROWSKI *et al.*, 2017; ZDUNEK *et al.*, 2018).

Como forma de estudar e prever as falhas no recobrimento no processo de fabricação da ferramenta de corte ou já em trabalho, são utilizados ensaios mecânicos e tribológicos. Entre esses se destacam o ensaio de nanoindentação por microscopia de força atômica, utilização do tribômetro para ensaio de pino sobre disco entre outros. O ensaio de nanoindentação é composto por um penetrador com formato cônico ou piramidal que avança sobre o recobrimento gerando como dados uma força de penetração relacionada ao avanço. Com isso é possível determinar características como dureza do recobrimento, módulo de elasticidade e o comportamento superficial (trincamento, delaminação do recobrimento, interface substrato recobrimento). A realização do ensaio ocorre com o auxílio de um aparelho de microscopia de força atômica (KAN *et al.*, 2013; LIBÓRIO, MAXWELL; LEMOS, DIEGO; DIAS, 2014; MARTINS, 2016).

Os métodos computacionais são amplamente utilizados para resolução de problemas de engenharia de forma rápida e com boa precisão. Entre esses se destaca o método dos elementos finitos que tem como objetivo a determinação de resultados aproximados para problemas de valores de contorno de equações diferenciais, dividindo cada domínio em elementos de menor tamanho. Como vantagens da utilização do método dos elementos finitos

destaca-se a resolução de problemas de forma rápida para geometrias complexas, e identificação de concentração de tensões em diversos pontos do corpo (CHANDRUPATLA; BELEGUNDU, 2021; DENG *et al.*, 2019).

A aplicação de métodos numéricos em problemas de engenharia é amplamente utilizada em diversas áreas, principalmente quando se tratam de situações de maior complexidade. A aplicação de métodos numéricos, como o método dos elementos finitos, pode acarretar em soluções otimizadas e com menor custo comparados aos métodos experimentais. Outra vantagem dos métodos numéricos é o acompanhamento de etapas intermediárias da simulação pretendida de forma rápida e prática, algo que necessitaria de maior esforço em métodos experimentais. Tendo isso em vista, os métodos numéricos vêm ganhando espaço nas áreas de processos de fabricação, fratura, estrutural, dentre outros (DAR; MEAKIN; ASPDEN, 2002; JAVADI; TAN; ZHANG, 2003).

1.1 Justificativa

Na busca de otimização das características tribológicas de filmes finos em serviço, ensaios mecânicos como a nanoindentação por meio de Microscopia de Força Atômica (AFM) são realizados em corpos de prova. Nesse ensaio é possível se obter características do filme como dureza e módulo de elasticidade. Porém, a realização desse experimento acarreta alto custo, disponibilidade de laboratório e ferramental específico. Além disso, nesse ensaio não é possível obter a distribuição de tensões e comportamento do substrato durante o ensaio. Tendo em vista essas limitações, o trabalho propôs a realização de simulação computacional do ensaio tribológico da nanoindentação pelo método dos elementos finitos como um complemento aos ensaios mecânicos para determinar características mecânicas e tribológicas de filmes finos.

1.2 Objetivo Geral

O objeto do estudo foi simular e obter resultados comparativos, pelo método dos elementos finitos, o ensaio de nanoindentação por AFM com penetrador *Berkovich* num conjugado composto por um filme fino de DLC depositado no substrato de aço rápido (AISI M2), para avaliar o comportamento de seu campo de tensões e de deformações. Os resultados obtidos foram comparados com valores experimentais e numéricos existentes na literatura especializada.

1.3 Objetivos Específicos

Tendo em vista o objetivo geral do trabalho, foram elaborados os seguintes objetivos específicos:

- a) Aplicar por meio do software Abaqus 2016 um modelo em elementos finitos do ensaio de nanoindentação com penetrador Berkovich de um corpo de prova composto de aço rápido AISI M2 revestido em DLC.
- b) Modelar características mecânicas da interface substrato, camada intermediária e revestimento para o corpo de prova.
- c) Utilizar o modelo validado, para diversas espessuras de filme de DLC, aplicando a diversas espessuras, em busca de uma espessura ideal para melhores resultados de dureza, tensões e de deformações do filme.

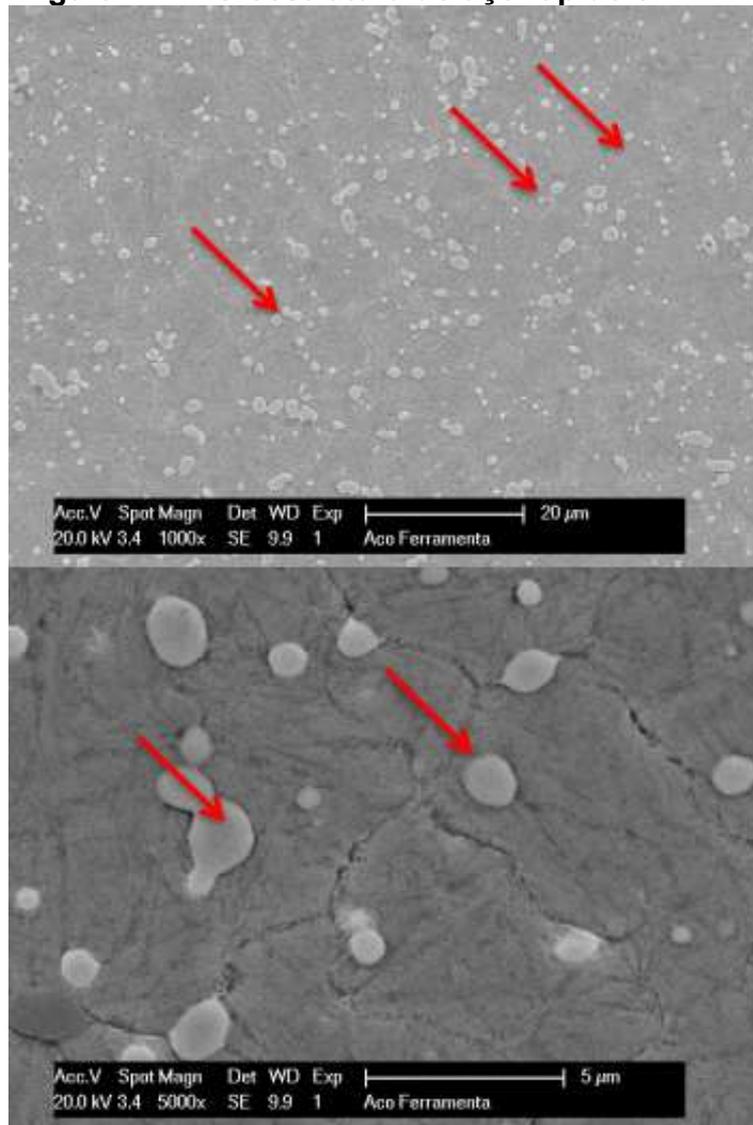
2 DESENVOLVIMENTO

No capítulo que se segue será exposta a fundamentação teórica que foi base do trabalho, sendo focada nas características dos materiais envolvidos, características do ensaio de nanoindentação e a utilização do método dos elementos finitos para simulação do ensaio.

2.1 Aço rápido

Os aços rápidos são amplamente utilizados na indústria, principalmente na fabricação de ferramentas de corte, em que são necessárias características como resistência ao desgaste abrasivo, resistência à ciclos térmicos, tenacidade e módulo de elasticidade. Apresenta como vantagem a tenacidade comparado a outros materiais para fabricação de ferramentas de corte, como cerâmicas e cermets. Porém, essas características não se mantêm a temperaturas acima de 600°C, presentes em alguns processos mecânicos, caracterizando baixa resistência térmica. Uma forma de contornar esse empecilho na aplicação do aço rápido é a utilização de recobrimentos, dentre eles se destacando o TiN, TiAlN, TiCN, WC/C, CrN, MoS₂ e DLC, além de tratamentos superficiais como nitretação e a niquelação (CHAUS *et al.*, 2021; GSELLMANN *et al.*, 2020; KRBATA *et al.*, 2020).

Os aços rápidos possuem uma matriz martensítica com microestrutura refinada e dispersão de precipitados finos formados na presença de elementos de liga como cromo (Cr), molibdênio (Mo), vanádio (V), tungstênio (W), cobalto (Co), titânio (Ti), níquel (Ni) e nióbio (Nb). Na Figura 1 é possível visualizar pontos martensíticos com precipitados intragranulares e intergranulares evidenciados pelas setas por meio de uma técnica denominada microscopia de varredura atômica (MEV). A dosagem de cada um dos elementos citados tem efeito sobre a dureza final do aço, juntamente com tratamentos térmicos. A variação da concentração de carbono no aço tem papel de aumentar a temperabilidade e controlar a dureza do aço (MARTINS, 2016; SCHINO; CORRADI, 2018; TSHABALALA *et al.*, 2021).

Figura 1 – Microestrutura do aço rápido em MEV

Fonte: Adaptado de Martins (2016)

Os aços rápidos são divididos em duas categorias, sendo a primeira a série T, com teor entre 11,75% e 21% de tungstênio, seu principal elemento de liga. A segunda categoria é ao molibdênio (série M) com um teor de molibdênio entre 3,25% e 11%, se tornando o principal elemento de liga do aço (ABNT NBR NM 116-1:2005). Os aços rápidos da série M são mais utilizados, pois apresentam maior resistência à abrasão e menor distorção no tratamento térmico (MARTINS, 2016).

2.2 Revestimento de carbono tipo diamante

O carbono é um dos elementos químicos mais abundantes na natureza e possui como característica se apresentar em várias formas morfológicas com variação na estrutura

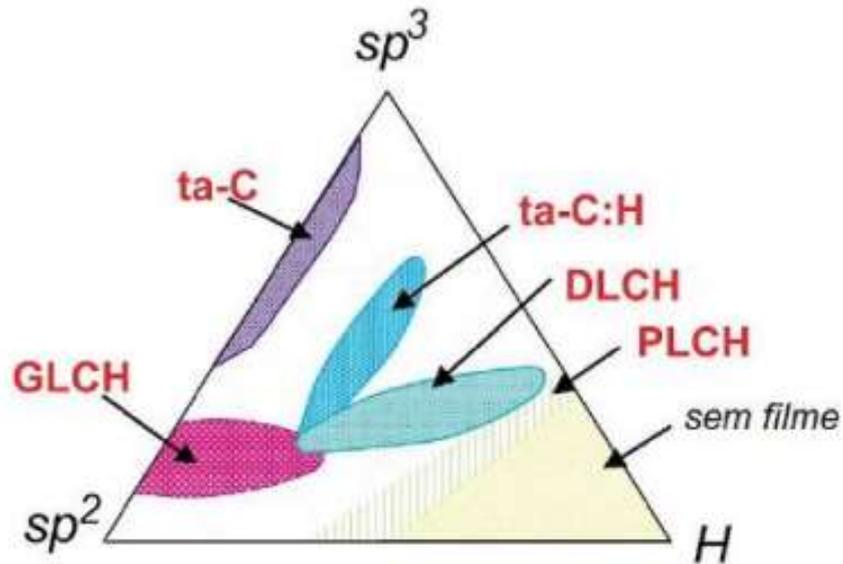
crystalina que compõe o material, levando a uma vasta gama de propriedades físicas e mecânicas. Entre as formas mais estudadas estão o diamante, grafite, nanotubo, fulereno, grafeno e algumas formas amorfas, como por exemplo o revestimento de carbono tipo diamante (DLC) (MARTINS, 2016).

O DLC é um revestimento que apresenta características de grande interesse para as ciências mecânicas, como alta dureza, baixo coeficiente de atrito, inércia química em meio alcalino e ácido, boa resistência ao desgaste e à corrosão. Como campos de aplicação se destacam a área de processos de fabricação, eletrônica e biomédica (ONODERA et al., 2020). Basicamente, o DLC é definido como um carbono amorfo composto por frações de hibridizações sp^2 (carbono semelhante ao grafite) e sp^3 (carbono semelhante ao diamante). A fração percentual de sp^3 irá definir a classe do DLC em: (1) a-C com até aproximadamente 20%; e (2) ta-C, entre 20% a 80%. Na presença do hidrogênio, as classes citadas anteriormente passam a ser a-C:H e ta-C:H. Outros elementos também podem ser adicionados (dopagem do DLC) para melhorar a adesão, propriedades mecânicas e/ou manipular a fração de sp^3 , como o nitrogênio, titânio, entre outros (MARTINS; CARNEIRO; et al., 2022).

Quando voltado à usinagem, o DLC é utilizado para recobrir ferramentas de corte conjugado a substratos de ligas ferrosas e não ferrosas como aço rápido, metal duro, cerâmicas, entre outros. Embora haja grande compatibilidade em diversos substratos, os filmes de DLC são contraindicados na usinagem de metais ferrosos, como aços, ferros fundidos e superligas. Isso pois há uma grande solubilidade química de carbono nesses materiais, além da elevada temperatura do processo, levando o DLC a uma condição de instabilidade (MARTINS et al., 2021).

Para compor as características do DLC, os átomos de carbono se apresentam em duas formas sp^2 e sp^3 ao formar ligações químicas. As ligações sp^2 tendem a formar anéis grafiticos/aromáticos, cadeia olefinas, enquanto o de hibridização sp^3 forma tetraedros e ligações terminais -C:H-n ($n = 1 - 3$). Com isso, as ligações sp^2 estão ligadas às características do grafite, enquanto as ligações sp^3 se relacionam às características do diamante, como sua alta dureza, inércia química e a densidade (FERRARI, 2008). Vale ressaltar que a estrutura do DLC não é completamente composta de carbono amorfo, também há a presença de carbono amorfo hidrogenado. Dessa forma é possível manipular as características do filme ajustando a fração sp^3 e sp^2 e o teor de hidrogênio adequando à aplicação proposta, conforme pode ser visualizado na Figura 2. Isso pode ser alcançado modificando os parâmetros de deposição (TALIBOUYA BA et al., 2021).

Figura 2 – Diagrama de fases do DLC

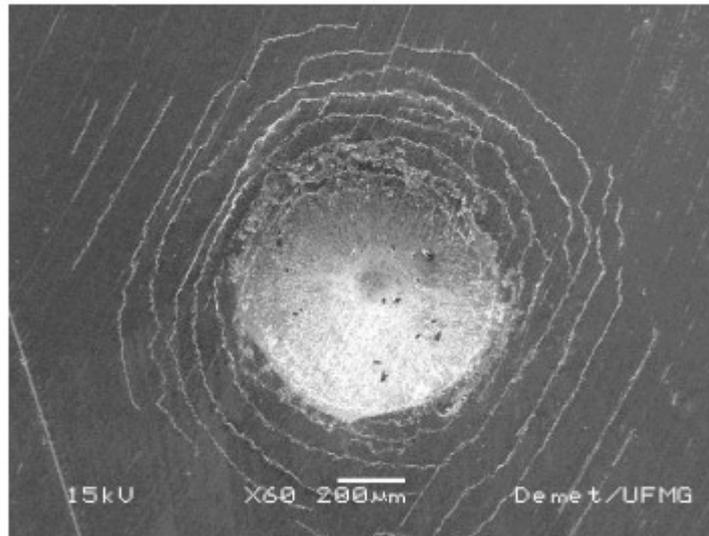


Fonte: Martins (2016)

O grafite é a forma do carbono que apresenta maior estabilidade nas condições normais de temperatura e pressão. Composto da hibridização sp^2 com configuração geométrica hexagonal, em que os átomos são ligados por ligações σ , gerando camadas planas de átomos sobrepostos. Isso leva o grafite a uma configuração anisotrópica, em que o módulo de Young na direção normal ao plano é bastante elevado, se contrastando à direção do cisalhamento. Isso pois a ligação dos planos é por forças de Van de Waals, levando a baixa força de ligação entre os planos e deslizamento entre eles a uma baixa força cisalhante (SHARIFAHMADIAN; MAHBOUBI; YAZDANI, 2019).

O diamante apresenta como características baixo coeficiente de atrito e desgaste, alta dureza, alta condutividade térmica, alta resistividade elétrica e inércia química quando exposto à maioria dos materiais. O diamante natural possui formato octaédrico de grãos, enquanto o diamante sintético apresenta formato cúbico e octaédrico (BARROS; RIBEIRO, 2005).

Em serviço, falhas em sistemas com recobrimentos em DLC tendem a ocorrer na interface entre substrato e recobrimento (falha adesiva), fratura do recobrimento, conforme a Figura 3, (falha coesiva) ou fratura sub superficial (falha do substrato). Para evitar a falha adesiva, camadas intermediárias entre o filme de DLC e o substrato são utilizadas de forma a aumentar a força de adesão. Vários materiais podem ser utilizados na deposição dessa camada fina, dentre eles silício (Si), cromo (Cr), titânio (Ti), tântalo (Ta), vanádio (V). Revestimentos multicamadas, como por exemplo SiC, TiC, TiN, TiCN, CN, Ti também podem ser utilizados (CHAVES FILHO; DIAS, 2019; CHEN, CIHAI *et al.*, 2020; LUNG; CHIANG; HON, 2001).

Figura 3 – Falha coesiva no filme de DLC

Fonte: Dias, A. M. S.; Sotani, P.F.B.; Godoy (2010)

2.3 Caracterização do filme de DLC

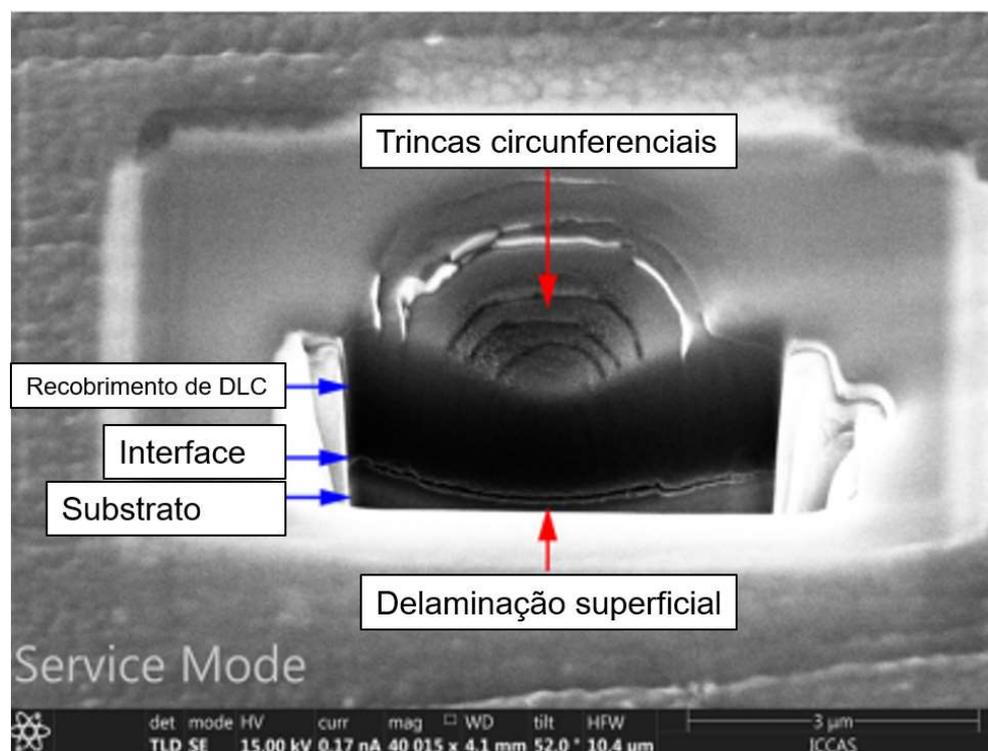
Caracterização de um material é um processo que utiliza de técnicas para determinar as propriedades de um material e sua estrutura interna. Essas técnicas podem ser destrutivas ou não destrutivas e determinam características como dureza, módulo de Young, coeficiente de atrito dentre outras. As técnicas relacionadas à caracterização do filme de DLC serão tratadas no tópico que se segue.

2.3.1 Nanoindentação

Atualmente, os ensaios instrumentados de dureza permitem a mensuração da resistência do material, resistência à penetração, deformação plástica, resistência ao risco dentre outras características (LEE et al., 2005). Um procedimento bastante utilizado para se obter a dureza é o ensaio Brinell. Este ensaio consiste na compressão de uma esfera rígida contra uma superfície plana e polida da amostra, por um determinado período de tempo. Após esta indentação uma marca fica impressa na superfície do corpo de prova e, a partir de relações entre a carga causadora da impressão e o tamanho da impressão, avalia-se a dureza do material. Em geral, esse é um ensaio simples, pois necessita apenas de um equipamento geralmente encontrado em laboratórios, além de ser um ensaio não destrutivo. Nas últimas décadas, com o surgimento dos ensaios de indentação instrumentada, esses equipamentos são capazes de avaliar além da dureza, outras características dos materiais, como o coeficiente de Poisson (ν), a tenacidade à Fratura (KIC) e o módulo de Elasticidade (E), principalmente em filmes finos (LIBÓRIO, MAXWELL; LEMOS, DIEGO; DIAS, 2014).

De acordo com KAN *et al.* (2013), a nanoindentação é um ensaio mecânico que é comumente utilizado para definir características como dureza e módulo de elasticidade para materiais com pequenas dimensões, que limitam a utilização de técnicas tradicionais. A técnica consiste na utilização de um penetrador, normalmente de um material de alta dureza, como diamante, que penetra a amostra aplicando uma carga crescente com valor máximo pré-definido. Ao atingir o valor máximo de carga, há uma redução da carga e recuo do indentador para atingir o relaxamento do material. Isso leva a uma resposta do material se deformando elasticamente e plasticamente, o que pode ser constatado na Figura 4.

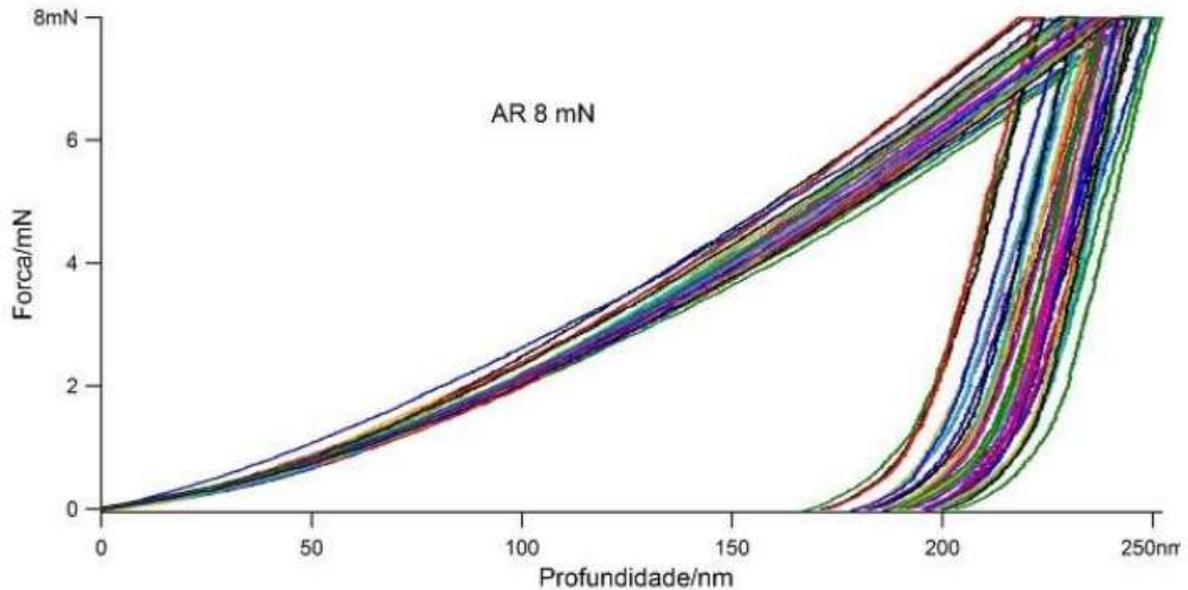
Figura 4 – Deformação gerada pelo ensaio de nanoindentação.



Fonte: Adaptado de Xiao *Et Al.* (2019)

Segundo MARTINS (2016), para o cálculo do módulo de elasticidade do material a partir dos resultados do experimento é utilizado o método de OLIVER; PHARR, 1992, que consiste da realização de diversas indentações do material no mesmo ponto e são geradas curvas de indentações similares à Figura 5.

Figura 5 – Força de carregamento (mN) com relação à profundidade(nm) para o aço rápido



Fonte: Martins (2016)

Segundo LIU et al., 2020 para obter o módulo de elasticidade a partir dos resultados, inicialmente é ajustada a curva de descarga com relação a carga, conforme a Equação (1):

$$P = C (h - hf)^m \quad (1)$$

Em que P é a carga (mN), C e m são parâmetros de ajuste, h é a profundidade e hf a profundidade residual.

Para o cálculo da rigidez no descarregamento (S) é utilizada a Equação (2):

$$S = m C (h_{máx} - hf)^{m-1} \quad (2)$$

A profundidade de contato do indentador no material é dada pela Equação (3):

$$hc = h_{máx} - \varepsilon P_{máx} S \quad (3)$$

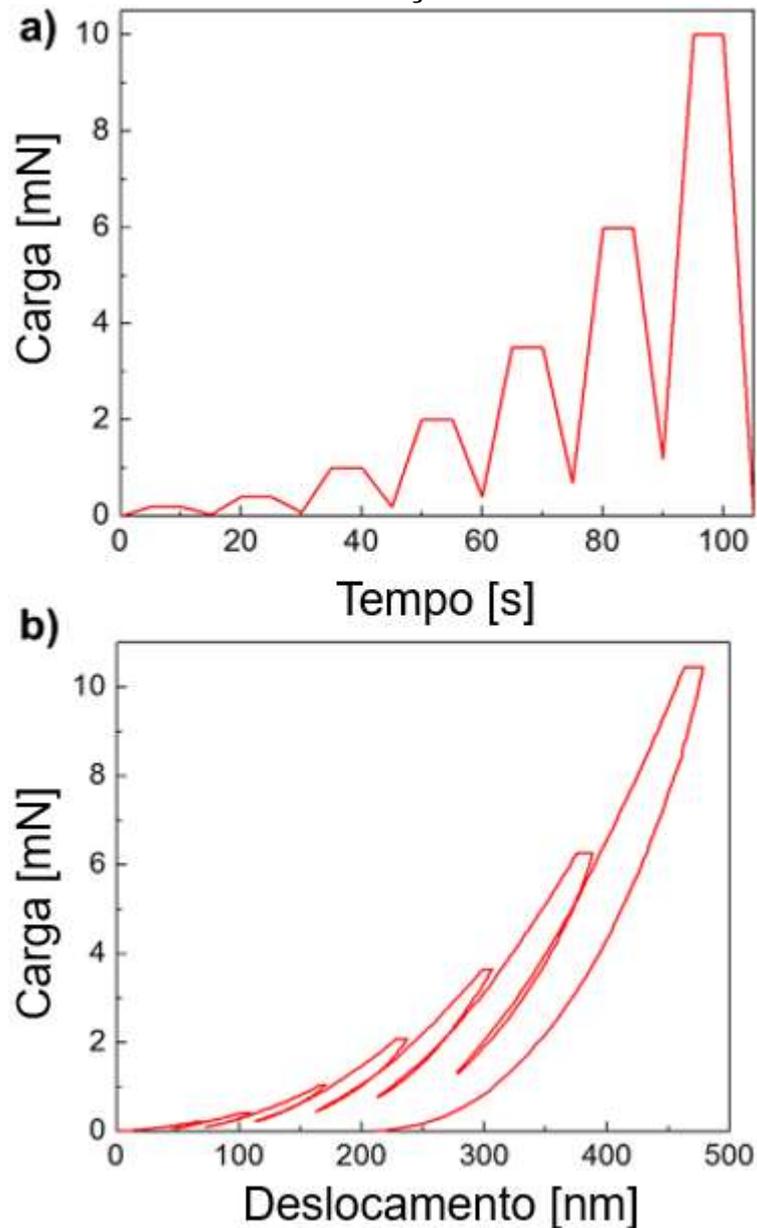
Sendo Pmax a carga máxima do ensaio (mN), ε a constante relacionada ao indentador. Para o cálculo da dureza de nanoindentação (HO - P) (GPa) e o módulo de elasticidade efetivo Eeff (GPa) são utilizadas as Equações (4) e (5):

$$(HO - P) = P_{máx} HC \quad (4)$$

$$E_{eff} = \sqrt{(\pi^2)} * S \sqrt{AC} \quad (5)$$

Uma adaptação do método elaborado por OLIVER; PHARR (1992) bastante utilizada é a indentação cíclica, em que a amostra sofre de vários carregamentos e descarregamentos parciais durante o ensaio, conforme Figura 6. Esse método acarreta menor tempo de realização do ensaio e é utilizado tanto para materiais duros quanto dúcteis.

Figura 6 – Força de carregamento (mN) com relação ao tempo (s) (a) e força de carregamento com relação ao deslocamento para o ensaio de nanoindentação.



