

## Застосування комп'ютерного моделювання для визначення пластичних властивостей твердих плівок на м'яких підложках за даними інденування

І.К. Валєєва, І.О. Горошко

Ін-т проблем моделювання в енергетиці ім. Г.Є. Пухова НАН України  
valyeyeva@rambler.ru

### **Abstract**

*Valyeyeva I.K., Goroshko I.O., Application of computer simulation for determination of plastic properties of hard films on soft substrates from indentation data. Influence of plastic properties of soft films on a hard substrates on indentation force-displacement curves is studied. Technique for determination of plastic properties based on approximation by Legendre polynomial series of loading curves is proposed.*

### **Вступ**

Метод наноінденування використовується для визначення механічних характеристик поверхневих зон твердих тіл, а також нанесених на них плівок. Він оснований на реєстрації залежності глибини  $h$  занурення індентора в матеріал від прикладеної до нього сили  $P$  у циклі навантаження–розвантаження. Схематично вигляд цієї залежності показаний на рис. 1.

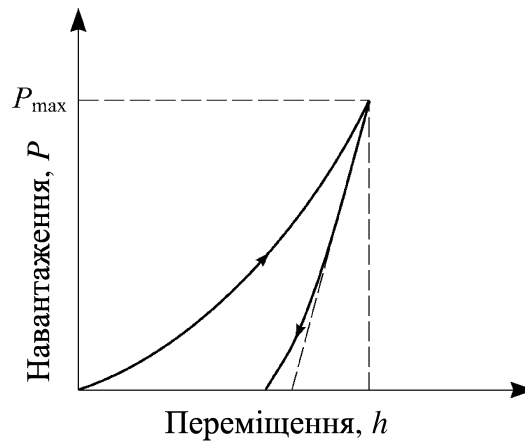


Рисунок 1 – Схематичний вигляд залежності сили  $P$ , прикладеної до індентора, від його переміщення  $h$ .

За даними інденування визначаються такі характеристики матеріалу, як твердість і модуль пружності [1]. Твердість обчислюється як відношення максимального зусилля до площі проекції області контакту:

$$H = \frac{P_{\max}}{A}.$$

Із співвідношення

$$S = \beta \frac{2}{\sqrt{\pi}} E_{\text{eff}} \sqrt{A},$$

отриманого на основі аналітичного розгляду контактної задачі, який зв'язує площу проекції контактної області  $A$  з поверхневою жорсткістю  $S$ , що обчислюється з нахилу кривої розвантаження, визначається приведений модуль пружності  $E_{\text{eff}}$ . Приведений пружний модуль є величиною, яка виражається через модуль Юнга і коефіцієнт Пуассона матеріалу і індентора  $E$ ,  $\nu$ ,  $E_i$ ,  $\nu_i$  таким чином:

$$\frac{1}{E_{\text{eff}}} = \frac{1-\nu^2}{E} + \frac{1-\nu_i^2}{E_i}.$$

Поправочний коефіцієнт  $\beta=1$  для осесиметричних інденторів, а для інденторів з квадратним або прямокутним перерізом  $\beta=1,03-1,05$  [1, 2].

Дані, що отримуються при індентуванні, містять інформацію як про пружні, так і про пластичні властивості досліджуваного матеріалу. Проте задача визначення пластичних параметрів за даними індентування є нелінійною оберненою задачею, розв'язання якої практично неможливе без використання чисельного моделювання процесу пружно-пластичної деформації досліджуваного матеріалу.

При індентуванні однорідних матеріалів конічними і пірамідальними інденторами внаслідок подібності напружено-деформованого стану матеріалу залежність сили  $P$ , прикладеної до індентора, від його переміщення  $h$  на етапі навантаження є квадратною параболою  $P=Ch^2$  [3], коефіцієнт якої залежить від пружних і пластичних параметрів досліджуваного матеріалу (а також від геометрії і параметрів матеріалу індентора).

