

## 纳米压痕过程的三维有限元数值试验研究<sup>1)</sup>

李 敏<sup>\*,†</sup> 梁乃刚<sup>\*</sup> 张泰华<sup>\*</sup> 王林栋<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup>(中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100080)

<sup>†</sup>(北京航空航天大学飞行器设计与应用力学系, 北京 100083)

**摘要** 采用有限元方法模拟了纳米压痕仪的加、卸载过程, 三维有限元模型考虑了纳米压痕仪的标准 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, 讨论了摩擦、滑动机制、试件模型的大小对计算结果的影响, 进行了计算结果与标准试样实验结果的比较, 证实了模拟的可靠性. 在此基础上, 重点研究了压头尖端曲率半径对纳米压痕实验数据的影响. 对比分析了尖端曲率半径  $r = 0$  与  $r = 100 \text{ nm}$  两种压头的材料压痕载荷-位移曲线. 结果表明, 当压头尖端曲率半径  $r \neq 0$  时, 基于经典的均匀连续介质力学本构理论、传统的实验手段与数据处理方法, 压痕硬度值会随着压痕深度的减小而升高.

**关键词** 纳米压痕, 有限元模拟, 硬度, 压痕尺度效应

### 引 言

压痕实验是一种简单、高效的评价材料力学性能的手段, 其应用已有近百年的历史<sup>[1]</sup>, 近 20 年来, 随着各种表面处理技术的迅速发展, 微小尺度的压痕实验又成为研究的热点.

对材料破坏机理的研究促进了材料表面处理技术的发展, 目前比较成熟的表面处理技术有激光改性、离子注入、等离子体喷涂、镀膜等. 经过表面处理的材料一般都具有两个特点: 生成的表层材料厚度小, 一般从几十纳米至几百微米; 材料的性能沿深度方向梯度变化. 由于表层材料厚度小且附着在基体材料上, 不可能用常规的拉伸实验得到其力学性能; 其次, 由于尺度的原因, 常规的硬度仪无法反映表层材料沿深度方向力学性能的梯度变化. 为此, 纳米硬度仪体现出其优势.

纳米压痕技术最早是由 W. C. Oliver 等人<sup>[2]</sup>提出并发展, 目前先进的纳米压痕仪可以给出整个加、卸载过程的载荷-位移曲线以及硬度与弹性模量随压痕深度变化的曲线, 提供了丰富的、比较精确的信息, 为探索表层材料比较完整的力学特性提供了可能. 为达到该目的, 就必须对压痕实验的加、卸载过程进行较为深入的研究.

材料的硬度主要反映材料抵抗其他材料侵入的能力, 它不是材料某个力学参数的单独表现, 而是材

料力学性能的整体体现. 对于工程实际中经过表面处理的材料, 材料的硬度还与微结构的构造有关. 从力学的观点来看, 压痕实验是一个十分复杂的过程, 位于压头下不同位置的材料经历了不同的过程、处于不同的状态, 虽然材料的塑性性质在压痕实验中占有重要的位置, 但弹性性质也不可忽略, 特别是在卸载过程, 所以在压痕过程的分析中过于简单的材料假设如刚塑性假设不尽合理; 另一方面, 压痕过程中包含大变形特别是压头尖端下的材料经历有限变形, 不同的压痕深度下压头与材料的接触面积不能事先给出, 即压头与材料试件的边界条件不断变化. 所有这些因素使得利用解析的方式分析该问题非常困难, 而数值模拟在该问题中体现出优势. 这种数值的压痕仪不仅是压痕过程的再现, 更可以作为工具研究真实压痕仪不便完成的研究.

到目前为止涉及纳米压痕的大部分文献均针对某种特定材料的特殊处理过程得出处理前后材料性能的相对变化, 而相关的机理性的研究并不多见. 这些机理性的文献大体可以分为三类: 1) 从理论上推导如何利用纳米压痕技术得出材料的力学性质<sup>[2~5]</sup>; 2) 由于某些小于百纳米级的压痕实验给出的硬度值高于常规实验给出的硬度值, 就是否存在压痕尺度效应 (ISE) 进行争论<sup>[6~9]</sup>; 3) 利用数值计算特别是有限元方法模拟压痕过程考证实验的精度, 验证理论推导中使用的假设与理想化<sup>[10~14]</sup>.

2002-01-12 收到第一稿, 2003-03-10 收到修改稿.

1) 中国科学院 KG CX1-11 项目和中国博士后基金资助项目.

文献 [15] 是一本专辑, 展示了压痕研究领域主要研究人员的成果与方向.

