ПРИМЕНЕНИЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ В ЗАДАЧАХ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТВЕРДОСТИ И ПЛАСТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МЯГКИХ ПЛЕНОК НА ТВЕРДОЙ ПОДЛОЖКЕ ПО ДАННЫМ ИДЕНТИРОВАНИЯ

И.К. Валеева

Ин-т проблем моделирования в энергетике им. Г.Е. Пухова НАН Украины valyeyeva@rambler.ru

Abstract

Valyeyeva I. K., Application of modeling in the problems of hardness and plastic properties determination for soft film on hard substrate from indentation data. Effect of plastic properties of soft films on a hard substrate on loading forse-displacement curves is investigated. The technique for behavior examination of loading curves is proposed.

Введение

Исследование механических свойств материалов представляет интерес в различных областях современной техники: машиностроении, оптике, радиоэлектронике. Одним из современных методов экспериментального исследования свойств материалов является метод наноиндентирования. Он состоит в контролируемом компьютерной системой управлении погружением высокотвердого алмазного индентора в поверхностный слой материала и регистрации зависимости силы P, приложенной к индентору, от глубины h его погружения. При этом твердость материала H определяется как отношение максимального усилия P_{max} к площади проекции области контакта A [1–3]:

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

Модуль Юнга оценивается на основе соотношения

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

полученного на основе аналитического рассмотрения контактной задачи.

Здесь $S = \frac{dP}{dh}$ — контактная жесткость, вычисляемая из наклона начального

участка разгрузочной кривой, а $E_{\it eff}$ — приведенный модуль упругости, который выражается через модули Юнга и коэффициенты Пуассона материала и индентора E, v и E_i , v_i следующим образом:

$$\frac{1}{E_{eff}} = \frac{1 - v^2}{E} + \frac{1 - v_i^2}{E_i} .$$

Поправочный коэффициент β =1 для осесимметричных инденторов, а для инденторов с квадратным или прямоугольным сечением β =1,03–1,05 [1–3].

В настоящее время разработан ряд методов, позволяющих оценивать пластические параметры однородных материалов как в случае малых деформаций [4, 5], так и для больших деформаций, возникающих при внедрении пирамидальных и конических инденторов в исследуемый образец [6]. Кроме того, получены оценки, основанные на конечно-элементном моделировании и методах теории подобия [7].

Известно, что при индентировании однородного материала коническими и пирамидальными инденторами зависимость силы P, прилагаемой к индентору от его перемещения h на этапе нагрузки представляет собой квадратную параболу, коэффициент которой зависит от упругих и пластических свойств образца — модуля Юнга, коэффициента Пуассона, предела текучести и показатель степенного закона упрочнения материала (если предполагается, что поведение материала описывается моделью упругопластического материала со степенным упрочнением) [1]

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

где σ_y — начальный предел текучести, ε_p — нелинейная часть деформации, n — показатель упрочнения.

Однако при индентировании пленок на подложках с отличающимися механическими свойствами на глубину, превышающую критическую [2-4], происходит отклонение нагрузочной кривой от квадратичной зависимости.

В случае, когда производится индентирование пленки на подложке с отличающимися свойствами, зависимость силы приложенной к индентору от глубины погружения уже не является квадратной параболой [5]. Кривая индентирования зависит от механических свойств как пленки, так и подложки. Это обстоятельство позволило разработать ряд методов определения пластических параметров пленок на подложках с известными механическими свойствами.

Интерес представляет решение задачи идентификации пластических параметров пленки — предела текучести и показателя степенного закона упрочнения по данным индентирования при известных упругопластических параметрах материала подложки, известных упругих параметрах материала пленки.

Для этого нагрузочную кривую на отрезке от нуля до некоторого h_0 можно приближенно представить в виде полинома

$$\widetilde{P}_{h}(h) = a_2 h^2 + a_3 h^3 + a_4 h^4$$
 (2)

Вместо того чтобы сравнивать экспериментальную и модельные кривые, и искать среди них кривую, удовлетворяющую условию

$$||P_{\rm exp} - P_{\rm mod}|| \rightarrow \min$$

применим следующий подход: поставим в соответствие каждой модельной кривой $P_{\text{mod}}(h)$ набор j чисел $a_k(n, \sigma_y)$, (k=2,...,j) — коэффициентов полиномиального разложения этой кривой, полученных тем или иным способом. При этом зависимости $a_k(n, \sigma_y)$, (k=2,...,j), можно рассматривать также как функции, зависящие от двух независимых переменных n и σ_v .

В данном случае необходимо идентифицировать два неизвестных пластических параметра материала пленки, поэтому для приближенного определения предела текучести и показателя степенного закона упрочнения можно воспользоваться построением линий уровня в плоскости (n, σ_v) для каждого $a_k(n, \sigma_v)$, (k=2,...,j).