Проте при індентуванні плівки на підложці з відмінними механічними властивостями крива навантаження вже не є квадратною параболою. При збільшенні глибини індентування відбувається достатньо помітне відхилення кривої навантаження від квадратичної залежності [2, 4–6]. На її поведінку впливають пружні і пластичні характеристики як матеріалу плівки, так і підложки [7].

### **Постановка задачі і результати чисельного моделювання**

При розв'язанні задачі вважається, що матеріал конічного індентора абсолютно твердий, кут напіврозхилу конуса рівний  $70,3^\circ$  (у цьому випадку відношення площі поперечного перетину до відстані до вершини є таким самим, що і для інденторів Берковича і Вікерса) [8], а коефіцієнт тертя між індентором і поверхнею матеріалу покладається рівним нулю. При розрахунках товщина плівки  $h_0$  приймалася рівною 150 нм.

При описі пружно-пластичної поведінки матеріалів плівки і підложки використовується модель пружно-пластического матеріалу із степеневим законом зміцнення [3], для якого залежність між напруженнями і деформаціями при одноосному деформуванні представляється у вигляді

$$\sigma = \begin{cases} E\varepsilon, & \varepsilon \leq \sigma_y / E, \\ \sigma_y \left( 1 + \frac{E}{\sigma_y} \varepsilon_p \right)^n, & \varepsilon > \sigma_y / E. \end{cases} \quad (1)$$

де  $E$  – модуль пружності  $\sigma_y$  – початкова межа текучості  $\varepsilon_p$  – нелінійна частина деформації,  $n$  – показник степеневого закону зміцнення. При цьому модель пружного ідеально пластичного матеріалу може розглядатися як частинний випадок при  $n=0$ . В якості критерію текучості вибрано критерій Мізеса.

При дослідженні твердих плівок на м'яких підложках вважається, що матеріали плівки і підложки однорідні. В якості матеріалу плівки вибраний матеріал, близький за пружними властивостями до карбїду кремнію [9] (модуль пружності  $E_f=450$  ГПа, коефіцієнт Пуассона  $\nu_f=0,16$ ), а в якості підложки вибрана м'яка сталь [9] (модуль пружності  $E_s=210$  ГПа, межа текучості  $\sigma_{ys}=700$  МПа, коефіцієнт Пуассона  $\nu_s=0,3$ , показник степеневого закону зміцнення  $n_s=0,1$ ).

У результаті чисельного моделювання було отримано ряд модельних кривих, для яких показник степеневого закону зміцнення  $n_f$  матеріалу плівки змінюється від нуля (для пружного ідеально-пластичного тіла) до 0,5 з кроком 0,1, а початкова межа текучості  $\sigma_{yf}$  приймає значення 8,75, 10, 12,5, 14, 16,25 і 18,75 ГПа. При обчисленнях вважається, що глибина вимірюється в мікронах, а сила, прикладена до індентора – в міліньютонках.

Для визначення пластичних властивостей матеріалу плівки відрізки кривих індентування (як модельних, так і експериментальних) на етапі навантаження представляються у вигляді відрізка ряду по поліномах Лежандра

$$\check{P} = \sum a_k P_k(x) \quad (2)$$

де  $P_k(x)$  – поліном Лежандра степеня  $k$ , який може бути визначений за формулою Родрігеса

$$P_k(x) = \frac{1}{2^k k!} \left( \frac{d}{dx} \right)^k (x^2 - 1)^k,$$

де  $x$  змінюється на інтервалі від  $-1$  до  $1$ .

Криві індентування  $P(h)$  на етапі навантаження апроксимуються рядами по поліномах Лежандра до третього степеня на ділянці від 0,02 до 0,1 мкм. При цьому  $x = (h - 0,06) / 0,04$ .

