

不同晶体取向向下纳米压痕的多尺度模拟*

王华滔 秦昭栋 倪玉山† 张 文

(复旦大学力学与工程科学系, 上海 200433)

(2008 年 4 月 14 日收到, 2008 年 7 月 14 日收到修改稿)

采用准连续介质多尺度方法模拟面心立方金属铝单晶薄膜的纳米压痕变形过程. 对薄膜分别采用三种不同的晶体取向(分别为 $x[111], y[\bar{1}10], z[\bar{1}\bar{1}2]$; $x[\bar{1}\bar{1}2], y[111], z[\bar{1}10]$; $x[1\bar{1}0], y[001], z[\bar{1}\bar{1}0]$) 得到载荷-位移响应曲线. 加载过程中, 对晶体内部变形比较剧烈的部分画出原子图, 并从微观角度分析产生剧烈变形的原因. 结果表明, 薄膜变形的微观机理因其晶体取向的不同而不同. 在 $x[111], y[\bar{1}10], z[\bar{1}\bar{1}2]$ 取向向下, 压头下压方向和晶体密排面平行, 薄膜内部的主要变形机理为晶面滑移产生位错成核. 该情况下材料的硬度较大, 材料 z 方向位移较大. 在 $x[\bar{1}\bar{1}2], y[111], z[\bar{1}10]$ 取向向下, 压头下压方向与晶体密排面垂直, 薄膜内部的主要变形机理为孪生变形. 该情况下材料硬度最大, z 方向位移也最大. 在 $x[1\bar{1}0], y[001], z[\bar{1}\bar{1}0]$ 取向向下, 压头下压方向与晶体密排面呈一定角度, 薄膜内部的变形机理为晶体层先滑移产生一小段位错, 之后随着加载的进行在薄膜内部出现孪晶. 该情况下材料硬度最小, z 方向位移也最小.

关键词: 纳米压痕, 准连续介质方法, 晶体取向, 位错成核

PACC: 4630, 6480G, 6185, 6170G

1. 引 言

材料的变形与其内部结构密切相关, 当晶粒尺寸减小到纳米尺度时, 它的硬度、杨氏模量都发生了很大的变化^[1]. 研究表明纳米晶粒的微观变形机理很复杂, 它依赖于压头形状、晶体取向^[2]、表面效应^[3]、衬底效应^[4]、晶界影响^[5]等等. 近年来, 纳米压痕技术已被广泛地应用于材料科学的各个领域. 金属纳米压痕实验中, 载荷-位移响应曲线会出现一个突降, 将材料的变形阶段分为弹性阶段和塑性阶段. 对其突降进行研究, 可以方便地了解材料从弹性变形到塑性变形的转变过程^[6-8]. 随着计算机模拟技术的发展, 越来越多的研究人员利用计算机模拟对压痕微观变形机理进行分析, 进而揭示宏观实验很难获得的材料微观变形破坏机理. 比如 Gouldstone 等^[9]利用 Bragg-Nye 泡筏模型^[10]模拟了面心立方 (fcc) 晶体在 $\{111\}$ 面系的压痕, 证明了二维纳米压痕中晶体可以形成均匀的位错成核; Liu 等^[11]使用分子动力学方法模拟单晶铝在弯曲时表面的位错成核; Ward 等^[12]利用分子动力学方法模拟多晶 Al/Si

复合薄膜的纳米压痕过程, 对比了复合薄膜和单晶 Al 薄膜纳米压痕结果的不同.

虽然分子动力学方法可以较好地模拟材料的微观变形, 但是由于计算量的限制, 一些效应因为分子动力学模拟的尺寸太小而无法获得. 而连续介质力学中的有限元方法又不能模拟微观变形行为. 正是由于分子动力学方法和连续介质方法的这些不足, 多尺度方法应运而生. 多尺度方法可以在不忽略材料微观层次变形的情况下进行较大尺寸的模拟. 准连续介质多尺度方法^[13,14] (quasi-continuum method, QC 方法) 是多尺度方法的一种, 并得到了广泛的应用. 例如, Tadmor 等^[13]使用 QC 方法模拟了在铝晶体表面位错成核的过程; Sansoz 等^[15]把 QC 方法延伸到对多晶材料的研究; Iglesias 等^[16]使用 QC 方法研究了不同金属不同晶体取向下的压痕情况, 观测到多个 (111) 面的滑移, 描述了微观的一些现象.