Для приближенного определения пластических параметров материала пленки нужно для экспериментальной кривой таким же образом найти коэффициенты полиномиального разложения (2) a_{k} exp, и по их величине определить соответствующие им линии уровня на плоскости (n, σ_y) (рис. 3). При этом линии уровня, соответствующие различным значениям a_{k} exp, (k=2,...,j), для экспериментальной кривой в плоскости (n, σ_y) будут пересекаться в общем случае вблизи искомого приближенного значения предела текучести σ_y и показателя степенного закона упрочнения n для материала пленки. Именно различие в ориентации полей изолиний дает возможность приближенно оценивать пластические параметры материала пленки.

Постановка задачи

При решении задачи полагалось, что материал конического индентора абсолютно твердый, угол полураствора конуса равен 70,3° (в этом случае получается тоже отношение площади поперечного сечения к расстоянию до вершины, что и для инденторов Берковича и Викерса) [6], а

коэффициент трения между индентором и поверхностью материала — равен нулю. Толщина пленки h_0 полагалась равной 150 нм.

При описании упругопластического поведения материала подложки использовалась модель упругого идеально-пластического материала, а при описании поведения пленки модель упругого идеально-пластического материала и модель упругопластического материала со степенным упрочнением [1], для которого зависимость между напряжениями и деформациями при одноосном растяжении представляется в виде (1).

исследовании При мягких пленок на твердых подложках предполагалось, что материалы пленки и подложки однородные. В качестве материала подложки был выбран карбид кремния [7] с модулем упругости E=450 ГПа, пределом текучести σ_v =12,5 ГПа и коэффициентом Пуассона v=0,16, в качестве материала пленки выбран модельный материал, близкий по свойствам к алюминию [8] с модулем Юнга Е=70 коэффициентом Пуассона v=0,25. В результате численного моделирования был получен ряд модельных кривых, для которых показатель степенного закона упрочнения п материала пленки изменяется от нуля (для упругого идеально-пластического тела) до 0,5 с шагом 0,1, а предел текучести σ_v принимает значения 182,8; 205,65; 228,5; 251,35; 297,05 и 342,75 МПа. Для этих кривых была определена твердость на глубине 150 нм. На рис. 1 построены ее изолинии в ГПа в плоскости изменения n, σ_{v} .

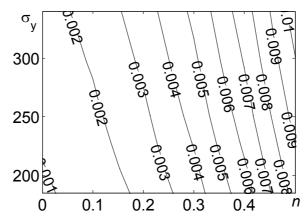


Рис. 1. Изолинии твердости (ГПа) в плоскости (n, σ_v) на глубине 150 нм

Для определения пластических свойств материала пленки нагрузочные кривые (как моделируемые, так и экспериментальные) представляются в виде полинома вида (2). При этом коэффициенты полинома $a_1(n, \sigma_y)$, $a_2(n, \sigma_y)$ и $a_3(n, \sigma_y)$ определяются по следующей схеме:

1) коэффициент $a_1(n, \sigma_y)$ получается путем приближения по методу наименьших квадратов кривой P(h) на участке от нуля до h_1 =0,025 мкм;

- 2) коэффициент $a_2(n, \sigma_y)$ определяется путем аппроксимации на участке от нуля до h_2 =0,05 мкм при фиксированном значении a_1 , полученном на первом шаге;
- 3) коэффициент $a_3(n, \sigma_y)$ определяется из аппроксимации на участке от нуля до h_3 =0,1 мкм при фиксированных значениях a_1 и a_2 , полученных ранее. При вычислениях полагалось, что перемещение индентора измеряется в микронах, а сила, приложенная к индентору в миллиньютонах.

В таблице 1 представлены значения коэффициентов $a_k(n, \sigma_y)$, (k=2, 3, 4), полученные для модельных кривых по вышеприведенной схеме.

Таблица 1. Таблица зависимости коэффициентов a_i от предела текучести и

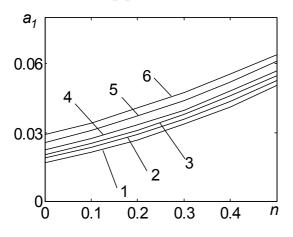
показателя степенного закона упрочнения

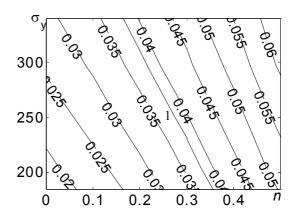
$\sigma_{\!y},$	a_k ,	п							
МПо	MIIa $k=2$ 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0								
IVIIIa	(k=2,	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5		
	3, 4)								
182,8	a_2	0.0169	0.0213	0.0267	0.0333	0.0411	0.0504		
	<i>a</i> ₃	0.0162	0.0406	0.0779	0.133	0.213	0.326		
	a_4	0.0224	0.184	0.551	1.176	2.077	3.175		
205,6	a_2	0.0188	0.0233	0.0290	0.0357	0.0435	0.0527		
5	a_3	0.0190	0.0484	0.0868	0.144	0.227	0.339		
	a ₄	0.0318	0.198	0.6023	1.269	2.188	3.303		
228,5	a ₂	0.0205	0.0252	0.0310	0.0377	0.0458	0.0547		
	a_3	0.0257	0.0546	0.0955	0.157	0.240	0.357		
	<i>a</i> ₄	0.0218	0.231	0.659	1.336	2.289	3.373		
251,3	a_2	0.0223	0.0271	0.0331	0.0398	0.0479	0.0567		
5			2						
	<i>a</i> ₃	0.0296	0.0607	0.104	0.167	0.252	0.368		
	a_4	0.0279	0.258	0.712	1.421	2.384	3.475		
297,0	a_2	0.0258	0.0307	0.0370	0.0439	0.0518	0.0608		

