

# 基于 FEFG 的显微硬度实验的数值模拟

成广庆 李林安

(天津大学力学系 天津 300072)

**摘要** 采用 FEFG 有限元程序自动生成系统模拟了膜基组件的微硬度测量过程, 得到了压头与膜体间存在摩擦时的组件变形, 塑性区和接触压力分布。

**关键词** 显微硬度; 薄膜; 有限元; FEFG

## 1 引言

### 1.1 基本方程

材料表面改性和薄膜材料是近年来材料科学的一个重要发展新方向。由于薄膜一般很薄, 仅为  $\mu\text{m}$  数量级, 且存在膜、界面和基底之间的交互作用, 这就给它的评价方法大大增添了难度。以薄膜重要的力学性能测试为例, 衡量薄膜的力学特性不能采用块状材料试验中的拉伸、冲击等方法, 目前公认的一种超显微硬度测试技术或纳米压入技术是近年来发展起来的一种测试分析新技术。由于测试负荷低、压痕尺寸小, 且作为扫描电子显微镜的附加装置与电镜联用, 可充分利用电镜放大倍数大, 分辨率高的特点, 其定位和测量精度均很高。在研究薄膜材料、微观质点和微区域的力学行为上很具有特色。

自从有限元方法发明以来这一方法已经逐渐成熟, 并在越来越多的领域中得到应用, 有限元程序自动生成系统 (FEFG) 是我国自行开发的一款国产有限元软件, 它的主要特点是通过 FEFG 可以生成有限元计算的 fortran 程序, 省去了自行编程的体力劳动, 并且可以修改程序, 生成符合自己要求的有限元程序, 很适合科研计算和特定问题的研究。

随着计算机科学技术的发展, 计算机模拟技术在材料科学与工程中的应用也越来越广泛。本文主要介绍 FEFG 系统在对超显微硬度测试压入过程模拟中的应用。

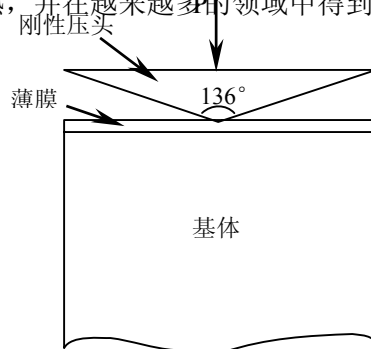


图 1 简化模型

## 2 计算简化模型

在量测膜基组件微硬度时, 一般采用维氏压头, 维氏压头呈四棱锥形, 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，为了节省计算时间和便于比较，本文采用了相当于维氏硬度压头夹角的  $136^\circ$  楔形压头来简化，如图 1。膜基之间为理想粘结界面。对图 1 问题采用平面应变弹塑性有限元模型。

### 3 数值模拟方案

#### 3.1 材料的选择

模型中我们选择了 HSS 作为基体材料，膜材料分别选择了 TiN 和 Al 两种材料，分别组成膜硬基软和膜软基硬两种膜基组件，这里假定三种材料都是双线性弹塑性材料，材料参数见表 1。

表 1 材料参数

材料名称	Al	TiN	HSS
杨氏模量 E (GPa)	75.9	616	218
泊桑比 $\nu$	0.33	0.25	0.3
屈服应力 $\sigma_s$ (Mpa)	485	4000	1600
强化系数	0.35	50	31.45

#### 3.2 接触边界的处理

在有限元数值模拟的过程中，压头与膜基组件之间的接触边界存在摩擦，摩擦系数为 0.3，压头通过位移的控制来加载，随着载荷的增加，接触边界要向外扩展，对边界和边界条件要进行实时跟踪修正。

#### 3.3 有限元模型

计算方法采用多次迭代的位移增量法，建模中压头假定为刚性的，膜和基体假定为各向同性的均质弹塑性连续体，遵循 Mises 屈服条件，材料屈服后具有线性强化系数，Al 膜 HSS 基体采用了三角形单元，在压头下网格加密，共有 590 个单元，330 个结点。TiN 膜 HSS 基体采用了四边形单元，压头下网格加密，共有 484 个单元，525 个结点。

### 4 程序修改

FEPG 有限元自动生成系统解决弹塑性问题的流程图如图 2。PRG 元件程序用于产生有限元程序所需的全部数据。START 元件程序给出每个节点的各个自由度与

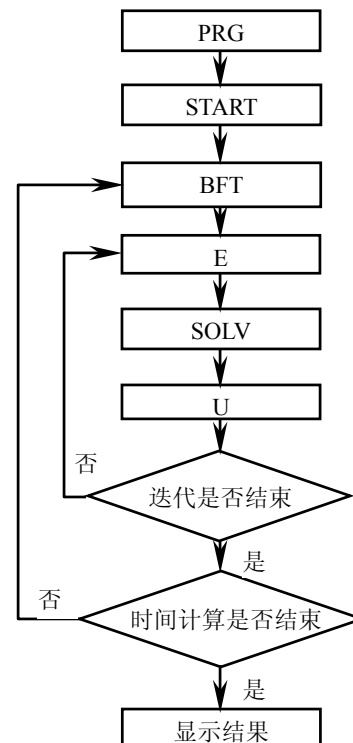


图 2 弹塑性问题流程图

将来要形成的代数方程组的变量的对应关系，以及解的初值。BFT 元件程序给出每一时刻指定节点位移和荷载。E 元件程序用于计算单刚，单质和单元荷载等，并把它们由节点各自由度表示转换成由代数方程组的变量表示，处理边界条件，形成代数方程组的右端项。SOLV 求解器由于迭加形成总体刚度矩阵以及求解线性代数方程组。U 元件程序用于把求解器求出的变量位移转换为节点各自由度的位移和其他的后处理计算。

