



## Numeryczne wyznaczanie rozkładów naprężeń resztkowych w warstwach powierzchniowych TiC i TiN na podłożu stalowym

WIESŁAW SZYMCZYK, JOANNA WŁODARCZYK

Wojskowa Akademia Techniczna, Wydział Mechaniczny, Zakład Mechaniki Ogólnej,  
00-908 Warszawa, ul. S. Kaliskiego 2

**Streszczenie.** Przeprowadzono symulacje numeryczne warstwy powierzchniowej TiC na zaworze wydechowym silnika wewnętrznego spalania. Otrzymano rozkłady naprężeń resztkowych w obszarach współpracy warstw i podłoża. Symulacje przeprowadzono dla zaworu o brzegach fazowanych i zaokrąglonych, z warstwą TiC obejmującą jedynie powierzchnię czołową, powierzchnię czołową i fazowanie/zaokrąglenie oraz powierzchnię czołową, fazowanie/zaokrąglenie i powierzchnię boczną grzybka zaworu. Najkorzystniejsze rozkłady naprężeń resztkowych otrzymano dla zaworu z brzegiem zaokrąglonym i dla warstwy obejmującej jego powierzchnię czołową i boczną. Następnie dla zaworu z zaokrąglonym brzegiem przeprowadzono symulacje numeryczne w celu wyznaczenia rozkładów naprężeń resztkowych w wybranej warstwie powierzchniowej TiN, naniesionej na osiowosymetryczną próbkę wykonaną ze stali zaworowej. Obliczenia wykonano dla 2 modeli: bez uwzględnienia i z uwzględnieniem warstwy pośredniej. Układ z warstwą pośrednią można traktować jako materiał gradientowy. Porównanie wyników dla tych modeli pozwala ocenić jakościowo wpływ warstwy pośredniej na rozkład naprężeń resztkowych w obszarze złącza.

**Słowa kluczowe:** warstwa powierzchniowa, symulacje numeryczne, naprężenia resztkowe, materiał gradientowy

**Symbole UKD:** 539.382

### 1. Wprowadzenie

Stosowanie warstw powierzchniowych jest utrudnione ze względu na naprężenia resztkowe. Naprężenia własne są pierwotną przyczyną zniszczenia warstwy powierzchniowej i ograniczenia trwałości elementu, na którym je naniesiono. Powstają po schłodzeniu od podwyższonej temperatury, w jakiej przeważnie jest

przewodzony technologiczny proces nanoszenia warstw, do temperatury otoczenia. Przyczyną są różnice we własnościach termomechanicznych między materiałami stosowanymi na warstwy a materiałem podłoża.

Naprężenia własne osiągają wartości warunkujące powstawanie mikropęknięć w warstwie wierzchniej, dekohezji na granicy tej warstwy. Mechanizmy te, do pewnej granicy intensywności ich występowania, mogą przyczyniać się początkowo do relaksacji naprężeń. W późniejszej fazie narastania obciążeń mogą doprowadzić do zniszczenia warstwy (np. przez łączenie się mikropęknięć i pustek w nieciągłości materiału o większych rozmiarach).

### 1.1. Materiały gradientowe i funkcjonalnie gradientowe

Poziom naprężeń własnych może być ograniczony przez spowodowanie ich redystrybucji dzięki celowemu wytworzeniu strefy pośredniej między podłożem metalicznym a zewnętrzną warstwą. W tej strefie może istnieć jedna lub kilka warstw o stopniowo zmieniających się udziałach fazy podłoża i pokrycia. Wówczas materiał w obszarze takiej strefy jest określany jako materiał gradientowy. Natomiast w materiale funkcjonalnie gradientowym zmiana udziałów następuje w sposób ciągły i daje się opisywać przy pomocy gładkiej funkcji (w statystycznie uśrednionym ujęciu).

Funkcjonalnie gradientowe materiały stanowią nową klasę różnorodnych materiałów, które pozwalają na przestrzenną optymalizację własności w jednym lub więcej kierunkach, w ciele o zdefiniowanej geometrii. Definicja ta jest w opozycji do klasycznej definicji kompozytów mikrostrukturalnych, od których oczekuje się, że własności i rozkłady poszczególnych faz materiałowych powinny być jednorodne.

Koncepcję stopniowo zmiennych warstw w pierwszej kolejności zastosowano do warstw powierzchniowych stanowiących barierę cieplną na elementach silników spalinowych i turbinowych.

W ciągu ostatnich kilku lat pole zastosowań materiałów funkcjonalnie gradientowych zostało znacznie rozszerzone, nie tylko na materiały o zastosowaniu w konstrukcji elementów maszyn, ale też w układach elektronicznych, optycznych, nuklearnych, medycznych, chemicznych, biologicznych itp.