本文采用 QC 方法模拟 fcc 铝单晶薄膜纳米压痕的初始塑性屈服过程, 得到不同晶体取向下的载荷-位移响应曲线. 对加载过程中, 薄膜内部变形比较剧烈的部分画出原子图, 观察晶体微观变形中原子的排列, 同时从原子角度分析产生大变形的原因,

* 国家自然科学基金委员会与中国工程物理研究院联合基金(批准号:10576010)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: niyushan@fudan.edu.cn

对不同晶体取向向下晶体微观变形的机理进行了分析.

2. 纳米压痕模拟

准连续介质多尺度方法提供了一个框架:在模拟一个原子系统的同时,耦合了连续介质.在材料变形时,将变形梯度变化比较小的区域考虑为小变形连续介质,采用有限元方法以“代表原子”为特征进行粗化描述,在缺陷密度较高、变形梯度变化较剧烈的区域用分子动力学来描述.这样就可以在不失精确的情况下减少问题的自由度和计算量,以实现较大尺寸试件的原子尺度模拟.

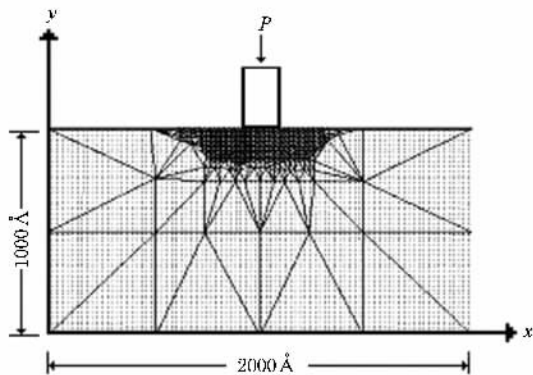


图1 模型示意图

本文模拟了 fcc 单晶铝薄膜纳米压痕在不同晶体取向下的变形过程.如图 1 所示,压头为刚性矩形压头,宽度为 24 Å (10 Å = 1 nm),薄膜厚 1000 Å,宽 2000 Å.模型中金属薄膜的宽度大约是压头宽度的一百倍,厚度约是下压深度的一百倍.原子区域大约为压头下方 200 Å × 200 Å 的区域,所有的原子都用分子动力学方法处理,采用 Ercolessi-Adams EAM 势^[17]模型.在远离压头区域采用有限元网格进行粗化处理.原子区与整个模型大小相比很小,微观计算精度不会受到边界的影响.整个模型的全部原子大约为 70 万个,计算中设置最大代表原子数目为 7000,最大单元数为 14000.可以看出,它相对于整个薄膜系统真实原子数,需要处理的原子数很小,所以 QC 方法可以在不失精度的情况下减少问题的自由度和计算量.

薄膜左边和右边的边界保持自由,底部为刚性衬底. z 轴无限长,取周期性边界条件.为了研究不同晶体取向对纳米压痕的影响,考虑到晶体中位错

的成核可能和晶体中的密排面相关,故采用三种特定的晶体取向进行模拟(晶体取向分别为 $x[111]$, $y[\bar{1}10]$, $z[\bar{1}\bar{1}2]$; $x[\bar{1}\bar{1}2]$, $y[111]$, $z[\bar{1}10]$; $x[\bar{1}10]$, $y[001]$, $z[\bar{1}\bar{1}0]$).这三种晶体取向,压头的下压方向和晶体密排面的关系分别为:平行、垂直和呈一定角度.实际模拟过程中通过控制压头与薄膜接触部分原子的位移来控制压头下压,每步的位移为 0.2 Å.每加载一步,执行一次能量最小化.

3. 模拟结果与分析

采用准连续介质多尺度方法模拟 fcc 单晶铝薄膜纳米压痕在不同晶体取向下的初始塑性屈服过程,得到各情况下应力-应变响应曲线.模拟观察到晶体微观变形中原子的排列,分析了不同晶体取向对变形机理的影响.

3.1. $x[111]$, $y[\bar{1}10]$, $z[\bar{1}\bar{1}2]$ 取向

在该取向,压头加载的方向与薄膜的密排面(111)面平行,压头压入晶体的($\bar{1}10$)面.通过对压头下方原子所受向上的排斥力求和得到压头施加载荷,进而得到压头的载荷-位移曲线(见图 2).

