

不同晶粒形状材料力学性能的研究

北京航空航天大学机械工程及自动化学院 李刘合 金杰 刘惊涛 梁进智 张彦华

中国原子能科学研究院同位素研究所 于涛

香港城市大学 朱剑豪

摘要 采用有限元的方法来模拟纳米压痕实验的加、卸载过程,采用的是简化的二维模型,有限元模型考虑了纳米压痕的标准 Berkovich 压头,介绍了有限元模型的几何参数、边界条件、材料特性与加载方式。从所得到的载荷与压入深度的关系曲线,以及由此计算而得到的硬度-位移曲线等为依据,对在纳米压痕测试过程中,不同的晶粒截面形状以及截面面积对整体材料的力学性能的影响进行了分析讨论。研究表明,在晶粒截面面积相等的情况下,当纳米压痕实验压入相同的深度时,晶粒的截面形状为矩形的材料的硬度高于晶粒的截面形状为三角形的材料的硬度,而且,当晶粒的截面形状相同的情况下,整体材料的硬度与晶粒截面面积存在一种近似的正比例关系。这种研究结果说明,即使在材料相同的情况下,如果晶粒的截面形状不同,由于力学传递关系的不同,仍然能够使得薄膜具有不同的宏观力学性能。

关键词 纳米压痕 力学性能 有限元分析

1 引言

材料的宏观力学特性,是由其微观结构决定的。对于薄膜材料,特别是用于保护层的薄膜材料,由于膜层厚度方向包含的晶粒有限,有时甚至是单层晶粒,受载荷后,膜层凹陷变形相对于膜层厚度足够大,因此,晶粒形状、种类、排布也极可能会对薄膜材料力学性能产生很大的影响。因此,除了考虑到晶粒细化之后,其尺寸效应、结构缺陷等对晶粒的宏观力学性能的影响之外,晶粒形状通常在薄膜的宏观力学性能中起着重要的作用^[1-3]。但是,由于直接进行微观尺寸晶粒的观察比较困难,尤其是纳米晶粒,晶粒本身力学性能的特征十分困难,其表征方法也正处于研究阶段。因此,前人在对纳米晶粒形状对材料本身力学性能的影响方面所做的工作还很少,本文试图从纯力学的角度,分析同种材料下,两种不同截面形状的晶粒对材料的宏观力学性能的影响。

由于薄膜尺寸非常薄,薄膜的力学性能评定方法有限,其中,最常用、最可靠的方法应该是纳米压痕技术。纳米压痕技术是通过压头对材料表面加载,然后测出压痕区域,以此来评价材料力学性能。前人的工作表明^[4-7],有限元方法可以有效模拟出纳米压痕

技术的压入结果。因此,本文拟采用有限元方法对两种不同截面形状的理想晶粒排布的 TiN 膜进行纳米压入过程中晶粒应力应变分布情况分析,并采用有限元模拟方法,得出不同截面晶粒形状下晶粒的纳米压入的位移-载荷曲线和硬度-位移曲线,从理论上获得了两种膜层的宏观硬度值。进而讨论不同截面形状晶粒对薄膜宏观硬度的影响,并试图获得影响规律。

2 FEM 有限元模拟

2.1 问题简化及模型的建立

在纳米压痕过程中,压痕附近材料将产生局部的大塑性变形,并且压头和材料间存在接触问题,因此,这是一个既具有物理非线性、几何非线性又具有边界条件非线性的三重非线性的复杂问题^[7]。且压头形状不同,所引起的接触问题也不一样。本文所讨论的晶粒对力学性能的影响,模拟采用常用的 Berkovich 压头。Berkovich 压头是三棱锥,使用圆锥压头的剖面图显得清晰且不影响该问题的说明,其形状如图 1 所示。纳米压痕测试是一个非常局部的材料测试方法,按照圣维南原理,被测材料中的应力和应变只是集中在压痕附近的区域里,远处的应力和应变趋近于 0。在有