Mechanizmy działające w warstwach funkcjonalnie gradientowych są nadal mniej rozpoznane i rozumiane niż dla warstw, w których można zaobserwować wyraźne granice między warstwami o stopniowo zmieniającej się zawartości faz.

W ciągu ostatniej dekady w świecie zrealizowano wiele prac eksperymentalnych i teoretycznych, dzięki którym określono podstawowe zależności między wielkością i rozkładem naprężeń własnych, mechanizmami zniszczenia, własnościami termomechanicznymi faz materiałowych, mikrostrukturą i geometrią próbki (powierzchni podłoża) w makroskali.

Obserwuje się systematyczny wzrost zainteresowania zastosowaniem metod numerycznych do badania wpływu mechanizmów odpowiedzialnych za rozkład naprężeń resztkowych w układach podłoże/warstwa powierzchniowa traktowanych jako materiały gradientowe lub funkcjonalnie gradientowe.

## 2. Własności materiałów na warstwy powierzchniowe rozważane w pracy

Z przeprowadzonych badań literaturowych wynika, że rozrzut danych dotyczących materiałów (zwłaszcza TiC, TiN, TiCN) jest bardzo duży. Przyczyną tego są różne sposoby przygotowania próbek w różnych ośrodkach badawczych, różne metody pomiarów, przyjmowanie różnych podstaw teoretycznych do przeliczeń, różny skład stechiometryczny materiałów badanych warstw. Metody pomiarowe są często złożone i subtelne, zwłaszcza w przypadku materiałów typowo stosowanych na cienkie pokrycia. Skutkuje to tym, że publikowane wyniki pochodzą z pomiarów przeprowadzonych przez autorów specyficznymi metodami, w przyjętych przez nich specyficznych warunkach. Charakterystyki chemiczne i mikrostrukturalne badanych materiałów są często niekompletne. Charakterystyki materiałowe podawane są w funkcji porowatości próbek. Stąd wynikają trudności w porównywaniu danych i ich uogólnianiu.

Szczegółowe dane dotyczące azotków, węglików i węglikoazotków można znaleźć w przeglądowej pracy Krala et al. [1]. Omawia ona wyczerpująco zagadnienia pomiarów i obliczeń własności wytrzymałościowych tych materiałów (otrzymywanych różnymi metodami) z uwzględnieniem korekcji porowatości, dla zróżnicowanych składów stechiometrycznych. Kral, analizując dane wielu innych autorów, podaje na podstawie tego przeglądu, że wartość modułu Younga wytworzonego pokrycia silnie zależy od porowatości. Przykładowo, dla TiN zmienia się od 550 GPa dla stanu nieporowatego do ok. 250 GPa dla porowatości 20%.

Bull et al. [2] podaje, że moduł Younga dla TiN wynosi 600 GPa, a dla TiC — 540 GPa (w stanie nieporowatym, litym).

Dahan et al. [3] podaje, że moduł Younga dla TiC, dla koncentracji C/Ti: 0,75, 0,85, 0,95 i 1,0, wynosi odpowiednio: 410, 440, 470 i 490 GPa, a gęstość: 4,74, 4,84, 4,92 i 4,93 g/cm<sup>3</sup>.

Grzesik [4] za Jawahirem i van Luttermveltem [5] (tab. 1) podaje dane na temat zmienności przewodności cieplnej omawianych materiałów funkcji temperatury dla omawianych materiałów.

W tabeli 1 podano wartości parametrów termomechanicznych TiC, TiN i TiCN przyjętych w pracy na podstawie analizy danych literaturowych.

TABELA 1

Własności materiałowe warstw TiC, TiN i TiCN

		TiC	TiN	TiCN
<i>E</i>	MPa	450 000,00	600 000,00	540 000,00
<i>v</i>		0,19	0,25	0,25
<i>α</i>	$e^{-6} K^{-1}$	7,20	9,35	8,20

## 2.1. Metody symulacji numerycznych

Na drodze obliczeniowej można analizować rozwój zniszczenia materiałów gradientowych i optymalizować przebieg funkcyjnej zmienności ich własności, a w konsekwencji optymalizować parametry procesu technologicznego wytwarzania ceramicznych warstw powierzchniowych. Przegląd metod analizy naprężeń resztkowych w materiałach gradientowych można znaleźć w opracowaniach [6-20].