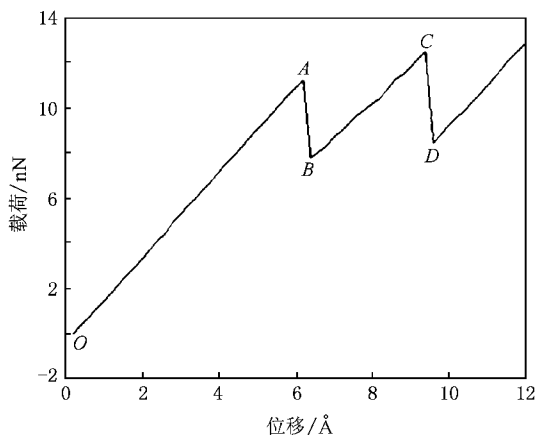


图2 在 $x[111]$, $y[\bar{1}10]$, $z[\bar{1}\bar{1}2]$ 晶体取向向下压头的载荷-位移曲线

如图 2,在压头位移为 6.2 Å 之前(图 2 中 OA 段)随着加载的进行,载荷随位移的增大而增大,结果与文献[18,19]一致.当载荷加载到压头位移为 6.4 Å 的时候(图 2 中 B 点),载荷-位移曲线出现一个突然下降.

对应于出现突然下降加载步时的变形,画出薄膜压头下方的局部原子图,可以清楚地看到晶体内

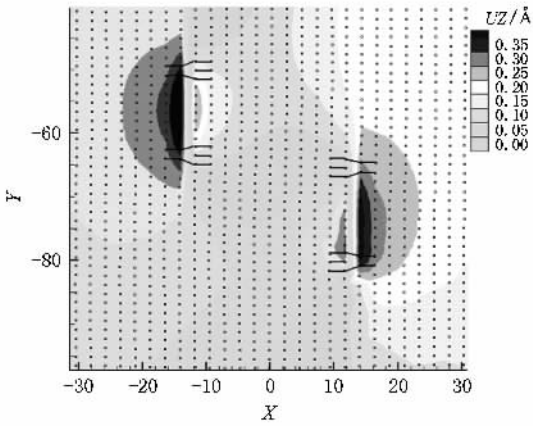


图3 压头位移为 6.4 Å 时晶体局部原子图及位错成核情况
 U_z 表示位错在 z 方向的位移

部有位错成核,如图 3. 图中位错成核的部位已标出,刃型位错在压头左右两边的正下方分别成核. 位错成核之后,形成的全位错又迅速通过滑移分解为两个 Shockley 不全位错^[20],滑移系为 $\{111\}100$ 系.

位错第一次成核之后,薄膜得到强化.薄膜的变形随着加载的继续进行(图 2 中 BC 段)和产生位错之前(图 2 中 OA 段)变化趋势一样,但是当压头位移达到 9.6 Å 的时候,薄膜载荷-位移曲线出现第二次突然下降(图 2 中 CD 段),表明薄膜内部出现新的位错成核,此时薄膜内部的结构如图 4 所示.

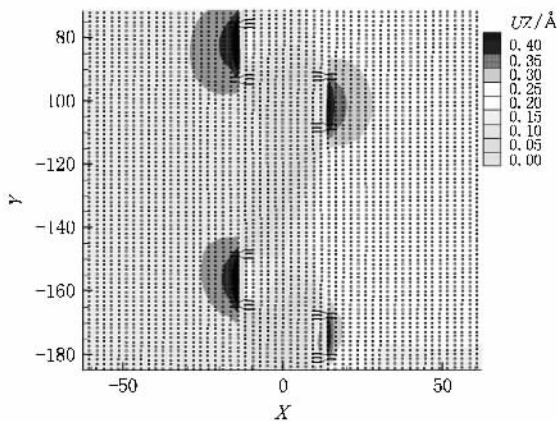


图4 压头位移为 9.6 Å 时晶体局部原子图及位错成核

从图 4 中可以看到,新的位错成核出现在第一次位错的正下方,而且不全位错之间的距离和第一次位错的不全位错基本相同,说明材料在形成第二次位错成核的变形机理与第一次位错成核基本相同,对应图 2 的宏观载荷-位移曲线中的 CD 段长度

和 AB 段长度基本相同.

3.2. $x[\bar{1}\bar{1}2],y[111],z[\bar{1}10]$ 取向

在该取向,压头加载的方向与薄膜的密排面 (111) 面垂直,压头压入薄膜的 (111) 面. 该取向下的载荷-位移曲线如图 5. 从图 5 可以看到,在加载的初始阶段,薄膜的载荷随位移的增大而增大,直到压痕深度达到 13.6 Å 载荷都没有出现突降,而在前种晶体取向 $(x[111],y[\bar{1}10],z[\bar{1}\bar{1}2])$ 取向)压痕深度到达 10.0 Å 的时候就已经发生了两个位错成核.

