文章编号: 1673-0062(2009)04-0056-06

韧性薄膜 /基底体系锥形压痕的有限元分析

胡和平^{1,2},廖艳果¹,周益春²

(1. 南华大学 数理学院, 湖南 衡阳 421001; 2 湘潭大学 低维材料与应用教育部重点实验室, 湖南 湘潭 411105)

摘 要:使用量纲分析和有限元法探讨了圆锥性压头压入韧性薄膜 制性基底体系的 力学响应.根据量纲分析,我们建立了压入响应和薄膜及基底的力学参量的无量纲关 系.通过对压痕曲线的几个关键变量研究,发现最大压痕荷载取决于压入的深度、薄膜和基底的弹塑性性能,当压入适当深度时初始卸载斜率不受基底的屈服强度的影响.这些结论有利于深入研究韧性薄膜/韧性基底体系的压痕过程,提供了一种从锥 形压痕试验中获得薄膜和基底的力学性能的方法. 关键词:量纲分析;有限元法;锥形压痕;薄膜/基底体系

中图分类号: TB383 文献标识码: A

Finite E lement Analysis of Conical Indentation of E lastic- plastic Film / Substrate Systems

HU He-ping^{1, 2}, LIAO Yan-guo¹, ZHOU Yi-chun²

 (1 School of M athematics and Physics University of South China H engyang H unan 421001, China
 2 Key Laboratory of Low D in ensional M aterials and Application Technobgy of M inistry of E ducation, X iang tan U niversity, X iang tan, H unan 411105, China)

Abstract D in ensional analysis and finite element method (FEM) have been used in this paper to investigate the conical indentation of elastic plastic film/substrate systems. The scaling relationships derived from dimensional analysis bridge the indentation response and the elastic – plastic properties of both film and substrate. Several key variables of an indentation curve are revealed and examined, which can indicate that the maximum indentation force depends on the elastic – plastic properties of both film and substrate and the initial unloading slope is independent on the initial yield stress of the substrate with the moderate indentation depth. The investigation and analysis of this work might be beneficial to understanding deeply the conical indentation of the elastic plastic film/substrate system, and provide a potential way for developing the practicable technique to extract the mechanical

作者简介: 胡和平 (1964-), 男, 湖南衡阳人, 南华大学数理学院副教授, 博士研究生. 主要研究方向: 薄膜材料的 力学性能研究.

收稿日期: 2009-09-25

基金项目:国家自然科学基金重点基金资助项目 (50531060); 衡阳市科技局基金资助项目 (KJ01)

properties of both film and substrate from the conical indentation test **Key words** dimensional analysis, finite element method (FEM); conical indentation, film / substrate system

0 前言

现代技术中,薄膜无处不在的,从集成电路到 热障涂层.薄膜具有优越的物理力学性能、较高的 密度和较小的整体规模,被越来越广泛地使用.薄 膜的力学性能是一个很重要的基本性能,薄膜技 术的快速发展和应用依赖于薄膜的力学性能.但 是由于材料本身具有的微观结构,使得其力学性 能测试方法不同于大块材料^[1-2].纳米压痕技术 是一种被广泛使用于测量薄膜力学性能的一种手 段,由于其测量的精度相当高,压痕技术已被广泛 用来测量大块材料的力学性能.数值模拟方法提 出了通过压痕测试的荷载 – 位移关系来确定材料 的力学性能,近来很多专家和学者通过运用有限 元方法从压痕的加卸载曲线获取材料的力学性 能.

但是,用微/纳米压痕法测定薄膜力学性能非 常困难.因为测试时受到基底性能的影响,一个常 用经验法则是当压痕深度小于薄膜厚度的 10% ~20%^[3-5],测试的结果可认为不受基底性能的 影响.但是,这一规则仅仅适用于薄膜厚度大于 1 µm的薄膜,不适用于非常薄的膜.因此,需要建 立新的理论和模型,把基底的影响减去.对于韧性 薄膜/脆性基底体系,马德军^[6]和 Zhao^[7]已经建 立了相应的模型.但是对于韧性薄膜 *制*性基底系 统,由于在压痕实验中需要考虑弹塑性基底对测 试结果的复杂的影响,所以至今还没建立起系统 的理论模型.

本文运用量纲分析和有限元方法研究弹塑性 薄膜/基底体系的三维锥形压痕响应过程.研究的 结果,有利于深入探讨弹塑性薄膜/基底系统的锥 形压痕过程,制定一个切实可行的方法从一个锥 形压痕试验抽取薄膜的力学性能.虽然本文提出 的分析是建立在圆锥形压头上,但是很多相关文 献表明,它们也适用于 Berkovich 三菱锥压头和 Vicker压头^[8].