Na najbardziej elementarnym poziomie do analizy stanu naprężeń w materiałach gradientowych stosuje się m.in. prawo mieszanin. Dla układów sprężystych stosowali takie podejście: Fukui i in. (1994) [6], Lee i Erdogan (1994/1995) [7], Erdogan (1995) [8]. Dla układów sprężysto-plastycznych: stosowali je Suresh i in. (1995) [9], Finot i Suresh (1996) [10]. Hirano i in. (1990) [11] bazowali na metodzie Mori-Tanaka (1973) [12] z uwzględnieniem przemian fazowych w matrycy metalicznej i wtrąceniach.

Zjawiska termosprężyste analizowali: Tanaka i in. (1993) [13, 14]; Hirano i Wakashima (1995) [15]. Dodatkowe odnośniki można znaleźć w przeglądowych pracach Markwortha i in. (1995) [16, 17] oraz u Williamsona i in. (1993) [18].

Reguła mieszanin, przy założeniu że w wyodrębnionej warstwie rozkłady poszczególnych faz mogą być traktowane praktycznie jako jednorodne, pozwala określić efektywne własności dla dyskretnych warstw materiału gradientowego i przejść do analizy bez konieczności uwzględniania rzeczywistej morfologii badanej mikrostruktury, przy zastosowaniu siatki elementów o regularnych kształtach.

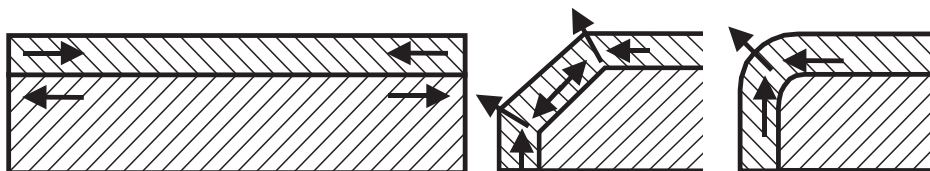
Analiza materiałów gradientowych metodą elementów skończonych może odbywać się także przy zastosowaniu rzeczywistych lub sztucznie wygenerowanych domen dla poszczególnych faz materiałowych. Można wówczas badać efekty różnorodnych rozkładów przestrzennych faz na termomechaniczne własności mikrostruktur niejednorodnych (Reiter i in., 1997) [19].

Stosuje się również metody, które nie wymagają formułowania założeń odnośnie fizycznych i mechanicznych własności wyodrębnionych warstw. Spotyka się tutaj różne podejścia hybrydowe, m.in. z wykorzystaniem wyspecjalizowanych

elementów skończonych tzw. elementów Voronoia (Biner, 2001) [20], których geometria opisuje poszczególne domeny i jest uzyskiwana na drodze tesselacji Dirichleta.

### 3. Ukształtowanie podłoża a rozkład naprężeń resztkowych

W miejscach, gdzie występują zmiany geometrii powierzchni podłoża wynikające z cech konstrukcyjnych elementu lub technologii wykonania, zmienia się rozkład naprężeń resztkowych w obszarze warstwy i podłoża. Takimi cechami geometrii powierzchni mogą być pory, rysy, zmiany krzywizny, fazowania, zaokrąglenia itp. (rys. 1). Na stan naprężeń w złączu podłoże/warstwa w obszarach takich cech ma wpływ ich topografia, grubość warstwy i różnice we własnościach termomechanicznych warstwy oraz podłoża.



Rys. 1. Rozważane w pracy cechy geometryczne podłoża

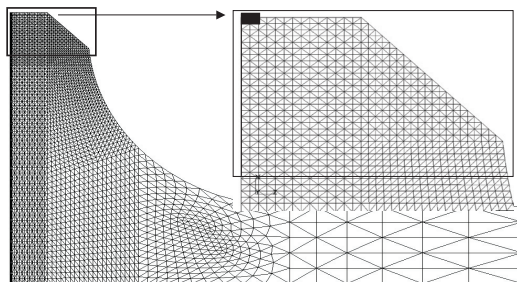
Zagadnienie to można zilustrować na przykładzie wyników modelowania tytanowego zaworu silnika wewnętrznego spalania z naniesioną warstwą TiC oraz modelowania warstwy TiN na próbce osiowosymetrycznej wykonanej ze stali zaworowej.

### 4. Jednorodna warstwa TiC na brzegu tytanowego osiowosymetrycznego elementu konstrukcyjnego

W przypadku badania warstw cienkich, jak TiC, TiN, TiCN, występują problemy z rozmiarami modelu numerycznego.

Wynika to stąd, że warstwy tego rodzaju mają znikomo małe grubości (typowo 0,003 mm) w porównaniu z rozmiarami badanego elementu konstrukcyjnego. Osiowosymetryczny model dla warstwy TiC stanowi niewielki wycinek (o boku zaledwie kilku dziesiątych milimetra) modelu całego zaworu (rys. 2).