限元建模时,可以只取局部材料。即模型中的材料尺寸比实际试验中的小,这样可以减少模型的单元数目,缩短计算时间^[4]。

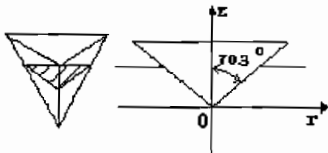


图1 Berkovich压头形状示意图

Berkovich压头是个三维空间体,故从理论上这是个三维模拟计算问题,但由于二维计算相对三维计算要简单和经济的多,而且晶粒本身的堆积非常复杂,本文只能给出晶粒形状对力学性能的一些定性的信息,为了简便运算,假定各个晶粒在长度方向上无限长,这样就把耗时的三维计算简化为平面应变的二维计算问题。根据有限元的原理,如果是短晶粒(如轴向对称短晶粒),结果将会大于本文所计算出来的结果,只是,由于精确计算本来就非常困难,二维的简化并不影响晶粒形状对力学性能的改变的整体趋势,所以本文给出的这个二维的定性分析仍然是有意义的。

图2是纳米压痕的有限元模型,当圆锥的半锥角是70.3°时,圆锥的截面积和实际情况最接近^[2]。本文考虑了压头的钝化问题,取其前端半径为50nm,如图3所示^[5]。图2为划分了网格的实体。

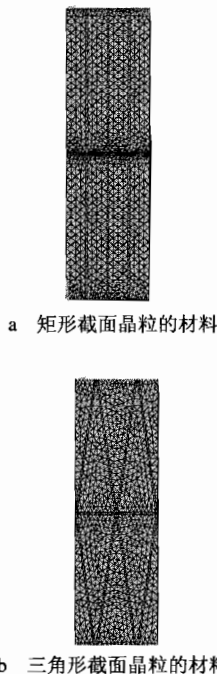


图2 纳米压痕的有限元模型

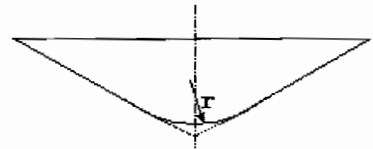


图3 压头钝化后的示意图

2.2 模型材料

为了研究晶粒形状对材料力学性能的影响,本文对矩形截面和三角形截面两种理想晶粒形状的材料进行了纳米压痕试验的有限元模拟。模拟时采用的是两种晶粒的截面面积相等的理想样品。晶粒的截面面积 S 分别为 750nm^2 、 1000nm^2 、 500nm^2 、 3000nm^2 ,晶粒截面的高度都为 50nm ,晶界截面面积为 50nm^2 ,最终的压入深度也均为 10nm 。

在纳米压痕问题中总共有两个模型:压头和被测材料。为了使问题进一步简化,模拟中假定压头是刚性的,而被研究的材料的晶粒和晶界分别作为各向同性的均质弹塑性连续体,并且遵循 Von Mises 屈服条件,材料屈服后具有线性硬化系数,晶粒的材料属性可以取同种普通晶体的材料属性,晶界的泊松比和晶粒的相同,不过由于晶界的弹性模量和屈服应力通常比晶粒的低,所以本文取晶粒的弹性模量和屈服应力的70%。矩形截面晶粒和三角形截面晶粒的截面如图4所示,材料属性见表1。另外,实际的试验过程中加、卸载速度比较慢,所以可以看作是准静态过程。