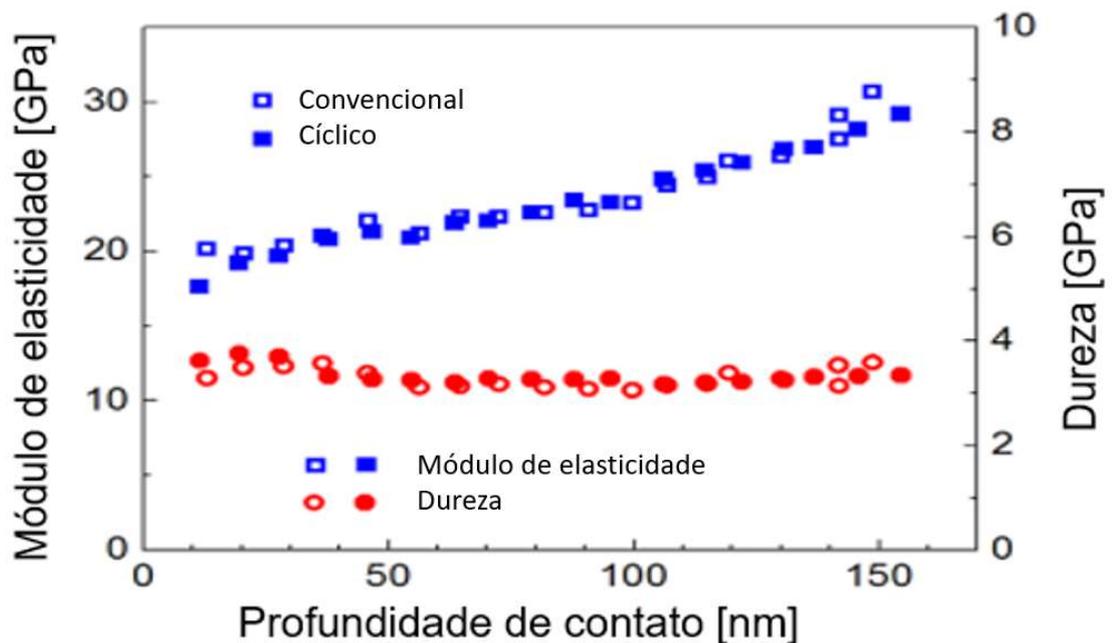
Fonte: Adaptado de CECH et al. (2015)

O perfil da curva visualizado na Figura 6 (b) demonstra um domínio do regime elástico durante o ensaio realizado, evidenciado pela inclinação do gráfico durante os períodos de

retorno do indentador. Também é possível notar um baixo comportamento viscoelástico, caracterizado pela sobreposição dos períodos de carregamento e descarregamento.

Na Figura 7 são comparados resultados de dureza e módulo de elasticidade do método convencional de OLIVER; PHARR (1992) e o método da indentação cíclica. Se pode observar uma grande semelhança nos resultados encontrados. Uma vantagem da indentação cíclica é a redução no tempo de ensaio comparado ao método convencional. O experimento foi realizado com um filme de tetravinylsilane (pp-TVS) depositado sobre um substrato de policarbonato (CECH *et al.*, 2015).

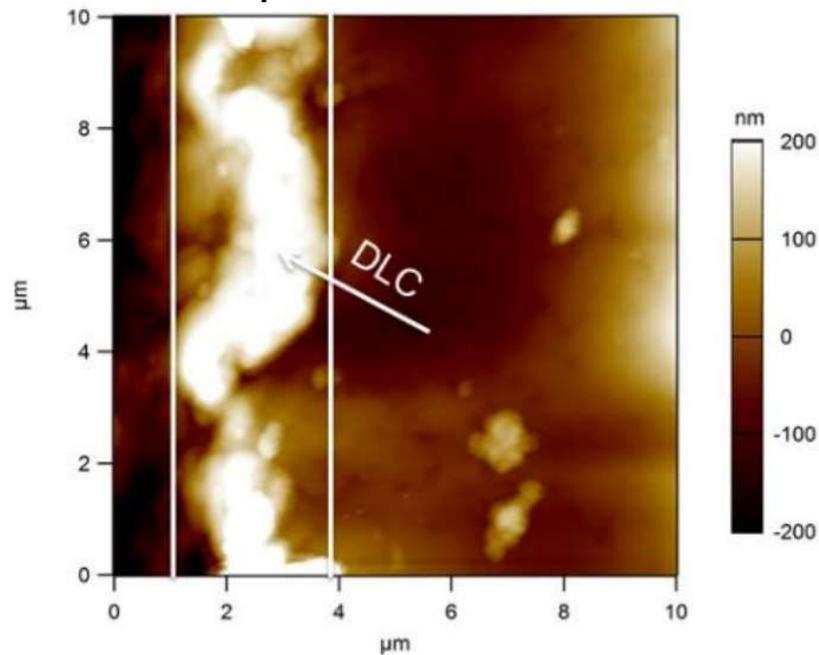
Figura 7 – Módulo de elasticidade (GPa) e dureza (GPa) por profundidade de penetração (nm) para o ensaio de nanoindentação.



Fonte: Adaptado de CECH *et al.* (2015)

Quando o ensaio é focado em filmes finos, a técnica de nanoindentação por AFM (*Atomic Force Microscope*) é utilizada. Todavia realizar estes ensaios em filmes finos pode ser um desafio pelas dificuldades em mensurar as solicitações, as tensões e as deformações em um recobrimento de pequenas dimensões, exigindo equipamentos sofisticados e de difícil acesso. Com o avanço da tecnologia, além dos microscópios ópticos, outros ainda mais potentes foram desenvolvidos, como o Microscópio de Varredura por Sonda (SPM – *Scanning Probe Microscope*), que se divide em duas classes: o STM (*Scanning Tunneling Microscope*) e o AFM. Na Figura 8 é possível visualizar um filme de DLC depositado sobre um substrato de metal duro por meio da técnica de AFM (ARAÚJO, 2011).

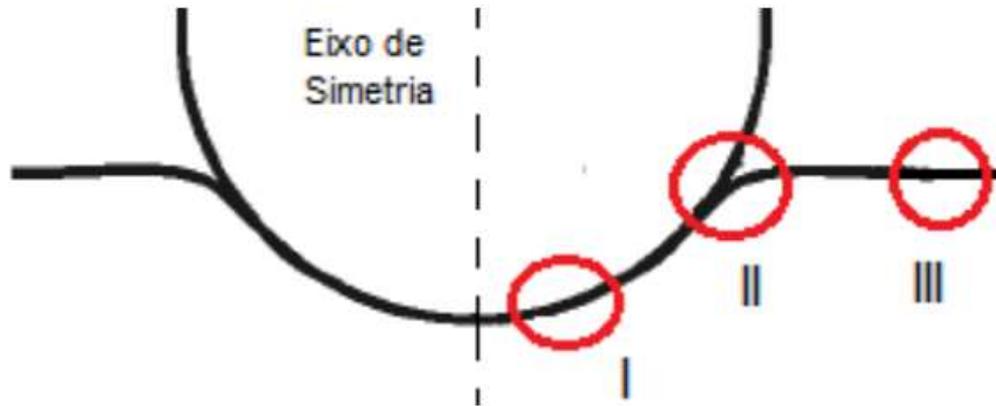
Figura 8 – Filme de DLC depositado em um substrato de metal duro visualizada por meio da técnica de AFM



Fonte: MARTINS (2016)

Durante um ensaio de nanoindentação para filmes finos compostos por material duro é esperada uma certa resposta, ilustrada pela Figura 9. Na área delimitada pela superfície da amostra próxima ao eixo de simetria do penetrador (região I), deve ocorrer uma maior concentração de tensões compressivas devido ao contato do penetrador com o corpo de prova. Na região delimitada pela borda de contato entre o penetrador e filme (região II) há uma grande probabilidade de concentração de trincas. Na região próxima à área de realização do ensaio (região III), são esperadas trincas devido às tensões de flexão que surgem no filme. Essas tensões de flexão são resultado da profundidade de penetração, o gradiente de tensões de contato se transforma em tensões de flexão no início do ensaio e com o avanço do penetrador, as tensões se comportam como tensões de membrana, ou seja, tensões de tração (ARAÚJO; DIAS, 2014; CHAVES FILHO; DIAS, 2019).

Figura 9 – Concentração de tensões durante o ensaio da nanoindentação



Fonte: Chaves Filho e Dias (2019)

Segundo FUJISAWA *et al.* (2018), é recomendada uma máxima profundidade de penetração do indentedor de 10% da espessura do filme. Isso ocorre pois, após essa profundidade de penetração, uma grande parte do recobrimento já se encontra em regime plástico, sendo que nas vizinhanças do indentedor há uma grande taxa de escoamento e, com isso, aumento da área de contato penetrador substrato com o acúmulo de material escoado, a uma maior participação do atrito durante o ensaio.

De acordo com KUMAR, AMIT; ZENG (2010) o comportamento do substrato na determinação das características do filme é sempre um contratempo, pois influi de forma significativa nos resultados dos ensaios. Isso ocorre em filmes finos mesmo com baixas profundidades de penetração e forma mais acentuada em recobrimentos duros, como o DLC.

Para determinar a dureza do recobrimento durante o ensaio, parte-se do conceito de dureza exposto na Equação (6), em que H é a dureza, P a carga e A_c a área de contato (KUMAR, AMIT; ZENG, 2010).

$$H = \frac{P}{A_c} \quad (6)$$

Para o indentedor Berkovich a área (A_c) pode ser expressa conforme a equação (7):

$$A_c = 24.56h_c^2 \quad (7)$$

Em que h_c é a profundidade de penetração do indentedor no corpo de prova. Porém caso seja realizada uma penetração em grande profundidade, em que o substrato sofra deformação de forma a influir no resultado, há necessidade de correção da profundidade com a equação (8):

$$h_c = h - \varepsilon \left(\frac{P_{\max}}{S_{ul}} \right) \quad (8)$$

Em que ε é uma constante da forma do penetrador (0,75 para o Berkovich), h é a profundidade de penetração, P_{\max} é a força máxima que o penetrador exerce durante o ensaio e S_{ul} é a dureza de contato definida pelas curvas de descarregamento. Essa equação é utilizada para a indentação pelo método convencional de OLIVER; PHARR (1992). Para a indentação cíclica, o valor de S_{ul} pode ser definido a cada descarregamento parcial (S_{csm}) conforme a equação (9).

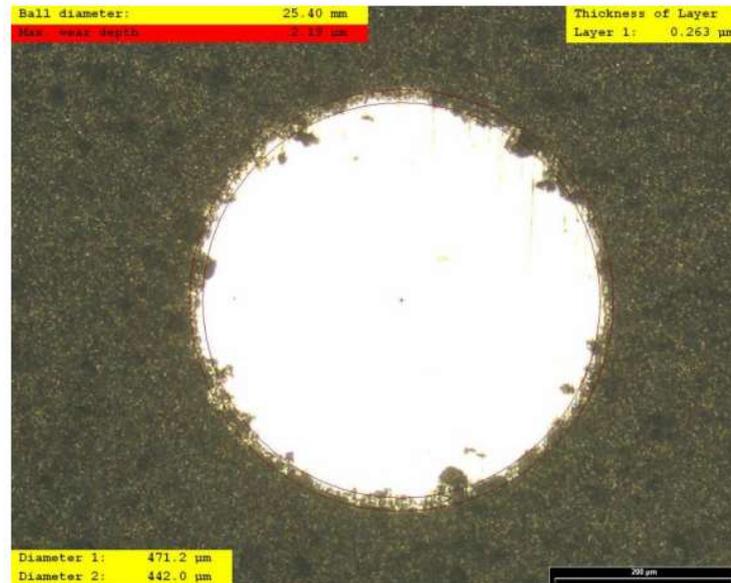
$$h_c = h - \varepsilon \left(\frac{P_{\max}}{S_{csm}} \right) \quad (9)$$

2.3.2 Caloteste

O caloteste é um método utilizado para medição do desgaste de uma superfície pelo mecanismo abrasivo. Entre suas vantagens com relação a outros ensaios de desgaste se destacam a facilidade de execução, baixo custo, possibilidade de trabalhar com superfícies não planas, dimensões reduzidas da amostra para o teste e maior precisão dos resultados quando se trabalha com revestimentos em filmes finos. Por meio do ensaio é possível encontrar a espessura do recobrimento depositado e coeficiente de desgaste da amostra com e sem o recobrimento, sendo o caloteste utilizado normalmente em substratos metálicos. Com algumas adaptações no ensaio, também é possível encontrar o coeficiente de atrito da superfície (CHEN, H. *et al.*, 2005).

No ensaio do caloteste uma esfera em rotação contínua é pressionada contra um ponto da superfície do corpo de prova, mantendo essa posição durante o ensaio. Essa rotação gera atrito sobre a superfície do corpo de prova e, na interface entre os dois corpos, uma solução contendo partículas abrasivas é aplicada, gerando um desgaste abrasivo a três corpos. Ao final do ensaio, ocorre uma depressão na superfície da amostra, chamada de calota, que pode ser visualizada na Figura 10 (GEE *et al.*, 2003).

Figura 10 – Calota gerada sobre a superfície de um corpo de prova no ensaio caloteste

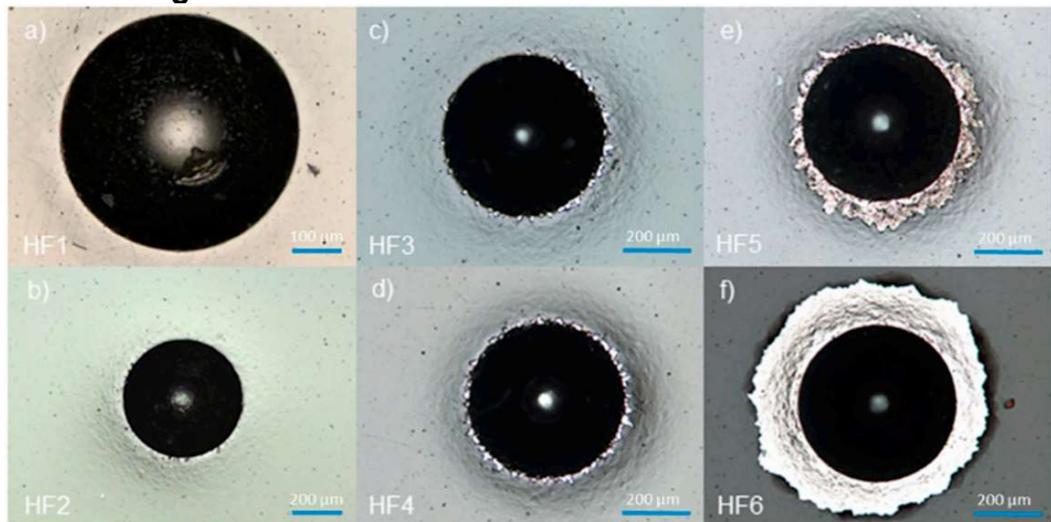


Fonte: MARTINS (2016)

A medição da calota gerada pelo ensaio pode ocorrer por análise de imagens e perfil bidimensional ou tridimensional, microscopia óptica e perfilometria por meio de apalpador mecânico ou laser. Para utilização da microscopia óptica para medição, é necessário que as calotas sejam efetivamente esféricas com raio de curvatura similar ao raio da esfera utilizado no ensaio. Isso pois há a necessidade de estimar o volume da calota para obtenção dos resultados (LEROY *et al.*, 2005).

2.3.3 Ensaio de adesão do filme fino ao substrato

Para verificar a adesão de um filme fino ao substrato é utilizado o método de Mercedes. Nesse ensaio é realizada uma indentação por meio de um durômetro na escala Rockwell C, com um indentador cônico de diamante e carga de penetração definida. Após a indentação, é formada uma impressão na peça devido à deformação plástica gerada pelo indentador. A imagem dessa impressão é analisada buscando padrões exemplificados na Figura 11, que classificam a impressão em uma escala de HF1 até HF6, conforme a Tabela 1 (LENZ; HASSELBRUCH; MEHNER, 2020).

Figura 11 – Escala de falha de adesão do filme fino

Fonte: LENZ; HASSELBRUCH; MEHNER (2020)

Tabela 1 – Classificação da adesão de revestimentos segundo VDI 3198

Classe	Características
HF1	Rachaduras finas na borda da impressão. Sem aparição de delaminações.
HF2	Maior presença de rachaduras não ligadas. Sem aparição de delaminações.
HF3	Delaminações visíveis podendo estar conectadas ao longo da impressão
HF4	Delaminações presentes em uma maior região da impressão
HF5	Delaminações de maior alcance ao redor da impressão
HF6	Delaminações conectadas em toda a área da impressão

Fonte: Adaptado de LENZ; HASSELBRUCH; MEHNER (2020)

2.4 Método dos elementos finitos

O Método de Elementos Finitos (MEF) foi criado para facilitar a solução de problemas de contorno para variadas geometrias, determinando o estado de tensão e deformação ao qual o corpo está submetido, dadas as condições de contorno do problema. O método consiste em modelar o problema por meio de um número finito de elementos discretos, obtendo uma solução aproximada para o sistema a partir do resultado individual desses vários elementos agrupados (ANTUNES, 2006; AZEVEDO, 2003; TAVARES; PADILHA, 1998).

A concepção inicial do MEF data da década de 60, porém o uso foi difundido com o avanço da capacidade computacional, possibilitando a resolução de matrizes de rigidez de maior complexidade, vinculadas a problemas reais. Atualmente há aplicação do MEF em diversas áreas da engenharia (AZEVEDO, 2003; BUDINAS; NISBETT, 2011).

O princípio do MEF é a discretização da geometria em diversas partes menores (elementos) que são conectadas entre si por nós. Os nós possuem como função a aplicação das características de contorno do problema (cargas, engastes, etc.) além da união dos elementos vizinhos. As informações imputadas ao problema são transformadas em matrizes relacionadas a um sistema de coordenadas global para resolução. Dessa forma, cada elemento da malha é tratado conforme suas propriedades geométricas, características de contorno e propriedades do material. Com isso, são calculados os campos de deformação e tensão ao longo da geometria, possibilitando a aplicação de diversos critérios de falha, fadiga e dano. Dessa forma é avaliada a integridade estrutural do componente mecânico (ANTUNES, 2006; ARAÚJO; DIAS, 2014; BUDINAS; NISBETT, 2011; DIAS, A. M. S.; SOTANI, P.F.B.; GODOY, 2010).

As malhas de elementos finitos apresentam distintos formatos de elementos, sendo os mais comuns triângulos e quadrados, reproduzindo a geometria desejada, variando de acordo com a complexidade do problema, geometria e capacidade de processamento do software em questão (ARAÚJO; DIAS, 2014).

A vantagem da utilização desse método é que a solução da equação que modela o sistema global pode ser obtida por meio das soluções das equações para cada elemento finito utilizado no modelamento. Outra vantagem deste método é sua facilidade de generalização, o que o torna aplicável a problemas bidimensionais e tridimensionais constituídos por vários materiais e com fronteiras irregulares. Essas características fazem com que o MEF seja uma ferramenta bastante robusta e prática na resolução de problemas em várias áreas do conhecimento. Adaptações do MEF também permitem análises térmica, dinâmica, eletromagnética, de fluídos e acústicas tanto para problemas lineares como não-lineares (ARAÚJO; DIAS, 2014; DIAS, A. M. S.; SOTANI, P.F.B.; GODOY, 2010).

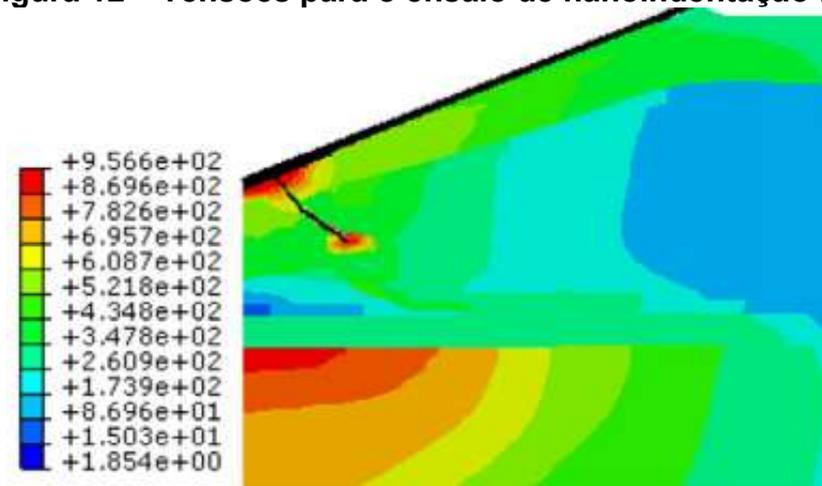
A utilização do método dos elementos finitos para simular ensaios de indentação data dos anos 1990, sendo utilizada inicialmente para avaliar o campo de tensões e deformações e dureza superficial de diversos materiais (AVELINO MANUEL DA SILVA DIAS, 2004).

2.5 Nanoindentação por meio do método dos elementos finitos

Segundo DENG *et al.* (2019), por meio de ensaios mecânicos como a nanoindentação, detalhes como distribuição local de tensões no material, concentração de tensões e comportamento da fratura são de difícil obtenção. Outra desvantagem desses ensaios é o alto custo e a impossibilidade de aplicação sob condições de temperaturas extremas.

Tendo isso em vista, surge a necessidade da utilização do Método de Elementos Finitos (MEF) para simulação do ensaio de nanoindentação, que proporciona uma investigação da formação do campo de tensões que é uma importante ferramenta na compreensão do mecanismo de falha em filmes finos, como pode ser visto na Figura 12. Isso leva ao aperfeiçoamento da deposição do recobrimento em diversos substratos (PANDURE; JATTI; SINGH, 2014).

Figura 12 – Tensões para o ensaio de nanoindentação (MPa)



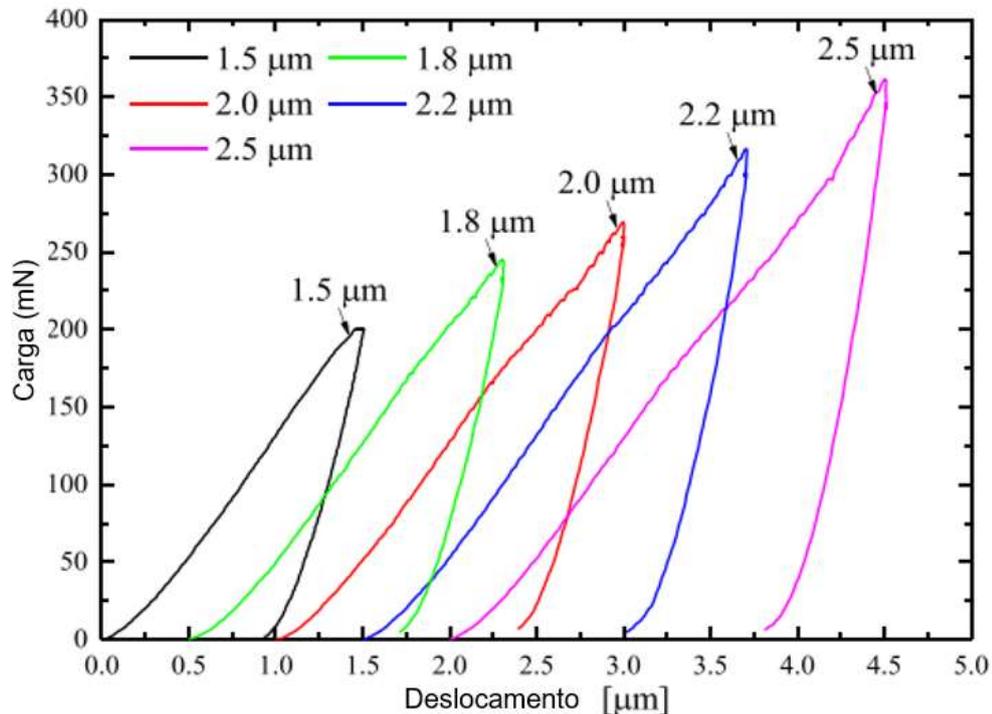
Fonte: Deng *et al.* (2019)

Para simulação do ensaio da nanoindentação, é consensual a realização de algumas simplificações para resolução do problema de forma a não demandar tempo de processamento proibitivo. Isso se resume a material isotrópico, com propriedades elasto-plásticas e condições de atrito desprezadas. Da mesma forma, o penetrador é considerado um material não deformável devido à natureza do ensaio, isto é, o material do penetrador tem dureza bastante superior ao corpo de prova (ALABOODI; HUSSAIN, 2019; CHATTERJEE *et al.*, 2010; CHAVES FILHO; DIAS, 2019; CHEN, HSI CHAO; HUANG; CHENG, 2018; HUANG; PELEGRI, 2007).

Para criação da malha de elementos finitos, busca-se um maior refinamento na área do filme fino próxima à região de contato definida. A área do penetrador que sofre contato com o

filme fino também passa por um refinamento buscando otimização de esforço computacional. Para melhor controle do processo, o avanço do penetrador é definido como parâmetro de controle. Dessa forma, há possibilidade de realizar o ensaio em várias profundidades de penetração, consequentemente gerando várias respostas de carga de indentação, conforme apresentado na Figura 13 (XIAO et al., 2019).

Figura 13 – Força de indentação para várias profundidades de penetração



Fonte: Adaptado de XIAO et al. (2019)

Inicialmente, toma-se como premissa que o recobrimento está perfeitamente aderido ao substrato com o objetivo de simplificar o modelo em elementos finitos. Porém, vale ressaltar que há possibilidade de utilização do modelo de zona coesiva, *cohesive zone model* (CZM), para simulação da adesão entre filme e substrato, sendo possível prever o fenômeno de deslocamento do filme (XIAO et al., 2019).

Outra condição de contorno importante para o ensaio de nanoindentação que, a princípio, não é considerada durante a simulação pelo método dos elementos finitos é a tensão térmica residual decorrente da forma de deposição do filme, que pode apresentar uma relevante parcela nos resultados. Além disso, outras falhas de fabricação não são levadas em conta no modelo (HUNT, R A ; MCCARTNEY, 2003).

HUNT, R A ; MCCARTNEY (2003), realizaram um experimento em que o ensaio de nanoindentação foi simulado com as seguintes características de contorno:

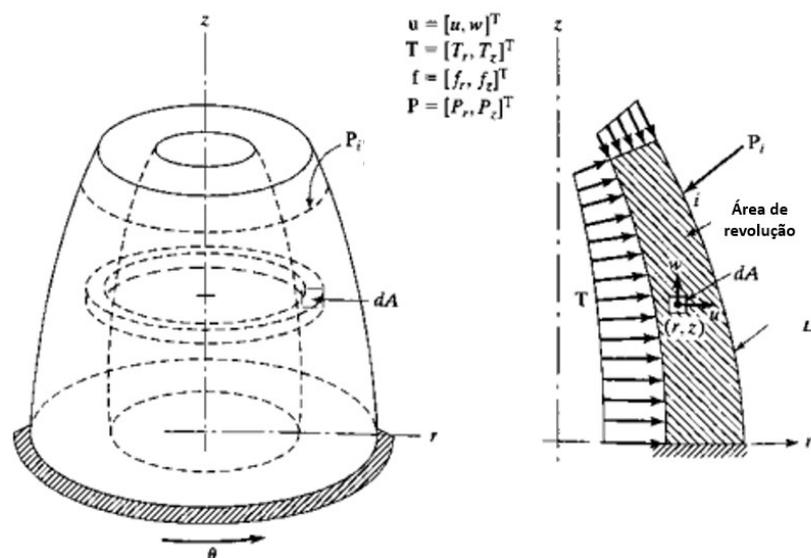
- Indentador considerado rígido devido a natureza do ensaio
- Força do indentador em direção ao corpo de prova aplicada e retirada em rampa, levando a uma condição quasi-estática, não dependente de efeitos dinâmicos.
- Engaste do corpo de prova nas extremidades para gerar equilíbrio ao ensaio
- Criação de dois passos para a simulação, a primeira aplicação de carga no corpo de prova e, o segundo, alívio na mesma, sendo que há um período de manutenção da carga de indentação antes do descarregamento.

Uma vez que a área de contato entre indentador e corpo de prova varia durante a simulação, a análise se torna não linear.

2.6 Utilização de axissimetria para o indentador Berkovich

A axissimetria é definida por sólidos tridimensionais que podem ser representados pela revolução de um formato bidimensional sobre um eixo, conforme a Figura 14. Para se utilizar essa representação é necessário que quaisquer forças ou tensões, às quais o corpo está sofrendo sejam independentes do ângulo de rotação θ . A intenção de utilizar essa representação é a simplificação do modelo de elementos finitos de um problema tridimensional para bidimensional reduzindo esforço computacional e, por conseguinte, tempo de processamento.