У таблиці 1 наведені значення коефіцієнтів  $a_k(n_f, \sigma_{yf})$ , отримані для кривих, які одержані в результаті чисельних розрахунків при варіюванні значення  $\sigma_{yf}$  і  $n_f$ .

Таблиця 1. Залежність коефіцієнтів  $a_k$  апроксимації ділянки кривої індентування поліномами Лежандра від показника степеневого закону зміцнення  $n_f$  і початкової межі текучості  $\sigma_{yf}$  матеріалу півки

$\sigma_y$ , ГПа	$a_k$ , ( $k = \overline{0,4}$ )	$n_f$					
		0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5
8,75	$a_0$	$7,37 \cdot 10^{-4}$	$7,66 \cdot 10^{-4}$	$7,94 \cdot 10^{-4}$	$8,20 \cdot 10^{-4}$	$8,45 \cdot 10^{-4}$	$8,68 \cdot 10^{-4}$
	$a_1$	$5,96 \cdot 10^{-4}$	$6,07 \cdot 10^{-4}$	$6,17 \cdot 10^{-4}$	$6,28 \cdot 10^{-4}$	$6,39 \cdot 10^{-4}$	$6,50 \cdot 10^{-4}$
	$a_2$	$3,61 \cdot 10^{-5}$	$2,31 \cdot 10^{-5}$	$1,21 \cdot 10^{-5}$	$3,05 \cdot 10^{-6}$	$-4,18 \cdot 10^{-6}$	$-9,89 \cdot 10^{-6}$
	$a_3$	$1,15 \cdot 10^{-5}$	$1,41 \cdot 10^{-5}$	$1,52 \cdot 10^{-5}$	$1,53 \cdot 10^{-5}$	$1,45 \cdot 10^{-5}$	$1,30 \cdot 10^{-5}$
10	$a_0$	$7,73 \cdot 10^{-4}$	$7,99 \cdot 10^{-4}$	$8,23 \cdot 10^{-4}$	$8,47 \cdot 10^{-4}$	$8,70 \cdot 10^{-4}$	$8,90 \cdot 10^{-4}$
	$a_1$	$6,13 \cdot 10^{-4}$	$6,22 \cdot 10^{-4}$	$6,31 \cdot 10^{-4}$	$6,41 \cdot 10^{-4}$	$6,51 \cdot 10^{-4}$	$6,62 \cdot 10^{-4}$
	$a_2$	$2,75 \cdot 10^{-5}$	$1,53 \cdot 10^{-5}$	$5,15 \cdot 10^{-6}$	$-3,08 \cdot 10^{-6}$	$-9,09 \cdot 10^{-6}$	$-1,35 \cdot 10^{-5}$
	$a_3$	$1,58 \cdot 10^{-5}$	$1,71 \cdot 10^{-5}$	$1,70 \cdot 10^{-5}$	$1,60 \cdot 10^{-5}$	$1,50 \cdot 10^{-5}$	$1,35 \cdot 10^{-5}$
12,5	$a_0$	$8,30 \cdot 10^{-4}$	$8,51 \cdot 10^{-4}$	$8,72 \cdot 10^{-4}$	$8,92 \cdot 10^{-4}$	$9,1 \cdot 10^{-4}$	$9,27 \cdot 10^{-4}$
	$a_1$	$6,38 \cdot 10^{-4}$	$6,46 \cdot 10^{-4}$	$6,54 \cdot 10^{-4}$	$6,63 \cdot 10^{-4}$	$6,73 \cdot 10^{-4}$	$6,82 \cdot 10^{-4}$
	$a_2$	$9,81 \cdot 10^{-6}$	$1,94 \cdot 10^{-7}$	$-7,60 \cdot 10^{-6}$	$-1,31 \cdot 10^{-5}$	$-1,70 \cdot 10^{-5}$	$-1,98 \cdot 10^{-5}$
