

带玻璃衬垫的硅泡沫薄膜压痕理论的 近似解析与数值研究

范天佑¹⁾ 范 蕾²⁾ Y. W. Mai³⁾

1) 北京理工大学理学院, 北京 100081)

2) 北京理工大学生命科学学院, 北京 100081)

3) Centre for Advanced Materials Technology, University of Sydney, Sydney 2006, Australia)

(2009 年 1 月 16 日收到, 2009 年 5 月 5 日收到修改稿)

基于弹性和多胞/泡沫固体理论, 用近似解析和数值方法研究了带玻璃衬垫的硅多胞/泡沫薄膜压痕问题. 研究的重点在于考察接触区的压力分布和压痕临界深度 ϵ_c , 并将计算得到的理论结果与实验结果进行了对比, 两者基本一致. 为了对这类薄膜结构系统完整性作合理的评估, 分析了多胞/泡沫材料变形和破损机理, 由此提出了压痕能概念并给出了相应的解析表达式.

关键词: 薄膜, 材料试验, 固体的力学性质

PACC: 6770, 8170, 6220

1. 引 言

Toivola 等^[1]讨论了包括光子晶体、传感器、催化剂、催化支撑、吸附剂、生物活性材料、药物释放的主体材料以及电池材料等有序多胞/泡沫材料的对称结构的重要意义, 这些材料在文献 [2—7] 中均有报道. 为使用上述这些材料加工器件, 发挥它们在光学、电学、化学和输运性质方面的优势, 泡沫必须具有适当的力学完整性. 在研究多胞/泡沫材料的力学性能方面, 深度敏感压痕 (depth-sensing indentation, 简记为 DSI) 是一个有效的方法, 它可以刻画有序多胞/泡沫材料的力学完整性.

DSI 已经应用于微电子、微机电系统和磁储存器等的薄膜-衬垫系统, 其中薄膜的性质 (模量、硬度、韧性) 是人们感兴趣的, 它们可以在薄膜 (小体积) 长度范围内得以测量^[8,9]. 此外, 碳纳米管 (CNTs) 在刚度、强度和韧性的高增强性能方面富有吸引力. 对各种 CNTs^[10,11] 的新型力学性能测试表明, CNTs 具有很高的弹性模量. 在某些材料和结构的性能测试方面, DSI 也是有效的工具, 国内研究者近来也开展了相关课题的研究^[12,13].

虽然实验工作提供了若干观测结果的定性描述, 但缺乏定量的分析. 这种分析应基于弹性^[14]或

多胞/泡沫材料塑性^[15]的接触理论, 本文试图对此作一初步讨论.

2. 理论分析与结果

多胞/泡沫薄膜-衬垫系统压痕试验及加载方式如图 1 所示, 其中多胞/泡沫材料由圆形胞规则地周期排列组成, 但下面的讨论对其他几何的胞结构 (如三角形胞、四角形胞、六角形胞多胞/泡沫材料) 也适合. 在图 1 中, H_1 为薄膜的厚度, H_2 为衬垫的厚度. 假设使用 Berkovich 压头, 作用在压头底部的合面力用 Q 表示. 显然多胞/泡沫薄膜与衬垫的力学性能不同, 它们的弹性模量和泊松系数分别用 E_k 和 ν_k ($k = 1, 2$) 表示, 相应的位移和应力用 $u_i^{(k)}$ 和 $\sigma_{ij}^{(k)}$ ($k = 1, 2; i, j = 1, 2$) 表示, 其中 $u_i^{(k)}$ 与 $\sigma_{ij}^{(k)}$ 之间的关系可以通过广义胡克定律得到. 下面使用直角坐标系, 记 $x_1 = x, x_2 = y$.