#### 4.1 接触边界的修改

FEFG 生成有限元程序后，不能直接解决动态边界的问题，并且计算的位移结果是增量位移。因此，首先修改 NFE 文件或 U 元件文件，累加每一加载步的增量位移，计算出总位移；然后修改 BFT 文件，读出上一步的位移，判断压头是否与膜接触，再修改其中的 bound 子程序，并重新生成 nv 文件来解决边界随时间改变和边界条件随时间改变的问题。

#### 4.2 摩擦的修改

在 BFT 中我们通过读入上一步的应力值来判断接触面上的摩擦是动摩擦还是静摩擦，当是静摩擦时，通过改变边界条件为指定位移来实现“锁死”，当是动摩擦时通过指定边界条件为边界力来实现添加摩擦力。

### 5 计算结果

由于薄膜系统的结构和尺寸的特点，在压入的过程中，随着压入深度（负荷）的逐渐增加，基底和界面层的应力和应力场将与膜层发生交互作用，其影响也逐渐增大。下面我们来看看软膜硬基底和硬膜软基底两种模型的计算结果。在 Al 膜 HSS 基底的模型中，随着压头压下量的增大，压头下的材料受到压头的挤压向压头的两边流动，出现了隆起，而基底的变形很小，当压头压下量达到一定程度时，由于受到基底的约束，塑性区不在向下扩展，而是开始沿着交界面扩展，此时测量的薄膜硬度中基底的影响很小。在 TiN 膜 HSS 基底的模型

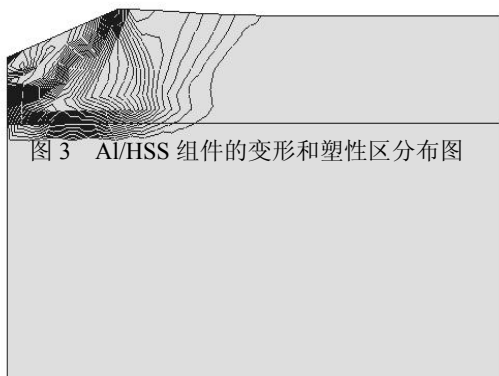


图3 Al/HSS 组件的变形和塑性区分布图

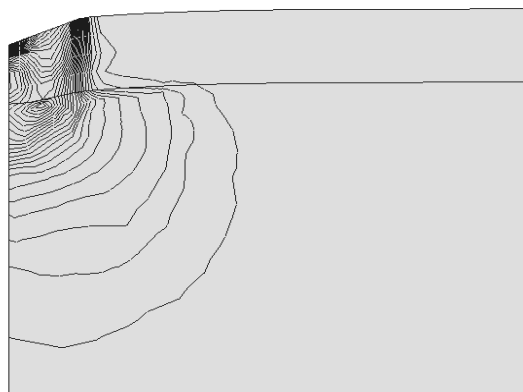


图4 TiN/HSS 组件的变形和塑性区分布图

中，随着压头压下量的增大，由于膜层的刚度较大，所以膜层并未出现软膜一样的膜层材料向压头两侧流动，而是继续向下移动，压迫基底变形，当压下量较大时，基底材料率先进

入塑性，此时测得的薄膜硬度应该是包含基底的影响在内了，不再是薄膜本身的硬度了；随着压下量的增大，膜层进入塑性，同时基底的塑性区沿着交接面移动。这些模拟的变形都与实际情况一致。

计算机模拟不仅可以动态的显示薄膜材料超显微硬度实验的全过程，而且可提供实验方法无法提供的压痕周围薄膜材料本身以及膜与基底之间界面处应力、应变场的大小和分布，压头下方材料塑性区的大小和形状等信息。依据模拟计算所得的压痕周围应力、应变场的大小和形状等信息，对显微硬度实验测试中基底材料的影响有了一个直观的了解，在软膜硬基底构件中，由于压头下的塑性区主要是在膜层中，并沿着交界面扩展，所以压入深度可以大一些；在硬膜软基底的构件中，由于压头下的塑性区很快就扩展到了基底中，所以压入的深度不能太大，否则测得的薄膜硬度的结果将有基底的影响在内。

FEPG 有限元自动生成系统在显微硬度压入实验计算模拟中充分体现了自身的特点，即可以修改源程序，得到符合使用者实际要求的程序，又建立了接近压入实验实际情况的计算模型，得到了满意的结果。

### 参 考 文 献

- [1] A.Wagendristel, 黄荣芳等, Ti-N 多层膜的显微结构和压痕行为, 金属学报, 2000, 28 (7): 316
- [2] 蔡 xun, 周平南, 显微硬度实验的计算机模拟, 金属学报, 1993, 31 (1): 44。
- [3] 黄建明, 杨卫, 膜基组件微硬度量测的数值模拟, 固体力学学报, 1990, 17 (2): 130。
- [4] FEPG4.0 使用说明书, 北京火箭软件有限公司, 2002。

## Numerical Simulation of Microhardness Testing Based on FEPG

Cheng guangqing Li linan

Mechanics Department of Tianjin Universty Tianjin 300072

**Abstract** FEPG is used to simulate the process of microhardness measurement of the film-substrate components. The simulation illustrates the deformation, plastic zone and the pressure distribution in contact zone. The friction is considered in this simulation.

**Keywords** Microhardness, Film, FEM, FEPG