在有限元模拟方面, 文献 [10~12] 采用商业有限元软件 ABAQUS, 文献 [13] 与 [14] 分别采用专用软件 NIKE2D (by A. Bolshakov and W. C. Oliver and G. M. Pharr) 与 FEAP (copyright by R. L. Taylor at U. C. Berkeley and J. C. Simo at Stanford University), 利用间隙元, 针对旋转对称压头进行二维模型的有限元模拟, 对存在的问题进行讨论. 纳米压痕仪压头尖端半径  $< 100 \text{ nm}$ , 由于加工工艺的限制使 Berkovich 三棱锥压头成为纳米硬度仪的标准压头, 为非旋转对称体. 过去由于计算机容量与速度的限制, 把加、卸载过程做到三维比较困难, 所以均在二维进行模拟: 文献 [11] 利用 IBM4341 计算机 15~25 h 完成一次 461 个单元的加、卸载过程计算 (1988 年); 文献 [13,14] 利用 Spare 2 工作站计算约 2000 个 4 节点双线性轴对称四边形单元约 24 h (1999 年). 为了与工程材料的测试相结合, 本文利用 MSC/NASTRAN 的接触滑动线 (contact slide line) 算法, 建立三维有限元模型, 模拟带滑动接触的加、卸载过程. 除了真实地模拟纳米压痕仪压头的几何形状外, 更可以使模型方便地应用于非均匀材料的纳米压痕过程.

## 1 有限元模型

### 1.1 几何形貌与网格划分

纳米硬度仪的标准压头为 Berkovich 三棱锥形, 其几何外形如图 1. 根据对称条件, 现取图 1 中压头 1/6 部分作为研究对象 (阴影部分), 模型中试件的外形依赖于压头的外形、压入的深度以及材料的特性, 这里取三棱柱形, 其各边长度分别为压痕深度的 40 倍, 该长度的合理性通过边界条件的变化来考证, 即试件的长度足够大可以不计材料外边

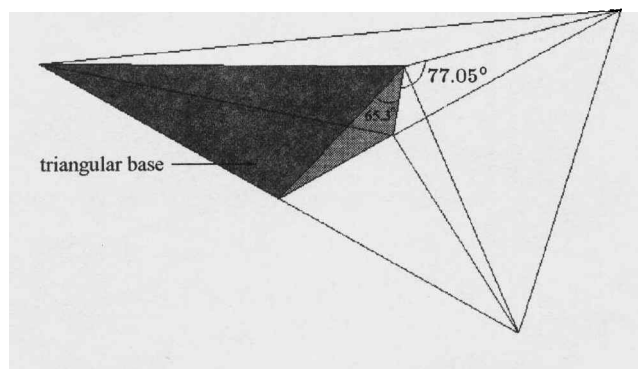
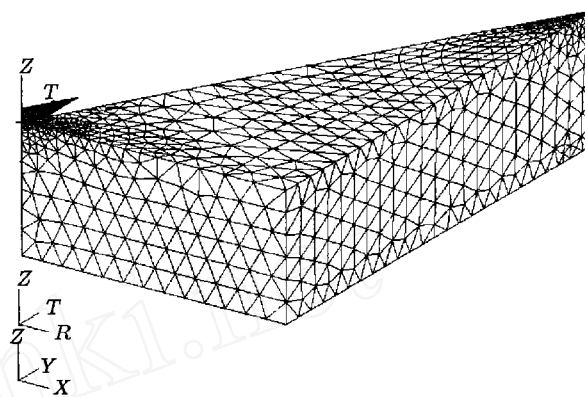


图 1 Berkovich 压头示意图

Fig.1 The sketch of Berkovich indenter

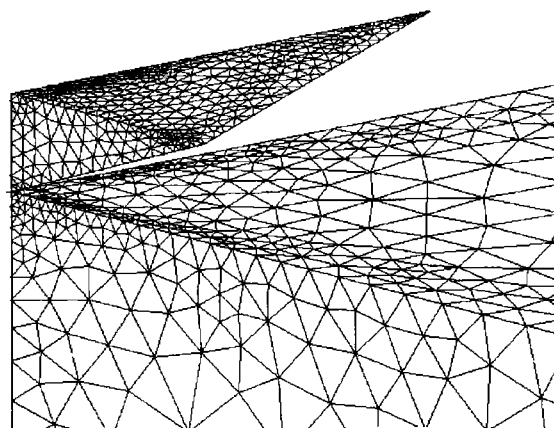
界面约束条件变化的影响.