图 2 表示压头与试样的力学和几何关系. 此关系在二维近似模型中是一个具有如下八个边界条件的边值问题:

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{(1)}(x, 0) &= 0 & (|x| > a), \\ u_y^{(1)}(x, 0) &= f(x) & (|x| < a); \end{aligned} \quad (1)$$

对于 $-\infty < x < \infty$ 情形, 有

$$\sigma_{xy}^{(1)}(x, 0) = 0, \quad (2)$$

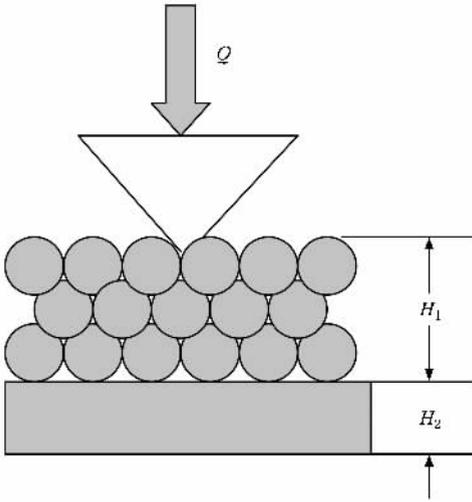


图 1 泡沫-衬垫系统压痕试验加载示意图

$$\sigma_{yy}^{(2)}(x, H) = 0, \tag{3}$$

$$u_y^{(2)}(x, H) = 0, \tag{4}$$

$$\sigma_{yy}^{(1)}(x, H_1) = \sigma_{yy}^{(2)}(x, H_1), \tag{5}$$

$$\sigma_{xy}^{(1)}(x, H_1) = \sigma_{xy}^{(2)}(x, H_1), \tag{6}$$

$$u_x^{(1)}(x, H_1) = u_x^{(2)}(x, H_1), \tag{7}$$

$$u_y^{(1)}(x, H_1) = u_y^{(2)}(x, H_1). \tag{8}$$

显然合力 Q 并不直接出现在边界条件中, 而 $H = H_1 + H_2$. 这里 a 代表压头-薄膜接触区范围, $f(x)$ 为接触位移函数, $f(x)$ 可由由实验测量得到.

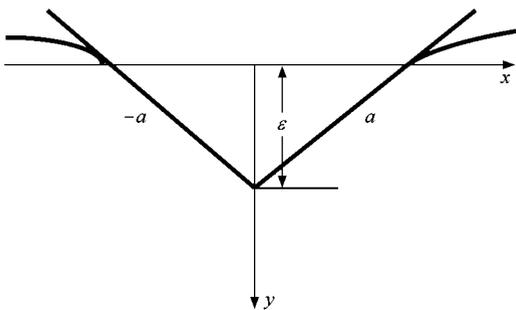


图 2 压痕响应示意图

定量分析必须求解薄膜区和衬垫区中两个双调和方程在边界条件(1)–(8)式下的边值问题.

傅里叶变换是求解上述问题的一种方法. 经傅里叶变换后, 边值问题可转化成确定下列八个未知参量: $A_k(\xi), B_k(\xi), C_k(\xi), D_k(\xi) (k = 1, 2)$. 经过推导它们又转化成七个代数方程组和一对对偶积分方程, 其中 ξ 代表傅里叶变换参量. 上述代数

方程组使得八个未知参量中的七个可由另外一个(如 $B_1(\xi)$)表示, 而它满足所谓的对偶积分方程. 此对偶积分方程需要化成单个 Fredholm 积分方程去求解, 就必须使用数值方法计算. 由于篇幅的限制, 以下仅讨论一简单情形, 并且忽略计算细节.

考虑 Berkovich 压头并且接触区的位移取为

$$f(x) = \begin{cases} -(\epsilon/a)x + \epsilon & (0 < x < a), \\ (\epsilon/a)x + \epsilon & (-a < x < 0), \end{cases} \tag{9}$$

我们可以得到接触压力的近似解为

$$\begin{aligned} p(x) &= -\sigma_{yy}(x, 0) \\ &= \frac{\epsilon}{H_1} \frac{E_1}{1 - \nu_1^2} \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right) \quad (|x| < a), \end{aligned} \tag{10}$$

$$\sigma_{yy}(x, 0) = 0 \quad (|x| > a).$$

(10)式之所以为近似解, 是因为这里仅取了级数的前两项. 严格而言, 该解应为一合流超几何级数, 具有无穷多项. 由于(10)式形式简单, 并且包含了刻画试样构型和材料性能的参量, 因而具有一定意义, 其中压痕深度 ϵ 更具有重要意义.