Stąd wynikła konieczność zastosowania symulacji metodą globalno-lokalną: globalny model elementu konstrukcyjnego służy do wyliczenia pola deformacji, które stanowi w następnym kroku podstawę do zdefiniowania warunków brzegowych na mniejszym, wycinkowym modelu lokalnego obszaru warstwy i podłoża.



Rys. 2. Porównanie skali osiowosymetrycznego modelu 2D zaworu z wycinkowym modelem z warstwą TiC (obszar modelu wycinkowego zaznaczony na czarno, na tle siatki modelu zaworu w obszarze brzegu grzybka)

W przypadku TiC zamodelowano warstwy powierzchniowe o grubości 0,003 mm i o jednorodnych własnościach termomechanicznych.

#### 4.1. Wyniki obliczeń

Na podstawie wyników wcześniejszych symulacji dla pokryć TiC, TiCN i TiN stwierdzono, że najniższe wartości maksymalne naprężeń resztkowych i najniższe ich gradienty, w obszarze styku warstwy powierzchniowej z podłożem, osiągane są na brzegu zaworu tytanowego dla TiN (tab. 2). Dla warstw — kolejno — TiCN i TiC obserwuje się coraz większe wartości maksymalne i gradienty.

TABELA 2

Wartości naprężeń resztkowych w modelach warstw TiC, TiCN i TiN na brzegu zaworu tytanowego

Naprężenia GPa	TiC		TiCN		TiN	
	max.	min.	max.	min.	max.	min.
Promieniowe	0,24	-2,54	0,16	-1,82	0,023	-0,229
Obwodowe	0,42	-1,29	0,39	-0,35	0,009	-0,420
Osiowe	0,03	-0,21	0,02	-0,14	0,007	-0,034

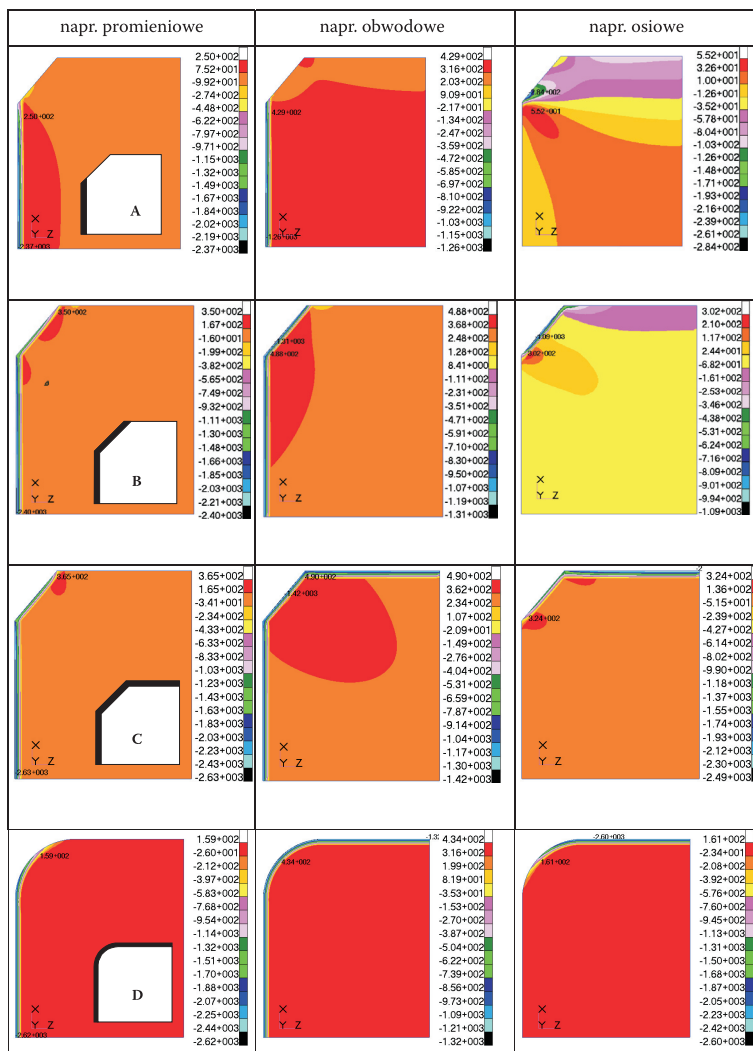
Do dalszych badań numerycznych wybrano warstwę TiC. Przeprowadzono obliczenia naprężeń resztkowych dla modeli zaworu tytanowego z brzegiem fazowanym i zaokrąglonym oraz dla różnych sposobów wykończenia warstwy, które w tabeli 3 oznaczono jako przypadki A, B, C i D (tab. 3).