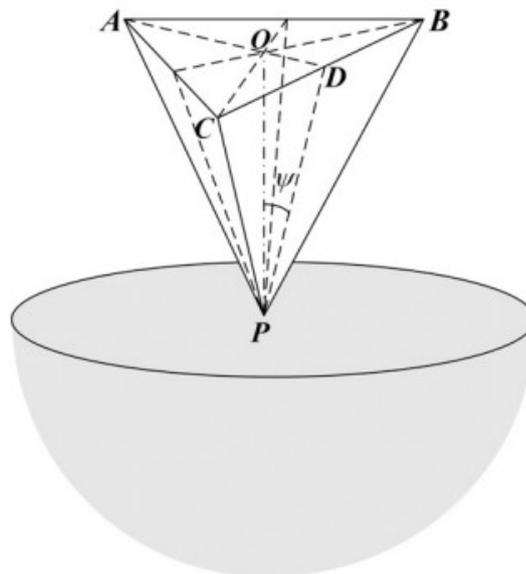
Figura 14 – Simplificação axissimétrica de um corpo tridimensional



Fonte: Adaptado de CHANDRUPATLA; BELEGUNDU (2021)

SHI *et al.* (2010) e QIN *et al.*, (2009) estudaram a utilização da axissimetria na simulação pelo método dos elementos finitos bidimensional do ensaio da nanoindentação utilizando o indentador Berkovich, que possui formato piramidal com três faces laterais conforme apresentado na Figura 15. Com a utilização dessa técnica, o maior empecilho se encontra na simplificação do indentador Berkovich, que não é axissimétrico.

Figura 15 – Indentador tipo Berkovich



Fonte: Adaptado de QIN et al. (2009)

NIX; GAO (1998) determinaram a relação entre dureza de indentação H e profundidade de penetração h do indentador no corpo de prova, conforme a equação (10):

$$\left(\frac{H}{H'}\right)^2 = 1 + \frac{h'}{h} \quad (10)$$

Em que H' é a dureza de indentação para ensaios com grandes profundidades de penetração, e h' está descrito na equação (11):

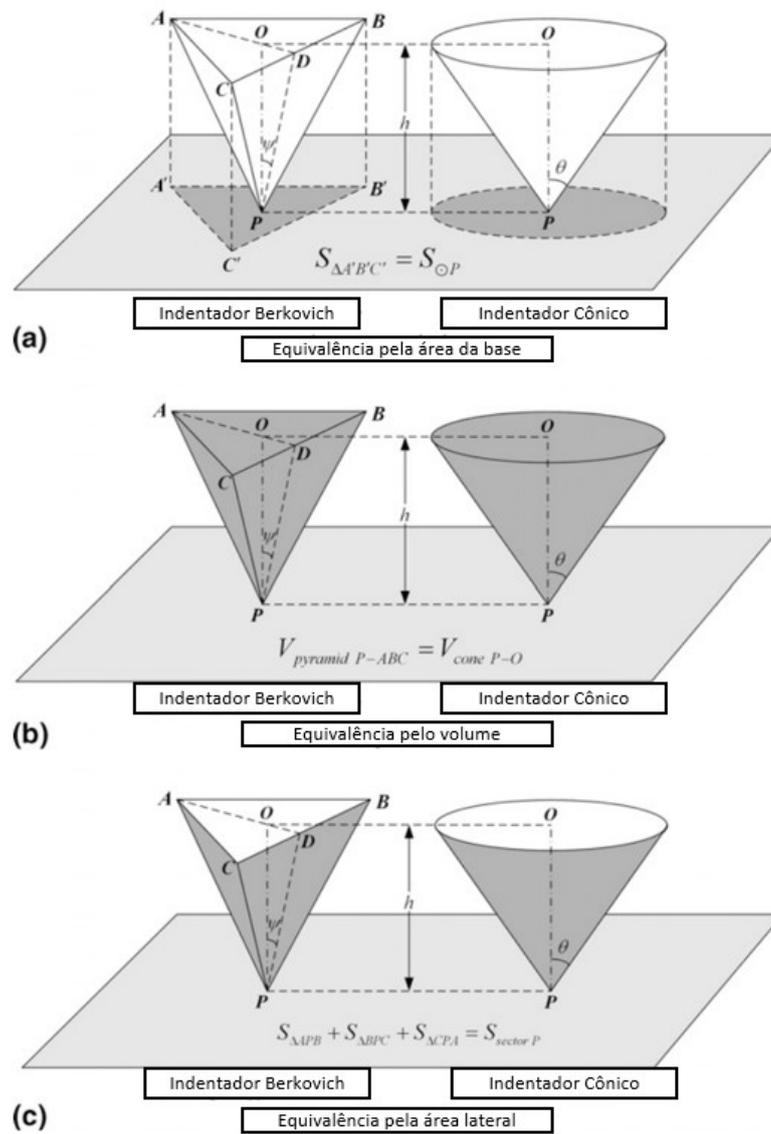
$$h' = \frac{27 * M^2 * b * \alpha^2}{2 * \text{tg}^2 \theta} \left(\frac{\mu}{H'}\right)^2 \quad (11)$$

Sendo que h' depende, como variáveis, do ângulo do cone de indentação θ , do vetor de Burgers b e do coeficiente de atrito entre indentador e corpo de prova, μ . As constantes são α que empiricamente se aproxima a 0,3 e $M = 3,06$ para metais com estrutura atômica cúbica

de face centrada e cúbica de corpo centrado. Porém esse modelo possui grande assertividade para indentadores axissimétricos, como o cônico e esférico.

Tendo isso em vista ocorreram esforços para aproximar o indentador Berkovich do indentador cônico, que possui característica assimétrica e geometria similar, resumidos na Figura 16 (QIN *et al.*, 2009).

Figura 16 – Aproximação do indentador Berkovich ao indentador cônico por:
(a) área da base (b) volume de penetração (c) área lateral de penetração



Fonte: Adaptado de QIN *et al.* (2009)

Segundo QIN *et al.* (2009) primeira forma de aproximação é pela área da base tanto do cone quanto da pirâmide na maior profundidade de penetração. Isso ocorre aproximando o ângulo θ do indentador cônico ao do indentador piramidal (Ψ) pela equação (12):

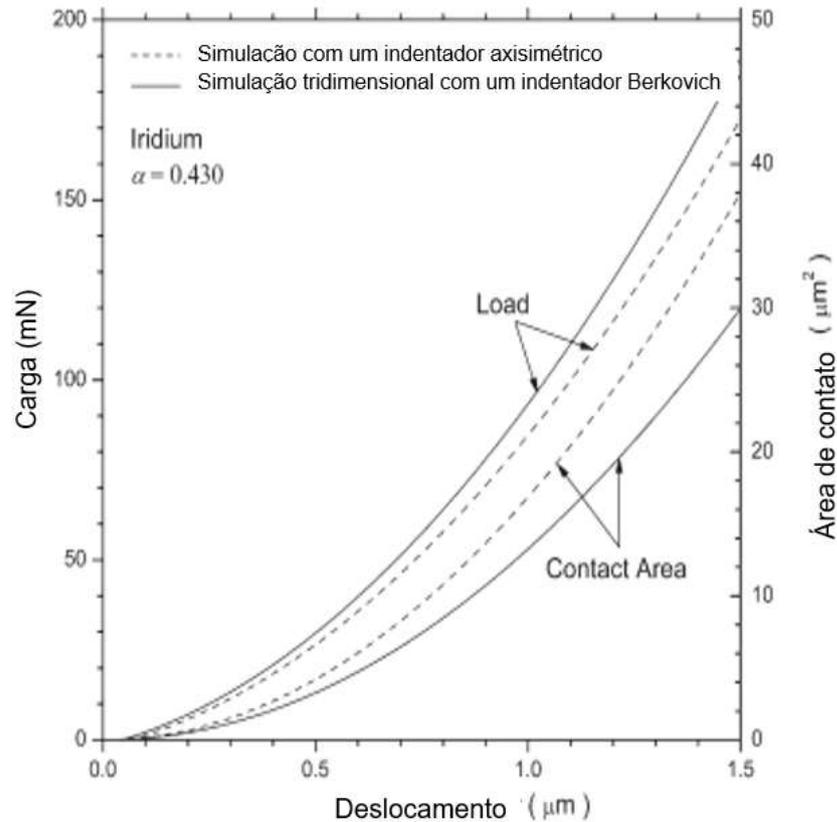
$$\theta = tg^{-1} \left(\sqrt{\left(\frac{3\sqrt{3}}{\pi} \right) tg\Psi} \right) \quad (12)$$

A fórmula acima também realiza a aproximação pelo volume, e para os dois casos, tendo como $\theta = 65,3^\circ$, o resultado de Ψ é $70,3^\circ$. Para realizar a equivalência para a área lateral de penetração, é necessário utilizar da equação (13), em que θ é o ângulo do indentador cônico e Ψ do piramidal. Nesse caso, com $\theta = 65,3^\circ$, o resultado de Ψ é $70,7^\circ$

$$\theta = sen^{-1} \left(\sqrt{1 + \frac{\pi^2 \cos^2 \Psi}{108tg^2\Psi} - \frac{\pi \cos\Psi}{6\sqrt{3}tg\Psi}} \right) \quad (13)$$

As formas de aproximação acima possuem boa correlação no ensaio de indentação. Porém, quando expandidas para a nano e micro indentação levam um grande erro no resultado. Isso é evidenciado na Figura 17, em que QIN *et al.* (2009) realizaram um experimento de microindentação com indentador Berkovich tridimensional com $\Psi = 65,3^\circ$ e uma simulação axissimétrica aproximando o ângulo do indentador cônico θ para $70,3^\circ$ utilizando da equivalência pela área lateral de indentação. O material escolhido para o corpo de prova foi o irídio.

Figura 17 – Resultados de carga (mN) e área de contato (μm^2) por deslocamento do indentador (μm) para modelo tridimensional e axissimétrico com raio de ponta de $70,3^\circ$

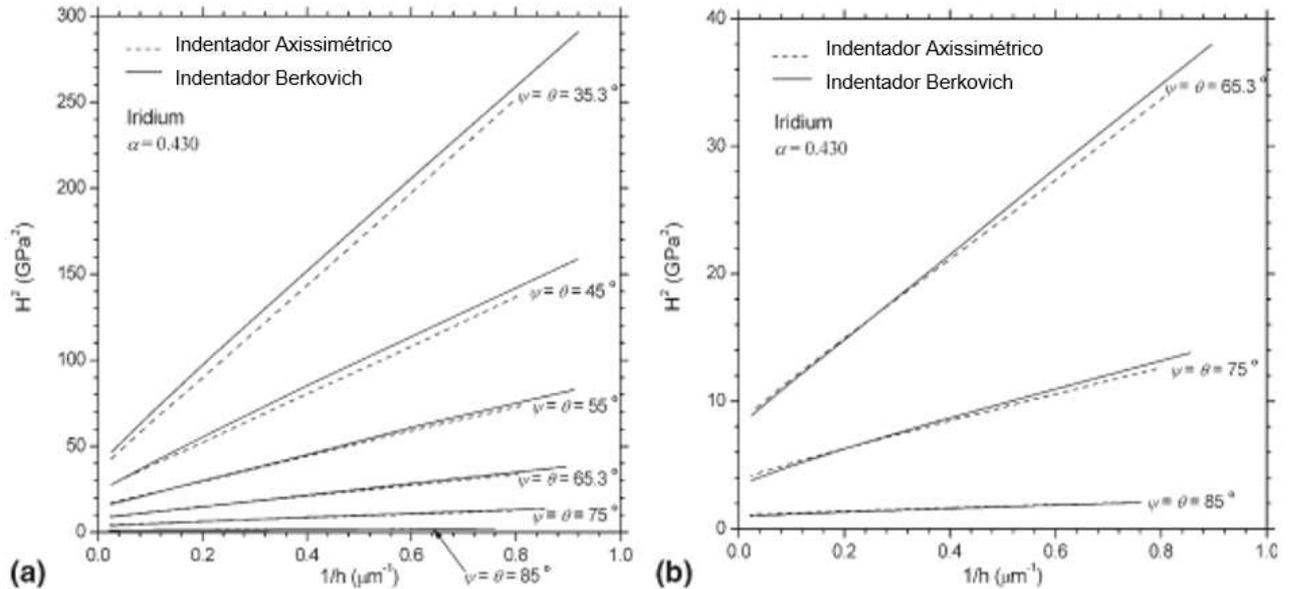


Fonte: Adaptado de QIN et al. (2009)

Pela Figura 17, em que é comparado o modelo tridimensional ao modelo axissimétrico com ângulo de ponta de $70,3^\circ$, pode-se averiguar que, com o avanço do penetrador, tanto a carga aplicada quanto a área de contato divergem do comportamento esperado do indentador Berkovich. Para a aproximação pela área da base também é esperado comportamento similar, uma vez que os resultados desse experimento apresentaram grande divergência com o avanço do indentador.

QIN *et al.* (2009) propuseram a equivalência dos ângulos do penetrador Berkovich com o indentador cônico para a simulação bidimensional axissimétrica ($\Psi = \theta$). Os resultados utilizando dessa equivalência aprestaram boa correlação com os resultados da simulação tridimensional com diversas condições de ângulo θ conforme Figura 18.

Figura 18 – Resultados da dureza de indentação (H^2) pela profundidade ($1/h$) em GPa^2 e μm^{-1} respectivamente para os ângulos de (a) 35.3, 45, 55, 65,3, 75, and 85 e 65,3, 75, e 85° comparando modelo bidimensional e tridimensional



Fonte: Adaptado de QIN et al. (2009)

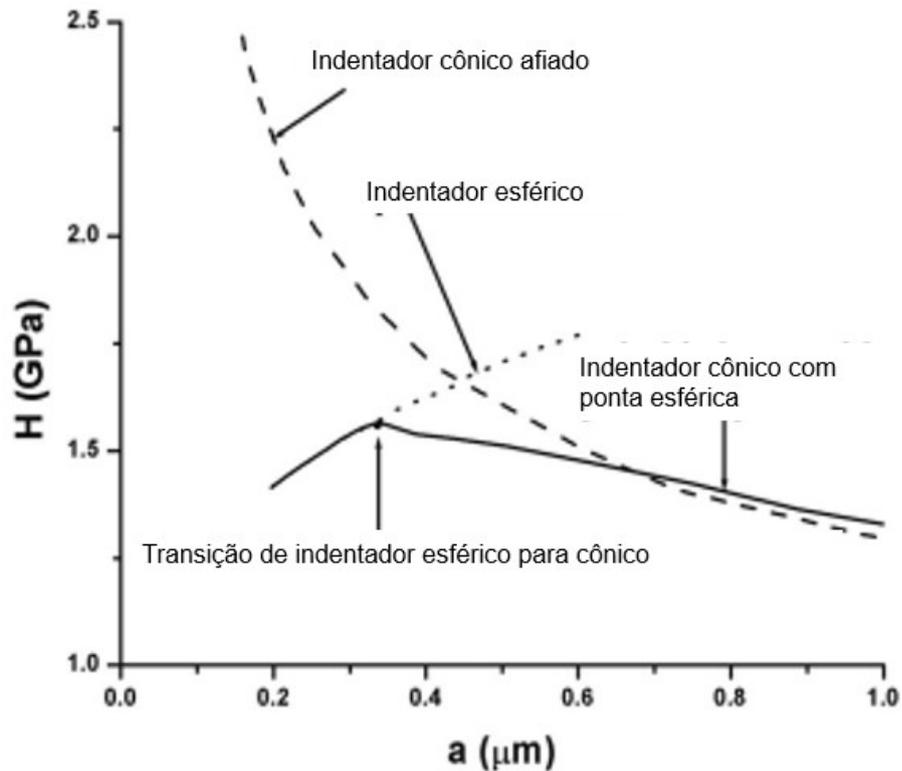
De acordo com SHI *et al.* (2010), a razão para a divergência nos resultados da simulação quando se usa alguma das equivalências apresentadas anteriormente se dá pela maior complexidade da geometria do indentador Berkovich comparado ao cônico, o que gera um maior gradiente de tensões e deformações durante a penetração e, conseqüentemente, maior força para que o indentador consiga a mesma profundidade de penetração.

Outro ponto importante na representação do indentador Berkovich em modelos de elementos finitos é o arredondamento da ponta do indentador, que se manifesta através de um raio de ponta, conforme visualizado na Figura 19. Tem-se por convenção que esse valor está entre 50 e 150 nm \pm 50% de erro (FISCHER-CRIPPS, 2006). Segundo QU *et al.* (2004), para o ensaio de microindentação em um substrato de cobre policristalino, o raio de ponta do indentador cônico não interfere no resultado final de dureza do ensaio de nanoindentação com somente uma penetração, caso seja possível passar da fase esférica para cônica do indentador com o avanço do mesmo.

Para o ensaio de nanoindentação, o efeito do raio de ponta do indentador deve ser levado em conta caso haja significância da dimensão do raio de ponta de um indentador afiado em relação à profundidade de indentação para o ensaio, até mesmo desviando da relação de proporcionalidade proposta por NIX; GAO (1998) entre dureza e profundidade de penetração para o caso do cobre policristalino. É suposto que os efeitos do raio de ponta do indentador

no ensaio dependem fortemente do material em questão, do raio de ponta e do avanço do indentedor.

Figura 19 – Dureza (GPa) X Profundidade de penetração (μm) para um indentedor cônico de ponta reta, cônico de ponta arredondada e esférico



Fonte: Adaptado de QU et al. (2004)

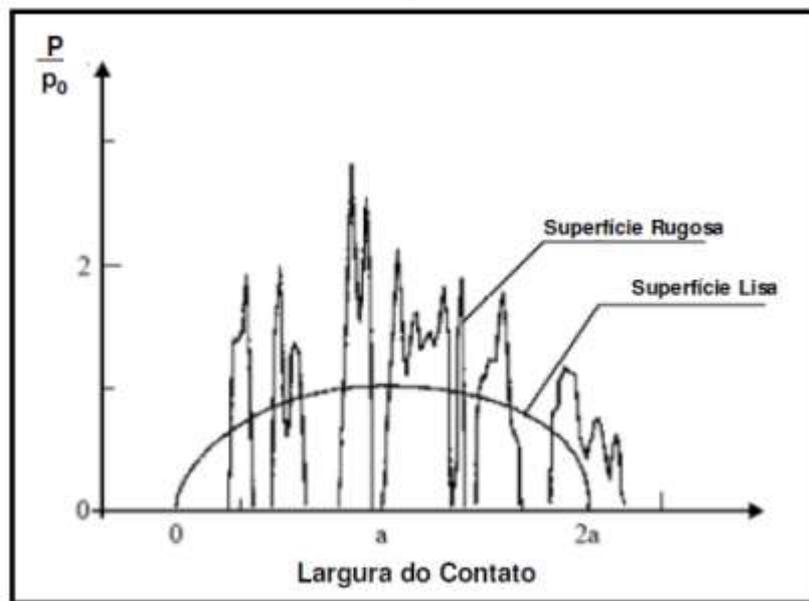
2.7 Efeitos da rugosidade no ensaio de nanoindentação

A rugosidade de uma superfície é composta por irregularidades decorrentes do processo de fabricação sobre qual a superfície foi imposta. Na usinagem, a rugosidade é fortemente relacionada à afiação e tipo de ferramenta de corte utilizada além de outros parâmetros de corte e estado de conservação da máquina. Dessa forma, se consegue uma melhor rugosidade da superfície com ferramentas de corte indicadas para o material da peça e o processo a ser realizado, além da condição de afiação (COSTA, J. D. D.; GOMES, 2010).

A rugosidade superficial de um substrato possui alto impacto no comportamento tribológico de um filme fino depositado sobre ele. Após a deposição, o filme tende a reproduzir a superfície do substrato e, por consequência, sua característica de rugosidade. Tendo isso em vista, substratos com alta rugosidade e característica de alta dureza, após o processo de deposição do filme fino, tendem a possuir como característica alto coeficiente de atrito e taxa

de desgaste elevada. Quando há deslizamento entre um contracorpo de alta rugosidade e dureza e um filme fino com grande rugosidade, há uma diminuição da área real de contato devido a menores deformações plásticas e elásticas, formando uma maior pressão de contato e favorecendo o desgaste. Na Figura 20 é possível visualizar a distribuição da pressão normalizada de contato (p) pela pressão de Hertz (p_0) para uma superfície com alta e baixa rugosidade. Na superfície rugosa, a presença de picos de pressão gera aumento de atrito e conseqüentemente desgaste com a quebra desses picos após deslizamento (PODGORNIK *et al.*, 2004; VICENTE, 2005).

Figura 20 – Distribuição da pressão de contato para uma superfície lisa e outra rugosa



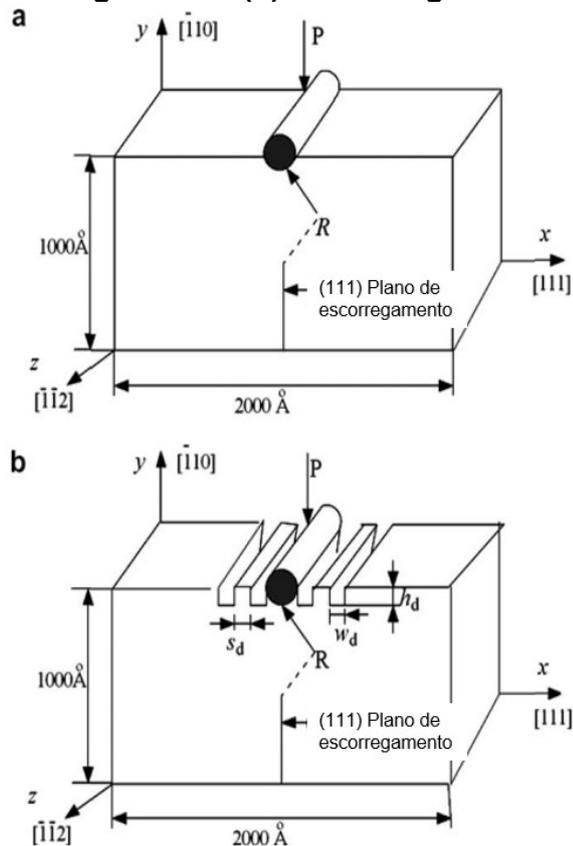
Fonte: Adaptado de PODGORNIK *et al.* (2004)

As características mecânicas superficiais apresentam um grande impacto no ensaio da nanoindentação, em especial a rugosidade do recobrimento. Estima-se que, caso a rugosidade média (R_a) do recobrimento ultrapasse 5% da profundidade de indentação, há impacto nos resultados do ensaio. Assim sendo, a premissa de não considerar os efeitos da rugosidade é uma fonte de incerteza à simulação (CHARVÁTOVÁ CAMPBELL *et al.*, 2019).

JIANG; SU; FENG (2008), realizou um experimento simulando o ensaio de nanoindentação bidimensional com um penetrador cilíndrico e um corpo de prova dotado de um filme fino de cobre com espessura de $0,1 \mu\text{m}$ e um substrato rígido em duas condições diferentes. A primeira desprezando a rugosidade superficial, conforme Figura 21, a e a segunda utilizando um parâmetro de rugosidade com altura dos vales

(h_d) de 5 Å com espessura (w_d) variando entre 10 e 20 Å e espaçamento entre os vales (s_d) de 20 Å, conforme Figura 21 (b).

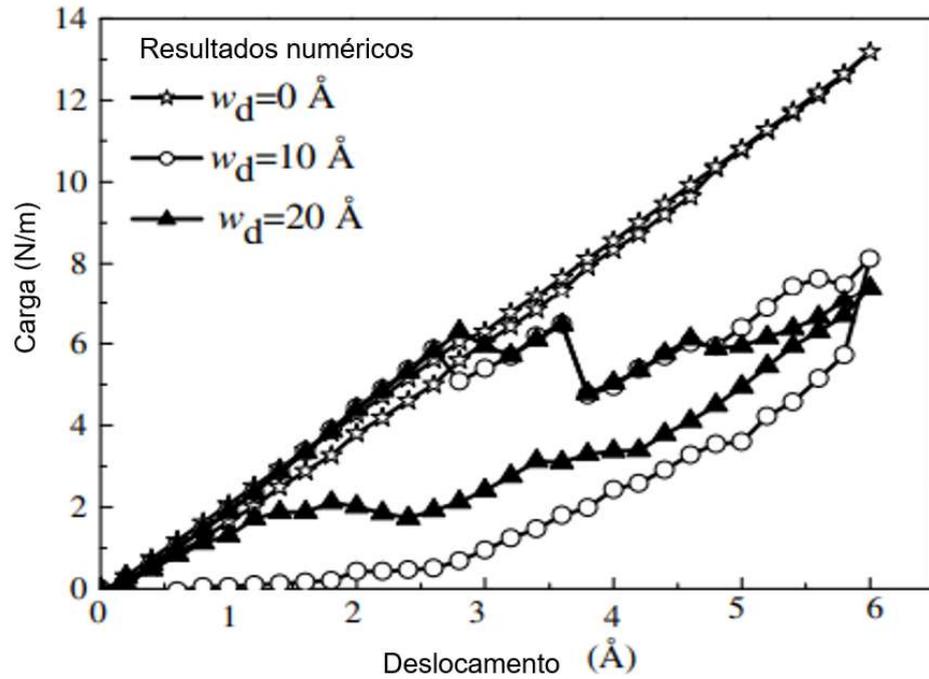
Figura 21 – Representação de um corpo de prova com superfície sem efeito da rugosidade (a) e com rugosidade (b)



Fonte: Adaptado de JIANG; SU; FENG (2008)

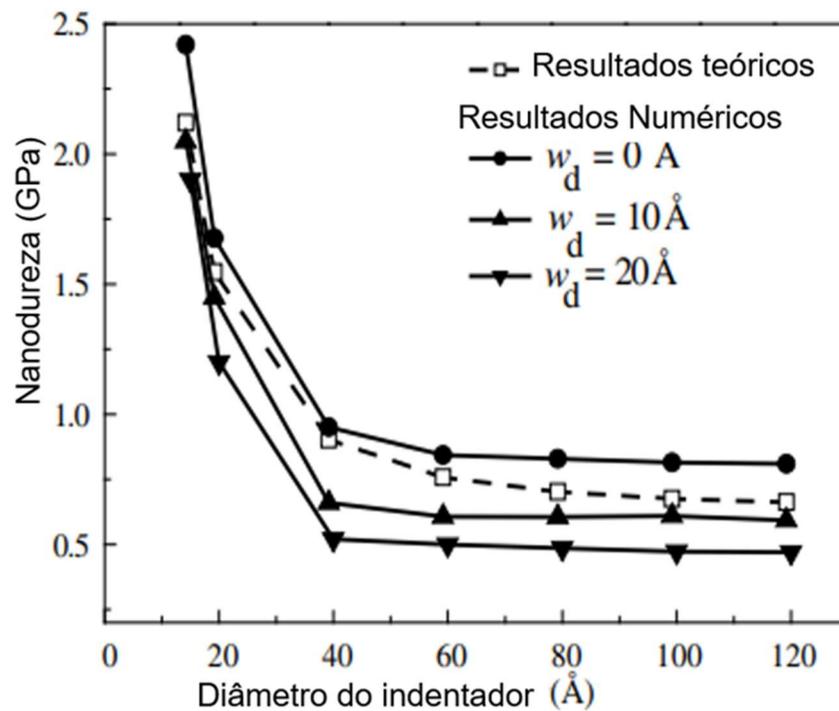
No experimento de JIANG; SU; FENG (2008) foram analisadas as curvas carga do indutor x profundidade de penetração para três espessuras do espessura do perfil da rugosidade (w_d), conforme Figura 22, e o impacto dessa variação na determinação da nanodureza do material, comparado a resultados experimentais, conforme Figura 23. É notado que a resistência do recobrimento à aplicação de carga e, conseqüentemente, a nanodureza diminui com a maior rugosidade da superfície. Outro ponto importante é que, com o aumento do raio do indutor, há uma estabilização na nanodureza encontrada tanto para o experimento real quanto para as simulações de elementos finitos.

Figura 22 – Carga em N/m X penetração (Å) para o ensaio de nanoindentação



Fonte: Adaptado de JIANG; SU; FENG (2008)

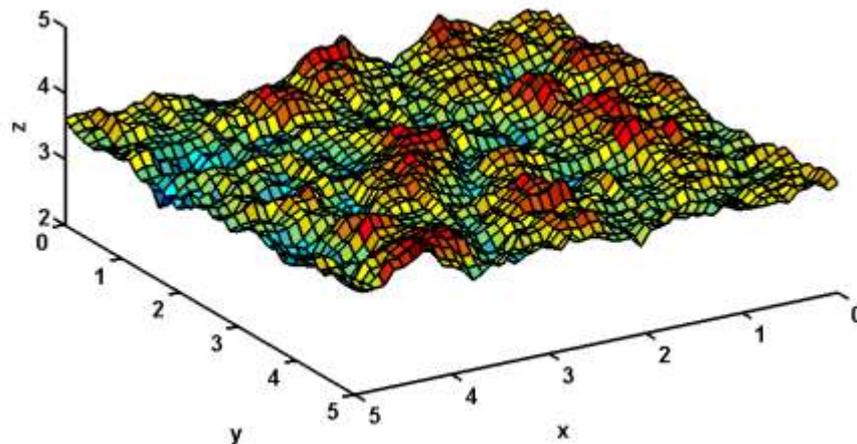
Figura 23 – Nanodureza (GPa) X diâmetro do indentador (Å) para o ensaio de nanoindentação variando o diâmetro do indentador



Fonte: Adaptado de JIANG; SU; FENG (2008)

CHEN, LING *et al.* (2014) apresentaram um estudo da nanoindentação do aço inoxidável AISI 316L com variação da rugosidade média (R_a). O modelo simulado foi tridimensional com indentador Berkovich pelo software Abaqus e o padrão de rugosidade foi gerado de forma aleatória no software Matlab para o experimento, conforme Figura 24. O material foi criado com características elasto-plásticas com os seguintes valores: módulo de elasticidade $E = 210$ GPa, tensão de escoamento $\sigma_y = 1.1$ GPa e coeficiente de Poisson $\nu = 0.28$. O ensaio foi realizado com uma força máxima de penetração de 5mN. Foi notado um efeito da rugosidade na variação da profundidade de penetração que, a princípio era esperado que se mantivesse. Esse fenômeno ocorreu devido à presença de algum vale ou pico na área inicial de indentação, fazendo com que o ponto inicial de penetração variasse. Isso foi corrigido considerando que o ponto inicial de penetração ocorrerá com uma carga mínima de 0,03 mN.