	$a_3$	$2,03 \cdot 10^{-5}$	$2,05 \cdot 10^{-5}$	$1,91 \cdot 10^{-5}$	$1,77 \cdot 10^{-5}$	$1,60 \cdot 10^{-5}$	$1,41 \cdot 10^{-5}$
14	$a_0$	$8,58 \cdot 10^{-4}$	$8,77 \cdot 10^{-4}$	$8,96 \cdot 10^{-4}$	$9,13 \cdot 10^{-4}$	$9,30 \cdot 10^{-4}$	$9,45 \cdot 10^{-4}$
	$a_1$	$6,50 \cdot 10^{-4}$	$6,57 \cdot 10^{-4}$	$6,66 \cdot 10^{-4}$	$6,74 \cdot 10^{-4}$	$6,83 \cdot 10^{-4}$	$6,92 \cdot 10^{-4}$
	$a_2$	$7,18 \cdot 10^{-7}$	$-8,10 \cdot 10^{-6}$	$-1,38 \cdot 10^{-5}$	$-1,83 \cdot 10^{-5}$	$-2,11 \cdot 10^{-5}$	$-2,31 \cdot 10^{-5}$
	$a_3$	$2,28 \cdot 10^{-5}$	$2,14 \cdot 10^{-5}$	$2,03 \cdot 10^{-5}$	$1,80 \cdot 10^{-5}$	$1,63 \cdot 10^{-5}$	$1,43 \cdot 10^{-5}$
16,25	$a_0$	$8,94 \cdot 10^{-4}$	$9,10 \cdot 10^{-4}$	$9,26 \cdot 10^{-4}$	$9,41 \cdot 10^{-4}$	$9,55 \cdot 10^{-4}$	$9,67 \cdot 10^{-4}$
	$a_1$	$6,66 \cdot 10^{-4}$	$6,73 \cdot 10^{-4}$	$6,81 \cdot 10^{-4}$	$6,89 \cdot 10^{-4}$	$6,97 \cdot 10^{-4}$	$7,06 \cdot 10^{-4}$
	$a_2$	$-1,23 \cdot 10^{-5}$	$-1,81 \cdot 10^{-5}$	$-2,23 \cdot 10^{-5}$	$-2,48 \cdot 10^{-5}$	$-2,66 \cdot 10^{-5}$	$-2,71 \cdot 10^{-5}$
	$a_3$	$2,42 \cdot 10^{-5}$	$2,27 \cdot 10^{-5}$	$2,03 \cdot 10^{-5}$	$1,83 \cdot 10^{-5}$	$1,60 \cdot 10^{-5}$	$1,45 \cdot 10^{-5}$
18,75	$a_0$	$9,26 \cdot 10^{-4}$	$9,40 \cdot 10^{-4}$	$9,54 \cdot 10^{-4}$	$9,66 \cdot 10^{-4}$	$9,78 \cdot 10^{-4}$	$9,88 \cdot 10^{-4}$
	$a_1$	$6,80 \cdot 10^{-4}$	$6,87 \cdot 10^{-4}$	$6,95 \cdot 10^{-4}$	$7,03 \cdot 10^{-4}$	$7,11 \cdot 10^{-4}$	$7,18 \cdot 10^{-4}$
	$a_2$	$-2,38 \cdot 10^{-5}$	$-2,75 \cdot 10^{-5}$	$-2,99 \cdot 10^{-5}$	$-3,11 \cdot 10^{-5}$	$-3,12 \cdot 10^{-5}$	$-3,12 \cdot 10^{-5}$
	$a_3$	$2,46 \cdot 10^{-5}$	$2,24 \cdot 10^{-5}$	$1,97 \cdot 10^{-5}$	$1,72 \cdot 10^{-5}$	$1,56 \cdot 10^{-5}$	$1,39 \cdot 10^{-5}$

На рис. 2 наведено карти ліній рівня коефіцієнтів  $a_k(n_f, \sigma_{yf})$ , ( $k = \overline{0,3}$ ) у площині  $(n_f, \sigma_{yf})$ .