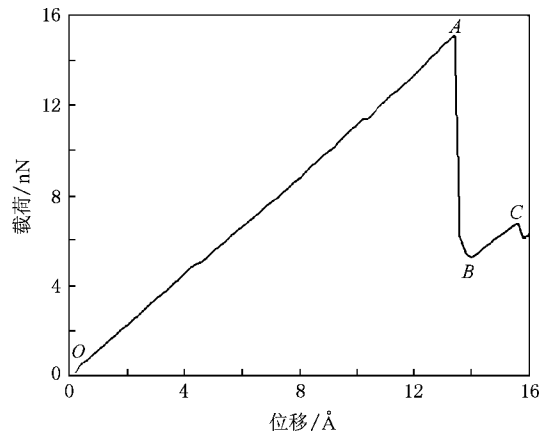


图5 在 $x[\bar{1}\bar{1}2],y[111],z[\bar{1}10]$ 晶体取向,压头的载荷-位移曲线

尽管在图 5 中 OA 段没有出现载荷的剧烈变化,但是通过观察此时的原子变形图(如图 6)可以发现薄膜内部已经发生了滑移和位错的发射,只是 z 方向的位移很小,在 10^{-14} m 量级.薄膜压头下方左侧发射了一个不全位错,从压头左侧在 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面沿 $[112]$ 方向向薄膜内部运动,导致 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面之间的滑移.

随着加载的进行,并没有在同一平面接着形成与前一不全位错对应的另一半不全位错,而是在相邻的下一个原子层发射了另一个不全位错,同样在 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 面沿 $[112]$ 方向往薄膜内部运动.由于连续发射的不全位错均沿 $[112]$ 方向,均垂直于 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 方向,所以并没有产生 z 方向上的位移,对应于载荷-位移曲线上也没有明显的突降.

随着加载的进行,当压头位移达到 13.6 Å 时,载荷-位移曲线出现一个幅度很大的突然下降(图 5 中的 B 点).薄膜的原子分布如图 7.

从图 7 中可以清楚的看到,在压头下方左侧发

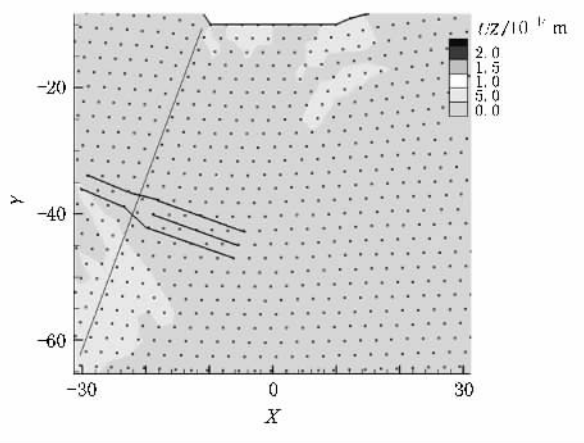


图 6 压头位移为 10.0 Å 时晶体局部原子图

取向下的载荷 - 位移曲线如图 8.

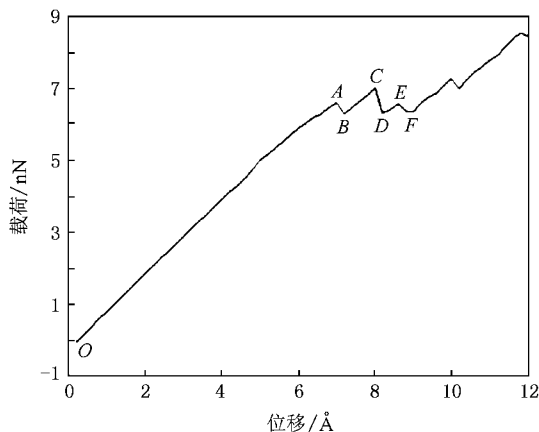


图 8 在 $x[1\bar{1}0], y[001], z[\bar{1}\bar{1}0]$ 晶体取向向下, 压头载荷 - 位移曲线

从图 8 中可以看出, 加载过程中载荷 - 位移曲线并没有出现剧烈的下降. 当压头位移达到 7.2 Å 时(图 8 中 B 点), 载荷有一个很小的下降, 此时的局部原子如图 9. 薄膜内部原子在压头的挤压下需沿 y 方向垂直向下滑移. 但是垂直向下滑移必须越过(001)面, 需要很大的能量, 而在密排面($\bar{1}\bar{1}1$)之间、密排方向之间的间距最大, 结合力最弱, 所以压头下方的原子会沿($\bar{1}\bar{1}1$)面滑移. 从图 9 中可以看到, 滑移分别从压头左右两个顶点处沿($\bar{1}\bar{1}1$)面向薄膜内部延伸, 在 y 坐标为 -25 Å 处相交, 相交后只有右侧的滑移继续向材料内部扩展. 滑移系和滑移面前端的位错在图 9 中标出.