5	a_3	0.0367	0.0730	0.118	0.182	0.272	0.381
	a_4	0.0459	0.313	0.8232	1.608	2.563	3.704
342,7	a_2	0.0289	0.0342	0.0405	0.0472	0.0553	0.0639
5	a_3	0.0466	0.0831	0.1327	0.203	0.291	0.403
	a_4	0.0611	0.385	0.936	1.737	2.726	3.818

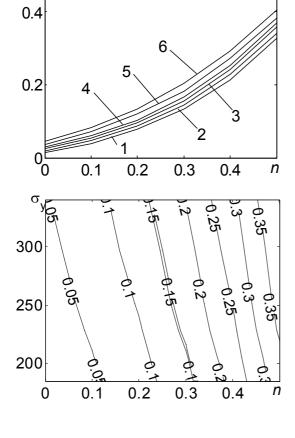
Графики зависимости коэффициентов a_k , (k=2, 3, 4) от показателя упрочнения n для различных значений предела текучести пленки приведены на рис. 2. На рис. 3 представлены карты линий уровня коэффициентов $a_k(n, \sigma_v)$, (k=2, 3, 4) в плоскости (n, σ_v) .

Для оценки работы метода был проведен численный эксперимент, в результате которого была получена зависимость P(h), отвечающая пределу текучести пленки σ_{y1} =255,92 МПа и показателю упрочнения n_1 =0,273 (рис. 3). Для зависимости P(h) методом, описанным выше, получены значения коэффициентов a_{21} , a_{31} , a_{41} (рис. 3).

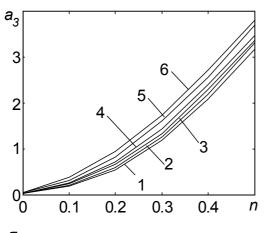


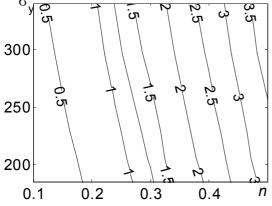






a₂





3

Рис. 2

Графики зависимости коэффициентов a_k от значения n

 $1-\sigma_y=182,8 \text{ M}\Pi a; 2-\sigma_y=205,65$

МПа; $3-\sigma_y$ =228,5 МПа; 4-

 σ_y =251,35 MIIa; 5- σ_y =297,05

МПа; $6-\sigma_y$ =342,75 МПа

Рис. 3

Карты линий уровня коэффициентов a_k в плоскости

 (n, σ_y) , где

 $1-a_{21}$, $2-a_{31}$, $3-a_{41}$

Выводы

Результаты, полученные при численном моделировании процесса упругопластического деформирования на примере индентирования мягкой пленки на твердой подложке, показывают, что в отличие от однородного материала, при индентировании пленок на подложках коническими или призматическими инденторами на глубину, превышающую критическую, возможно определение пластических свойств этих пленок из нагрузочных участков зависимостей силы от перемещения индентора.

В работе предложена методика исследования поведения нагрузочных кривых на основе рассмотрения коэффициентов степенной аппроксимации нагрузочного участка зависимости силы, приложенной к индентору от его перемещения и предложен метод идентификации пластических параметров материала пленки (предела текучести и показателя степенного закона упрочнения) в рамках модели материала со степенным законом упрочнения.

Литература

- 1. *Dao M., Chollacoop N. et al.* Computational Modeling of the Forward and Reverse Problems in Instrumented Sharp Indentation //Acta Materialia 49.–2001.– p. 3899–3918.
- 2. *Chen X., Vlassak J.J.* A Numerical Study on the Measurement of Thin Film Mechanical Properties by means of Nanoindentation //Journal of Materials Research 16.–2001.– p. 2974.
- 3. *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. p. 198–204.
- 4. *Xu Z.-H.*, *Rowcliffe D*. Finite Element Analysis of Substrate Effects on Indentation Behaviour of Thin Films //Thin Solid Films 447–448 (2004).– p. 399–405.
- 5. Cheng Y.-T., Cheng C.-M. Scaling, dimensional analysis, and indentation measurements// Materials Science and Engineering R 44 (2004) 91–149.

- 6. *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.
- 7. *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.
- 8. *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.

Дата надходження до редакції 15.10.2006 р.