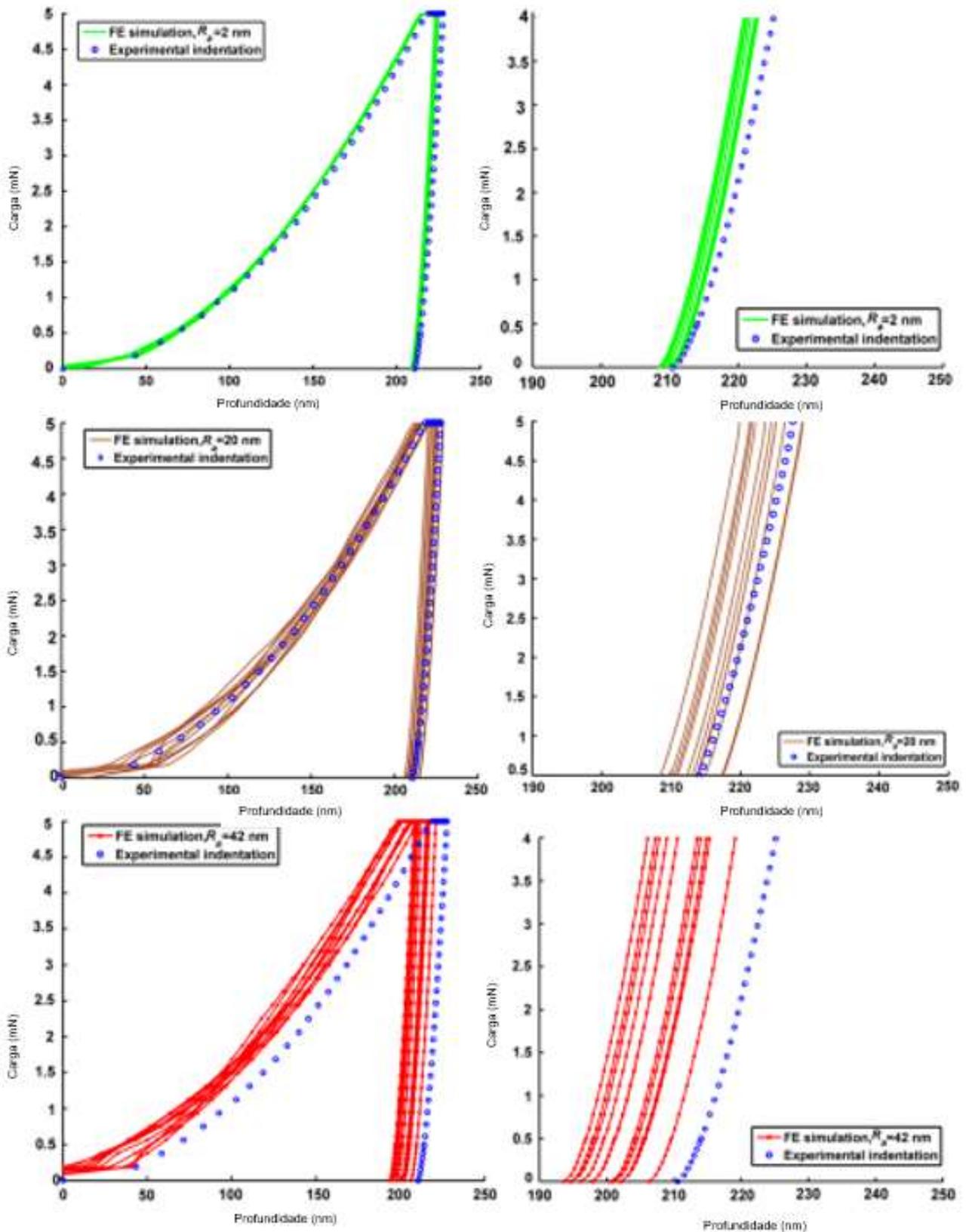
Figura 24 – Perfil de rugosidade gerado para o corpo de prova



Fonte: CHEN, LING *et al.* (2014)

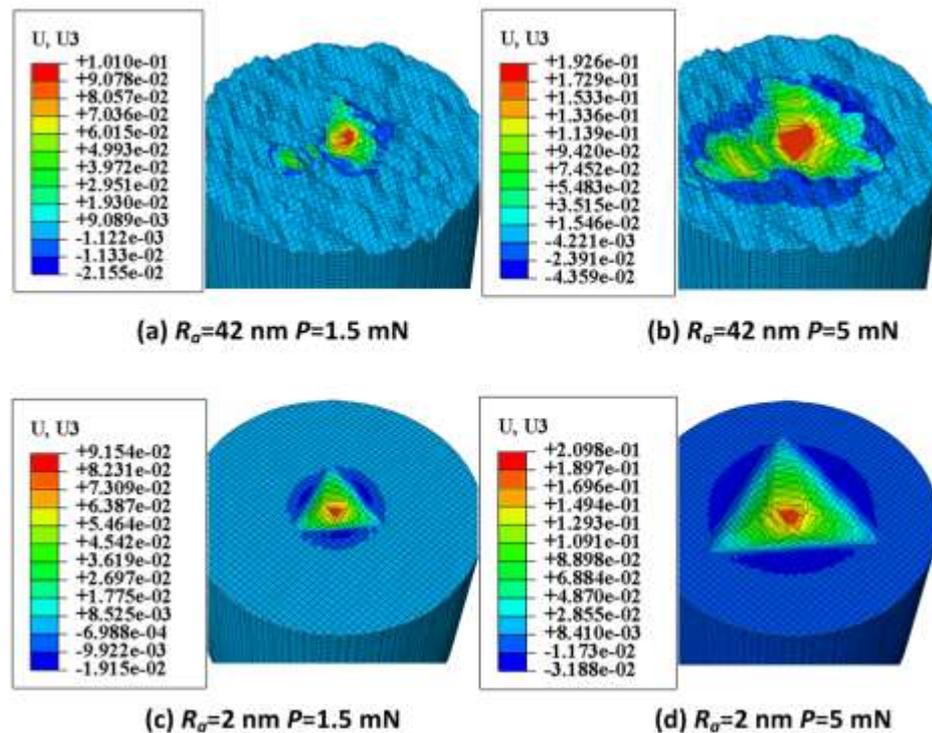
Os resultados do ensaio podem ser visualizados na Figura 25, em que foram realizadas diversas simulações para os valores de R_a de 2 nm, 20 nm e 42 nm, variando a distribuição dos picos e vales presentes na rugosidade. Pode ser percebida maior constância dos resultados em menores valores de R_a e uma maior divergência tanto entre resultados de simulação quanto comparado ao resultado experimental em $R_a = 42$ nm. Isso ocorre pois, quando a altura dos picos e vales presentes na rugosidade se torna relevante, considerando a profundidade de penetração, há uma dependência forte dos resultados na forma com que a rugosidade se distribui na superfície do corpo de prova. Esse fenômeno pode ser explicado pela diminuição na área de contato entre indentador e corpo de prova com o aumento exacerbado da rugosidade, o que pode ser verificado na Figura 26.

Figura 25 – Carga em mN X penetração (nm) para o ensaio de nanoindentação para os valores de R_a de 2 nm, 20 nm e 42 nm.



Fonte: Adaptado de CHEN, LING et al. (2014)

Figura 26 – Resultados de deformação no corpo de prova após o ensaio de nanoindentação para cargas de penetração de 1.5 mN (a, c) e 5 mN (b, d) para os valores de R_a de 42 nm (a, b) e 2 nm (c, d)

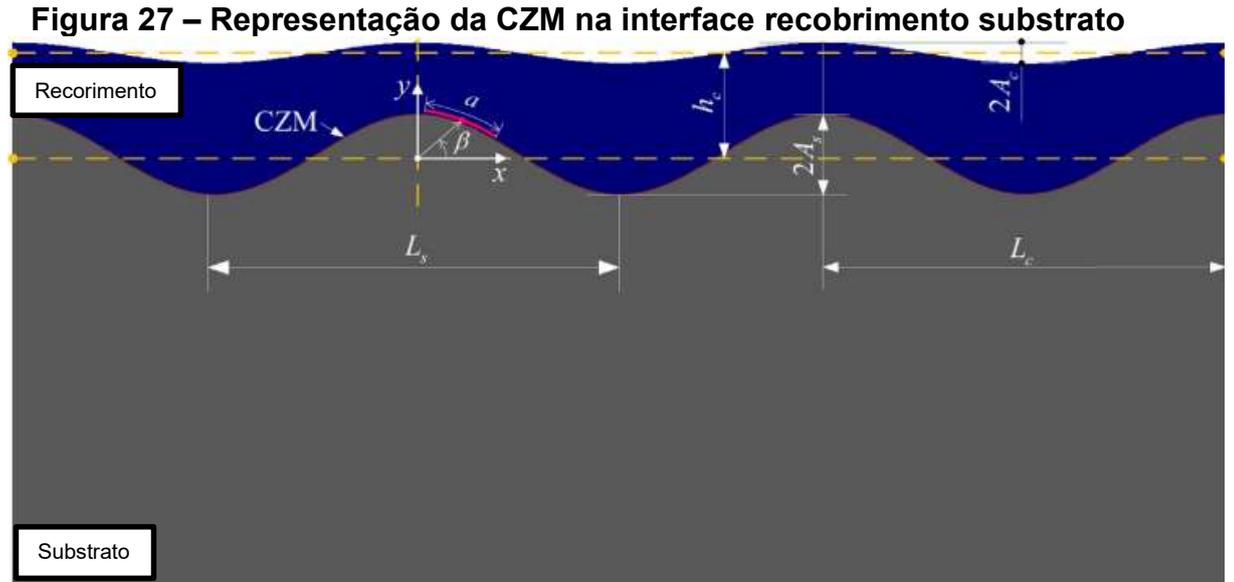


Fonte: CHEN, LING et al. (2014)

2.7 Interface substrato-recobrimento

A delaminação entre filme fino e substrato é um modo de falha crítico em serviço quando se tratam de ferramentas de corte com recobrimento. Ela depende principalmente da compatibilidade química entre substrato e recobrimento, além de possíveis falhas decorrentes do processo de fabricação, como tensões residuais, trincas ou descontinuidades. A força coesiva de ligação entre o filme e substrato influencia diretamente os processos de delaminação, sendo que uma maior força coesiva aumenta a resistência do recobrimento à formação e propagação de trincas, porém há um aumento na probabilidade de delaminação do material (HUANG; PELEGRI, 2007).

Para analisar a interface substrato-recobrimento, é comum a utilização do modelo de zona coesiva (CZM) no método dos elementos finitos, que consiste em uma representação das forças coesivas que se apresentam quando dois materiais ligados estão sofrendo esforços, conforme Figura 27. A maior vantagem da utilização é a capacidade de simular o comportamento da interface de forma fidedigna tanto em ensaios em que não há formação de trincas e descontinuidades quanto em ensaios que essas são formadas e propagadas (XIAO et al., 2016, 2019).



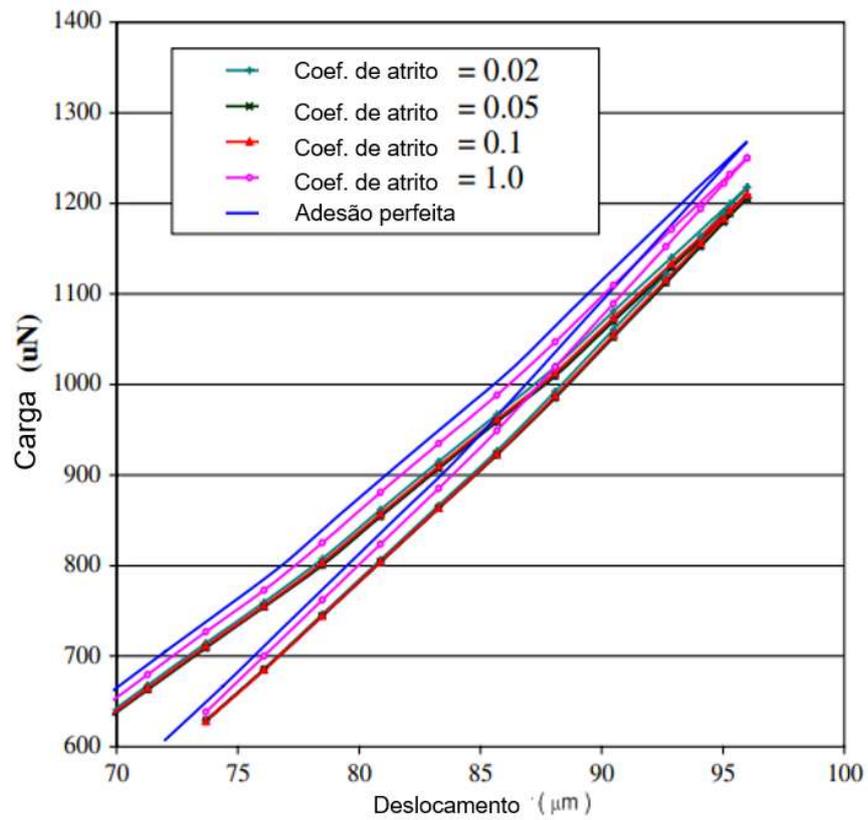
Fonte: Adaptado de XIAO et al. (2019)

Por meio de procedimentos experimentais são utilizadas as seguintes características para composição de uma CZM do recobrimento de DLC depositado sobre um aço (XIAO et al., 2016):

1. Resistência à fratura do revestimento (K_{IC}) = $1,579 \text{ MPa} \times \text{m}^{1/2}$
2. Energia de adesão interfacial (G) = $343 \frac{\text{J}}{\text{m}^2}$

Outra forma de representação da força de adesão é por meio de um modelo de atrito na interface substrato e recobrimento, conforme abordado por HUANG; PELEGRI (2007). No experimento realizado para um filme de oxido de silício (SiO_2) em um substrato de silício, foram comparados os coeficientes de atrito de 0, 0,05, 0,1, 0,2, 0,6 e 1,0. Os resultados para alguns valores podem ser visualizados na Figura 28, que se concentra na parte final de avanço do penetrador. É possível verificar que as respostas ao avanço do penetrador variam com os diferentes coeficientes de atrito, dessa forma demonstrando que as propriedades mecânicas fruto do ensaio de nanoindentação dependem das condições de contato entre substrato e recobrimento presentes, mesmo quando o avanço do indentador é controlado para no máximo 10% de sua espessura.

Figura 28 – Força de penetração x Deslocamento para diferentes coeficientes de atrito entre substrato e recobrimento para uma profundidade de avanço do penetrador maior de 70 μm

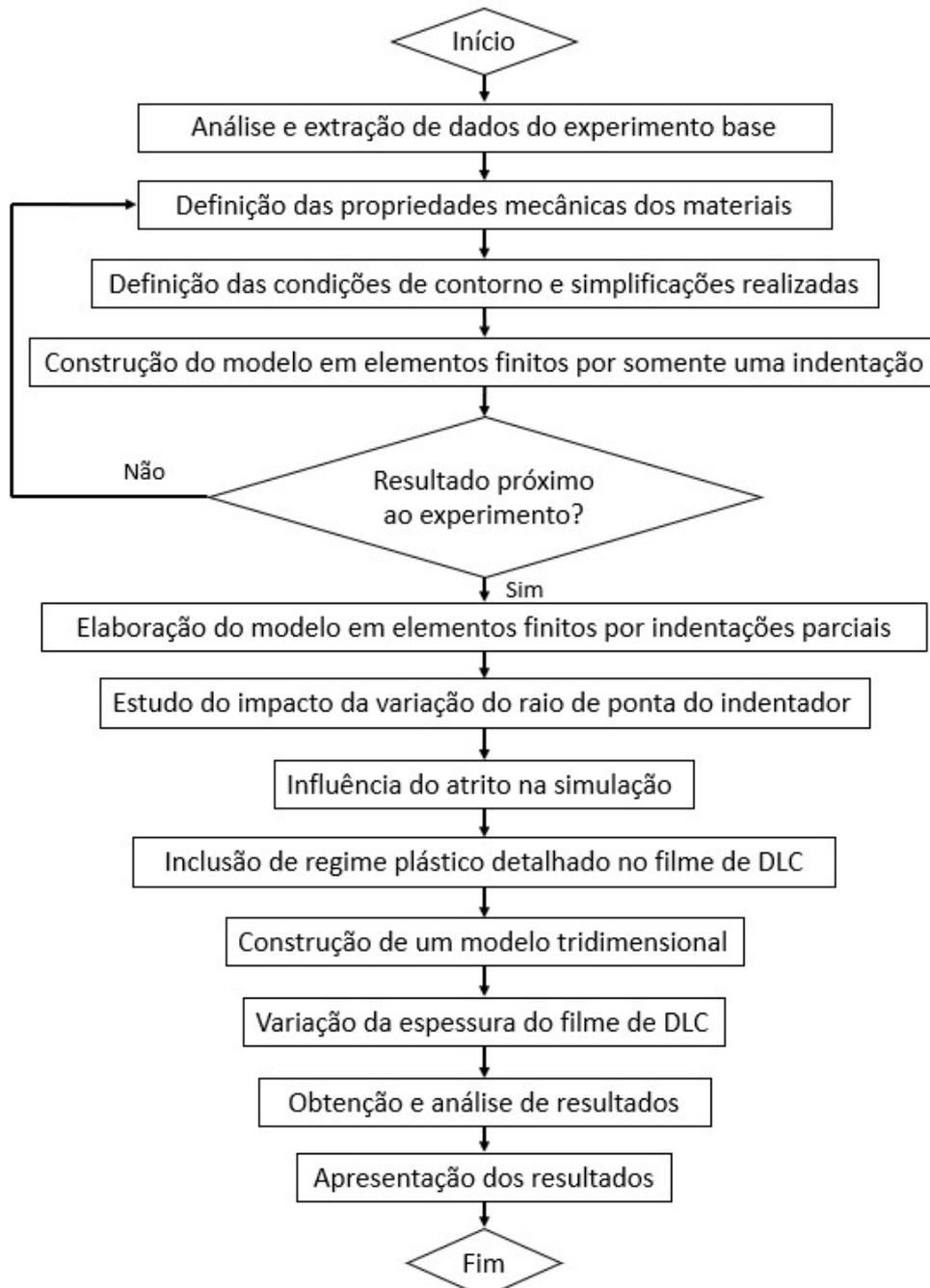


Fonte: HUANG; PELEGRI, (2007)

3 METODOLOGIA

Para apresentar de forma clara os procedimentos experimentais numéricos, foi elaborado um fluxograma para o mesmo, que é apresentado na Figura 29, e resume todas as etapas estabelecidas para alcançar os objetivos do presente trabalho.

Figura 29 – Fluxograma para o procedimento experimental



Fonte: Elaborado pelo autor

3.1 Experimento utilizado para validação do modelo

Os estudos matemáticos que aplicam o método dos elementos finitos comumente reduzem o tempo de realização dos ensaios ou até mesmo investimentos para certificar o nível de confiabilidade de um determinado ensaio, que traz grandes avanços tecnológicos para o campo da metal mecânica. Dito isso, esse estudo foi realizado com base nos dados experimentais levantados em uma pesquisa que foi aplicada no ambiente industrial, com suas análises de características em laboratório para certificar as condições do filme de DLC sobre os substratos de aço rápido. Esse estudo é o experimento de nanoindentação realizado por MARTINS (2016) em um filme de DLC em um substrato de aço rápido. O procedimento experimental é descrito nessa seção.

Para realização do experimento de nanoindentação em um substrato com um recobrimento de DLC, foi preparada uma amostra de aço rápido AISI M35 (65 ± 1 HRC) com formato de bloco, em dimensões de 20x20x5 mm e acabamento superficial obtido por polimento. A composição química do aço é apresentada na Tabela 2.

Tabela 2 – Composição química do aço AISI M35

Elemento	Fe	C	Mn	P	S	Si	Cr	V	W	Mo	Co	Outros
Conteúdo (% em peso)	76,6	0,9	0,4	0,0	0,0	0,4	4,1	1,6	6,8	4,8	3,9	0,5

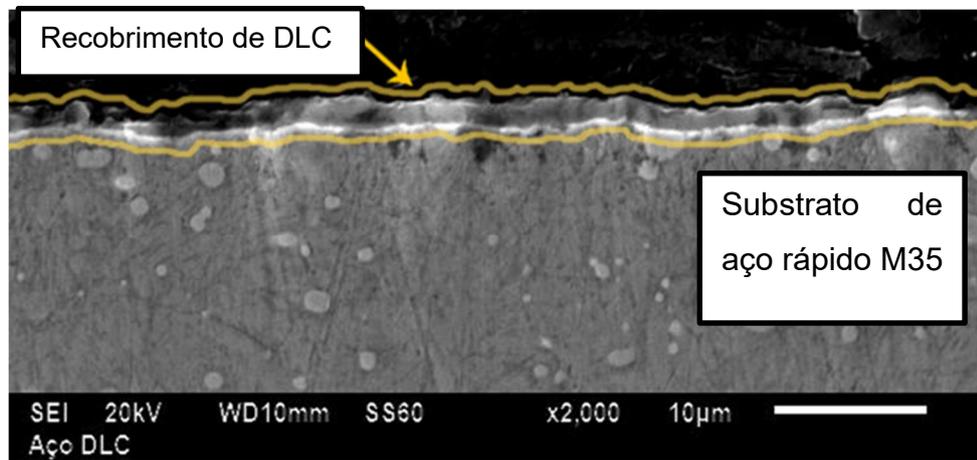
Fonte: Adaptado de MARTINS, 2016

A deposição do filme de DLC foi realizada após a deposição de uma camada intermediária de cromo para maior adesão (SHAHSVARI *et al.*, 2020). Essa camada apresentou uma espessura de 0.5 μm . O processo de deposição física de vapor (PVD) foi utilizado para a deposição com temperatura de 150°C por um período de três horas. Após a deposição, a amostra passou por um procedimento de limpeza para posterior caracterização (MARTINS; CARNEIRO; *et al.*, 2022).

Conforme apresentado na Figura 30, o recobrimento é observado a partir da superfície até uma profundidade média de 1,5 μm , demonstrando a deposição de um revestimento isento de vazios e trincas (DRUMOND *et al.*, 2020). Esse resultado foi obtido através de uma média de 5 medições pontuais da espessura, mensurada pelas técnicas de microscopia de feixes de íons focalizados (FIB) e eletrônica de varredura (MEV) (BA *et al.*, 2022; MARTINS; ALMEIDA MAGALHÃES JÚNIOR; *et al.*, 2022). Em análise de espectrometria Raman, o DLC foi classificado como pertencente à classe a-C não hidrogenado: predominante em hibridizações

sp^2 , contendo no máximo 20% hibridizações sp^3 . Mais detalhes sobre esses resultados podem ser encontrados no estudo realizado por MARTINS; CARNEIRO; *et al.* (2022).

Figura 30 - Análise em MEV da deposição do DLC sobre o aço rápido M35



Fonte: Adaptado de VIEIRA *et al.* (2023)

Os ensaios de nanoindentação foram realizados no equipamento de Microscopia de Força Atômica Olympus AC160TS *probe*, com 300 kHz de frequência de ressonância e 26 N/m de constante elástica e foram medidas as espessuras do filme de DLC e posteriormente realizado o ensaio de nanoindentação para medição da dureza e determinação do módulo de elasticidade da amostra. Para obtenção desses resultados, foi seguido o método de OLIVER; PHARR (1992) por meio de indentações parciais foram realizadas, com carga máxima de penetração de 10,0 μN . A profundidade máxima de penetração foi de 205 nm, respeitando a proporção de aproximadamente 10% da espessura da camada de recobrimento depositada (DCL + Cr) de forma a minimizar os efeitos do tipo de substrato nos resultados do ensaio (FUJISAWA *et al.*, 2018).

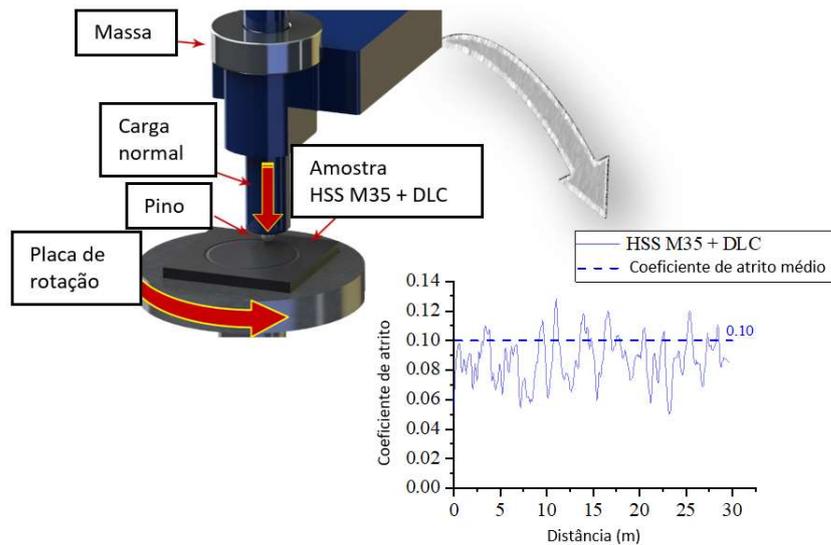
3.2 Propriedades dos materiais

Para iniciar a simulação por meio do método dos elementos finitos, é necessária a definição das características dos materiais que foram utilizados, sendo esses o aço rápido para o substrato, o cromo como camada intermediária e o DLC como recobrimento do material.

As propriedades dos materiais utilizados são apresentadas na Tabela 3, sendo as características do filme fino de DLC retiradas do estudo realizado por FUJISAWA *et al.* (2018) e MARTINS; CARNEIRO; *et al.* (2022); as características do cromo de PANG; GAO; VOLINSKY (2007); e do aço rápido de HUNT, R A; MCCARTNEY (2003), em que foi utilizado

o aço rápido M2 que é semelhante ao aço rápido AISI M35 (com 5% a menos de cobalto). Essa diferença implica na variação de dureza a quente do material, que gera pouco impacto ensaio de nanoindentação. O coeficiente de atrito do par tribológico utilizado foi de 0,10, conforme encontrado pelo experimento do ensaio de desgaste por deslizamento, pino sobre disco, realizado por MARTINS *et al.* (2022), ilustrado na Figura 31.

Figura 31 – Ensaio de pino sobre disco realizado



Fonte: Adaptado de VIEIRA *et al.* (2023)

Tabela 3 – Características dos materiais e revestimentos utilizados

Material	Módulo de Young [GPa]	Coefficiente de Poisson	Regime plástico
Aço rápido M2	220,60	0,29	Assumido material com regime elasto-plástico ideal com $\sigma_e = 4,0$ GPa.
Cromo	205,00	0,25	Assumido material com regime elasto-plástico ideal com $\sigma_e = 4,3$ GPa
DLC	137,0	0,20	Assumido material com regime elasto-plástico ideal com $\sigma_e = 2,1$ GPa.

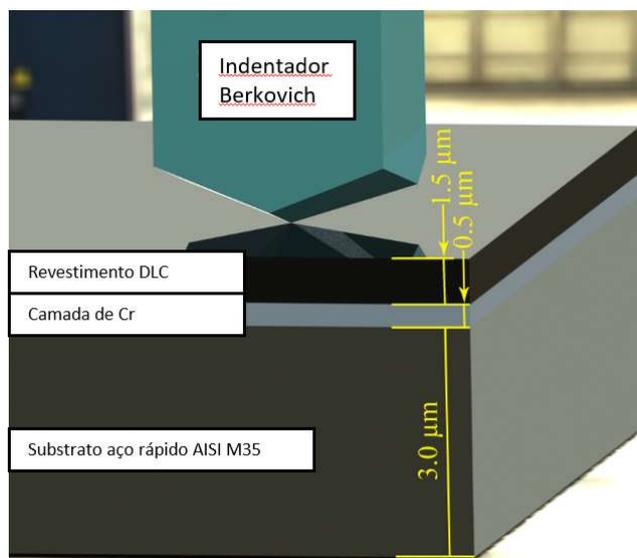
Fonte: Elaborado pelo autor

3.4 Definição das condições de contorno do ensaio

O ensaio de nanoindentação teve como base o experimento já citado na seção 3.1. De forma a tornar o modelo factível, levando em conta capacidade computacional e informações disponíveis para agregar à simulação. Foram adotadas algumas hipóteses simplificadoras, apontadas a seguir.