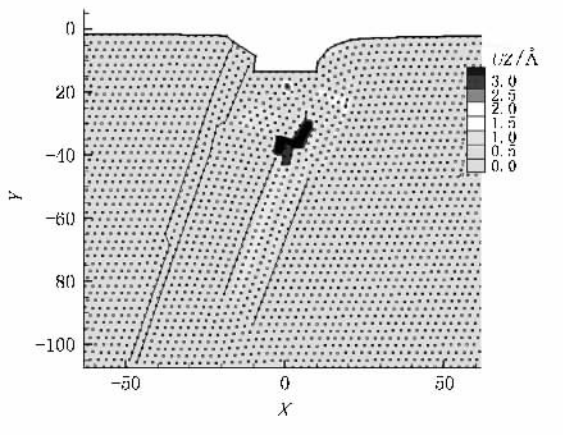


图 7 压头位移为 13.6 Å 时晶体局部原子图及孪生变形情况

生了明显的孪生变形(deformation twinning). 这是由相邻的($\bar{1}\bar{1}1$)面连续发射 $[112]$ 不全位错形成的. 这两个相邻的($\bar{1}\bar{1}1$)孪生面最上端区域的宽度最大, 达到 3 个($\bar{1}\bar{1}1$)面原子层间距, 宽度随着区域向薄膜内部延伸而变小, 最小只有 1 个($\bar{1}\bar{1}1$)面间距. 与 Chen 等^[21]采用高分辨率透射电子显微镜(HRTEM)观察到的孪生面之间有一些原子层间距, 结果相一致. 整个区域延伸到薄膜内部距离表面 110 Å 左右. 除此之外, 压头下方薄膜内部产生了很多不全位错, 并有很大的 z 向位移. 这些 z 向位移是由 $[\bar{1}21]$ 方向的不全位错引起的. 两个孪生面的宽度约 5 个($\bar{1}\bar{1}1$)面间距, 延伸到薄膜内部距离表面 90 Å 左右.

3.3. $x[1\bar{1}0], y[001], z[\bar{1}\bar{1}0]$ 取向

在该取向向下, 压头加载的方向与薄膜的密排面(111)面呈一定角度. 压头压入薄膜的(001)面, 该

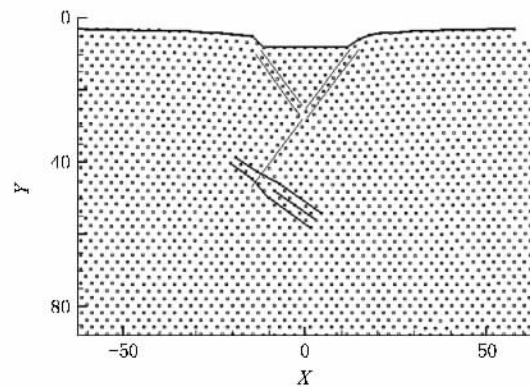


图 9 压头位移为 7.2 Å 时晶体局部原子图

随着加载的进行, 滑移面前端的位错不断向材料内部运动, 使滑移传递到下一层($\bar{1}\bar{1}1$)面, 当压头位移达到 12 Å 的时候, 薄膜中出现了两个孪生变形的区域, 孪生面和孪生方向均为 $\{111\}112$ 系. 孪

晶区域的晶向与基体区域成对称,如图 10. 区域从上到下宽度逐渐变小,孪生面间距最上端为 5 个 $(\bar{1}11)$ 面原子层间距,最下端只有一个 $(\bar{1}11)$ 面原子层间距.此时孪生变形区域尖端的位错已经移动到薄膜内部 -110 \AA 的深度.

本取向与前两个取向不同的是在计算中无论载荷-位移曲线出现突降与否,得到 z 向位移都一直保持在 10^{-14} m 量级,和前面两个情况相比可以忽略,因此在薄膜的局部原子图中没有显示 z 向位移的大小分布.