1 理论分析

我们考虑半角为 θ的圆锥形压头压入薄膜 / 基底体系上 (如图 1). 在本文中, $θ = 703^{\circ}$, 与 Berkovich压头和 Vicker压头 $\frac{19-10}{10}$ 具有相同的接 p 触面积与压入深度比.基底和薄膜材料的本构关 系如下:

$$\varepsilon = \begin{cases} \frac{\sigma}{E}, & \sigma \leqslant \sigma_{y} \\ \frac{\sigma_{y}}{E}, & \sigma \geqslant \sigma_{y} \end{cases}$$
(1)

在这里, σ_y为材料的初始屈服强度, 而 *E* 和 *v* 分别为杨氏模量和泊松比. 拉伸行为推广到多轴 应力状态, 假设材料为各向同性硬化并服从密斯 屈服准则. 薄膜力学参数分别为: σ₁, *v*₁, *E*₃; 基底 力学参数分别为: σ₂, *v*₂ *E*₂.

图 2为典型的加卸载曲线,最大压痕荷载 *P_m* 应该是所有独立参数的函数,即薄膜与基底材料 参数 (*E*₁, σ₁, *v*_b *E*₂ σ₂ *v*₂)、薄膜厚度 (*h*₀) 和压 痕深度 (*h*) 的函数,即



图 1 薄膜 基底体系的压痕示意图 Fig 1 Schematic of normal indentation on the film / substrate system



图 2 典型的弹塑性材料加卸载曲线图

Fig 2 Schem atic of load ing- unbading curve of a typical elastic- plastic material ng House. All rights reserved. http://www

ww.cnki.net

57

P_m = P_m(E₁, σ₁, v₁, E₂, σ₂, v₂, h₀, h_m) (2)
 材料的泊松比在压痕测试中是一个可以忽略
 的因素^(8 11-12), 本文中取为 0 3 运用 定理并选
 择无量纲量, 使未知参数无量纲化, 得到下面的无量纲方程:

$$\frac{P_m}{E_2 h_m^2} \prod_{1} \left(\frac{E_1}{E_2}, \frac{\sigma_1}{E_2}, \frac{\sigma_2}{E_2}, \frac{h_m}{h_0} \right)$$
(3)

初始的卸载斜率与材料的杨氏模量和接触面 积相关联⁽¹³⁾,将初始卸载斜率无量纲化得:

$$\frac{1}{h_m E_2} \frac{d\mathbf{P}}{dh} \mid_{h_m} = \prod_2 \left(\frac{E_1}{E_2}, \frac{\sigma_1}{E_2}, \frac{\sigma_2}{E_2}, \frac{h_m}{h_0} \right) \qquad (4)$$

有限元分析压痕问题采用商业有限元软件 ABAQUS.其压痕过程可看成刚性圆锥性压头压 入一个薄膜 /基底体系构成的圆柱体顶部,如图 1.从图中可以看出,压入过程具有几何对称性,可 简化二维轴对称问题. 在本文, 假设刚性压头为一 个完美的圆锥性压头, 压头和薄膜表面之间的摩 擦为库仑摩擦, 其摩擦对压入过程的影响很小, 假 设摩擦系数为 0 1^[9-10]. 其有限元模型的二维轴 对称网格如图 3 在半无限薄膜 /基底体系模型中 使用了 6 400个四点轴对称四边形单元. 在最大压 入载荷下, 每个有限元计算中的接触单元不小于 20个. 一般来说, 金属或合金的初始屈服强度和 杨氏模量范围分别为 0 03 ~ 1.1 GPa和 40 ~ 210 GPa 有限元计算中, 基底和薄膜的材料参数 范围如下: 0 04 $\leq E_1 / E_2 \leq 5$ 0 0005 $\leq \sigma_1 / E_2 \leq$ 0 02 0 0005 $\leq \sigma_2 / E_2 \leq 0$ 02和 0 02 $\leq h_n / h_0 \leq$ 2 为了简单起见, 本文中基底的杨氏模量假定为 200 GPa



图 3 薄膜 基底体系的网格划分示意图

Fig 3 Schematic of of finite elementmesh of an elastic – plastic film / substrate system