按照多胞/泡沫固体理论^[15], 对于这种宏观上已经不连续的材料, 为简单起见, 可以采用等价的连续介质模型进行描述, 为此提出了各种等价的连续本构模型. 针对本文的情形, 广义胡克定律仍然成立, 只是其弹性模量 E_1 与多胞/泡沫材料结构和材质有关, 可以近似地表示为

$$E_1 = E_s \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^2, \tag{11}$$

式中 ρ 为泡沫材料的密度, ρ_s 和 E_s 为多胞/泡沫材料胞壁的质量密度和弹性模量, ρ/ρ_s 称为多胞/泡沫材料的相对密度. 对于二维多胞/泡沫材料, 相对密度 ρ/ρ_s 是胞的形状和尺寸的函数. 针对规则的周期排列胞, 有如下近似估计:

$$\frac{\rho}{\rho_s} = \alpha \left(\frac{t}{L} \right), \tag{12}$$

式中 α 代表胞的几何形状因子, 对几类简单几何形状的胞, 例如对四方形、六方形、三角形和圆形胞分别有 $\alpha = 2, 2\sqrt{3}, 2\sqrt{3}$ 和 $\pi/4\sqrt{2}$. (12)式中 t 为胞壁的厚度, 对于多角形胞, $L = l$, 其中 l 是胞的边长^[15, 16], 而对于圆形胞 $L = R_0$, 其中 R_0 是圆形胞的外半径^[1].

多胞/泡沫材料压痕实验的目的在于寻求刻画材料性能的参量, 而 ϵ 的临界值可能是这种参量之一, 此临界值的确定需要探索材料的变形机理.

Toivola 等^[1]指出,主导多胞/泡沫材料压痕变形的机理是胞壁的损伤和接下来发生胞的坍塌,他们强调该机理是非弹性和非体积守恒的变形.

导致破损的原因可能是胞壁屈曲(压缩失稳)或塑性坍塌,也可能是裂纹扩展等原因.我们初步分析认为,塑性坍塌的可能性较大,下面的计算针对圆形胞进行,目的是便于与实验结果进行对比.(10)式表明,在压痕顶端,亦即 $x = 0, y = 0$ 处,接触压力达到其最大值

$$(\rho(x))_{\max} = \frac{E_1 \epsilon}{(1 - \nu_1^2) H_1} \quad (10)$$

胞壁的破坏往往从这里开始.由于胞的尺寸很小,不妨认为靠近这点的胞壁上的压力近似为一常数 q .根据简单计算和塑性理论的 von Mises 屈服判据,我们可以确定圆形胞多胞/泡沫材料塑性破坏的临界压力

$$q_c = \frac{R_0^2 - R_i^2}{2\sqrt{1 - \nu_1} R_0^2} \sigma_{cs} \quad (13)$$

式中, R_0 和 R_i 为胞壁的外半径和内半径, ν_1 为多胞/泡沫材料的泊松系数, σ_{cs} 代表多胞/泡沫材料初始压缩屈服极限,为一材料常数.

假定 $q_c = (\rho(x))_{\max}$, 得到

$$\epsilon_c = \frac{H_1(1 - \nu_1^2)}{E_1} \left(\frac{R_0^2 - R_i^2}{2\sqrt{1 - \nu_1} R_0^2} \sigma_{cs} \right) \quad (14)$$

这样,压痕临界深度得以确定.

根据文献[1]中给出的实验数据 $H_1 = 2.7 - 3.8 \mu\text{m}$, $R_0 = 299 - 496 \text{ nm}$, $R_i = 248 - 426 \text{ nm}$, $\rho/\rho_s = 0.24 - 0.18$, $E_1 = 3 \text{ GPa}$ 和 Gibson 与 Ashby^[15]给出硅的数据 $\nu_1 = 0.33$, $\sigma_{cs} = 2000 - 3500 \text{ MN/m}^2$, 可以计算

出压痕临界深度.有趣的是, ϵ_c 理论计算值与文献[1]的实验测量值一致(文献[1]中 ϵ_c 记为 h_c).由于实验测量是三维的,而本文中用了二维近似,因此理论值比实验值要小一些.

上述对破坏机理的分析具有局域特征,而局域特征会导致涨落,若能把局域破裂与整体失稳相结合进行研究则更好.所以,更有意义的是压痕能 U , 它定义为

$$U = 2 \int_0^a \frac{1}{2} \rho(x) \rho(x) dx \quad (15)$$

把上述结果代入(15)式可得

$$U = \frac{5}{12} \frac{a}{H} \epsilon^2 \frac{E}{1 - \nu^2} \quad (16)$$

压痕能 U 的物理意义清晰且形式简单,其实验标定也较容易.根据它的临界值就可以确定 ϵ 的临界值.因此,我们建议将压痕能 U 作为刻画多胞/泡沫薄膜力学性能对压痕响应的一个参量.