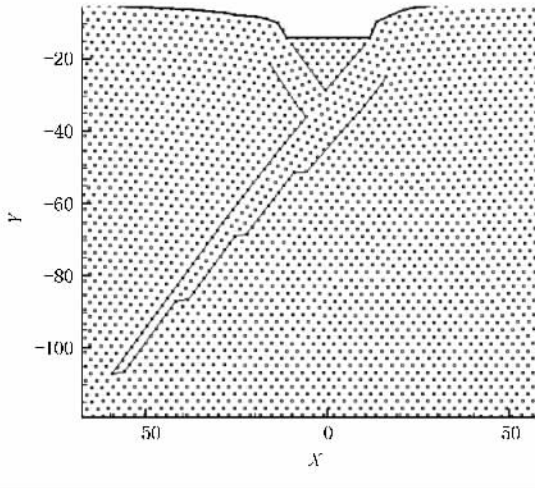


图 10 压头位移为 12 \AA 时晶体局部原子图

4. 讨 论

从以上三个模拟结果可以看到,不同晶体取向对纳米压痕的模拟结果影响很大,薄膜变形的微观机理因晶体取向的不同而不同.陈奇志等^[22]使用透射电子显微镜 (TEM) 观察到对于 fcc 金属(铜和铝),当位错滑移能力枯竭时,发生 $\{111\}112$ 孪生或微裂纹形核.孪生时,微裂纹在孪晶生长前沿的应力集中处沿 $\{111\}$ 面系成核.由以上三种情况模拟的结果可以发现,本文的模拟与其基本一致,位错的 $\{111\}110$ 滑移系和孪生的 $\{111\}112$ 滑移系是 fcc 晶体的两种主要形变模式.由载荷-位移曲线和晶体局部原子图可以发现,载荷的每次下降都对应着材料 z 方向位移的产生.对比第一种晶体取向(x $[111]$, y $[\bar{1}10]$, z $[\bar{1}\bar{1}2]$ 取向)和第二种晶体取向(x $[\bar{1}\bar{1}2]$, y $[111]$, z $[\bar{1}10]$ 取向)产生的 z 向位移,可以发现第二种晶向下 z 向位移要大很多.为了分析 z 方向位移产生的原因,采用 Thompson 四面体

图^[23]来观察位错的形成机制,四面体展开图如图 11. 图中 DA , DB , DC , AB , AC 和 BC 段为全位错.在加载过程中,全位错极难形成,滑移中经常出现的是一个全位错分解成为两个不全位错.

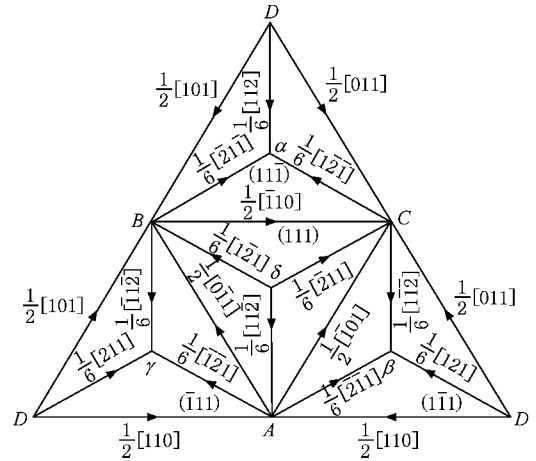


图 11 Thompson 四面体中的位错^[23]

在 x $[111]$, y $[\bar{1}10]$, z $[\bar{1}\bar{1}2]$ 取向,压头加载的方向与薄膜的密排面 (111) 面平行,晶体内部容易形成位错成核,所以在加载过程中,压头位移在 6.2 \AA 的时候压头载荷就出现了突然下降,此时的载荷值为 11.2 nN ,对应材料的硬度为 11.7 GPa ;该晶体取向, z 方向为图中 $A\delta$ 方向.全位错 BC 沿 $[\bar{1}10]$ 方向分解为 $B\delta$ 和 δC 两个 Shockley 不全位错.这两个不全位错与 z 向的夹角分别为 60° ,所以在晶体产生塑性变形时 z 向位移比较大.

在 x $[\bar{1}\bar{1}2]$, y $[111]$, z $[\bar{1}10]$ 取向,压头加载的方向与薄膜的密排面 (111) 面垂直,压头压入薄膜的 (111) 面,晶体产生塑性变形的微观变形机理为孪生变形.孪生变形很难形成,直到压头位移达到 13.6 \AA 时才出现载荷的突然下降,对应着大量孪生变形的产生.晶体产生较大破坏,载荷下降幅度也很大.从载荷-位移曲线可以看到,弹性阶段的载荷在突然下降之前出现一个最大值 14.9 nN ,对应材料的硬度为 15.5 GPa ;该晶体取向, z 方向为 BC 方向,全位错 DC 分解成为 $D\alpha$ 和 αC 两个不全位错.对应于图 7 可以看出,在加载开始的时候,压头左侧顶点向薄膜内部发射的不全位错为 $D\alpha$,其方向 $[112]$ 垂直于 z 方向,所以没有 z 向位移.而随着加载的进行,激活了图 11 中 αC 段的 $1/6[1\bar{2}\bar{1}]$ 方向 Shockley 不全位错. αC 与 z 向夹角为 30° ,在 z 方向的分量较大,所以在载荷-位移曲线出现突降的同时在 z 向

也出现了较大的位移,从而证实了文献[23]关于孪生变形提出的模型,孪生变形是由于 $1/6 \langle 112 \rangle$ Shockley 不全位错分解时产生的堆垛层错造成的.