O modelo foi simplificado como bidimensional axissimétrico. Inicialmente foi utilizada uma correlação da área total de penetração entre o indentador Berkovich, exposto na Figura 32, e o modelo bidimensional elaborado na simulação para determinação do ângulo da ponta do penetrador, utilizando o valor de $70,3^\circ$. Porém, resultados iniciais já apresentaram grande discrepância entre a simulação e o resultado experimental quando comparadas as forças finais de indentação (aproximadamente 40% de erro). Como alternativa para esse percalço encontrado, foi convencionada a utilização do ângulo de ponta de $65,3^\circ$, seguindo os experimentos de QIN *et al.*, 2009 e SHI *et al.* (2010), uma relação direta entre o ângulo do indentador Berkovich e o modelo bidimensional, alcançando resultados consistentes. O conjunto formado por substrato, camada intermediária e filme fino foi simplificado para uma menor altura e largura segundo o princípio de Saint-Venant, que determina que o efeito de uma carga aplicada em um objeto é puramente local e que as tensões decaem rapidamente com o distanciamento do ponto onde é aplicado o esforço (SILVA; CHAVES; SANTOS, 2017). O modelo gerado pode ser visualizado na Figura 32, em que se constata que as espessuras do filme fino e camada intermediária foram mantidas.

Figura 32 – Modelo para nanoindentação



Fonte: Adaptado de VIEIRA et al. (2023)

Além das considerações anteriores, as seguintes características de contorno foram utilizadas para realização do ensaio, tomando como base a literatura especializada (ALABOODI; HUSSAIN, 2019; CHATTERJEE *et al.*, 2010; CHEN, HSI CHAO; HUANG; CHENG, 2018; PANDURE; JATTI; SINGH, 2014):

- a) Materiais considerados isotrópicos e sem falhas de fabricação
- b) Perfeita adesão entre substrato e recobrimento
- c) Indentador considerado rígido devido à natureza do ensaio

3.5 Modelo de elementos finitos com somente uma indentação

Inicialmente foi criado um modelo com a simplificação de somente uma indentação total em substituição às indentações parciais para verificação dos impactos no resultado final de força de indentação e tensões sobre o filme de DLC. A variação do curso do indentador ocorre de forma abrupta do 0 nm até os 205 nm.

O contato entre os dois corpos foi configurado como contato rígido e deslizamento finito, impossibilitando interpenetração entre os dois corpos. O corpo considerado como mestre foi o indentador e o escravo o corpo de prova. Não foram utilizadas simplificações para descrever o impacto entre os dois corpos. Após essa simulação foi simulado o ensaio contendo todas indentações parciais do ensaio real.

XIAO *et al.* (2019) construiu um modelo de elementos finitos da nanoindentação com um indentador cônico e um substrato de aço engrenagem (20CrMnMo), um filme fino de DLC depositado com espessura de 1,73 μm e uma camada intermediária de titânio (Ti). Foi simulada somente uma indentação, a camada de Ti foi simplificada como DLC devido a características elásticas similares. Também foram realizadas simplificações de somente regime elástico para os materiais e modelo bidimensional. Buscou-se avaliar a característica de interface entre o filme de DLC e o substrato utilizando de elementos coesivos na interface. Foi encontrada boa correlação na curva de carregamento e nas falhas encontradas no filme. Sendo essas falhas em maioria trincamentos superficiais no filme na superfície que entra em contato com o indentador.

HUANG; PELEGRI (2007) realizou a simulação do experimento de nanoindentação com somente uma indentação em um substrato de silício (Si) e um filme de silício oxidado termicamente (SiO_2). O software utilizado foi o Abaqus e os materiais foram descritos com características elasto-plásticas ideais. Foi realizada uma simulação bidimensional e o indentador Berkovich foi aproximado ao indentador cônico, porém com ângulo de ponta de

70.3°. Foi variado o coeficiente de atrito entre substrato e recobrimento buscando simular a adesão entre substrato e recobrimento. O maior valor de força de indentação foi encontrado para o material com adesão perfeita e o menor para um coeficiente de atrito de 0 conforme esperado.

3.6 Modelo de elementos finitos por meio de indentações parciais

Após a geração do modelo de elementos finitos com somente uma indentação, foram acrescentados diversos passos intermediários de penetração e alívio, simulando o ensaio de indentações parciais realizado. Esses passos são descritos na Tabela 4.

Tabela 4 – Pontos do ensaio de nanoindentação

Passo do ensaio	Ponto de avanço (nm)	Ponto de retorno (nm)
1	47,7	42,9
2	52,5	47,9
3	60,4	53,4
4	68,7	59,9
5	77,8	66,7
6	87,0	73,5
7	95,1	80,3
8	102,6	86,4
9	110,1	92,1
10	117,8	97,2
11	124,9	103,0
12	132,8	108,7
13	141,3	114,6
14	150,0	120,5
15	157,7	127,3
16	166,1	133,3
17	174,5	140,3
18	183,6	147,5
19	192,3	154,6
20	205,0	0,0

Fonte: Elaborado pelo autor

3.7 Variação do raio de ponta do indentador

Para verificação do efeito do raio de ponta do indentador para o ensaio de nanoindentação, foi proposta a variação do mesmo entre 0, 100 nm, 150 nm, 175 nm, 200

nm, 215 nm, 225 nm e 250 nm. Foi optado nas simulações anteriores a esse ponto pela escolha do raio de ponta de 225 nm, uma vez que, segundo FISCHER-CRIPPS (2006), o raio de ponta de um indentador varia entre 50 a 150 nm com 50% de erro, dessa forma o valor de 225 nm é o caso crítico.

GADELRA; CHIESA (2011) avaliaram a influência da variação do raio de ponta no módulo de elasticidade na simulação por elementos finitos do ensaio de nanoindentação de um corpo de prova de sílica fundida. A simulação realizada foi bidimensional axissimétrica com ângulo de ponta de $70,3^\circ$, regime somente elástico do material e profundidade máxima de indentação de 230 nm. Foram simulados raios de ponta de 100, 200 e 300 nm. Foi calculado o módulo de elasticidade do filme pelo método de OLIVER; PHARR (1992). Foi concluído que com o aumento da profundidade de penetração o impacto da variação do raio de ponta foi reduzido, porém ainda presente. Um erro de 6% no cálculo do módulo de elasticidade foi encontrado comparado ao valor real e o estudo credita isso à utilização de um modelo bidimensional axissimétrico se equivalendo ao ensaio com o indentador Berkovich.

Conforme descrito anteriormente, QU *et al.* (2004) realizaram experimentos de microindentação de um substrato de cobre policristalino e obtiveram como resultado que o raio de ponta do indentador tem grande interferência nos resultados caso possua dimensão significativa em relação ao avanço do indentador.

3.8 Verificação da influência do atrito no ensaio de nanoindentação

Para verificar a influência do atrito no ensaio de nanoindentação foram gerados modelos com diversas condições de atrito, sendo elas atrito zero, atrito de 0,1, encontrado no experimento de MARTINS, 2016, e atrito de 0,3. Para avaliação dos resultados, foram consideradas as características da curva de força de indentação x profundidade do indentador e força final de indentação.

3.9 Comparação a um modelo tridimensional

Foi gerado um modelo tridimensional com a geometria do indentador Berkovich para a nanoindentação. As características dos materiais, pontos do ensaio por indentações parciais e características de contato foram mantidos, de forma a minimizar possíveis discrepâncias entre os modelos bidimensional e tridimensional para comparação.

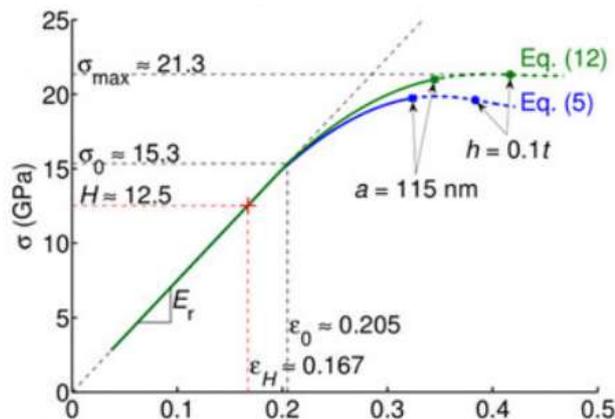
Foram avaliadas características da curva de força de indentação x profundidade do indentador, força final de indentação, dureza do material e tensões e deformações ao longo do corpo.

3.10 Verificação das características mecânicas do DLC

O módulo de elasticidade do filme de DLC utilizado no modelo em elementos finitos foi extraído diretamente do resultado de MARTINS; CARNEIRO; *et al.* (2022), não foram avaliadas as características de plasticidade do filme durante seus ensaios. Observou-se que durante o ensaio, o filme de DLC apresenta comportamento plástico expressivo na área em contato com o indentador, foi adicionada ao modelo essa não linearidade de material.

Inicialmente foram utilizadas as características de regime plástico obtidas por FUJISAWA *et al.* (2018) para o filme de DLC, conforme Figura 33, mas com uma simplificação de linearidade do regime plástico.

Figura 33 – Gráfico de tensão (GPa) x deformação para o filme de DLC



Fonte: Adaptado de FUJISAWA *et al.* (2018)

Tendo isso em vista, foi comparado o modelo com o regime elastoplástico ideal com o regime plástico obtido por FUJISAWA *et al.* (2018). Foram comparadas as curvas de força de indentação x profundidade do indentador e as tensões e deformações durante o ensaio. Em busca do impacto da utilização do regime elastoplástico ideal para o ensaio.

3.11 Variação da espessura do filme de DLC

Com o intuito de mensurar o impacto da variação da espessura do filme de DLC buscando a espessura que gera os melhores resultados de adesão, trincamento e módulo de

elasticidade, foi simulado o ensaio de nanoindentação com as espessuras de filme de 0,8 μm e 2 μm . O parâmetro de profundidade de indentação será mantido em 205 nm, de forma a comparar os resultados obtidos para o ensaio.

LI *et al.* (2020) realizaram um experimento em que foram aplicados filmes de DLC em substratos de aço inoxidável (SUS 304), liga de alumínio silício (Al-Si) e cobre (Cu) com uma camada intermediária de silício pela técnica de deposição PCVD. Foram produzidos filmes com a espessura de 5,5, 10,1, 21,8 e 28,3 μm . As amostras foram analisadas com a técnica de MEV para determinação da espessura do filme aplicado, espectroscopia Raman para avaliar os componentes químicos presentes, nanoindentação com um indentador Berkovich para dureza e módulo de elasticidade da amostra (mantendo a mesma carga de penetração de 50 mN para todas as amostras, sempre mantendo a relação de máximo de 10% de profundidade de penetração). Foi observado que a tensão residual do filme aumentou junto à espessura do mesmo. Na Tabela 5 é possível verificar os resultados encontrados de dureza e módulo de elasticidade do experimento. A dureza para os substratos de aço inoxidável e alumínio aumentam com a camada de DLC. Para o substrato de aço inoxidável, o módulo de elasticidade não varia fortemente. Já para a liga de alumínio há aumento do módulo de elasticidade com a espessura. O aumento de dureza e módulo de elasticidade para esses casos possui como causa o aumento do número de camadas de DLC paralelas à superfície do substrato. Porém para o cobre, a dureza aparenta grande aumento seguido por uma queda. Isso pode ser explicado pelo o fenômeno de deslocamento da camada de DLC no filme de cobre de 28,3 μm observado após o ensaio de nanoindentação.

Tabela 5 – Dureza (GPa) e módulo de elasticidade (GPa) com a variação da espessura para o aço inoxidável, liga de alumínio e cobre

Espessura (μm)	Aço inoxidável		Liga de alumínio		Cobre	
	Dureza (GPa)	Módulo de elasticidade (GPa)	Dureza (GPa)	Módulo de elasticidade (GPa)	Dureza (GPa)	Módulo de elasticidade (GPa)
5,5	12,7	119,3	10,6	88,3	11,9	105,7
10,1	13,1	113,1	12,3	99,5	15,5	117,8
21,8	14,4	125,7	13,4	108,7	13,5	142,6
28,3	16,3	123,4	14,5	110,5	12,3	95

Fonte: Adaptado de LI *et al.* (2020)

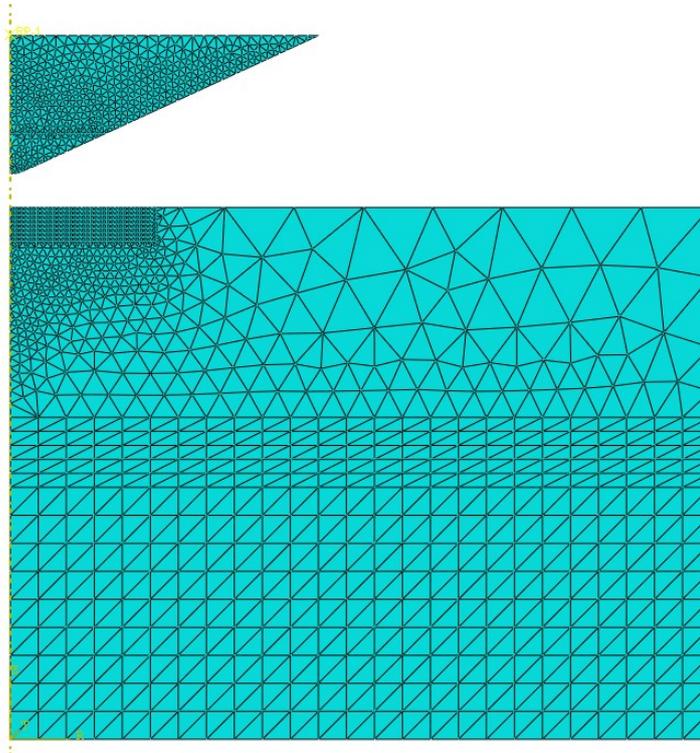
4 RESULTADOS

Na seção que segue serão apresentados os resultados levantados nos métodos experimentais numéricos.

4.1 Modelo em elementos finitos com somente uma indentação

Foi realizada uma simulação pelo método dos elementos finitos com somente uma indentação como forma de avaliar o impacto dessa simplificação relacionado ao ensaio com indentações parciais tendo como base a força final de indentação. O modelo de elementos finitos pode ser visualizado na Figura 34. Foram utilizados elementos triangulares com maior refinamento nos pontos de contato e maior deformação impostos. No total foram utilizados 1960 elementos no corpo de prova, com menor tamanho de 30 nm e 851 elementos no indentador, com menor tamanho de elemento de 10 nm na ponta do indentador.

Figura 34 – Modelo em elementos finitos gerado para somente uma indentação



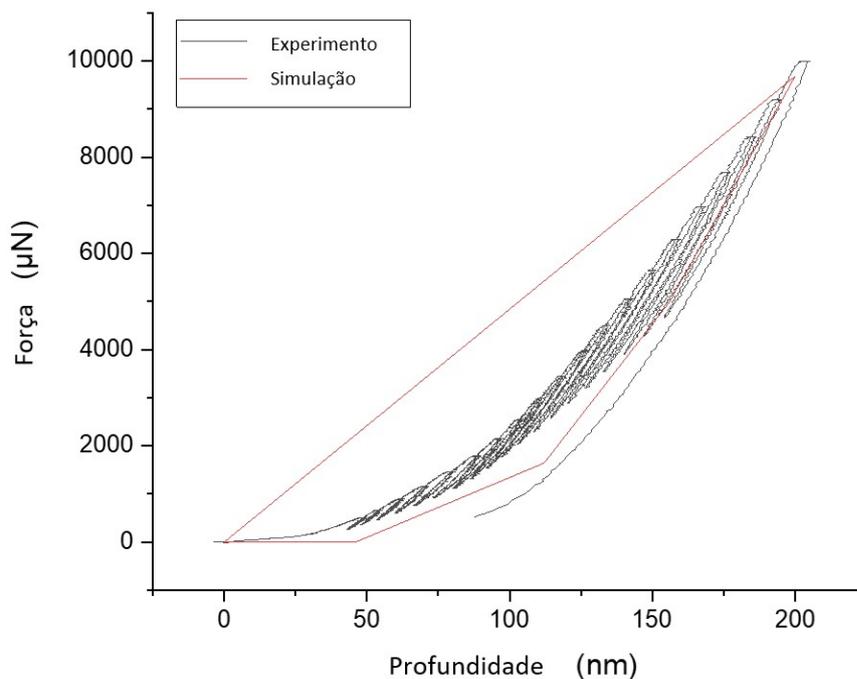
Fonte: Elaborado pelo autor

No procedimento experimental de nanoindentação foi encontrado um valor máximo de carga de indentação de 10000,7 μN para uma profundidade de penetração de 205 nm. Já o valor obtido para a simulação de elementos finitos foi de 9396,0 μN para uma única

indentação. Dessa forma, foi encontrada uma aproximação de 93,9% entre o resultado da simulação e real. Foi optado nas primeiras simulações pela escolha do raio de ponta de 225 nm, uma vez que, segundo FISCHER-CRIPPS, 2006, o raio de ponta de um indentador varia entre 50 a 150 nm com 50% de erro, assim sendo o valor de 225 nm é o caso com maior valor de raio de ponta.

Na Figura 35 é possível verificar o gráfico de força versus profundidade de penetração para o experimento real e a simulação de elementos finitos com uma indentação somente. Como foi utilizado apenas um passo de simulação para deslocar da primeira posição do indentador até a sua posição final, como é esperado no método de indentação única, os valores intermediários entre os resultados experimentais e simulados devem ser diferentes e não podem ser comparados devido à diferença nos métodos. Essa divergência no resultado de força de indentação pode estar ligada ao retorno elástico do material a cada alívio do penetrador no caso de indentações parciais. Como o valor final de indentação não ultrapassou 10% da camada recoberta, não há alterações significativas do substrato que interfiram no resultado.

Figura 35 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real (preto) e a simulação em elementos finitos com uma indentação (vermelho)



Fonte: Elaborado pelo autor

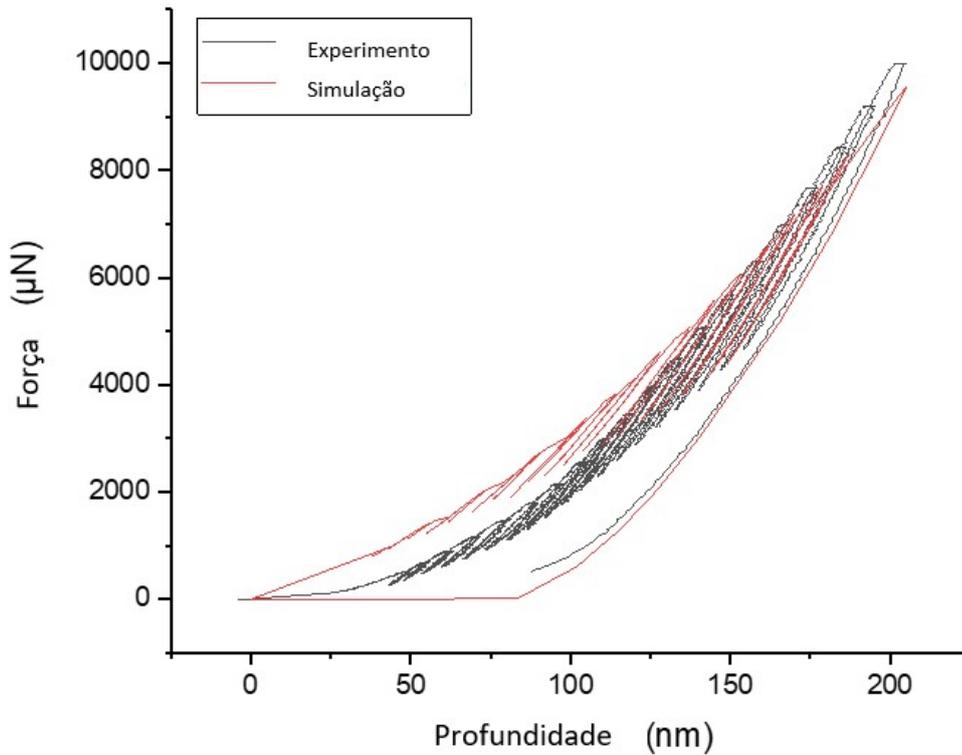
4.2 Modelo em elementos finitos com indentações parciais

Um modelo em elementos finitos contendo todas as indentações parciais foi gerado para verificar se ocorreria maior aproximação com o resultado real baseado na força de indentação. Foi utilizada a mesma malha em elementos finitos do modelo com somente uma indentação de forma a manter por padrão os possíveis erros gerados pela malha de elementos finitos e comparar de forma verossímil os modelos.

O valor de força final de indentação encontrado na simulação foi de 9550,4 μN para a simulação contendo todas as 20 indentações parciais, mantendo o raio de ponta em 225 nm. Um resultado com 95,5% de proximidade com o do experimento, de 10000,7 conforme citado anteriormente.

Na Figura 36 é representado o gráfico de força do indentador versus profundidade de penetração para o experimento realizado e o modelo em elementos finitos contendo todos os passos de indentações parciais realizados. Há uma maior aproximação entre os resultados finais, em relação ao modelo de indentação simples (Figura 35). Nas faixas de penetração mais altas no gráfico da Figura 36, após 150 nm, há uma aproximação entre a forma do MEF e as curvas experimentais. A diferença na parte inicial da curva pode ser função da rugosidade da superfície que, no modelo de elementos finitos, não foi levada em consideração. As medidas de rugosidade R_a foram realizadas nas amostras do experimento real com um equipamento de microscopia de força atômica (AFM MPFP3D SA Asylum Research), e um valor médio entre as medições de 48 nm foi obtido para uma área de medição de 25 μm^2 . Comparando com a profundidade máxima de penetração do penetrador (205 nm), a rugosidade da superfície pode ser considerada relevante. Esse comportamento está de acordo com o estudo de CHEN, LING *et al.* (2014) em que foi realizado um ensaio de nanoindentação em aço inoxidável AISI 316L, observou-se que a aleatoriedade de um perfil de rugosidade respeitando um valor de R_a para valores de rugosidade relevantes pode alterar a forma da curva carga x força de penetração.

Figura 36 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real (preto) e a simulação em elementos finitos com diversas indentações parciais (vermelho)



Fonte: Elaborado pelo autor

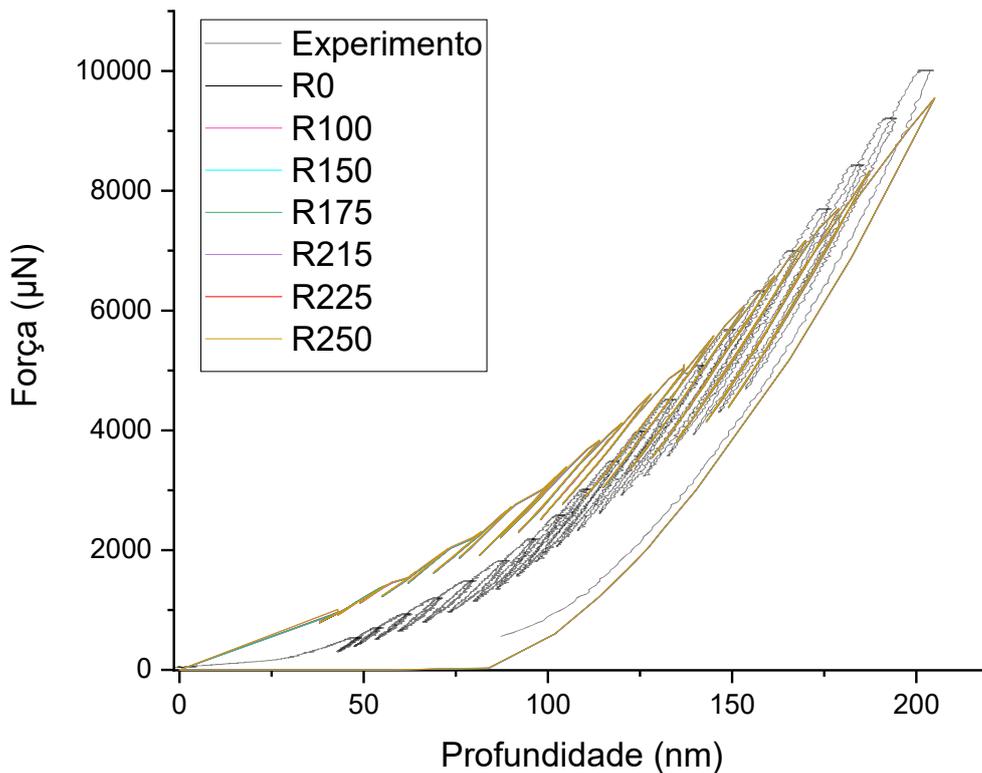
4.3 Impacto da variação do raio de ponta na força final de indentação

Para melhor compreensão dos efeitos do raio de ponta em uma simulação de nanoindentação por meio de elementos finitos contendo indentações parciais, foram realizados ensaios com diversos valores de raio de ponta. Na Figura 37 é apresentado o gráfico de força do indentador versus profundidade de penetração para o experimento realizado e o modelo em elementos finitos para os raios de ponta de 0, 100, 150, 175, 215, 225 e 250 nm. Foi necessário iniciar com o valor de 100 nm após 0 nm devido às limitações do software. Como pode ser visto na Figura 38, em profundidades de penetração menores, até aproximadamente 75 nm, é possível visualizar uma maior dispersão nas curvas para diferentes raios de ponta do indentador, verificando-se que inicialmente essa divergência é maior e, com o aumento da profundidade de penetração, há uma convergência nos resultados. Isso indica uma maior influência do raio da ponta do indentador em profundidades de indentação menores. Em profundidades menores, a dimensão do raio da ponta torna-se relevante e, à medida que o indentador avança e ocorre um maior contato com sua parte reta, o efeito do raio da ponta vai diminuindo até se tornar irrelevante para os resultados. Pode-se observar que em grandes profundidades de penetração, após 150 nm, há uma grande

proximidade das formas das curvas, como visto na Figura 37. Isso corrobora com o experimento de microindentação realizado por QU et al. (2004), em que se percebe uma interferência do raio da ponta em baixas profundidades de indentação e com o avanço do indentador, o efeito é reduzido até sua extinção.

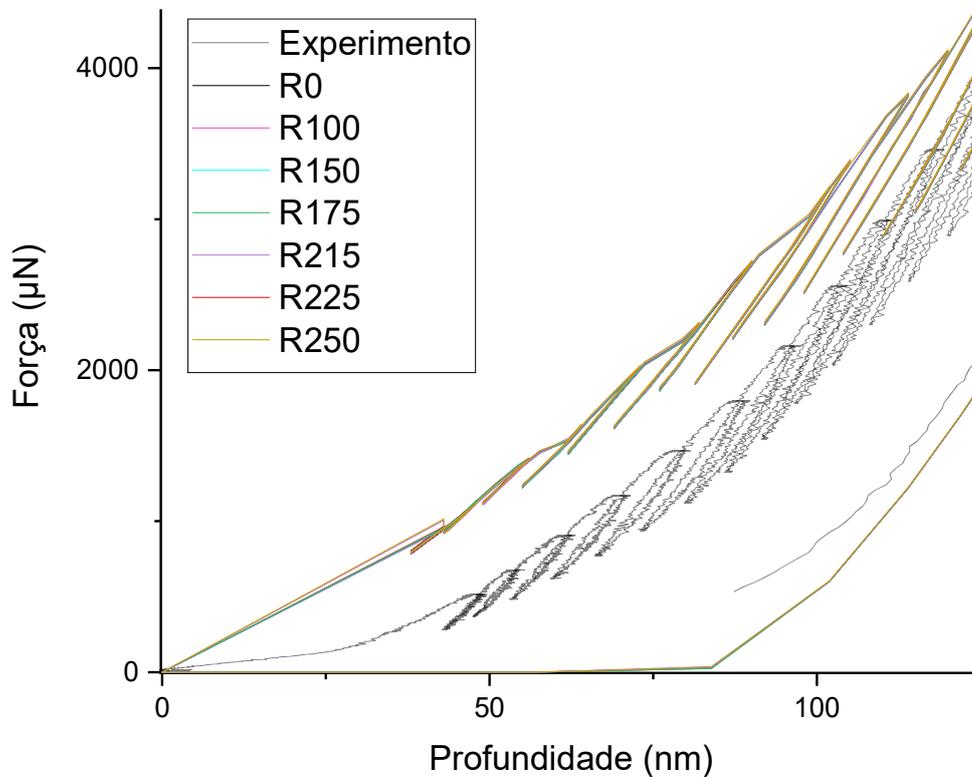
Pode-se observar que a variação do raio da ponta não tem grande interferência no formato da curva força x profundidade de penetração do ensaio, e que não há variação significativa no resultado final em relação ao raio da ponta escolhido, conforme o modelo aplicado. Além disso, ao trabalhar em uma faixa de penetração maior, após 150 nm, há uma aproximação entre a forma das duas curvas reais e simuladas.