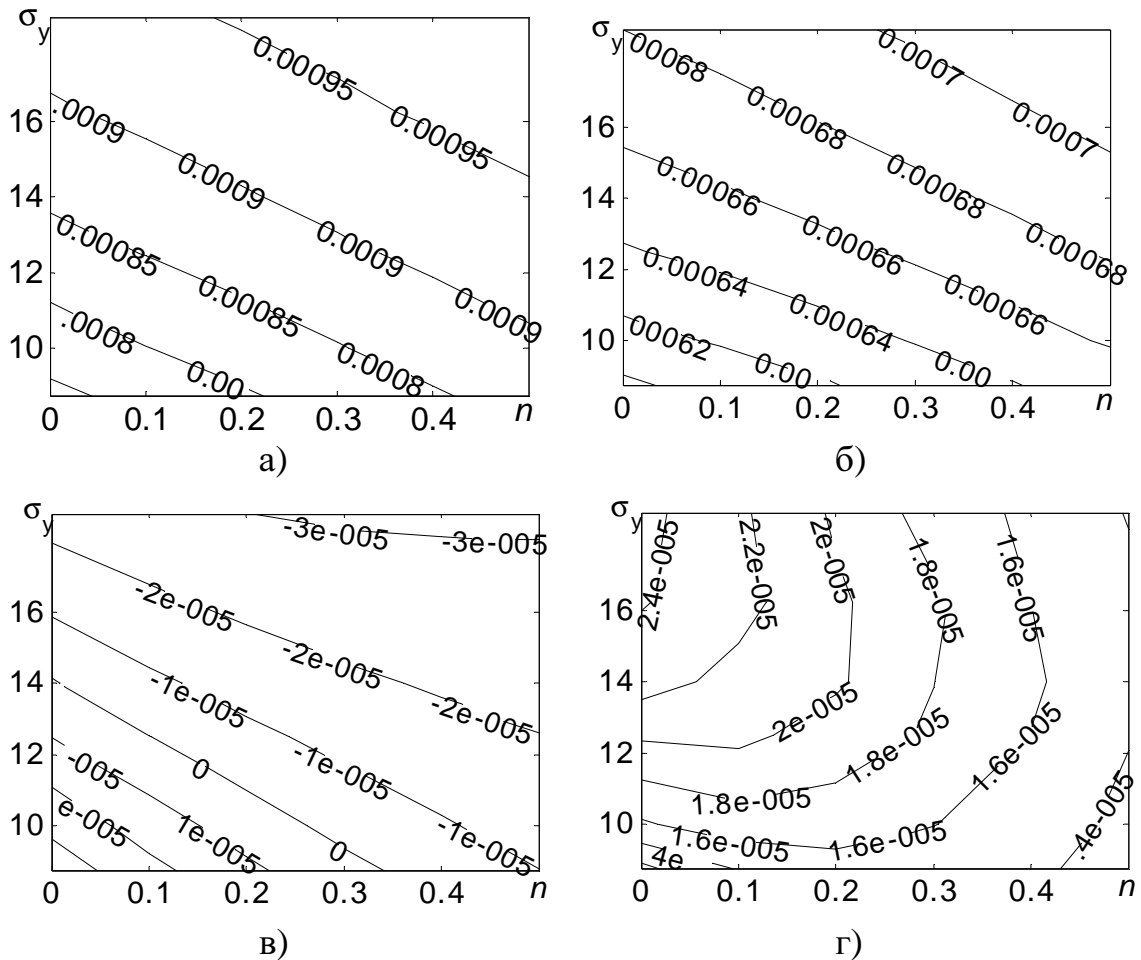


Рисунок 2 – Карти ліній рівня коефіцієнтів  $a_k$  у площині  $(n_f, \sigma_{yf})$ :  
 а)  $a_0(n_f, \sigma_{yf})$ , б)  $a_1(n_f, \sigma_{yf})$ , в)  $a_2(n_f, \sigma_{yf})$ , г)  $a_3(n_f, \sigma_{yf})$ .