2 结果与讨论

接下来我们分别讨论了薄膜 基底体系中基本 力学参数对加卸载曲线的压入荷载和硬度的影响。

21 压痕加载曲线

我们使用有限元方法研究了最大压入荷载与 材料参数、压入深度及薄膜厚度之间的无量纲关 系,即 $\prod_{r} 当 \sigma_2 \pounds_2 = 0 005 \pi h_m /h_0 = 0 8 \text{时},$ $P_m / (E_2 h_m^2) 与 \sigma_1 \pounds_2 Q E_2 \pounds_1$ 的变化关系如图 4 其中 $E_2 \pounds_1$ 为基底 与薄膜的弹性模量比. 随着 $\sigma_1 \pounds_2 增加, P_m / (E_2 h_m^2)$ 的值增加. 从图中可以观 察到当 $E_1 \pounds_2 很小时, P_m / (E_2 h_m^2) 受 \sigma_1 \pounds_2 变化$ $影响很小. 图 4表明, 随着 <math>E_1 \pounds_2 增大, P_m h_m^2$ 变大.



图 4 当 $\sigma_2 E_2 = 0\ 0005\ P_m\ /(E_2h_m^2)$ 和 $\sigma_1\ /E_2$ 之间的关系示意图 Fig 4 Relationship between $P_m\ /(E_2h_m^2)$ and $\sigma_1\ /E_2$. In all the case $\sigma_2\ /E_2 = 0\ 0005$

当 $\sigma_1 \mathcal{F}_{94-\overline{2}0} P_2 OO1 和 h_{\mathcal{R}} h_{\mathcal{R}} e_{\overline{n}i} O_1 Sett _{\mathcal{R}} e_{\overline{n}i} e_{\overline{n}$

 $P_m / E_2 h_m^2$ 随 σ_2 / E_2 增加而增加, 尤其是当 σ_2 / E_2 很 小时这种变化特别明显. 当 $\sigma_2 / E_2 \ge 0$ 0025 σ_2 / E_2 对 $P_m / (E_2 h_m^2)$ 影响很小, 仅取决于 E_1 / E_2 仅当 σ_2 / E_2 变化时, 在压头附近薄膜和基底等效 塑性应变图如图 6 所示. 从图中可以发现, 当 $\sigma_2 / E_2 \ge 0$ 0025 基底只发生了弹性变形而没有 塑性变形, 这刚好可以用来解释图 5 中的现象. 当 $\sigma_2 / E_2 = 0$ 0005 和 $\sigma_1 / E_2 = 0$ 001, $P_m / E_2 h_m^2$ 与 $h_m / h_0 D E_1 / E_2$ 的关系如图 7所示. 从图中可以看 到: 当压入越深时, $P_m / (E_2 h_m^2)$ 的大小越来越依赖 干基底的力学性能.



图 5 $\sigma_1 E_2 = 0 \ 001 P_m / (E_2 h_m^2) 和 \sigma_2 E_2 之间的关系示意图$ $Fig. 5 Relationship between <math>P_m / (E_2 h_m^2)$ and σ_2 / E_2 . In all the case, $\sigma_1 / E_2 = 0 \ 001$



图 6 当 $\sigma_1 / E_2 = 0.001$ 和 $E_1 / E_2 = 1$ 时, $\sigma_2 / E_2 = (a) 0.0005$ (b) 0.001; (c) 0.0025; (d) 0.005; (e) 0.015; (f) 0.02, 靠近压头的薄膜 /基底体系塑性区域分布图 Fig 6 Plastic zones of both the film and substrate near indenter for several $\sigma_2 / E_2 : (a) \sigma_2 / E_2 = 0.0005$ (b) $\sigma_2 / E_2 = 0.0015$; (c) $\sigma_2 / E_2 = 0.0025$; (d) $\sigma_2 / E_2 = 0.0055$ (e) $\sigma_3 / E_2 = 0.0155$; (f) $\sigma_3 / E_2 = 0.0255$; (d) $\sigma_3 / E_2 = 0.00555$

2 2 初始卸载斜率

初始卸载斜率是材料非常有趣的参数,对于 块体材料而言与材料的杨氏模量和接触面积相 关⁽¹³⁾.对于弹性 – 完美塑性薄膜 /基底系统而 言,初始卸载斜率与薄膜 /基底体系的材料参数、 压入深度和薄膜厚度的无量纲函数关系如方程 (4).