Figura 37 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real e a simulação em elementos finitos com raio de ponta de 0, 100, 150, 175, 200, 225 e 250 nm



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 38 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real e a simulação em elementos finitos com raio de ponta de 0, 100, 150, 175, 200, 225 e 250 nm em escala aumentada



Fonte: Elaborado pelo autor

Na Tabela 6 estão expostos os resultados de força final de indentação para os raios de ponta simulados contendo todos os passos de indentações parciais realizados. Nota-se que todos os valores de força final de indentação são aproximados a 95550 µN. Isso demonstra o impacto pouco expressivo nos resultados em função da variação do raio de ponta, corroborando com o experimento realizado por QIN *et al.*, 2009 e SHI *et al.* (2010) para os ensaios de microindentação de uma amostra de cobre. No estudo dos autores, também não foi encontrada expressiva variação nos resultados com a variação no raio de ponta do indentador.

Tabela 6 – Resultado final de força de indentação para diversos raios de ponta

Raio de ponta (nm)	Força final de penetração (μN)	Diferença para o resultado real (%)
0	9549,3	4,5%
100	9549,3	4,5%
150	9549,6	4,5%
175	9550,0	4,5%
215	9551,4	4,5%
225	9550,4	4,5%
250	9553,8	4,5%
Real	10000,7	-

Fonte: Elaborado pelo autor

4.4 Impacto da variação do raio de ponta na dureza do filme de DLC

Tendo como base os resultados de força de indentação com diversos raios de ponta, foi calculada a dureza do filme de DLC pela simulação de elementos finitos.

Para o cálculo da dureza do filme de DLC obtida pelo ensaio de nanoindentação, foi utilizada a Equação (14), em que H é a dureza, P a carga e A_c a área de contato (KUMAR, AMIT; ZENG, 2010).

$$H = \frac{P}{A_c} \quad (14)$$

Para o indentador Berkovich a área (A_c) pode ser expressa conforme a Equação (15):

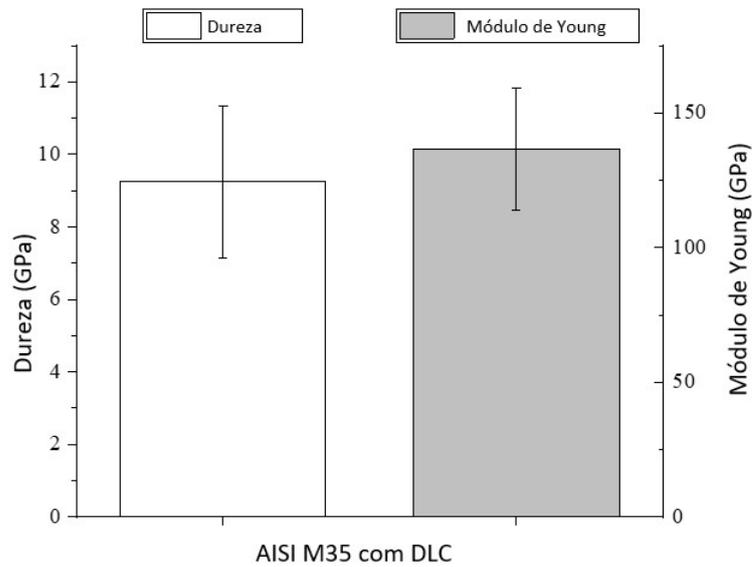
$$A_c = 24.56h_c^2 \quad (15)$$

No ensaio experimental foi encontrada uma dureza de $9,25 \pm 2,10$ GPa, conforme a Figura 39. Na Tabela 7 é possível visualizar o resultado de dureza para cada simulação realizada. Conforme averiguado nos resultados de força de indentação, não nota-se variação na dureza obtida para o corpo de prova com a variação do raio de ponta. O valor de dureza para todas as simulações foi em média 9,25 GPa, em consonância com o valor obtido experimentalmente, um indício forte de aproximação da simulação comparada ao modelo experimental.

Tabela 7 – Dureza em GPa para cada simulação realizada e o ensaio real

Raio de ponta	H (GPa)
0	9,25
100	9,25
150	9,25
175	9,25
200	9,25
215	9,25
225	9,26
250	9,25
Real	$9,25 \pm 2,10$

Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 39 – Resultados experimentais de dureza e módulo de elasticidade

Fonte: Elaborado pelo autor

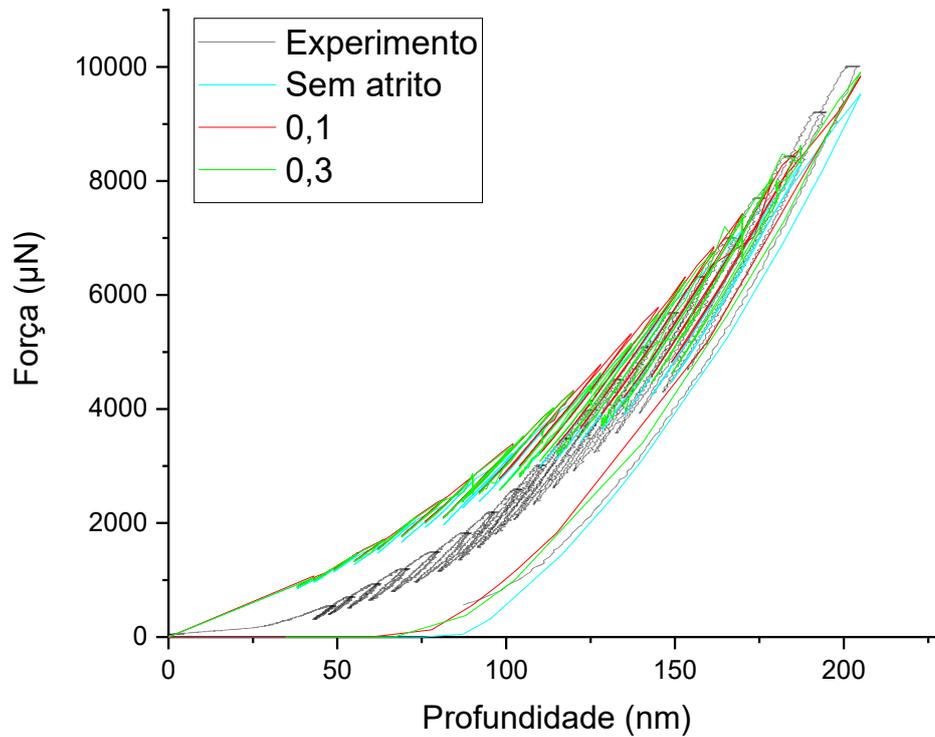
4.5 Influência do atrito na simulação

Uma vez que foi verificado que o raio de ponta não apresenta interferência nos resultados finais de força final de indentação, a partir desta seção, esse fator não será levado em consideração na análise.

Como forma de verificar o impacto do atrito no modelo em elementos finitos e entender sua participação nos resultados, foram realizadas simulações com diversos valores de atrito de Coulomb.

Na Figura 40, é possível visualizar o impacto da variação do atrito na curva de Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real, simulações sem atrito, atrito de 0,3 e atrito de 0,1, coletado do experimento de MARTINS (2016). Nota-se que a variação no atrito de Coulomb não gera grande impacto no formato das curvas. Há variação na força final de indentação, sendo a força para o experimento sem atrito de 9148,0 μN , com atrito de 0,1 de 9551,4 μN e atrito de 0,3 de 9888,8 μN .

Figura 40 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real (preto) a simulação sem atrito (azul), atrito de 0,1 (vermelho) e atrito de 0,3 (verde)



Fonte: Elaborado pelo autor

4.6 Verificação das características mecânicas do DLC

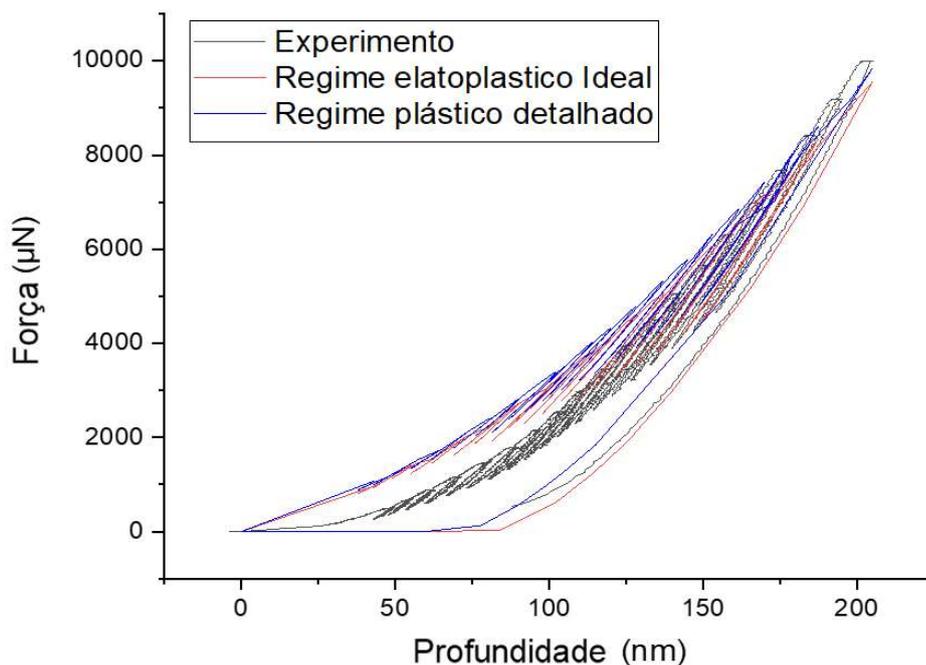
Inicialmente foi utilizada uma simplificação no regime plástico do filme de DLC com um regime elasto-plástico ideal com $\sigma_e = 2,1$ GPa. De forma a verificar o impacto da não utilização dessa simplificação, foi utilizado da curva de tensão x deformação obtida por FUJISAWA *et al.* (2018) para compor o regime plástico do filme na simulação.

Para a simulação realizada, excetuando os valores de regime plástico para o filme de DLC, foram mantidos os mesmos parâmetros no modelo em elementos finitos.

Na Figura 41, é possível visualizar o resultado de Força de indentação x Profundidade do penetrador para o experimento realizado, regime elastoplástico ideal e o regime plástico detalhado. Nota-se que não houve grande impacto tanto no formato da curva em toda sua

extensão quanto no valor final de força de indentação, sendo o valor de 9550,4 μN para o regime elastoplástico ideal e 9907,6 μN para o regime detalhado, uma aproximação de 96,3% entre os valores. Além disso, a dureza encontrada para o regime elastoplástico detalhado foi de 9,60 GPa, valor também de acordo com a medida realizada experimentalmente, que foi de $9,25 \pm 2,10$ GPa.

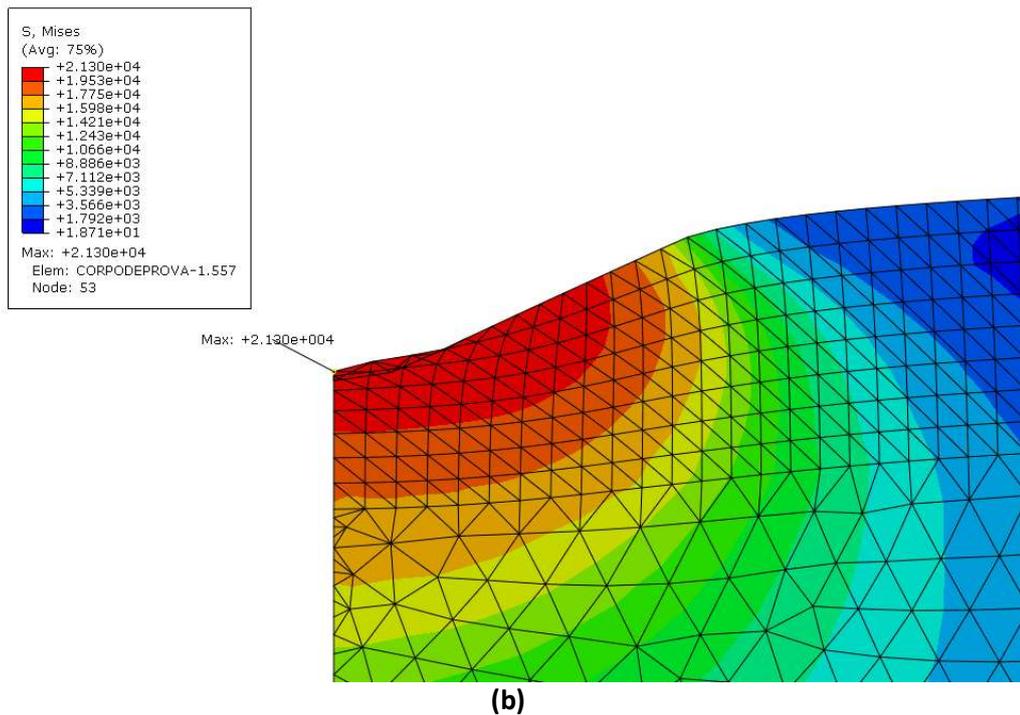
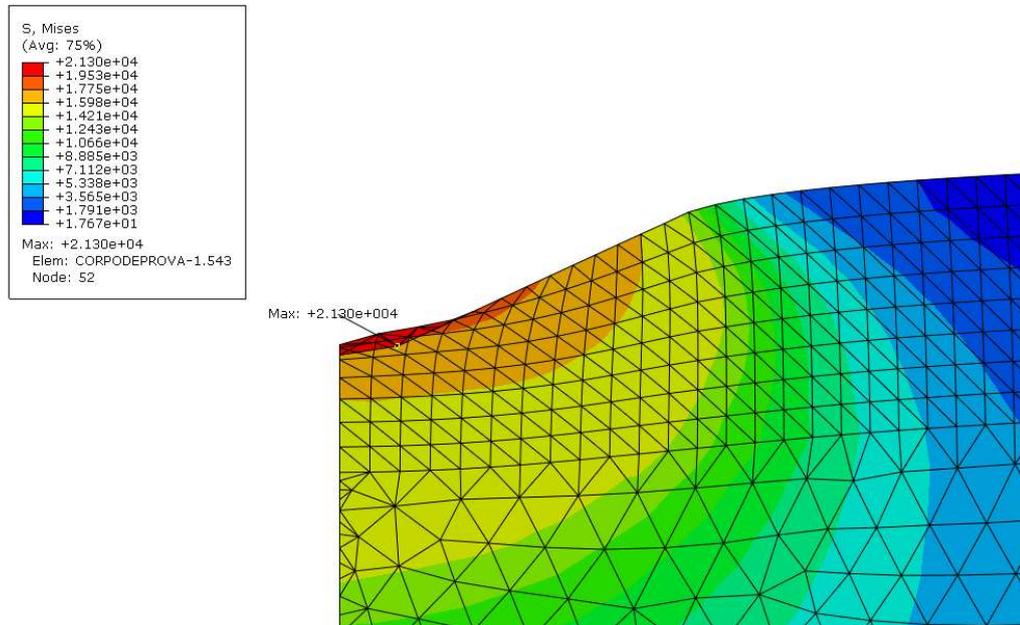
Figura 41 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real, modelo com regime elastoplástico ideal e detalhado



Fonte: Elaborado pelo autor

Na Figura 42 é possível verificar o resultado numérico das tensões de Von Mises no ponto de maior profundidade do penetrador junto ao corpo de prova, 205 nm, em MPa. Essa Figura apresenta as tensões compressivas no ponto de maior deformação imposta pelo ensaio. Nota-se maior valor de tensão de 21,3 GPa tanto para a Figura 42(a) quanto para a Figura 42(b), valor em consonância com a tensão máxima do material encontrada por FUJISAWA et al. (2018). Para o regime elastoplástico ideal, observa-se uma menor propagação das tensões pelo corpo comparado ao regime plástico detalhado, porém para ambos os casos, na área de interface entre o indentador e o corpo de prova, houve grande proximidade entre os resultados. Ambos os resultados levam à indicação de possíveis falhas do filme de DLC na área de contato entre indentador e corpo de prova, uma vez que foi atingida o limite de resistência do material (21.3 GPa).

Figura 42 – Tensões de Von Mises no ponto de maior penetração do indentador (MPa) para o regime elastoplástico ideal (a) e para o regime plástico detalhado (b)

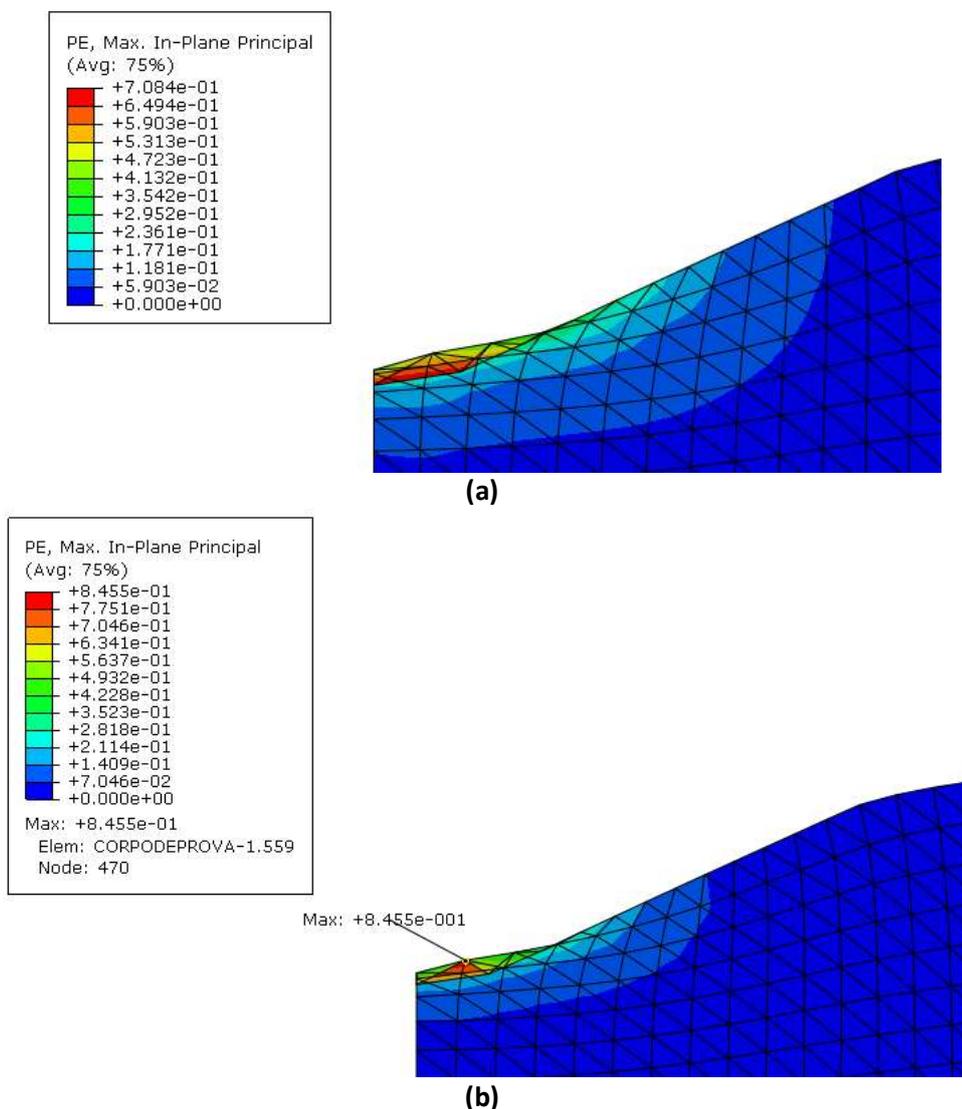


Fonte: Elaborado pelo autor

A deformação plástica que o corpo de prova sofreu durante o ensaio pode ser visualizada na Figura 43. Nota-se que a deformação que o corpo sofre concentra-se na área de realização do ensaio tanto para a Figura 43(a) tanto para a Figura 43(b), tendo o valor de

maior deformação na área correspondente ao centro do indentador. O valor de maior deformação para o regime elastoplástico ideal foi de 0,7048 e para o regime plástico detalhado foi de 0,8455, uma diferença percentual de 17% entre esses valores. De toda forma, nota-se que a distribuição das deformações no corpo para ambos os ensaios se assemelha, com maiores deformações na região de realização da nanoindentação.

Figura 43 – Deformação plástica no ponto de maior penetração do indentador para o regime elastoplástico ideal (a) e para o regime plástico detalhado (b)

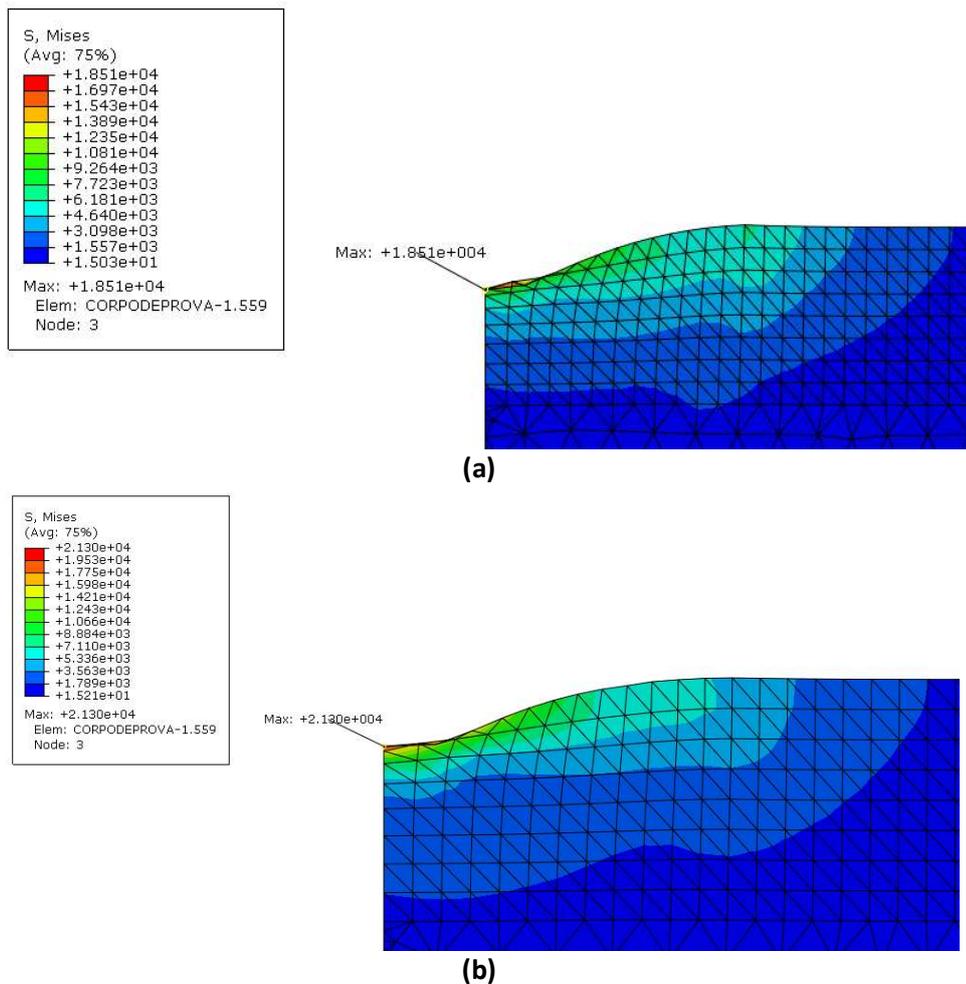


Fonte: Elaborado pelo autor

Na Figura 44 são apresentadas as tensões de Von Mises em MPa residuais no filme de DLC após a realização do ensaio. Nota-se concentração das tensões no ponto de maior deformação imposta pelo indentador para ambos os casos, com valor máximo de 18,51 GPa

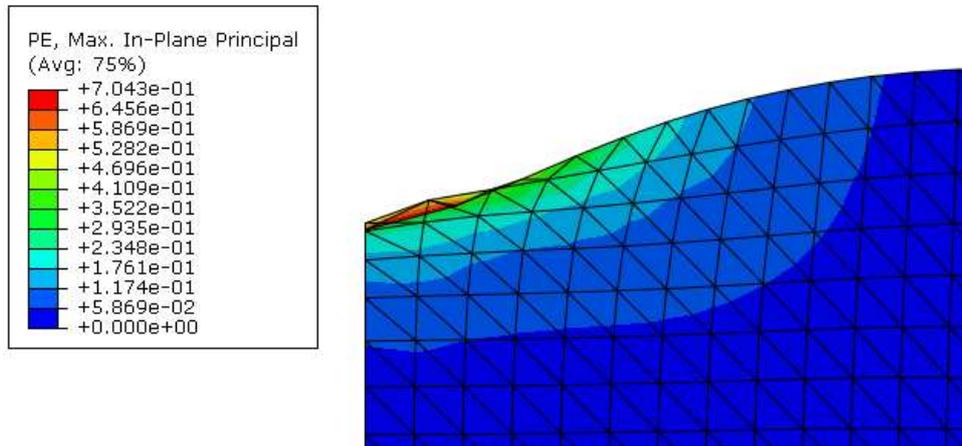
para o regime elastoplástico ideal (a) e para o regime plástico detalhado (b). Na Figura 45 é possível visualizar a deformação plástica residual após o retorno do indentador, nota-se que a deformação plástica é concentrada na área de realização do ensaio para ambos os casos possuindo um perfil semelhante. Em ambos os casos nota-se que, devido ao perfil residual de deformações, há a possibilidade de geração de trincas na área de contato entre a face do indentador e o corpo de prova, área II da Figura 9, e menor possibilidade de geração de trincas nas áreas adjacentes à realização do ensaio, área III da Figura 9, conforme estudo realizado por ARAÚJO; DIAS (2014) e CHAVES FILHO; DIAS (2019). Não são esperadas falhas adesivas uma vez que as tensões e deformações impostas pelo ensaio não são expressivas na interface entre recobrimento e camada intermediária.

Figura 44 – Tensões de Von Mises residuais no retorno do indentador (MPa) para o regime elastoplástico ideal (a) e para o regime plástico detalhado (b)

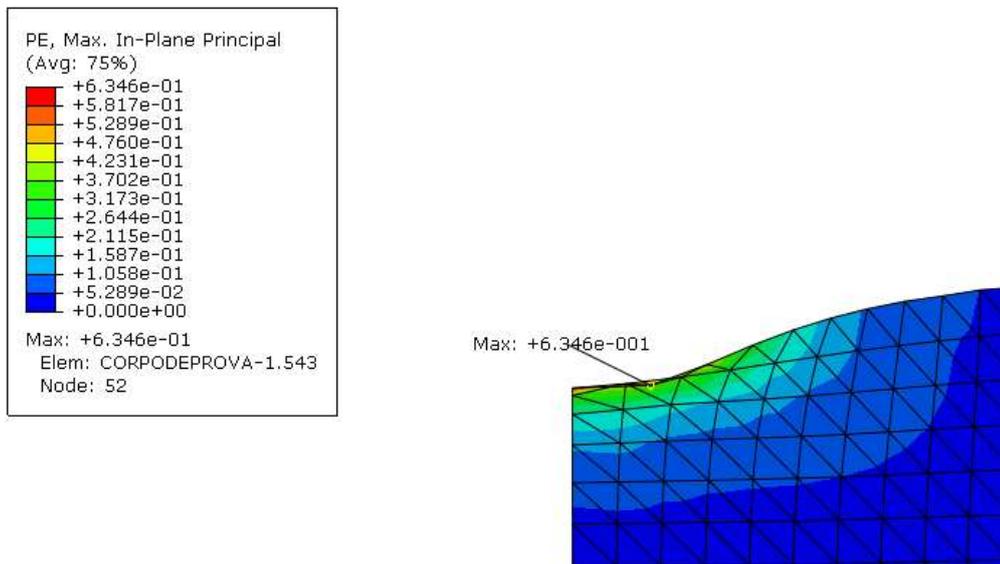


Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 45 – Deformações plásticas residuais no retorno do indentador para o regime elastoplástico ideal (a) e para o regime plástico detalhado (b)



(a)



(b)

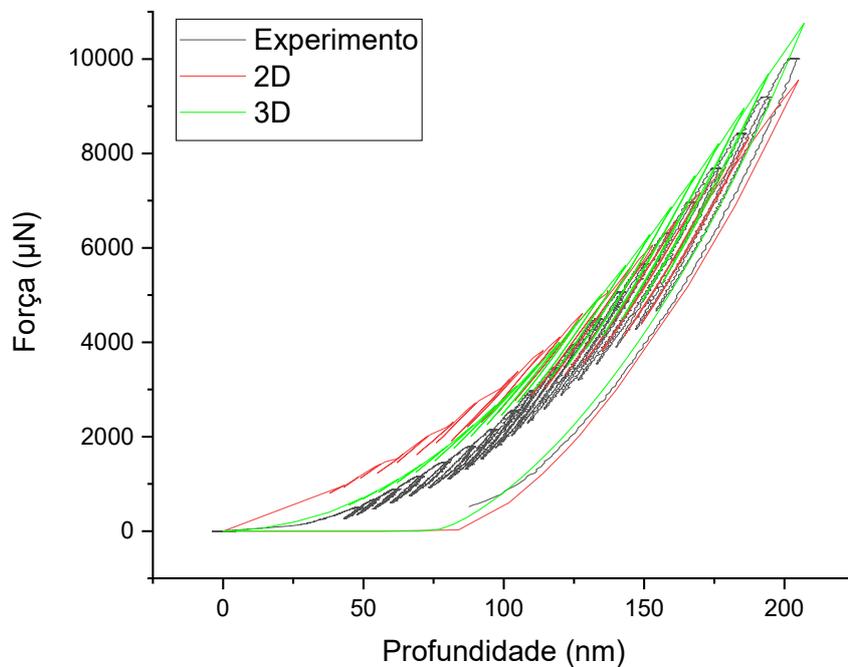
Fonte: Elaborado pelo autor

4.7 Modelo de nanoindentação tridimensional

Foi realizada uma simulação em elementos finitos tridimensional para o experimento de nanoindentação no filme de DLC por meio de indentações parciais, mantendo as mesmas premissas e características imputadas ao modelo bidimensional, como características dos materiais, tamanho do corpo de prova e espessuras, propriedades de contato, avanço do indentador e engastes no corpo. Para esse modelo foi gerada uma malha com 110212 elementos do tipo tetraédrico sendo 2434 elementos utilizados no indentador e 107778 no corpo de prova. A região de interesse entre indentador e corpo de prova recebeu um maior refinamento de forma a dar maior precisão aos resultados.