有限元模型网格划分见图 2, 其划分方式主要考虑几何形貌与可能接触的区域, 压头部分在锐角区域的单元较细而中部较粗, 试件从接触区至边界, 单元尺寸逐步增加, 且网格细分程度兼顾计算精度与效率. 在目前普通 P4 计算机上完成一次单元数为 10000 的压痕加卸载过程约 1 h.



(a) 有限元模型网格划分总图

(a) The sketch of FEM mesh



(b) 有限元模型网格划分压头接触区域放大

(b) The zoom in for contact region

图 2

Fig.2

由于该计算中涉及大量单元材料的塑性变形而引起单元形状畸变, 严重的单元畸变会导致 Jacobi 矩阵退化使计算出现错误. 所以有限元模型中选取 4 节点四面体单元以尽量避免该效应.

### 1.2 边界条件与接触算法

以图 2(a) 中柱坐标系  $ORTZ$  为分析坐标系, 边界条件为: 中心轴上节点径向位移  $u_r = 0$ , 试件底面  $u_z = 0$ , 由于试件的几何尺寸取得足够大, 试

件外侧面可以作为自由面，也可作为径向位移约束面，在这两种边界条件下的计算结果完全一致，即计算结果对外侧面的边界条件不敏感。压头与试件周向对称面  $u_\theta = 0$ ，压头顶面节点位移一致。

压头与试件的边界接触条件，采用接触滑移线 (slide contact line) 来模拟，在两个周向对称面分别定义接触滑移线。接触检查采用对称搜索即两条接触线互为主、从，这相当于使接触区的网格密度平均提高了一倍，其代价为计算规模增加 30%。

事实上，如果压入深度只有几十纳米可以采用间隙元算法得到同样的结果，但间隙元无滑动功能，即采用间隙元的算法在本质上不允许存在几何非线性 (大变形)，只适用于压入深度相对模型尺度较小的情况。

### 1.3 材料特性

纳米压痕仪的压头为金刚石，其弹性模量为 1141 GPa，相对于多数被测材料高一个量级，所以多数文献中把压头简化为刚体，本研究中涉及硬金属，所以计算中把压头作为弹性体考虑。试件为 Von Mises 屈服各向同性强化弹塑性材料，材料特性以应力 - 应变关系输入，计算中用分段线性强化描述，其要求的材料特性参数见图 3。图中： $\epsilon < \epsilon_1$  为弹性区， $\epsilon > \epsilon_1$  为塑性区， $E$  为弹性模量， $Y_1$  为屈服应力。

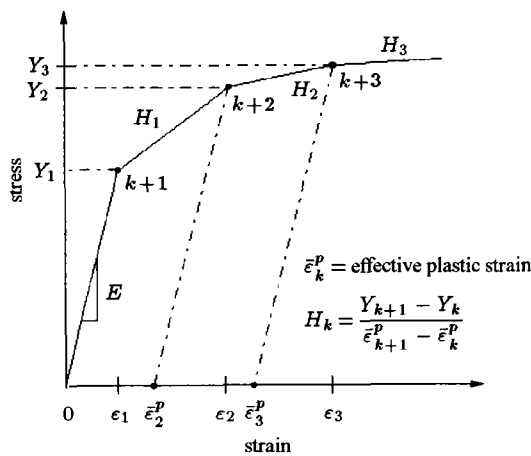


图 3 材料参数的说明

Fig.3 The sketch of material parameters

### 1.4 加载过程与收敛条件

计算过程为非线性静力加载过程，考虑几何大变形。载荷有两种方式：力与强制位移。经过计算考证，力加载与强制位移加载得到的载荷 - 位移曲线是完全一致的，本文计算中多采用控制加载载荷的

方法。每个载荷步收敛条件为位移误差为 1 nm，接触面法向力误差为 1 nN，应变能误差为 0.1 nJ。放宽收敛条件可以使初始阶段计算加快，但易导致误差积累使迭代发散。

## 2 计算结果的验证与讨论

### 2.1 收敛性检查

与一般数值计算不同，由于计算中涉及几何非线性与材料非线性，计算结果具有“路径”相关性，网格划分程度、载荷步长、材料的特性都是影响“路径”的因素。随着接触区域网格的细分，进入接触检查的节点迅速增加，为了满足收敛性条件则迭代计算的规模几何级数上升，为了保证计算规模不致过大，一般都采用从接触区至边界逐步增大的有限元网格，当最大单元与最小单元特征长度之比过大时，系统矩阵会趋于病态。根据笔者大量计算的实践，可能接触区域的节点过多会引入严重的计算收敛问题，当需要检查的节点数超过 100 时，计算收敛变得非常困难。随着压痕深度的增加，大量材料单元进入塑性区而引入由材料特性带来的反复迭代，模拟计算结果对于模型网格划分逐步敏感。所以在压痕过程有限元模拟时，应根据具体的材料特性、压痕深度以及数值模拟的目的来决定细分程度，特别是对于利用有限元模拟进行参数敏感性分析而不涉及硬度仪的精度问题，不必使用非常细分的有限元网格，避免给计算收敛性与效率带来困难。