从图 8和图 9中, 可以发现压入适当的深度时 薄膜的屈服强度对初始卸载斜率的影响很小. 因 此, 初始卸载斜率主要取决于 *E*₂/*E*₁的大小, 类似 于大块材料. 初始卸载斜率主要取决于材料的杨 氏模量和接触面积⁽¹³⁾. 故方程(4) 可以进一步简 化为:

$$\frac{1}{h_m E_2} \frac{dP}{dh} \mid_{h_m} = \prod_2 \left(\frac{E_1}{E_2}, \frac{h_m}{h_0} \right)$$
(5)



图 7 当 $\sigma_1 \pounds_2 = 0$ 001和 $\sigma_2 / \pounds_2 = 0$ 0005, $P_m / (E_2 h_m^2)$ 和 $h / h_0 关系示意图$





(e) $\sigma_2 E_2 = 0.015$; (f) $\sigma_2 E_2 = 0.02$ \odot 1994-2012 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

对干弹性 - 完美塑性薄膜 /基体材料体系, 初 始卸载斜率和无量纲参数 $(E_1/E_2, h_m/h_0)$ 的关系 如图 10 当 $E_1 / E_2 = 1$ 对应于大块材料 从图中可 以发现初始卸载斜率不随压入的深度而改变 这 符合以往的报道^[13].

23 硬度分析

60

材料的硬度是材料一个非常重要的力学性 能.硬度用通常定义为材料在荷载作用下的平均 压力^[13],即

$$H = \frac{P_m}{A_c} \tag{6}$$

这里 P_m 为最大荷载,通过方程 (4)可以计算 出来: A, 为最大荷载下的投影面积. 根据其定义. 复合硬度 H 与薄膜 基底体系材料参数、压入深 度和薄膜厚度的无量纲函数关系如下:

$$\frac{H}{E_2} = \prod_1 \left(\frac{E_1}{E_2}, \frac{\sigma_1}{E_2}, \frac{\sigma_2}{E_2}, \frac{h_m}{h_0} \right)$$
(7)

以往的研究表明 大块材料的硬度与压痕深 度 h 无关^[12], 但是这种结论不再适用于薄膜 基 底材料体系,也就是说,薄膜/基底材料体系的复 合硬度与上述无量纲参数相关. 硬度与初始屈服 强度比是一个非常有趣的量,普通金属大约为 $30^{14/}$. 对于弹性 – 完美塑性薄膜 /基底系统.

$$\frac{H}{\sigma_1} = \frac{E_2}{\sigma_2} \prod_1 \left(\frac{E_1}{E_2}, \frac{\sigma_1}{E_2}, \frac{\sigma_2}{E_2}, \frac{h_m}{h_0} \right)$$
(8)

$$\frac{H}{\sigma_2} = \frac{E_2}{\sigma_2} \prod_{1} \left(\frac{E_1}{E_2}, \frac{\sigma_1}{E_2}, \frac{\sigma_2}{E_2}, \frac{h_m}{h_0} \right)$$
(9)

首先,我们考虑薄膜的屈服强度对复合硬度 的影响, 如图 11(a). 当 $\sigma_2 \not E_2 = 0$ 0005和 $h_m \not h_0$ $= 0.8 \pm 0.0005 \le \sigma_1 E_2 \le 0.02$ 范围内, H / σ_1 的 值从012变化至45结果表明,该值不再为30 的常数.^[14].

接下来我们考虑基底的屈服强度对复合硬度 影响, 即图 11(b). 当 $\sigma_1 / E_2 = 0.001$ 和 $h_m / h_0 =$ 0 8时, 在 0 0005≤ 𝔤, 𝔼₂≤0 02范围内, 𝑘 /𝔤₂的 值从约 0.2变化至 5 5 从图 11(a)~(b)中也可 以看出不同的薄膜与基底的弹性模量比, 即 $E_1/$ E_2 对复合硬度的影响.

从图 11(c)中可以观察到: 当 $\sigma_2 E_2 = 0.0005$ 和 $h_m / h_0 = 0$ 001 H / σ_1 与 h_m / h_0 及 E_1 / E_2 的关 系. 随着 h_m /h₀ 增大, H /o₁ 的值越来越靠近于大 块材料. 如果当 $E_1/E_2 = 1$ 对应于大块材料, 如果 不考虑梯度效应等尺寸效应的影响,其硬度值为 一个不随 h_m /h₀ 变化的一个常数, 这完全吻合以 往的研究^[14] 2012 China Academic Journal Electronic Publishing House. Add rights reserved. Ohttp://www.cnki.net

3 结论

本文使用量纲分析和有限元方法探讨了圆锥 压头压入弹性 - 完美塑性薄膜 基底系统的力学 过程.得到的弹塑性薄膜/基底的力学参数和压入 参数之间的关系可归纳如下:

1)当 h_m / h_0 固定时, 压入的最大荷载随 E_1 / E_2 , σ_1 / E_2 和 σ_2 / E_2 的增加而增加的.