Na Figura 46 é representado o gráfico de força do indentador versus profundidade de penetração para o ensaio experimental, a simulação bidimensional e tridimensional em elementos finitos. É notada uma maior aproximação entre o ensaio tridimensional ao experimental comparado ao ensaio bidimensional e consequente similaridade no perfil da curva de Força do indentador x Profundidade de indentação. Isso pode ser relacionado à utilização do indentador Berkovich para o ensaio tridimensional, comparada à aproximação realizada no ensaio bidimensional de indentador cônico. Além disso, o modelo tridimensional apresenta resultados de força de indentação superiores ao experimental durante todo curso do ensaio. Isso pode ter como causa certas características dos materiais não levadas em conta no ensaio, como a rugosidade superficial que apresentou valores expressivos no ensaio real (R_a de 48nm) comparado à profundidade de indentação (205 nm). Além disso não foram levadas em conta características de adesão entre as camadas de recobrimento aplicadas, que no experimento real podem gerar alívios na força de indentação devido ao fenômeno do deslocamento.

Figura 46 – Força do indentador X Profundidade de penetração para o experimento real (preto) a simulação em elementos finitos bidimensional (vermelho) e tridimensional (verde)



Fonte: Elaborado pelo autor

Na Tabela 8 é possível visualizar a força final de indentação e dureza do material encontrada para os ensaios bidimensional, tridimensional e experimental. Nota-se que a força

final de indentação para o ensaio tridimensional é maior do que a experimental, com uma diferença de 7,0% entre os valores. Já o modelo bidimensional apresentou um resultado menor comparado ao experimental e diferença de 4,5% entre os valores. Já para a dureza, o valor encontrado no modelo bidimensional foi igual ao valor nominal do experimento, já o valor encontrado para o modelo tridimensional apresentou uma diferença de 11,2% com relação ao valor nominal do resultado experimental, vale ressaltar que o valor de 10,42 GPa está dentro da faixa de erro de medição do experimento.

Essa diferença tanto de força final de indentação quanto dureza entre o ensaio bidimensional e tridimensional está de acordo com o estudo realizado por QIN et al. (2009), em que foram realizadas simulações de nanoindentação para um indentador bidimensional cônico com ângulo de ponta de 65,3° e o indentador Berkovich. Foi constatado que com maior profundidade de indentação é encontrada uma maior dureza, e por conseguinte força final de indentação, para o indentador Berkovich comparado ao indentador bidimensional cônico, conforme demonstrado na Figura 18.

Tabela 8 – Resultado de força final de indentação e dureza para o modelo bidimensional, tridimensional e resultado experimental

	Força final de indentação (μN)	Dureza (GPa)
Experimental	10000,7	9,25 \pm 2,10
Bidimensional	9551,4	9,25
Tridimensional	10755,6	10,42

Fonte: Elaborado pelo autor

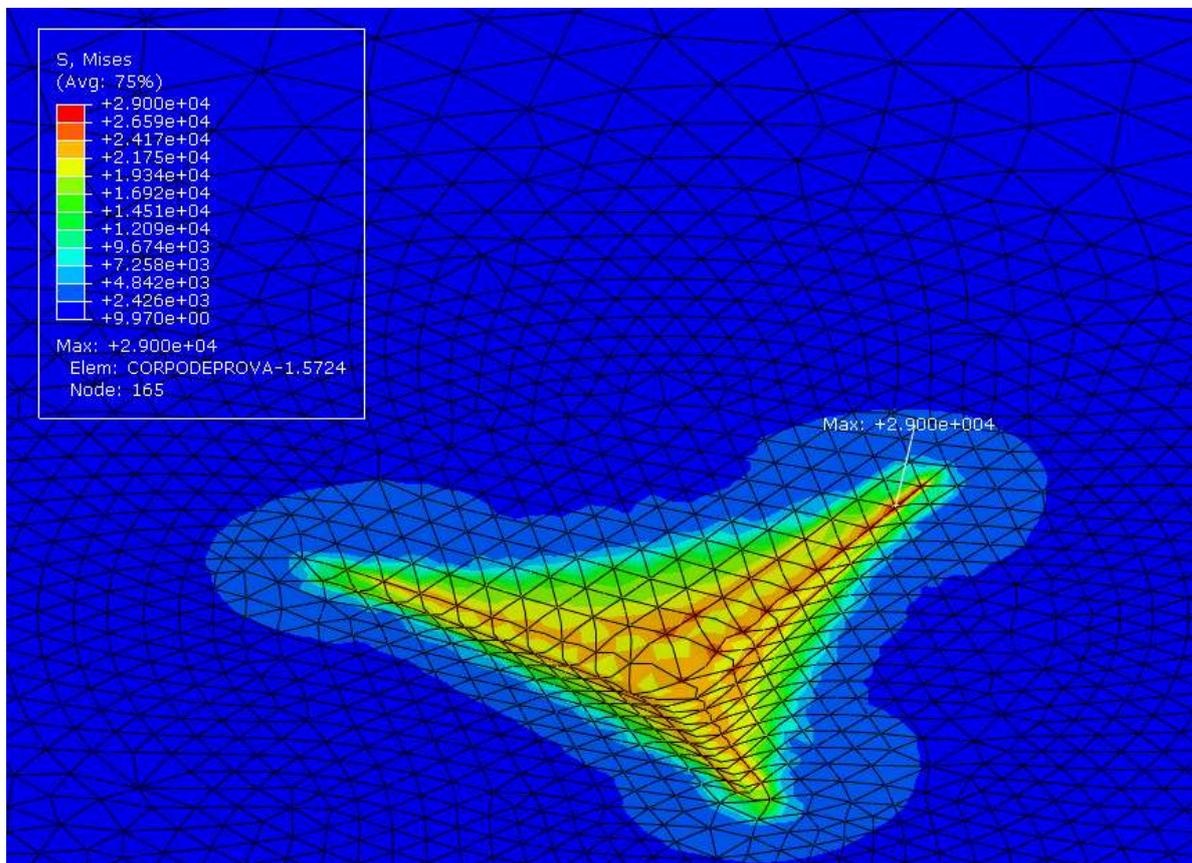
4.7.1 Tensões e deformações no ensaio de nanoindentação tridimensional

Na Figura 47 é mostrado o resultado de tensões de Von Mises no ponto de maior profundidade do penetrador durante o ensaio, em MPa. Nota-se uma diferença no perfil de distribuição de tensões comparado ao modelo bidimensional. No modelo bidimensional a concentração de tensões ocorre no ponto em que o indentador imprime o maior avanço e, no modelo tridimensional, há uma concentração de tensões na região que entra em contato com as arestas do indentador Berkovich. Esse resultado está de acordo com os resultados de SHI et al. (2010), em que foram realizadas simulações tridimensionais de um ensaio de microindentação com indentador Berkovich e indentador cônico. Notou-se que a variação do

perfil de tensões entre os dois corpos de prova se deve à maior complexidade do formato do indentador Berkovich, que possui arestas em toda sua extensão, comparado ao indentador cônico que possui como único ponto que gera concentração de tensões no corpo de prova, sua ponta.

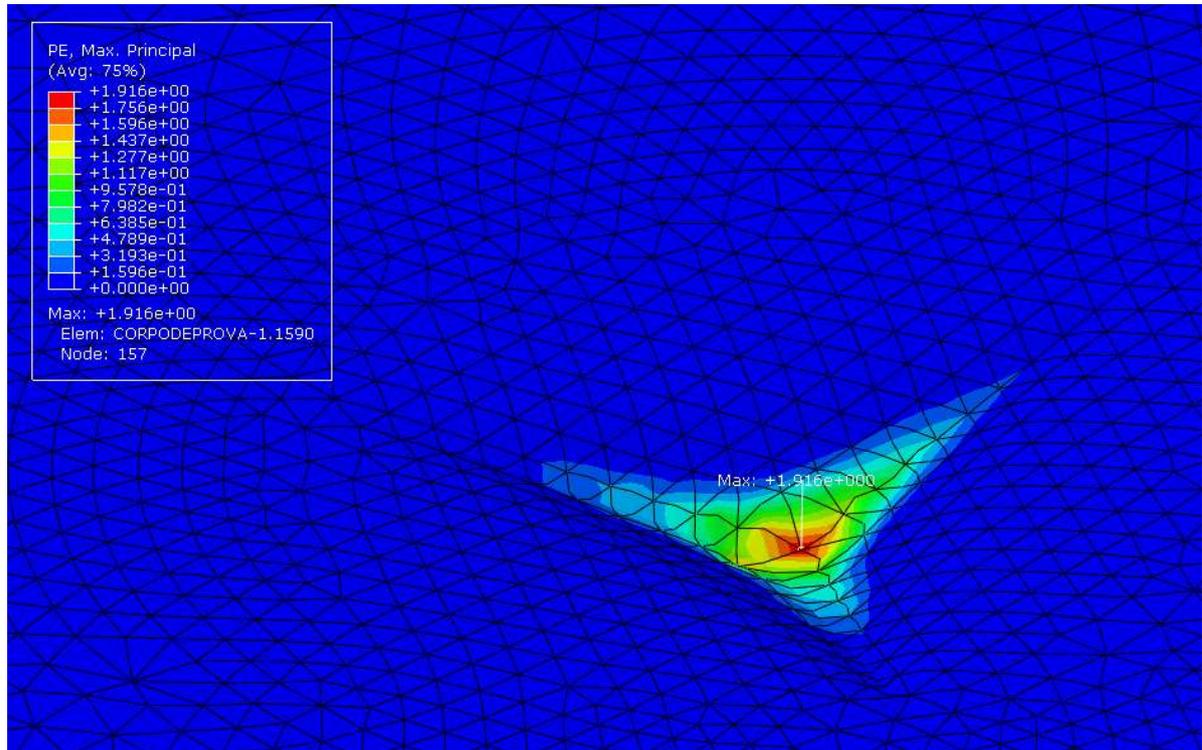
Já o perfil de deformações plásticas do modelo tridimensional, no ponto de maior deformação, apresenta maior similaridade comparado ao modelo bidimensional, como pode ser visualizado na Figura 48. Ambos apresentam o ponto de maior deformação como sendo o local que possui contato com o centro do indentador. Além disso, ambos resultados apresentam tensões máximas nesse ponto próximas ao limite de resistência do DLC (21.3 GPa).

Figura 47 – Tensões de Von Mises no ponto de maior penetração do indentador (MPa) para o ensaio de nanoindentação tridimensional



Fonte: Elaborado pelo autor

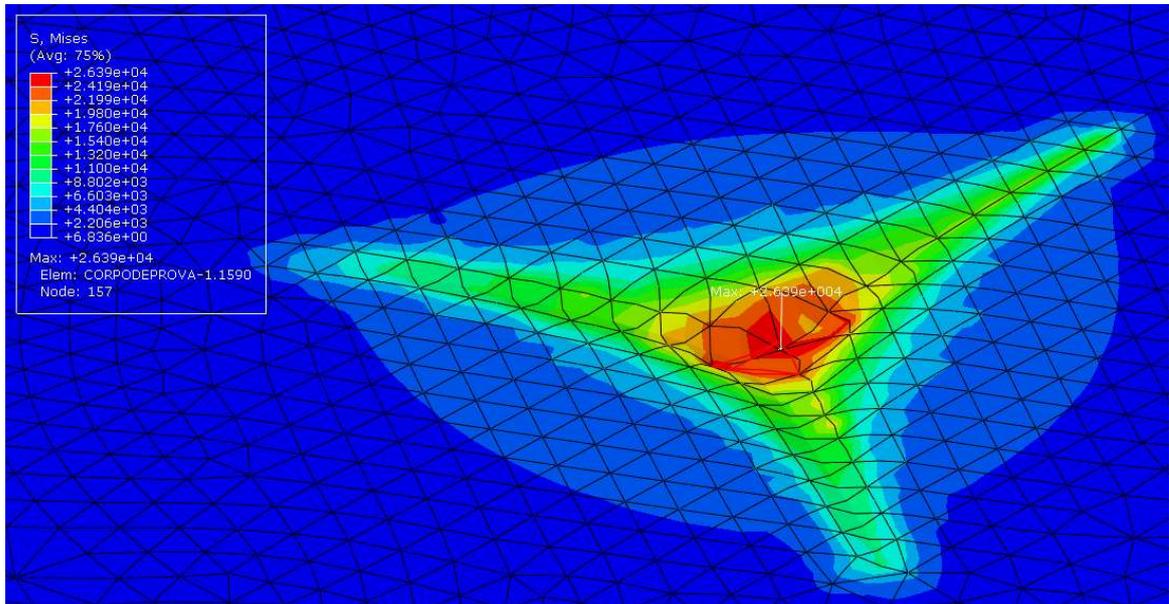
Figura 48 – Deformações plásticas no ponto de maior penetração do indentador para o ensaio de nanoindentação tridimensional



Fonte: Elaborado pelo autor

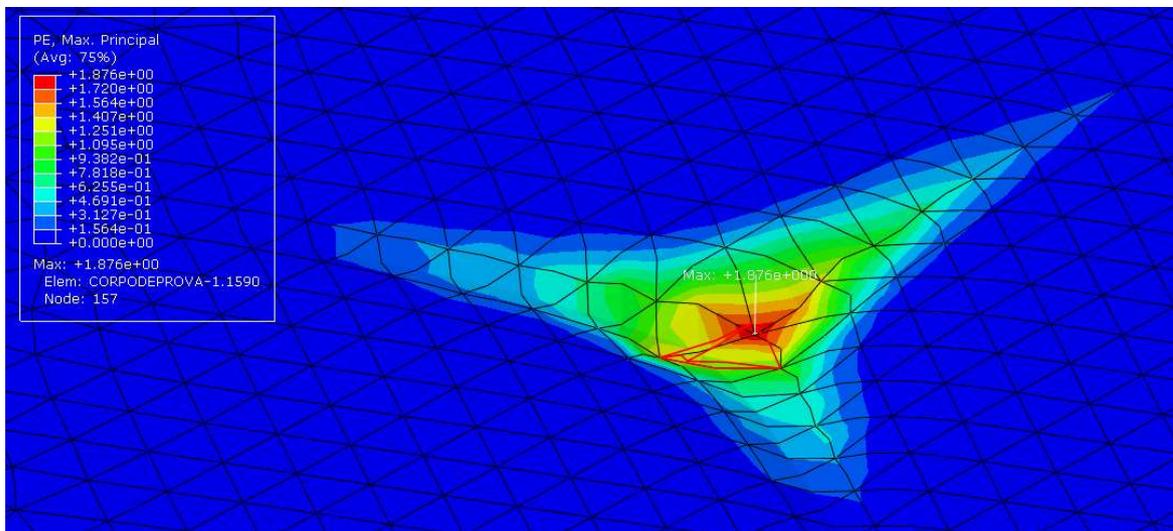
Na Figura 49 são mostradas as tensões de Von Mises, em MPa, residuais no filme após o ensaio. Nota-se maior tensão no ponto que entra em contato com o centro do indentador e valores intermediários nas regiões que entram em contato com as arestas do indentador Berkovich. Perfil similar é encontrado na Figura 50, em que é apresentada a deformação plástica residual após o retorno do indentador. O maior valor de tensão residual encontrado foi de 26 GPa, comparado a 18,5 GPa para o modelo bidimensional. Comportamento esse similar ao encontrado na Figura 44 e Figura 45 e, por conseguinte, levando também à possibilidade de geração de trincas na área de contato entre as arestas laterais do indentador e o corpo de prova e menor possibilidade de geração de trincas nas áreas adjacentes à realização do ensaio, conforme estudo realizado por ARAÚJO; DIAS (2014) e CHAVES FILHO; DIAS (2019).

Figura 49 – Tensões de Von Mises residuais no retorno do indentador (MPa) para o ensaio de nanoindentação tridimensional



Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 50 – Deformações plásticas residuais no retorno do indentador para o ensaio de nanoindentação tridimensional



Fonte: Elaborado pelo autor

O processamento do modelo tridimensional durou 17 horas e 50 minutos utilizando de um computador com as seguintes características: Processador Intel Xeon CPU E5-1650 v2 @ 3.5 GHz com 6 núcleos físicos e 12 threads, 32 GB de memória RAM e placa de vídeo Nvidia Quadro K600. O processamento do modelo bidimensional na mesma máquina durou 3 minutos e 13 segundos no mesmo equipamento.

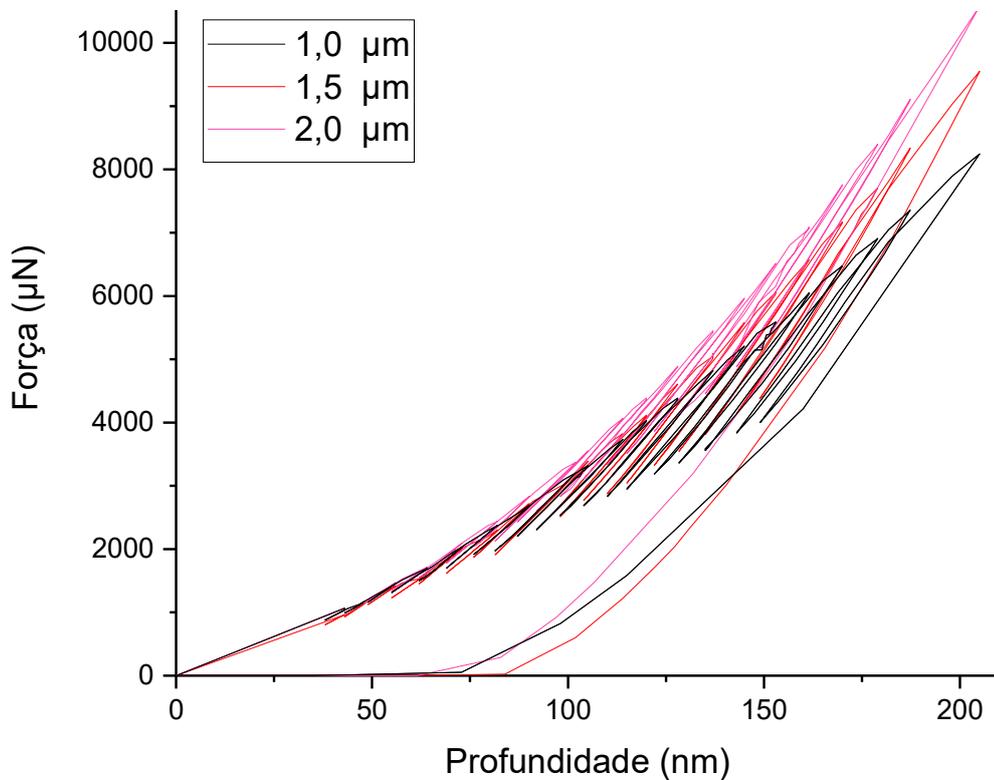
Foi verificado que as discrepâncias encontradas entre o resultado bidimensional e tridimensional apresenta como maior discrepância a aproximação do indentador Berkovich para o cônico e está de acordo com resultados encontrados na literatura especializada. Visto que as próximas etapas de realização do trabalho terão um caráter comparativo entre características do corpo de prova mantendo-se o mesmo modelo, optou-se por utilizar o modelo bidimensional para seguir com o estudo. Isso visa redução de tempo de processamento e complexidade do modelo em elementos finitos sem impactar os resultados do trabalho.

4.8 Variação da espessura do filme de DLC

A espessura do filme de DLC foi variada para 1,0 μm e 2,0 μm comparado ao 1,5 μm utilizado até então. Os demais parâmetros foram mantidos constantes de forma a minimizar quaisquer erros nesse experimento. No ensaio de nanoindentação foi mantida a mesma profundidade final do ensaio de 205 nm para comparar de forma fidedigna as tensões, deformações e dureza do corpo de prova obtidas pelo ensaio.

Na Figura 51 é possível visualizar o resultado da força final de indentação versus profundidade para todas as espessuras de filme de DLC. Nota-se por meio da Tabela 9 uma maior força final de indenação para o filme com profundidade de 2,0 μm , conforme esperado, visto que a camada de DLC apresenta uma dureza superior ao aço rápido, e seu substrato é o cromo, a camada intermediária. A dureza para o filme de 2,0 μm é 10% superior à encontrada no filme de 1,5 μm e 28% superior ao filme de 1,0 μm . Já o filme com menor dureza foi o de 1,0 μm . Pelo formato da curva de Força x Profundidade de penetração, em valores iniciais de profundidade, menor que 100 nm, nota-se uma aproximação entre os filmes de diversas espessuras. Com o avanço do indentador, os resultados se divergem, tornando-se visível a maior dureza do corpo de prova com maior espessura de substrato.

Figura 51 – Força do indentador X Profundidade de penetração para espessura de 1,0 μm (preto), 1,5 μm (vermelho) e 2,0 μm (rosa)



Fonte: Elaborado pelo autor

Tabela 9 – Resultado de força final de indentação e dureza para as espessuras de camada de DLC de 1,0 1,5 e 2,0 μm

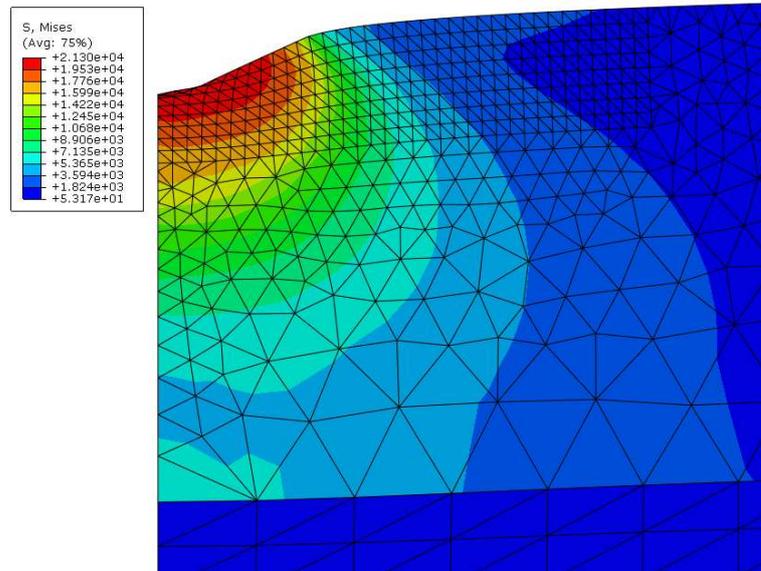
Espessura do filme de DLC (μm)	Força final de indentação (μN)	Dureza (GPa)
1,0	8239,0	7,98
1,5	9551,4	9,25
2,0	10520,8	10,19

Fonte: Elaborado pelo autor

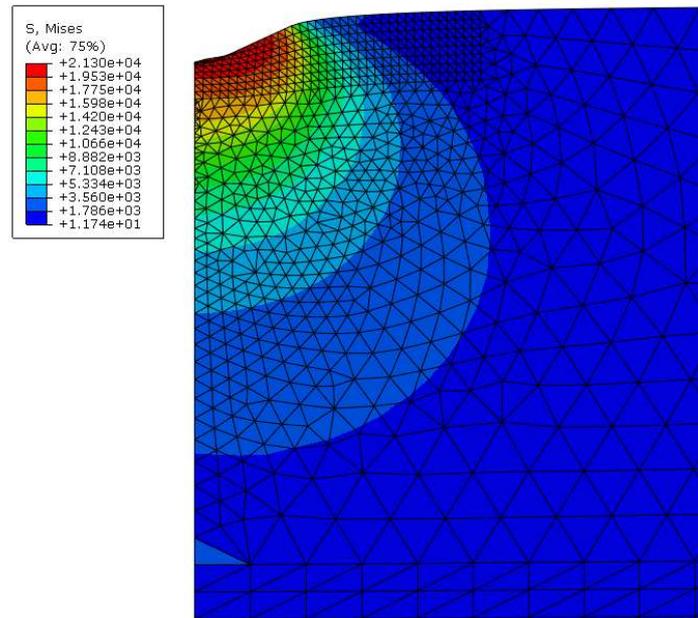
Na Figura 52 é possível verificar as tensões de Von Mises no ponto de maior penetração do indentador para a espessura de 1,0 μm (a) e 2,0 μm (b). Nota-se que as tensões no recobrimento de 1,0 μm se expandem para a interface recobrimento/camada intermediária. Esse fenômeno está de acordo com FUJISAWA et al. (2018), uma vez que a profundidade de

penetração versus a espessura do recobrimento junto a camada intermediária é de 13,3%, maior que os 10% tomado como padrão para penetração máxima de forma a não levar efeitos da camada intermediária ao ensaio de nanoindentação.

Figura 52 – Tensões de Von Mises no ponto de maior penetração do indentador (MPa) para espessura de filme de 1,0 μm (a) e 2,0 μm (b)



(a)



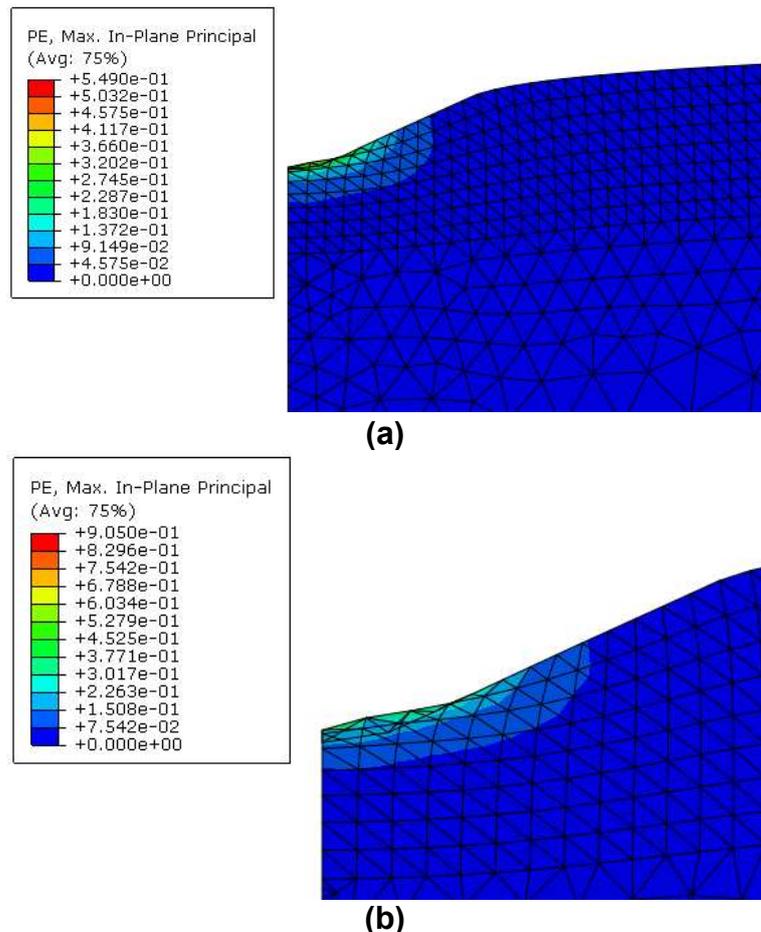
(b)

Fonte: Elaborado pelo autor

Na Figura 53 são mostradas as deformações plásticas no ponto de maior penetração do indentador para a espessura de filme de 1,0 μm e 2,0 μm do filme de DLC. Nota-se que na maior espessura de filme de DLC, há um maior pico de deformação plástica (0,95) comparado à espessura de 1,0 μm (0,54), na espessura de 1,5 μm foi encontrado o valor de 0,85,

conforme Figura 42 (b). Nota-se uma diferença considerável entre a espessura de 1,0 μm com relação às outras duas espessuras de filme que apresentaram valores próximos para deformação plástica. Isso pode ser relacionado a uma maior camada de filme de DLC, o material com maior dureza do corpo de prova, que gera uma menor elasticidade do corpo de prova levando à área que entra em contato com a ponta do indentador a sofrer maior deformação plástica.