在 $x[1\bar{1}0]$, $y[001]$, $z[\bar{1}\bar{1}0]$ 取向,压头加载的方向与薄膜的密排面(111)面既不垂直,也不平行.晶体微观变形机理很复杂,既有位错的产生,也发生了孪生变形.与前两个晶体取向明显不同的是该晶体取向,在加载过程中材料在 z 方向的位移很小,相对于前两个晶体取向的情况可以忽略不计.由此可知, $x[1\bar{1}0]$, $y[001]$, $z[\bar{1}\bar{1}0]$ 取向材料的主要变形发生在 xy 面内,而载荷-位移响应曲线出现突然下降也不是很明显.材料的硬度最小.该晶体取向, z 方向为图11中 AD 方向, x 方向为 CB 方向,在加载中先是激活了图中 By 和 $C\beta$ 两个 Shockley 不全位错,两位错向内部滑移并相交后,只有 $C\beta$ 不全位错继续向材料内部运动.本文既观测到晶体层面滑移产生的位错,也发现了薄膜的孪生变形现象.压头与薄膜接触的顶点处先向薄膜内部发射不全位错,随着加载的进行,已形成的不全位错向薄膜内部运动.压头向薄膜内部挤压,薄膜的上表面靠近压头处开始塌陷,不全位错继而扩展到相邻的原子层,同样向薄膜内部运动.最终导致几个相邻的原子层与未变形区域呈对称结构,形成孪晶.在此取向,密排面上的原子很容易产生滑移,继而发生位错成核.由于在该晶体取向,发射的不全位错与

z 向垂直,所以几乎没有 z 向位移的产生.

5. 结 论

采用准连续介质多尺度方法模拟 FCC 单晶铝薄膜的纳米压痕变形过程.为研究不同晶体取向对纳米压痕的影响,对薄膜分别采用三种特定的晶体取向(分别为 $x[111]$, $y[\bar{1}\bar{1}0]$, $z[\bar{1}\bar{1}2]$; $x[\bar{1}\bar{1}2]$, $y[111]$, $z[\bar{1}\bar{1}0]$; $x[1\bar{1}0]$, $y[001]$, $z[\bar{1}\bar{1}0]$)得到载荷-位移响应曲线.结果表明,不同晶体取向对纳米压痕的模拟结果影响很大,薄膜变形的微观机理因晶体取向的不同而不同.

在 $x[111]$, $y[\bar{1}\bar{1}0]$, $z[\bar{1}\bar{1}2]$ 晶体取向,压头的下压方向和晶体密排面平行,薄膜内部的主要变形机理为晶面滑移产生位错成核.该情况下材料的硬度较大,材料 z 方向位移较大;在 $x[\bar{1}\bar{1}2]$, $y[111]$, $z[\bar{1}\bar{1}0]$ 取向,压头下压方向与晶体密排面垂直,薄膜内部的主要变形机理为孪生变形.该情况下材料硬度最大, z 方向位移也最大;在 $x[1\bar{1}0]$, $y[001]$, $z[\bar{1}\bar{1}0]$ 取向,压头下压方向与晶体密排面呈一定角度,薄膜内部的变形机理为位错成核与孪生变形共同起作用.该情况下,晶体层先因为滑移而产生一小段位错,之后随着加载的进行在薄膜内部出现孪晶.材料硬度最小, z 方向位移也最小.

[1] Yang H B, Hu M, Zhang W, Zhang X R, Li D J, Wang M X 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4032 (in Chinese) [杨海波、胡明、张伟、张绪瑞、李德军、王明霞 2007 物理学报 **56** 4032]

[2] Liang T, Jiang C B, Xu H B 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1722 (in Chinese) [梁婷、蒋成保、徐惠彬 2005 物理学报 **54** 1722]

[3] Zheng R L, Tao Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1942 (in Chinese) [郑瑞伦、陶冶 2006 物理学报 **55** 1942]

[4] Nowak R, Li C L, Maruno S 1997 *J. Mater. Res.* **12** 64

[5] Wen Y H, Zhu T, Cao L X, Wang C Y 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2520 (in Chinese) [文玉华、朱、曹立霞、王崇愚 2003 物理学报 **52** 2520]