Dla przykładowego układu podłoże/warstwa otrzymano jakościowo i ilościowo różne rozkłady naprężeń w zależności od tego, czy warstwa znajduje się tylko na powierzchni czołowej grzybka zaworu czy też obejmuje jego powierzchnię boczną.

Zdecydowanie najlepszy rozkład naprężeń otrzymano wtedy, kiedy warstwa obejmuje również powierzchnię boczną zaworu. Najkorzystniejszy jest zaokrąglony kształt brzegu zaworu (tab. 3 — przypadek D), ponieważ unika się powstawania koncentracji naprężeń. W przypadku fazowania, w obszarach załamania powierzchni, tuż pod warstwą powierzchniową, w materiale podłoża, powstają koncentracje naprężeń.

TABELA 3

Zestawienie wyników obliczeń naprężeń resztkowych dla wybranej warstwy TiC dla różnych kształtów brzegu grzybka zaworowego i dla różnego sposobu wykończenia warstwy



Jeśli weźmie się pod uwagę składową osiową naprężeń, można stwierdzić, że im bardziej warstwa powierzchniowa zachodzi na powierzchnię boczną zaworu (porównaj przypadki fazowania brzegu zaworu od przypadku A do C — tab. 3), tym bardziej koncentracje naprężeń ekstremalnych (które powstają w materiale podłoża tuż pod warstwą powierzchniową) ulegają rozseparowaniu, aż do ich zaniku dla przypadku D (zaokrąglenie brzegu zaworu). Dla przypadku D rozkłady w warstwie są „laminarne”, a w podłożu — jednorodne. Wartości bezwzględne składowych naprężeń (rzędu  $-2,6$  GPa) i gradienty naprężeń w samej warstwie nieznacznie wzrastają w porównaniu z przypadkami fazowania brzegu, ale są to wciąż naprężenia ściskające. Naprężenia ściskające mogą korzystnie wpływać na zapobieganie spękanii warstwy i na jej uszczelnienie. Z literatury wiadomo [21], że zmierzone eksperymentalnie wartości naprężeń resztkowych w rozważanych warstwach mogą osiągać znacznie większe wartości (rzędu  $-4,5$  GPa), niż otrzymane w niniejszej pracy.

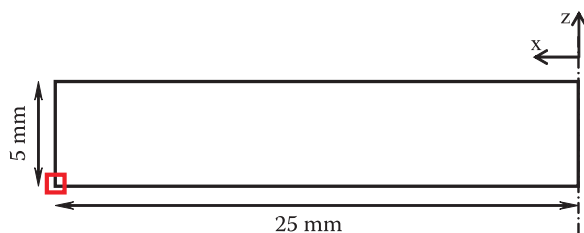
Przypadek D (tab. 3) jest najbardziej korzystny, zwłaszcza jeżeli weźmiemy pod uwagę czynniki inne niż uwzględnione w analizie numerycznej. Na brzegu warstwy, w warunkach eksploatacji rzeczywistego elementu, zachodzi bowiem proces utleniania, który sprzyja odpajaniu i w konsekwencji wpływa na ograniczenie jej trwałości. Proces ten może być najsilniej wspomagany w przypadku A przez najbardziej niekorzystny układ koncentracji naprężeń, które występują akurat na brzegu warstwy. W przypadku D (tab. 3) widać, że koncentracji wspomagających ten proces nie ma, a warstwa chroni również powierzchnię boczną elementu.

## **5. Gradientowy układ warstwa TiN-warstwa pośrednia na brzegu osiowosymetrycznej próbki stalowej**

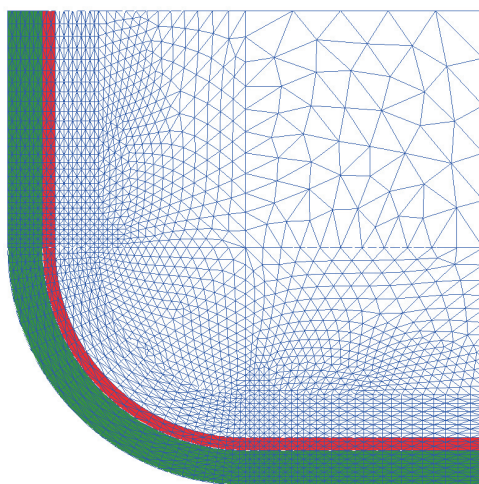
Rozważane są modele próbki osiowosymetrycznej (rys. 3). Testowano dwa modele: pierwszy uwzględniał tylko jednorodną warstwę zewnętrzną (TiN) oraz podłoże (stal), a drugi — warstwę pośrednią pomiędzy TiN oraz stalą. Założono, że warstwa pośrednia ma własności wyliczone przy uwzględnieniu równych udziałów objętościowych TiN i stali. Układ z warstwą pośrednią można traktować w obszarze styku warstw jako materiał gradientowy.