Figura 53 - Deformações plásticas no ponto de maior penetração do indentador para espessura de filme de 1,0 μm (a) e 2,0 μm (b)

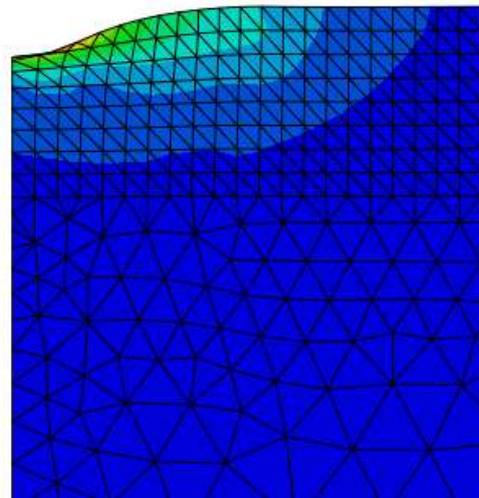
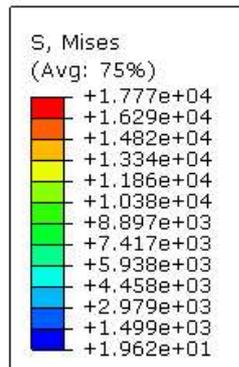


Fonte: Elaborado pelo autor

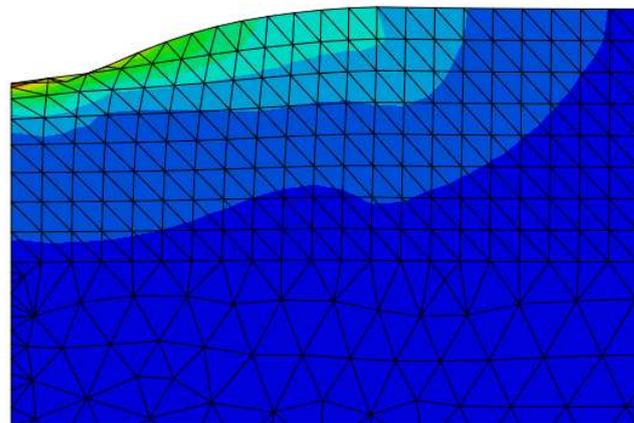
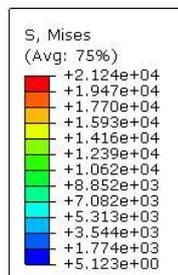
Para as tensões e deformações residuais, apresentadas na Figura 54 e na Figura 55 no corpo de prova, nota-se que não houve uma grande variação no campo de tensões ou deformações criado, também semelhantes à Figura 43 (b) e Figura 44 (b) relativas ao filme de DLC com espessura de 1,5 μm . A tensão máxima entre os dois ensaios não apresenta grande variação, sendo de 17,8 GPa para o filme com espessura de 1,0 μm e de 21,2 GPa para a espessura de 2,0 μm . Dessa forma, para ambos os casos espera-se a geração de trincas na área de contato entre a face lateral do indentador e o corpo de prova, e menor possibilidade de geração de trincas nas áreas adjacentes à realização do ensaio, conforme

estudo realizado por ARAÚJO; DIAS (2014) e CHAVES FILHO; DIAS (2019). Para a espessura de $1,0\ \mu\text{m}$ há maior possibilidade de geração de falhas adesivas, já que no momento de maior deslocamento do indentador essa área sofre de tensões compressivas de maior valor.

Figura 54 – Tensões de Von Mises residuais no retorno do indentador (MPa) para espessura de filme de $1,0\ \mu\text{m}$ (a) e $2,0\ \mu\text{m}$ (b)



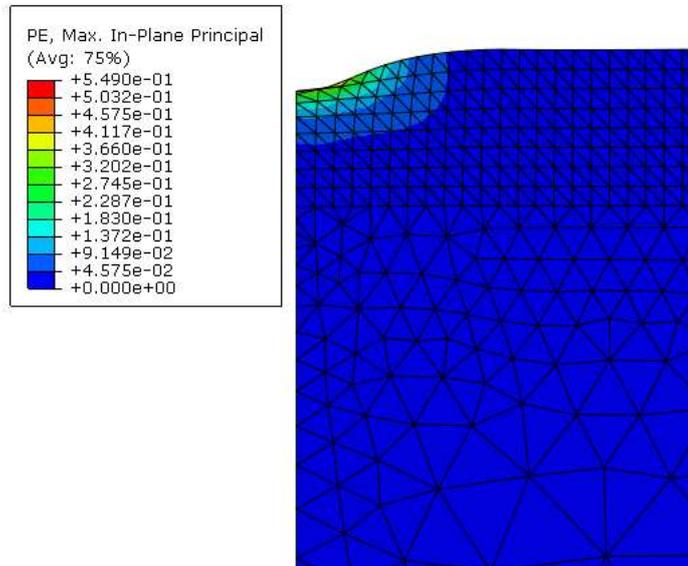
(a)



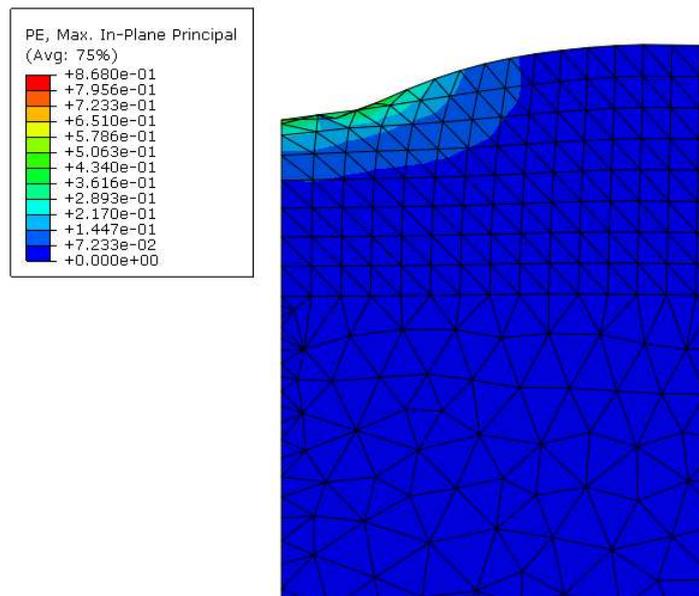
(b)

Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 55 – Deformações plásticas residuais no retorno do indentador para espessura de filme de 1,0 μm (a) e 2,0 μm (b)



(a)



(b)

Fonte: Elaborado pelo autor

Tendo em vista os resultados obtidos nessa seção, nota-se melhor comportamento mecânico para o filme de 2,0 μm . Isso devido a maior dureza obtida para essa espessura de filme no ensaio de nanoindentação comparado as outras espessuras. Além disso, as tensões e deformações que o filme com espessura de 2,0 μm se sujeita no ensaio de nanoindentação não são distantes a do filme de 1,5 μm , dessa forma não esperando falhas diferentes para esses dois filmes em serviço. Vale ressaltar que nesse modelo não foram verificadas as características de adesão entre o filme, camada intermediária e substrato.

5 CONCLUSÕES

O estudo teve como objetivo a simulação do ensaio de nanoindentação de um substrato de aço rápido com um filme fino de DLC depositado, modelando por meio do software Abaqus 2016 as características mecânicas dos materiais do substrato, camada intermediária e filme fino de DLC. O modelo gerado foi validado utilizando de dados experimentais do ensaio de nanoindentação e analisando as condições de contorno e simplificações inerentes à criação do modelo de elementos finitos para o ensaio. Com o modelo validado foi variada a espessura do filme de DLC para 1,0 e 2,0 μm de forma a verificar o impacto nas características mecânicas do corpo de prova e tensões e deformações geradas pelo ensaio de nanoindentação.

As seguintes conclusões podem ser observadas para o estudo realizado:

1. A simplificação do modelo em elementos finitos de indentações parciais para somente uma indentação, utilizada nesse estudo como ponto de partida para elaboração do modelo em elementos finitos, não apresenta resultados satisfatórios quando se compara ao ensaio real de nanoindentação por meio de indentações parciais;
2. O modelo em elementos finitos em indentações parciais criado apresentou uma aproximação de 95,5% para o valor de força final de indentação quando comparado ao experimento realizado. Além disso, a curva de força de indentação x deslocamento do indentador mostrou perfil similar entre o experimento e o modelo elaborado;
3. A variação do raio de ponta do indentador não apresentou impacto forte nos resultados do ensaio, com exceção do perfil inicial da curva de força de indentação x deslocamento;
4. A variação da característica de atrito de Coulomb não apresentou impacto expressivo no perfil inicial da curva de força de indentação x deslocamento. Foi encontrada uma variação de 4,3% na força final de indentação ao alterar o atrito de 0,1 para 0 e de 3,5% ao alterar o atrito de 0,1 para 0,3.
5. A utilização do regime plástico simplificado ou detalhado não apresentou grande impacto no perfil inicial da curva de força de indentação x deslocamento e força final de indentação;
6. O modelo tridimensional apresenta como maior discrepância comparado ao modelo bidimensional a melhor representação do indentador Berkovich.

Observou-se durante o estudo a necessidade de recurso computacional e tempo de processamento elevados comparado ao modelo bidimensional;

7. Foi verificado que a espessura de 2,0 μm apresentou melhores resultados comparado as espessuras de 1,0 e 1,5 μm quando avaliada a dureza do corpo de prova e tensões e deformações no ensaio de nanoindentação.
8. Foi possível verificar a viabilidade da utilização de um modelo matemático pelo método dos elementos finitos para simulação do ensaio de nanoindentação de forma a complementar a realização de ensaios experimentais, tendo como limitante o propósito para realização dos ensaios. Isso vale para casos onde são conhecidas as características mecânicas do corpo de prova. Uma vez que não foram incluídas no modelo as características de adesão do filme à camada intermediária, a utilização desse modelo não é indicada para situações em que o deslocamento do indentador esteja distante de 10% da espessura do filme fino.

6 TRABALHOS FUTUROS

Tendo como base o estudo desenvolvido e conclusões encontradas, se vê a possibilidade da realização dos seguintes trabalhos:

1. Realização de simulações com características de atrito detalhadas utilizando de outros modelos a não ser Coulomb.
2. Simulação da interface entre substrato e diversos filmes finos (DLC, DLC Star, TiAlN), incluindo falhas de adesão.
3. Realizar ensaios experimentais tendo como base espessuras simuladas nesse trabalho com o intuito de comparar os resultados obtidos pela simulação com o experimento.
4. Simulação com diversos substratos utilizados em ferramentas de corte.

REFERÊNCIAS

ALABOODI, Abdulaziz S.; HUSSAIN, Zahid. Finite element modeling of nano-indentation technique to characterize thin film coatings. *Journal of King Saud University - Engineering Sciences*, v. 31, n. 1, p. 61–69, 2019. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.jksues.2017.02.001>>.

ANTUNES, JMA. *A indentação de materiais maciços e filmes finos: modelação e análise inversa*. 2006. 197 f. UNIVERSIDADE DE COIMBRA, 2006.

ARAÚJO, R. *Análise numérica do comportamento mecânico de um filme [(Cr_{1-x}, Al_x)N] durante o ensaio de dureza com penetradores esféricos*. 2011. UFSJ, São João del-Rei., 2011.

ARAÚJO, Rodrigo; DIAS, Avelino Manuel da Silva. Numerical Evaluation of Strength in the Interface during Indentation Spherical Testing in Thin Films. *Materials Sciences and Applications*, v. 05, n. 03, p. 149–157, 2014.

AVELINO MANUEL DA SILVA DIAS. *Análise Numérica do Processo de Fratura no Ensaio de Indentação Vickers em uma Liga de Carboneto de Tungstênio com Cobalto*. 2004. 104–110 f. UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS, 2004.

AZEVEDO, F M. *Método dos elementos finitos*. 1. ed. Porto, Portugal: Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto Portugal, 2003.

BA, Elhadji Cheikh Talibouya *et al.* Deconvolution process approach in Raman spectra of DLC coating to determine the sp³ hybridization content using the ID/IG ratio in relation to the quantification determined by X-ray photoelectron spectroscopy. *Diamond and Related Materials*, v. 122, n. September 2021, 2022.

BRASILEIRA, Norma. *ABNT NBR NM 116-1*. . [S.l: s.n.], 2005

BUDINAS, R. G.; NISBETT, J. K. *Elementos de Máquinas de Shigley: Projeto de Engenharia Mecânica*. Mc Graw Hill. [S.l: s.n.], 2011

CECH, Vladimir *et al.* Elastic Modulus and Hardness of Plasma-Polymerized Organosilicones Evaluated by Nanoindentation Techniques. *Plasma Processes and Polymers*, v. 12, n. 9, p. 864–881, 2015.

CHANDRUPATLA, Tirupathi; BELEGUNDU, Ashok. *Introduction to Finite Elements in Engineering*. 5. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2021. Disponível em:

<<https://www.cambridge.org/core/books/introduction-to-finite-elements-in-engineering/2406D52ABAED86EDDC869DB41C071E30>>.

CHARVÁTOVÁ CAMPBELL, Anna *et al.* Modeling the influence of roughness on nanoindentation data using finite element analysis. *International Journal of Mechanical Sciences*, v. 161–162, n. June, 2019.

CHATTERJEE, Abhishek *et al.* Nanoscratch study of hard HfB₂ thin films using experimental and finite element techniques. *Wear*, v. 268, n. 5–6, p. 677–685, 2010.

CHAUS, A. S. *et al.* Role of microstructural factor in wear resistance and cutting performance of high-speed steel end mills. *Wear*, v. 474–475, n. December 2020, 2021.

CHAVES FILHO, Ozias Ferreira; DIAS, Avelino Manuel da Silva. Avaliação dos processos de fratura em filmes finos através da simulação de ensaios de indentação com penetradores esféricos. *Matéria (Rio de Janeiro)*, v. 24, n. 4, 2019.

CHEN, Cihai *et al.* Structure and cutting performance of Ti-DLC films prepared by reactive magnetron sputtering. *Diamond and Related Materials*, v. 104, n. January, p. 107735, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.diamond.2020.107735>>.

CHEN, H. *et al.* Micro-scale abrasive wear behaviour of HVOF sprayed and laser-remelted conventional and nanostructured WC-Co coatings. *Wear*, v. 258, n. 1- 4 SPEC. ISS., p. 333–338, 2005.

CHEN, Hsi Chao; HUANG, Chen Yu; CHENG, Po Wei. Stress mechanisms of SiO₂ and Nb₂O₅ thin films sputtered on flexible substrates investigated by finite element method. *Surface and Coatings Technology*, v. 344, n. September 2017, p. 449–457, 2018. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.03.051>>.

CHEN, Ling *et al.* Numerical and Experimental Study of the Roughness Effects on Mechanical Properties of AISI316L by Nanoindentation. *Modeling and Numerical Simulation of Material Science*, v. 04, n. 04, p. 153–162, 2014.

COSTA, J. D. D.; GOMES, J. O. ANÁLISE DE RUGISIDADE EM SUPERFÍCIES USINADAS DE FORMA COMPLEXA. 2010, São José dos Campos: [s.n.], 2010.

DAR, Fazilat H; MEAKIN, Judith R; ASPDEN, Richard M. Statistical methods in finite element analysis. *Journal of Biomechanics*, v. 35, n. 9, p. 1155–1161, 2002. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021929002000854>>.

DAS, Ruchita S.; AGRAWAL, Y. K. Raman spectroscopy: Recent advancements, techniques and applications. *Vibrational Spectroscopy*, v. 57, n. 2, p. 163–176, 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.vibspec.2011.08.003>>.

DENG, Jixi *et al.* Extended finite element analysis of plastic and fracture behaviors of SiC-based multi-layer thin films system. *International Journal of Mechanical Sciences*, v. 161–162, n. March, p. 2–6, 2019.

DIAS, A. M. S.; SOTANI, P.F.B.; GODOY, G.C. Simulação do ensaio de indentação em filmes finos com o uso de modelos de trinca difusa Simulation of indentation testing in thin films using numerical cracking models. *Revista Matéria*, v. 15, n. 3, p. 422–430, 2010.

DRUMOND, Ramon Martins *et al.* Avaliação Do Desgaste Por Microabrasão Do Aço Aisi M-35 Revestido Por Dlc – Diamond-Like Carbon. *Revista Eletrônica Perspectivas da Ciência e Tecnologia - ISSN: 1984-5693*, v. 12, p. 199–212, 2020.

FERRARI, Andrea C. Non-destructive characterisation of carbon films. *Tribology of Diamond-Like Carbon Films: Fundamentals and Applications*, p. 25–82, 2008.

FISCHER-CRIPPS, A. C. Critical review of analysis and interpretation of nanoindentation test data. *Surface and Coatings Technology*, v. 200, n. 14–15, p. 4153–4165, 2006.

FUJISAWA, Naoki *et al.* Substrate-independent stress-strain behavior of diamond-like carbon thin films by nanoindentation with a spherical tip. *Journal of Materials Research*, v. 33, n. 6, p. 699–708, 2018.

GADELRAH, Karim R.; CHIESA, Matteo. Influence of nanoindenter tip radius on the estimation of the elastic modulus. *Materials Research Society Symposium Proceedings*, v. 1297, n. May 2014, p. 53–58, 2011.

GEE, M. G. *et al.* Progress towards standardisation of ball cratering. *Wear*, v. 255, n. 1–6, p. 1–13, 2003.

GSELLMANN, Matthias *et al.* Near-interface cracking in a TiN coated high speed steel due to combined shear and compression under cyclic impact loading. *Surface and Coatings Technology*, v. 394, n. March, p. 125854, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2020.125854>>.

HUANG, Xiaoqin; PELEGRI, Assimina A. Finite element analysis on nanoindentation with friction contact at the film/substrate interface. *Composites Science and Technology*, v. 67,

n. 7–8, p. 1311–1319, 1 jun. 2007.

HUNT, R A; MCCARTNEY, L N. *USE OF MODELS TO PREDICT DEFORMATION DURING THE ELASTIC-PLASTIC NANO-INDENTATION OF COATINGS*. . [S.l: s.n.], 2003.

ILYUSCHENKO, Alexandre Ph *et al.* On the properties of PVD coating based on nanodiamond and molybdenum disulfide nanolayers and its efficiency when drilling of aluminum alloy. *Surface and Coatings Technology*, v. 270, p. 190–196, 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.surfcoat.2015.03.004>>.

JAVADI, A. A.; TAN, T. P.; ZHANG, M. Neural network for constitutive modelling in finite element analysis. *Computer Assisted Mechanics and Engineering Sciences*, v. 10, n. 4, p. 523–529, 2003.

JIANG, Wu-Gui; SU, Jian-Jun; FENG, Xi-Qiao. Effect of surface roughness on nanoindentation test of thin films. *Engineering Fracture Mechanics*, v. 75, n. 17, p. 4965–4972, 2008. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0013794408001847>>.

KAN, Qianhua *et al.* Oliver–Pharr indentation method in determining elastic moduli of shape memory alloys—A phase transformable material. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 61, n. 10, p. 2015–2033, 1 out. 2013. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022509613001038>>. Acesso em: 6 ago. 2021.

KRBATA, Michal *et al.* Wear behaviour of high strength tool steel 90mncrv8 in contact with Si₃N₄. *Metals*, v. 10, n. 6, p. 1–17, 2020.

KUMAR, Amit; ZENG, Kaiyang. Alternative methods to extract the hardness and elastic modulus of thin films from nanoindentation load-displacement data. *International Journal of Applied Mechanics*, v. 2, n. 1, p. 41–68, 2010.

KUMAR, S Suresh *et al.* Investigation of WEDM process parameters of Al–SiC–B₄C composites using response surface methodology. *International Journal of Lightweight Materials and Manufacture*, v. 3, n. 2, p. 127–135, 2020. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2588840419301052>>.

LEE, Youngmin *et al.* Atomistic simulations of incipient plasticity under Al(1 1 1) nanoindentation. *Mechanics of Materials*, v. 37, n. 10, p. 1035–1048, 2005.

LENZ, Bastian; HASSELBRUCH, Henning; MEHNER, Andreas. Automated evaluation of Rockwell adhesion tests for PVD coatings using convolutional neural networks. *Surface and Coatings Technology*, v. 385, n. January, p. 125365, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2020.125365>>.

LEROY, C. *et al.* Ball cratering an efficient tool for 3 body microabrasion of coated systems. *Surface and Coatings Technology*, v. 200, n. 1- 4 SPEC. ISS., p. 153–156, 2005.

LI, An *et al.* Effect of the Variation of Film Thickness on the Properties of Multilayered Si-Doped Diamond-Like Carbon Films Deposited on SUS 304, Al and Cu Substrates. *Journal of Materials Engineering and Performance*, v. 29, n. 12, p. 8473–8483, 2020.

LIBÓRIO, MAXWELL; LEMOS, DIEGO; DIAS, Manuel; Avaliação Numérica da Espessura de Filmes de Nitreto de Titânio Obtidos por Processamento a Plasma . 2014, Juiz De Fora, MG: SIMMEC/EMMCOMP 2014, 2014. p. 1039–1048.

LIU, Kouqi; OSTADHASSAN, Mehdi; XU, Xiaomeng. A comparison study of the unloading behavior in shale samples in nanoindentation experiments using different models. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, v. 186, p. 106715, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.petrol.2019.106715>>.

LU, Yunxiang *et al.* (100) Oriented Diamond Film Prepared on Amorphous Carbon Buffer Layer Containing Nano-Crystalline Diamond Grains. *Surface and Coatings Technology*, v. 385, n. July 2019, 2020.

LUNG, B. H.; CHIANG, M. J.; HON, M. H. Growth characterization and properties of diamond-like carbon films by electron cyclotron resonance chemical vapor deposition. *Thin Solid Films*, v. 392, n. 1, p. 16–21, 2001.

MARTINS, Paulo Sérgio. *ESTUDO DA FURAÇÃO EM ALTAS VELOCIDADES DE CORTE EM LIGAS DE Al-Si UTILIZANDO BROCAS DE AÇO RÁPIDO E METAL DURO SEM E COM REVESTIMENTO DE DLC (DIAMOND LIKE CARBON)*. 2016. 209 f. PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DE MINAS GERAIS, 2016.

MARTINS, Paulo Sérgio; ALMEIDA MAGALHÃES JÚNIOR, Pedro Américo; *et al.* Study of Diamond-Like Carbon coating application on carbide substrate for cutting tools used in the drilling process of an Al–Si alloy at high cutting speeds. *Wear*, v. 498–499, n. March, 2022.

MARTINS, Paulo Sérgio *et al.* Study on roughness and form errors linked with tool wear in the drilling process of an Al-Si alloy under high cutting speed using coated diamond-like

carbon high-speed steel drill bits. *Journal of Manufacturing Processes*, v. 62, n. July 2020, p. 711–719, 2021.

MARTINS, Paulo Sérgio; CARNEIRO, José Rubens Gonçalves; *et al.* Study on the Tribological Behavior of Wear and Friction Coefficient on AISI M35 High-Speed Steel with and without DLC Coating. *Materials Research*, v. 25, 2022.

NIX, William D; GAO, Huajian. Indentation size effects in crystalline materials: A law for strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, v. 46, n. 3, p. 411–425, 1998. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022509697000860>>.

OLIVER, W C; PHARR, G M. An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments. *Journal of Materials Research*, v. 7, n. 6, p. 1564–1583, 1992. Disponível em: <<https://doi.org/10.1557/JMR.1992.1564>>.

ONODERA, Shu *et al.* Antibacterial property of F doped DLC film with plasma treatment. *Diamond and Related Materials*, v. 107, p. 107835, 1 ago. 2020.

PANDURE, Pravin S.; JATTI, VijayKumar S.; SINGH, T.P. Finite Element Simulation of Nano-indentation of DLC Coated HSS Substrate. *Procedia Materials Science*, v. 6, n. Icmpc, p. 1619–1624, 2014. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.mspro.2014.07.145>>.

PANG, Xiaolu; GAO, Kewei; VOLINSKY, Alex A. Microstructure and mechanical properties of chromium oxide coatings. *Journal of Materials Research*, v. 22, n. 12, p. 3531–3537, 2007.

PODGORNIK, B. *et al.* Tribological behaviour of WC/C coatings operating under different lubrication regimes. *Surface and Coatings Technology*, v. 177–178, p. 558–565, 2004.

POPOV, Ilya V. *et al.* Relative stability of diamond and graphite as seen through bonds and hybridizations. *Physical Chemistry Chemical Physics*, v. 21, n. 21, p. 10961–10969, 2019.

QIN, J *et al.* The equivalence of axisymmetric indentation model for three-dimensional indentation hardness. *Journal of Materials Research*, v. 24, n. 3, p. 776–783, 2009. Disponível em: <<https://doi.org/10.1557/jmr.2009.0095>>.

QU, S *et al.* Indenter tip radius effect on the Nix–Gao relation in micro- and nanoindentation hardness experiments. *Journal of Materials Research*, v. 19, n. 11, p. 3423–

3434, 2004. Disponível em: <<https://doi.org/10.1557/JMR.2004.0441>>.

SALAH, Numan *et al.* Tribological behavior of diamond-like carbon thin films deposited by the pulse laser technique at different substrate temperatures. *Tribology International*, v. 103, p. 274–280, 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.triboint.2016.07.013>>.

SCHINO, A. D.I.; CORRADI, M. Quenching and tempering (Q&T) effect on a steel for forging with Cr and mo addition. *Anali Zavoda za Povijesne Znanosti Hrvatske Akademije Znanosti i Umjetnosti u Dubrovniku*, v. 57, n. 4, p. 307–309, 2018.

SHAHSAVARI, Fatemeh *et al.* A comparative study of surface morphology, mechanical and tribological properties of DLC films deposited on Cr and Ni nanolayers. *Ceramics International*, v. 46, n. 4, p. 5077–5085, 2020. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.10.251>>.

SHARIFAHMADIAN, Omid; MAHBOUBI, Farzad; YAZDANI, Sepehr. Comparison between corrosion behaviour of DLC and N-DLC coatings deposited by DC-pulsed PACVD technique. *Diamond and Related Materials*, v. 95, n. March, p. 60–70, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.diamond.2019.04.007>>.

SHI, Z. *et al.* The equivalent axisymmetric model for Berkovich indenters in power-law hardening materials. *International Journal of Plasticity*, v. 26, n. 1, p. 141–148, 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ijplas.2009.06.008>>.

SILVA, Fernando De Azevedo; CHAVES, Carlos Alberto; SANTOS, Jefferson Rodrigo Marcelino. EXPLICAÇÃO DO PRINCÍPIO DE SAINT-VENANT UTILIZANDO O. *Uniabeu*, v. 10, n. 24, p. 158–170, 2017.

SUGITA, Naohiko *et al.* Dedicated drill design for reduction in burr and delamination during the drilling of composite materials. *CIRP Annals*, v. 68, n. 1, p. 89–92, 2019. Disponível em: <<https://doi.org/10.1016/j.cirp.2019.04.094>>.

TALIBOUYA BA, Elhadji Cheikh *et al.* Investigation of the effects of skewness Rsk and kurtosis Rku on tribological behavior in a pin-on-disc test of surfaces machined by conventional milling and turning processes. *Materials Research*, v. 24, n. 2, p. 1–14, 2021.

TAVARES, Joao; PADILHA, A. Introdução ao método dos elementos finitos. 1 jan. 1998.

TSHABALALA, Lerato *et al.* Axial fatigue behaviour of additively manufactured tool steels. *Materials Today: Proceedings*, v. 38, n. xxxx, p. 789–792, 2021. Disponível em:

<<https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.04.548>>.

VICENTE, Geraldo Candido Maia. *CARATERIZAÇÃO DE FILMES DLC COM POTENCIAL DE UTILIZAÇÃO EM MOTORES DE COMBUSTÃO INTERNA*. 2005. 96 f. Universidade Federal do Paraná, 2005.

VIEIRA, Vitor Ferreira *et al.* Nanoindentation test of a DLC coated high-speed steel substrate using a two-dimensional axisymmetric finite element method. *Diamond and Related Materials*, v. 134, n. February, 2023.

WIATROWSKI, A. *et al.* Deposition of diamond-like carbon thin films by the high power impulse magnetron sputtering method. *Diamond and Related Materials*, v. 72, p. 71–76, 2017. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.diamond.2017.01.007>>.

XIAO, Yangyi *et al.* Evaluation of failure properties of a DLC/steel system using combined nanoindentation and finite element approach. *Diamond and Related Materials*, v. 93, n. February, p. 159–167, 2019.

XIAO, Yangyi *et al.* Residual stress and its effect on failure in a DLC coating on a steel substrate with rough surfaces. *Diamond and Related Materials*, v. 66, p. 23–35, 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.diamond.2016.03.009>>.

ZDUNEK, Krzysztof *et al.* Characterization of sp³ bond content of carbon films deposited by high power gas injection magnetron sputtering method by UV and VIS Raman spectroscopy. *Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, v. 194, p. 136–140, 2018.