[6] Suresh S, Nieh T G, Choi B W 1999 *Scripta Mater.* **41** 951

[7] Gouldstone A, Koh H J, Zeng K Y 2000 *Acta Mat.* **48** 2277

[8] Gerberich W W, Nelson J C, Lilleodden E T 1996 *Acta Mat.* **44** 3585

[9] Gouldstone A, Vliet K J, Suresh S 2001 *Nature* **411** 656

[10] Bragg W L, Nye J F 1947 *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **190** 474

[11] Liu Y F, Giessen E V, Needleman A 2007 *Int. J. Solids Struct.* **47** 1719

[12] Ward D K, Curtin W A, Qi Y 2006 *Acta Mat.* **54** 4441

[13] Tadmor E B, Ortiz M, Phillips R 1999 *J. Mater. Res.* **14** 2234

[14] Ni Y S, Wang H T 2007 *Chin. J. Mech. Eng.* **43** 101 (in Chinese) [倪玉山、王华滔 2007 机械工程学报 **43** 101]

[15] Sansoz F, Dupont V 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 111901

[16] Iglesias R A, Leiva E P 2006 *Acta Mat.* **54** 2655

[17] Ercolessi F, Adams J B 1994 *Europhys. Lett.* **26** 583

[18] Smith G S, Tadmor E B, Bernstein N, Kaxiras E 2001 *Acta Mat.* **49** 4089

[19] Phillips R, Rodney D, Shenoy V 1999 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **7** 769

[20] Gerold V 1993 *Structure of Solids* (New York: Cambridge) p393

[21] Chen M W, Ma E, Hemker K J, Sheng H W, Wang Y M, Cheng X M 2003 *Science* **300** 5623

[22] Chen Q Z, Huang Y Z, Zhao B, Chu W Y 1998 *Science in China* (Ser. E) **28** 385 (in Chinese) [陈奇志、黄一中、赵滨、褚武扬 1998 中国科学(E辑) **28** 385]

[23] Hirth J P, Lothe J 1992 *Theory of Dislocations* (2nd ed) (Krieger: Malabar) p319

Multi-scale simulation of the deformation in nano-indentation under different crystal orientations^{*}

Wang Hua-Tao Qin Zhao-Dong Ni Yu-Shan[†] Zhang Wen

(Department of Mechanics and Engineering Science , Fudan University , Shanghai 200433 , China)

(Received 14 April 2008 ; revised manuscript received 14 July 2008)

Abstract

The nano-indentation process of an fcc Al film under three different crystal orientations ($\alpha[111]$, $\gamma[\bar{1}10]$, $\alpha[\bar{1}\bar{1}2]$; $\alpha[\bar{1}\bar{1}2]$, $\gamma[111]$, $\alpha[\bar{1}10]$ and $\alpha[1\bar{1}0]$, $\gamma[001]$, $\alpha[\bar{1}\bar{1}0]$) are studied using the quasi-continuum method. The load-displacement responses of the film under different crystal orientations are presented respectively. The local atomics in the regions where sharp deformation occurred are plotted to analyse their mechanisms on atomic scale. The results show that the micro-mechanisms of the deformation in the film are different for different crystal orientations. Under the orientation of $\alpha[111]$, $\gamma[\bar{1}10]$, $\alpha[\bar{1}\bar{1}2]$, in which the indentation direction is parallel to the close-arranged plane, the deformation in the film is mainly dominated by the dislocation nucleation caused by the slip of the plane, and the hardness and the out-of-plane displacement of the crystal are large. Under the $\alpha[\bar{1}\bar{1}2]$, $\gamma[111]$, $\alpha[\bar{1}10]$ orientation, in which the indentation direction is perpendicular to the close-arranged plane, the deformation in the film is mainly dominated by the deformation twinning, and both the hardness and the out-of-plane displacement of the crystal are the largest. Under the $\alpha[1\bar{1}0]$, $\gamma[001]$, $\alpha[\bar{1}\bar{1}0]$ orientation, in which the indentation direction is at some degrees inclined to the close-arranged plane, the deformation in the film starts from a small dislocation line nucleating on a slip plane at the beginning of the loading and then deformation twinning is formed with the increasing loading, and the hardness and the out-of-plane displacement of the crystal are the smallest.

Keywords : nano-indentation , quasi-continuum method , crystal orientation , dislocation nucleation

PACC : 4630 , 6480G , 6185 , 6170G

^{*} Project supported by the NSAF Joint Fund (Grant No. 10576010).

[†] Corresponding author. E-mail : niyushan@fudan.edu.cn