Na rysunku 4 pokazano, jak zdefiniowano własności materiałowe dla układu gradientowego warstwa powierzchniowa/warstwa pośrednia/podłoże (na tle siatki elementów skończonych wycinkowego lokalnego modelu, który uwzględnia zaokrąglenie brzegu próbki stalowej).





Rys. 3. Schemat próbki osiowoosymetrycznej z zaznaczonym wycinkowym obszarem na obwodzie, w którym przeprowadzono analizę rozkładu naprężeń resztkowych



Rys. 4. Układ gradientowy warstwa powierzchniowa/warstwa pośrednia/podłoże na tle siatki modelu MES

Ponieważ wcześniejsze badania wykazały, że najlepsze wyniki otrzymuje się dla próbek osiowoosymetrycznych z zaokrąglonym brzegiem o odpowiednio dużym promieniu w stosunku do grubości nanoszonych warstw, rozważano już tylko próbki o takim kształcie. Rozważano dwie warstwy o jednakowym rozkładzie własności: zewnętrzną (TiN) o grubości  $4\ \mu\text{m}$  oraz warstwę pośrednią o grubości  $1,5\ \mu\text{m}$ . Model obciążono spadkiem temperatury  $\Delta T = -500^\circ$ .

### 5.1. Własności materiałowe

Mechaniczne i termiczne własności materiałów, dla podłoża i warstw rozważanych w tej pracy, zestawiono w tabeli 4. Własności dla warstwy pośredniej zostały wyliczone zgodnie z regułą mieszanin w stosunku 50/50, na podstawie wartości parametrów termomechanicznych pokrycia i podłoża.

TABELA 4

## Własności materiałowe

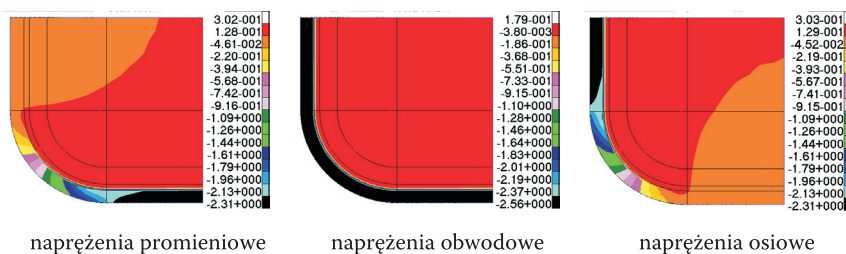
		Stal	Warstwa pośrednia	TiN
$E$	GPa	210,00	405,00	600,00
$\nu$		0,300	0,275	0,250
$\alpha$	$e^{-6} K^{-1}$	16,0	12,7	9,4

$E$  — moduł Younga;  $\nu$  — współczynnik Poissona;  $\alpha$  — współczynnik rozszerzalności cieplnej

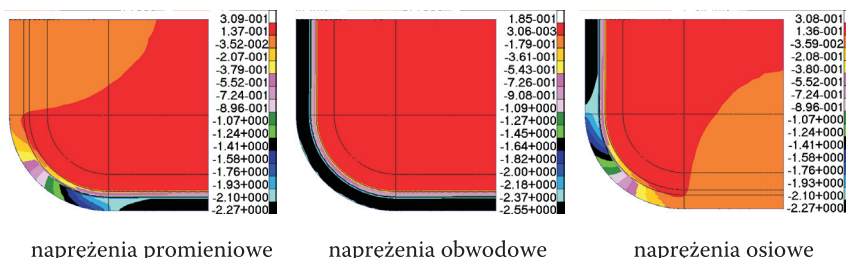
## 5.2. Wyniki obliczeń

Na rysunku 5 przedstawiono zestawienie wyników dla modelu próbki z warstwą powierzchniową TiN, bez uwzględnienia warstwy pośredniej.

Na rysunku 6 przedstawiono zestawienie wyników dla modelu próbki z warstwą powierzchniową TiN, z uwzględnieniem warstwy pośredniej.



Rys. 5. Rozkłady naprężeń dla modelu próbki z zaokrągleniem brzegu, z warstwą powierzchniową TiN, bez uwzględnienia warstwy pośredniej



Rys. 6. Rozkłady naprężeń dla modelu próbki z zaokrągleniem brzegu, z warstwą powierzchniową TiN, z uwzględnieniem warstwy pośredniej

W tabeli 5 zostały zestawione wyniki obliczeń dla obu przypadków.