表1 有限元分析中晶粒与晶界的弹塑性性能参数

膜基体系	杨氏模量 E/GPa	泊松比 ν	屈服应力 σ_y/GPa
晶粒	616	0.25	50
晶界	420	0.25	35

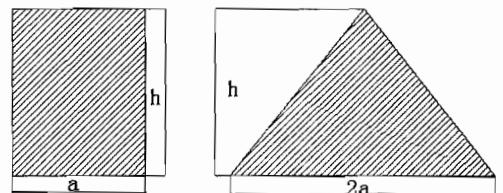


图4 矩形截面和三角形截面晶粒的截面示意图

2.3 边界条件

边界条件为:试件底面在一个支撑面上;沿对称轴的所有节点的水平位移为零;压头只有向下的一个自由度。

2.4 模拟时的加载方式

模拟时的加载方式有两种：力和强制位移。经过两种方式的加载模拟比较证实，力加载和强制位移加载得到的载荷-位移曲线完全一致，本文采用强制位移的方法。

3 结果与讨论

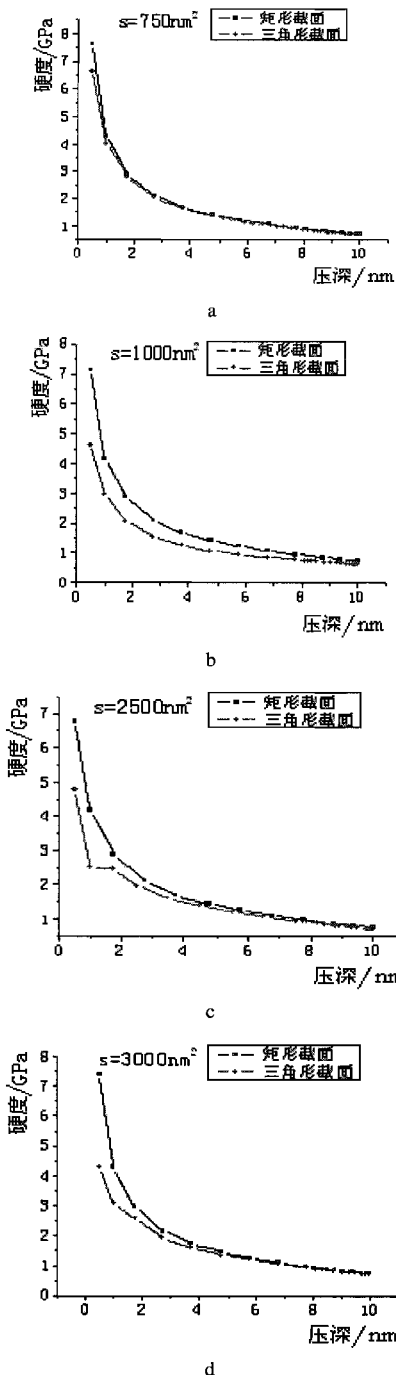


图5 相同截面面积的矩形截面晶粒和三角形截面晶粒的硬度-位移曲线

图5给出了两种不同晶粒界面形状下，当两种晶粒形状的面积相同时，改变两个晶粒截面面积的情况下，用有限元方法模拟出的两种截面晶粒的材料在最大压入深度都为10nm时的硬度-位移曲线。

从图中可以得出，在压入相同的深度时，对于两种截面面积相等的晶粒材料，矩形截面晶粒材料的整体硬度大于三角形截面晶粒材料的整体硬度。这表示截面面积相等的矩形截面晶粒抵抗变形的能力高于三角形截面的晶粒。

图6、图7分别是用有限元模拟得到的不同截面面积的矩形截面和三角形截面的晶粒材料在纳米压痕过程中的载荷-位移曲线和硬度-位移曲线，从图中可以很清楚地看到，随着截面面积的增大，材料的硬度值呈上升的趋势，这表示晶粒截面面积的增大加强了材料抵抗变形的能力。材料的硬度与晶粒截面的面积存在一定的正比例关系。但是这种关系并不是线性的，当晶粒的截面面积从 250 nm^2 变成 500 nm^2 时，对硬度的影响要比截面面积从 2500 nm^2 至 3000 nm^2 时对硬度影响要大的多。当横截面面积接近于 3000 nm^2 时，其硬度值增大到一个极限值。以上分析表明，当考虑材料晶粒的形状时，薄膜材料的纳米探头硬度值不仅与晶粒晶界的材料属性有关，而且还与晶粒截面面积的大小有关。当晶粒的面积较小时，晶界对材料力学性能的影响较大，随着晶粒的面积不断增大，晶界对材料力学性能的影响逐渐减小，当晶粒的面积增大到足够大时，材料的力学性能就只由晶粒决定。