3. 结 论

基于弹性和多胞/泡沫固体理论,本文用解析和数值方法研究了带玻璃衬垫的硅泡沫薄膜压痕问题,得到的近似解析结果与实验结果基本一致.依据所得结果,我们认为用压痕能分析多胞/泡沫材料变形和破损机理更有意义,并给出了相应的解析表达式.

本文的分析对于其他形状胞的多胞/泡沫材料也适用,只是需将(13)(14)式予以更换.

[1] Toivola Y, Stein A, Cook R F 2004 *J. Mater. Res.* **19** 261
 [2] Stein A 2001 *Micropor. Mesopor. Mater.* **44-45** 227
 [3] Holland B T, Blanford C F, Do T, Stein A 1999 *Chem. Mater.* **11** 795
 [4] Yan H, Blanford D F, Lytle J C, Carter C B, Smyrl W H, Stein A 2001 *Chem. Mater.* **13** 4314
 [5] Yan H, Blanford D F, Holland B T C B, Smyrl W H, Stein A 2000 *Chem. Mater.* **12** 1134
 [6] Schroden R C, Al-Daous M, Blanford D F, Stein A 2002 *Chem. Mater.* **14** 3305
 [7] Schroden R C, Al-Daous M, Sokolov S, Melde B J, Lytle J C, Stein A 2000 *J. Mater. Chem.* **12** 3261
 [8] Thurn J, Cook R F, Kamarajugdda M, Stearns L C 2002 *Thin Films: Stresses and Mechanical Properties* (Warrendale: Mater. Res. Soc. Symp. Proc.) p91

[9] Li X, Bhushan B 2001 *Thin Solid Films* **398-399** 313
 [10] Yu M F, Lourie O, Dyer M J 2000 *Science* **287** 637
 [11] Wagner H D, Lourie D, Feldman O Y 1998 *Appl. Phys. Lett.* **72** 188
 [12] Wu H F, Zhang H J, Liao Q, Lu H, Si J X, Li H Y, Bao S N, Wu H Z, He P M 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1310 (in Chinese) [吴海飞, 张寒洁, 廖清, 陆豪, 斯剑霄, 李海洋, 鲍世宁, 吴惠祯, 何丕模 2009 物理学报 **58** 1310]
 [13] Wang H T, Qing Z D, Ni Y S, Zhang W 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1057 (in Chinese) [王华滔, 秦昭栋, 倪玉山, 张文 2009 物理学报 **58** 1057]
 [14] Gladwell G M L 1980 *Contact Problems in the Classical Theory of Elasticity* (Alphen aan den Rijn: Sijthoff & Noordhoff)
 [15] Gibson L J, Ashby M F 1997 *Cellular Solids—Properties and Structures* (Cambridge: Cambridge University Press)
 [16] Hayes A M, Wang A, Dempsey B M 2004 *Mech. Mater.* **36** 691

Approximate analytic and numerical study on indentation of cellular/foam film with glass substrate

Fan Tian-You¹⁾ Fan Lei²⁾ Y. W. Mai³⁾

1) *School of Science ,Beijing Institute of Technology ,Beijing 100081 ,China)*

2) *School of Life Science ,Beijing Institute of Technology ,Beijing 100081 ,China)*

3) *Centre for Advanced Materials Technology ,University of Sydney ,Sydney 2006 ,Australia)*

(Received 16 January 2009 ; revised manuscript received 5 May 2009)

Abstract

Approximate analytic and numerical studies on depth-sensing indentation response of ordered cellular/foam materials with glass substrate are carried out based on the elasticity theory and the theory of cellular solids. The observation focuses on the pressure distribution and critical value of indentation depth in the contact zone ,which are approximately determined. The theoretical results are compared with the experimental measurements. The comparison shows that they are in good agreement with each other. In order to give a reasonable estimation on the integrality of the film system , the deformation and the failure mechanism are analyzed. And further we observe the indentation energy and derive its analytic expression , whose form is very simple and we suggest that it can be used as a parameter characterizing the indentation response.

Keywords : films , materials testing , mechanical properties of solids

PACC : 6770 , 8170 , 6220