TABELA 5

Naprężenia dla modelu bez warstwy pośredniej oraz z warstwą pośrednią

Naprężenia GPa	Model bez warstwy pośredniej		Model z warstwą pośrednią	
	max	min	max	min
Promieniowe	0,302	-2,31	0,309	-2,27
Obwodowe	0,179	-2,56	0,185	-2,55
Osiowe	0,303	-2,31	0,308	-2,27

## 6. Podsumowanie

Przedstawiono aspekty modelowania cienkich warstw powierzchniowych na przykładzie warstw TiC, TiCN i TiN. Zaprezentowano metodę tzw. globalno-lokalną przeprowadzania obliczeń.

Rozważono wpływ ukształtowania brzegu zaworu, a także sposobu wykończenia brzegu warstwy na rozkład naprężeń resztkowych. Na podstawie otrzymanych wyników można sformułować następujące zalecenia dla procesu nanoszenia warstw na taki element, jak zawór:

- brzegi elementu należy raczej zaokrąglić niż fazować,
- generalnie unikać ostrych załamań powierzchni i krawędzi — w przypadku koniecznego fazowania — krawędzie samego fazowania zaokrąglić,
- proces nanoszenia warstw natryskiwanych prowadzić tak, aby warstwa pokryła nie tylko powierzchnię chronioną, ale zachodziła także na powierzchnię boczną w stosunku do niej,
- na brzegu warstwy jej grubość zmniejszać stopniowo.

Rozważono również wpływ warstwy pośredniej na rozkład naprężeń resztkowych. Po porównaniu wyników numerycznych, otrzymanych dla modelu bez warstwy pośredniej i modelu uwzględniającego tę warstwę widać, że wprowadzenie do układu podłoże/pokrycie warstwy z pośrednimi własnościami termomechanicznymi powoduje zmniejszenie wartości naprężeń ściskających, które powstają w pokryciu. W modelu uwzględniającym warstwę pośrednią naprężenia o wartościach leżących między ekstremum ściskania w pokryciu a ekstremum rozciągania w podłożu koncentrują się w warstwie pośredniej, a ich gradient jest mniejszy niż w modelu bez warstwy pośredniej w obszarze bezpośredniego styku pokrycia i podłoża. Utrzymują się wysokie gradienty naprężeń w obszarze bezpośredniego styku pokrycia i warstwy pośredniej i w obszarze styku warstwy pośredniej z podłożem. Poprawę można by uzyskać przez zastosowanie na warstwę pośrednią materiału o własnościach bardziej zbliżonych do pokrycia i/lub dokonanie gradacji własności w samej warstwie pośredniej.

Przedstawione metody modelowania warstw powierzchniowych można doskonalić. Można również umożliwić otrzymywanie modeli numerycznych odzwierciedlających różnorodne rodzaje morfologii, jakie są spotykane w rzeczywistych warstwach otrzymywanych przy zastosowaniu typowych, obecnie stosowanych technologii wytwarzania warstw gradientowych i funkcjonalnie gradientowych. Można uwzględnić kolejne, bardziej złożone czynniki, które wpływają na rozkład naprężeń w warstwach powierzchniowych. Mogą to być cechy geometryczne, takie jak chropowatość powierzchni podłoża, porowatość, mikrospeknięcia itp. Dążąc do przeprowadzania bardziej zaawansowanych analiz, można uwzględnić zmienność własności materiałowych w zależności od temperatury.

Artykuł wpłynął do redakcji 16.02.2006 r. Zweryfikowaną wersję po recenzji otrzymano w maju 2006 r.