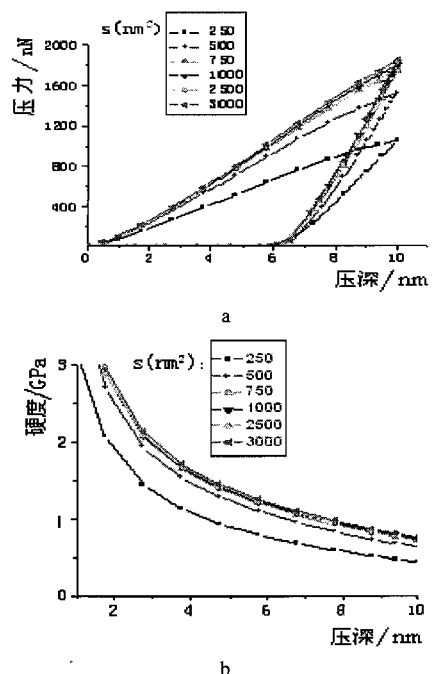


图6 不同截面面积的矩形截面晶粒材料的关系曲线

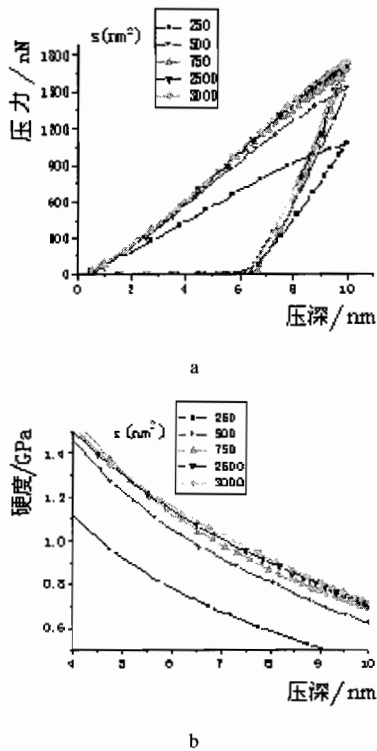


图7 不同截面面积的三角形截面晶粒材料的关系曲线

4 结论

当晶粒的形状不同时,即使材料相同,由于力学传递关系的不同,仍然能够使得薄膜具有不同的宏观力学性能。

a. 纳米压痕试验中,在相同的压入深度,矩形截面晶粒材料的硬度值比三角形截面晶粒材料的硬度

值大,也就是说矩形截面晶粒材料的力学性能较好;

b. 当晶粒截面形状也相同时,材料的硬度值与截面面积存在近似的正比例关系;

c. 晶粒的面积越大,材料的力学性能受晶界的影响就越小,晶粒的面积大到一定程度时,晶界的影响就可以忽略。

参考文献

- 1 刘扬, 陈定方. 基于纳米压痕技术和有限元仿真的材料力学性能分析[J]. 武汉理工大学学报, 2003, 27(5): 690~693
- 2 李河清, 蔡珣, 陈秋龙. 纳米压入技术表征薄膜(涂层)的力学性能[J]. 材料热处理学报, 2001, 22(4)
- 3 高鹏. 纳米压痕技术及其应用[J]. 中国机械工程. 1996, 7(5): 58~69
- 4 Oliver WC, Pharr GM. An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiment. J Mater Res, 1992, 7(6): 1546~1583
- 5 李敏, 梁乃刚, 张泰华, 王林栋. 纳米压痕实验的三维有限元数值模拟研究[J]. 力学学报, 2003, 35(3): 257~264
- 6 李河清, 蔡珣, 马峰, 陈秋龙. 新的薄膜本征硬度和复合硬度关系模型[J]. 中国有色金属学报, 2001, 2(2): 217~220
- 7 蔡珣, 周平南, 杨晓豫. 薄膜材料微观力学行为的有限元分析[J]. 应用力学学报, 1998, 15(2): 62~66.

作者简介



李刘合(1970-), 男, 材料学工学博士; 研究方向: 等离子体表面改性以及等离子体加工等。

(上接第10页)

- 7 P.Perrier, M.Rapuc, P.Rostand, R.Hallard, D.Regard, A.Dufour, O.Penanhoat. Nozzle and afterbody design for hypersonic airbreathing vehicles. AIAA-96-4548
- 8 M.Bouchez, F. Falempin. French-Russian partnership on hypersonic wide range ramjets: status in 2001. AIAA-2001-1872
- 9 L.Serre, F. Falempin. PROMETHEE the French military hypersonic propulsion program: status in 2002. AIAA-2003-6950
- 10 F. Falempin, L.Serre. LEA flight test program: status in 2004. AIAA-2004-3344
- 11 F. Falempin. MBDA advanced propulsion studies. Military Aerospace Conference, October 2003, London, England

- 12 F. Falempin, L.Serre. LEA flight test program: status in 2004. AIAA-2004-3344
- 13 F. Falempin, T.Salmon, V. Avrashkov. Fuel cooled composite materials structures status at Aerospatiale MATRA. AIAA-2000-3343

作者简介

郑日恒, 湖北人。博士, 研究员。1984年获得北京航空航天大学航空发动机专业学士学位。1987年获得航空航天部航空发动机专业硕士学位。1997年11月获得剑桥大学博士学位; 研究方向: 冲压发动机技术。