2)当 h_m / h_0 固定时, σ_2 / E_2 大于 0 0025 时, 压入最大荷载对 $\sigma_2 \mathbb{E}_2$ 的变化不敏感.

3)初始卸载斜率(材料的刚度)不受基底的 屈服强度的影响.

4) 薄膜 /基底体系的硬度主要取决于薄膜和 基底材料的屈服强度,受薄膜和基底的弹性性能 的影响比较小.











图 11 (a) 当 $\sigma_2 E_2 = 0\ 0005$ 和 $h_m A_0 = 0\ 8\ H/\sigma_1$ 和 $\sigma_1 E_2 关系;$ (b) 当 $\sigma_1 E_2 = 0\ 001$ 和 $h_m A_0 = 0\ 8$ H $/\sigma_2$ 和 $\sigma_2 E_2 关系;$ (c) 当 $\sigma_1 E_2 = 0\ 005$ 和 $\sigma_2 E_2 = 0\ 005$ 时, H $/\sigma_1$ 和 $h A_0$ 关系

Fig 11(a) Relationship between H / σ_1 and σ_1 / E_2 with fixed $\sigma_2 / E_2 = 0.0005$ and $h_m / h_0 = 0.8$; (b) Relationship between H / σ_2 and σ_2 / E_2 with fixed $\sigma_1 / E_2 = 0.001$ and $h_m / h_0 = 0.8$; (c) Relationship between H / σ_1 and h_m / h_0 with fixed $\sigma_1 / E_2 = \sigma_2 / E_2 = 0.005$

参考文献:

- [1] Liu S B, W ang Q J Determ ination of Young's modulus and Poisson's matio for coatings[J]. Surface and Coatings Technology, 2007, 201(14): 6470-6477
- [2] Tan J M eadows P J Zhang D, et al Yoang's modulus measurements of sic coatings on spherical particles by u-

sing nanoindentation [J]. Journ al of Nuclear Materials, 2009, 393(1): 22–29

- [3] Gamonpiks C, Busso E P. On the effect of substrate properties on the indentation behaviour of coated systems[J]. Materiak Science and Engineering A, 2004, 380(1/2): 52-61.
- [4] Panich N, SunY. Effect of penetration depth on indentation response of soft coatings on hard substrates a finite element analysis [J]. Surface and Coatings Technology, 2004, 182(2/3): 342- 350.
- [5] Xu Z H, Rowcliffe D. F in ite element analysis of substrate effects on indentation behaviour of thin films [J]. Thin Solid F ilms 2004 447-448 399-405.
- [6] M a D J Xu K W, H e JW, et al Evaluation of the mechanical properties of thin m etal films[J]. Surface and Coatings Technology, 1999, 116-119 128-132
- [7] Zhao M, Chen X, X iang Y, et al M easuring elastop lastic properties of thin films on an elastic substrate using sharp indentation [J]. A cta M aterialia 2007, 55 (18): 6260-6274
- [8] Tho K K, Swardd wudhipong S, Liu Z S, et al Simulation of instrumented indentation and material characterization
 [J]. M aterials Science and Engineering A, 2005, 390(1/ 2): 202-209
- [9] Zhao M, Chen X, Yan J et al Determination of uniaxial residual stress and mechanical properties by instrumented indentation[J]. A cta M aterialia, 2006, 54(10): 2823 - 2832
- [10] Yan J Karlsson A M, Chen X. Determining plastic properties of a material with residual stress by using conical indentation [J]. International Journal of Solids and Structures 2007, 44(11/12): 3720-3737
- [11] Luo J Lin J A study on the determination of plastic properties of metals by instrumented indentation using two sharp indenters[J]. In ternational Journal of Solids and Structures 2007, 44(18/19): 5803-5817.
- [12] Cheng Y T, Cheng C M. Scaling dimensional analysis and indentation measurements [J]. Materials Science and Engineering R., 2004, 44(4/5): 91-149
- [13] Cheng C M, Cheng Y T. On the initial unloading sbpe in indentation of elastic-plastic solids by an indenter with an axisymmetric smooth profile[J]. Applied Physics Letters, 1997, 71: 2623-2625.
- [14] Yan W Y, Sun Q P, Feng X Q, et al Analysis of spherical indentation of superelastic shape memory albys
 [J]. International Journal of Solids and Structures, 2007, 44(1): 1-17.