#### LITERATURA

- [1] C. KRAL, W. LENGAUER, D. RAFAJA, P. ETTMAYER, *Critical review on the elastic properties of transition metal carbides, nitrides and carbonitrides*, Journal of Alloys and Compounds 265, 1998, 215-233.
- [2] S. J. BULL, D. G. BHAT, M. H. STAJA, *Properties and performance of commercial TiCN coatings. Part 1: Coating architecture and hardness modeling*, Surf. Coat. Techn., 163-164, 2003, 499-506.
- [3] I. DAHAN, U. ADMON, N. FRAGE, J. SARIEL, M. P. DARIEL, J. J. MOORE, *The development of a functionally graded TiC-Ti multilayer hard coating*, Surf. Coat. Techn., 137, 2001, 111-115.
- [4] W. GRZESIK, *Experimental investigation of the cutting temperature when turning with coated indexable inserts*, Int. J. Machine Tools Man., 39, 1999, 355-369.
- [5] I. S. JAWAHIR, C. A. VAN LUTTERVELT, *Recent developments in chip control research and applications*, Ann. CIRP 42 (1), 1993, 659.
- [6] Y. FUKUI, K. TAKASHIMA, C. B. PONTON, *Measurement of Young's modulus and internal friction of an in-situ Al-Al<sub>3</sub>Ni functionally gradient material*, J. Mater. Sci., 29, 1994, 2281-2288.
- [7] Y.-D. LEE, F. ERDOGAN, *Residual/thermal stresses in FGM and Laminated thermal barrier coatings*, Int. J. Fract., 69, 1994/1995, 145-165.
- [8] F. ERDOGAN, *Fracture mechanics of functionally graded materials*, Comp. Eng., vol. 5, 1995, 753-770.
- [9] S. SURESH, M. OLSSON, A. E. GIANNAKOPOULOS, N. P. PADTURE, J. JITCHAROEN, *Engineering the resistance to sliding-contact damage through controlled gradients in elastic properties at contact surfaces*, Acta Mater. vol. 47, no. 14, 1999, 3915-3926.
- [10] M. FINOT, S. SURESH, *Small and large deformation of thick and thin-film multi-layers: Effects of layer geometry, plasticity and compositional gradients*, J. Mech. Phys. Solids, vol. 44, no 5, 1996, 683-721.
- [11] T. HIRANO, J. TERAKI, T. YAMADA, *On the design of functionally gradient materials*, Proc. 1<sup>st</sup> Int. Symp. on Functionally gradient Materials, ed. M. Yamanouchi, M. Koizumi, T. Hirai and I. Shiota, 1990, 5-10.
- [12] T. MORI, K. TANAKA, *Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions*, Acta Metall., 21, 1973, 571-574.

- [13] K. TANAKA, Y. TANAKA, K. ENOMOTO, V. F. POTERASU, Y. SUGANO, *Design of thermoelastic materials using direct sensitivity and optimization methods. Reduction of thermal stresses in functionally gradient materials*, Comp. Meth. Appl. Mech. Engng, 106, 1993a, 271-284.
- [14] K. TANAKA, Y. TANAKA, K. ENOMOTO, V. F. POTERASU, Y. SUGANO, *An improved solution to thermoelastic material design in functionally gradient materials: scheme to reduce thermal stress*, Comp. Meth. Appl. Mech. Engng, 109, 1993b, 377-389.
- [15] T. HIRANO, K. WAKASHIMA, *Mathematical modelling and design*, MRS Bull. Jan., 1995, 40-42.
- [16] A. J. MARKWORTH, J. H. SAUNDERS, *A model of structure optimization for a functionally graded material*, Mater. Lett., 22, 1995, 103-107.
- [17] A. J. MARKWORTH, K. S. RAMESH, W. P. PARKS, *Review: modelling studies applied to functionally graded materials*, J. Mater. Sci., 30, 1995, 2183-2193.
- [18] R. L. WILLIAMSON, B. H. RABIN, J. T. DRAKE, *Finite element analysis of thermal residual stresses at graded ceramic-metal interfaces. Part I. Model description and geometrical effects*, J. Appl. Phys. 74 (2), 1993, 1311-1320.
- [19] T. REITER, G. J. DVORAK, V. TVERGAARD, *Micromechanical models for graded composite materials*, J. Mech. Phys. Solids, vol. 45, no. 8, 1997, 1281-1302.
- [20] S. B. Biner, *Thermo-elastic analysis of functionally graded materials using Voronoi elements*, Mat. Sci. Eng. A315, 2001, 136-146.
- [21] L. L. SHAW, *Thermal residual stresses in plates and coatings composed of multi-layered and functionally graded materials*, Composites: Part B, 29B, 1998, 199-210.

W. SZYMCZYK, J. WŁODARCZYK

### Numerical determination of residual stresses distributions in TiC and TiN surface coatings on a steel substrate

**Abstract.** TiC surface coatings on an exhaust valve of an internal combustion engine were numerically simulated. The stresses distributions in the areas of collaboration of surfaces and substrates were obtained. Simulations were conducted for the valve with different shapes of the edge and for different finishes of the coating in this area. The best results were obtained for the valve with a rounded edge and the coating which covered not only the front but also circumferential surface of the considered axisymmetric body. Then, a TiN coating on an axisymmetric steel sample with rounded edges was investigated for two cases: with and without a NiCr interlayer. This allowed for comparison and assessment of influence of an interlayer on the residual stress distribution change.

**Keywords:** surface coating, numerical simulations, residual stress, gradient material

**Universal Decimal Classification:** 539.382