За перетином ізоліній можливе наближене визначення пластичних параметрів  $n_f$  та  $\sigma_{yf}$ . Але з рис. 2 можна бачити, що ізолінії для  $a_0$ ,  $a_1$  та  $a_2$  здебільшого майже паралельні, і точне визначення точки перетину ускладнене. Проте достатньо точне визначення точки перетину можливо, наприклад, при використанні функцій  $a_0(n_f, \sigma_{yf})$  та  $a_3(n_f, \sigma_{yf})$ , які є в достатній мірі функціонально незалежними. Саме завдяки функціональній незалежності параметрів апроксимації  $a_k$  є можливим наближене визначення пластичних параметри плівок за даними індентування.

## Висновки

Результати, отримані при чисельному моделюванні процесу пружно-пластичної деформації на прикладі індентування твердої плівки на м'якій підложці показують, що на відміну від однорідного матеріалу, при

індентуванні плівок на підложках конічними або призматичними інденторами можливе визначення пластичних властивостей цих плівок за залежністю сили від переміщення індентора на ділянці навантаження.

У роботі запропоновано методику дослідження поведінки кривих індентування на основі розгляду коефіцієнтів їх апроксимації відрізком ряду по поліномах Лежандра на ділянці навантаження і запропоновано методику ідентифікації пластичних параметрів матеріалу плівки (межі текучості і показника степеневого закону зміцнення) у рамках моделі матеріалу із степеневим зміцненням. Встановлено, що для визначення пластичних властивостей за результатами індентування достатньо використання ряду по поліномах Лежандра до третього степеня включно, в той час як при використанні меншої кількості членів ряду визначення пластичних параметрів практично неможливе, оскільки степінь їх функціональною незалежності виявляється малою.

### **Література**

1. *Oliver W.C., Pharr G.M.* Measurement of Hardness and Elastic Modulus by Instrumented Indentation: Advances in Understanding and Refinements to Methodology //J. Mater. Res.– **19**, No. 1.– 2004.– pp. 3–20.
2. *Chen X., Vlassak J.J.* A Numerical Study on the Measurement of Thin Film Mechanical Properties by means of Nanoindentation //J. Mater. Res. 16 (2001) 2974.
3. *Dao M., Chollacoop N. et al.* Computational Modeling of the Forward and Reverse Problems in Instrumented Sharp Indentation //Acta mater.– **49**.– 2001.– pp. 3899–3918.
4. *Sun Y., Bell T., Zheng S.* Finite element analysis of the critical ratio of coating thickness to indentation depth for coating property measurements by nanoindentation //Thin Solid Films.– 258.– 1995.– pp. 198–204.
5. *Xu Z.-H., Rowcliffe D.* Finite Element Analysis of Substrate Effects on Indentation Behaviour of Thin Films //Thin Solid Films 447–448 (2004).– pp. 399–405.
6. *Bolshakov A., Pharr G.M.* Influences of Pileup on the Measurement of Mechanical Properties by Load and Depth Sensing Indentation Techniques //J. Mater. Res.– **13**, No. 4.– 1998.– pp. 1049–1058.
7. *Cheng Y.-T., Cheng C.-M.* Scaling, dimensional analysis, and indentation measurements // Materials Science and Engineering R 44 (2004) 91–149.
8. *K.-D. Bouzakis, N. Michailidis, G. Erkens* Thin hard coatings stress\_strain curve determination through a FEM supported evaluation of nanoindentation test results // Surface and Coatings Technology 142–144.– 2001.– p. 102–109.
9. *Giannakopoulos A.E., Larsson P.-L.* Analysis of Pyramid Indentation of Pressure-sensitive Hard Metals and Ceramics //Mechanics of Materials.– **25**.– 1997.– p. 1–35.