### 2.2 标准试件的实验数据与计算结果的比较

本文取较软的金属单晶铜与较硬的金属单晶钨，在中科院力学所非线性力学国家重点实验室进行标准试件的纳米硬度实验，以考证模拟计算的可信度。表 1 列出了两种材料的特性，图 4 是两种材料计算与实验的对比，可以看出计算与实验吻合较好。

表 1 块体单晶铜与单晶钨的力学性能

Table 1 The material parameters of copper and tungsten

Material	$E$	$\mu$	$Y_1$	$H_1$
Cu	128 GPa	0.36	100 MPa	2 650 MPa
W	381 GPa	0.24	4 GPa	8.47 GPa

计算中比较了带有摩擦 (摩擦系数为 0.5) 与光滑接触的计算结果，证明摩擦对这种非线性静力过程计算基本无影响；还比较了试件外侧边界约束与自由的情况，证明计算结果对试件外侧边界的约

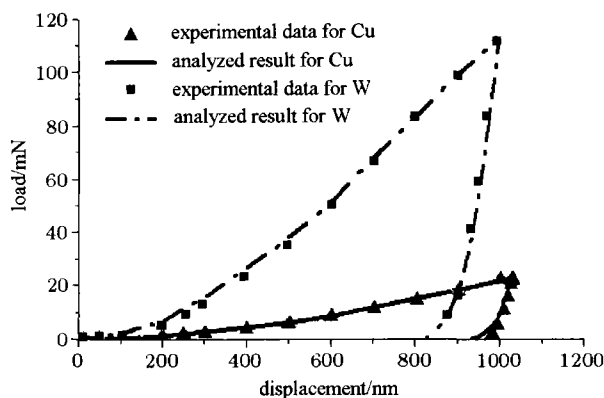


图 4 纳米压痕实验与计算模拟结果比较

Fig.4 Compared between calculation and test

束条件不敏感。

除载荷 - 位移曲线外, 模拟计算还可得到每一载荷步下三维压痕形貌、应变场、应力场、塑性应变场等, 对不同材料压痕形貌、位移场、塑性应变场、应变场的相关性分析将于另文讨论。

### 2.3 关于滑动机制的考证

压痕过程有限元模拟计算相比常规有限元计算的特殊之处在于压头与试件接触表面的相互滑动, 对于二维模型利用接触滑移线单元可保证所有可能接触点的检查, 但对三维的、不具有旋转对称性的模型, 只能在对称面处利用接触滑移线进行检查, 由此引入的一个问题是: 利用这种算法, 除了对称面处接触滑移线上的节点, 压头与试件接触面上其它节点是否满足位移协调性条件。经过对计算结果的多次检查, 证实不在接触滑移线处的节点也满足位移协调性条件且精度与用于接触滑移线给定的精度处于同一量级; 另外这些节点在周向具有相互错动, 证实该计算模式是可行的。

### 2.4 关于沉降 (sink-in) 与堆积 (pile up) 现象

许多文献涉及沉降与堆积, 讨论真实接触面积与压痕深度之间经验公式的误差及其修正。为了考证模型与算法的适用性, 针对不同的边界条件、材料特性组合、网格划分下进行了大量的计算, 结果与实验现象基本符合。但相对于二维模型的计算结果, 堆积的程度较小。其原因在于二维模拟中周向位移被约束, 变形只能在径向扩展, 而非旋转对称三维模型只在对称面处有周向位移约束, 变形可以同时向径向与周向扩展。

## 3 压头尖端半径对实验结果的影响

### 3.1 理论推导

图 5(a) 与图 5(b) 分别是理想几何形状压头 (尖端曲率半径  $r = 0$ ) 压入试件材料与非理想几何形状压头 (尖端曲率半径  $r \neq 0$ ) 的示意图, 尽管纳米压痕仪的标准压头为正三棱锥 Berkovich 压头, 但使用圆锥压头的剖面示意图显得清晰且不影响该问题的说明。

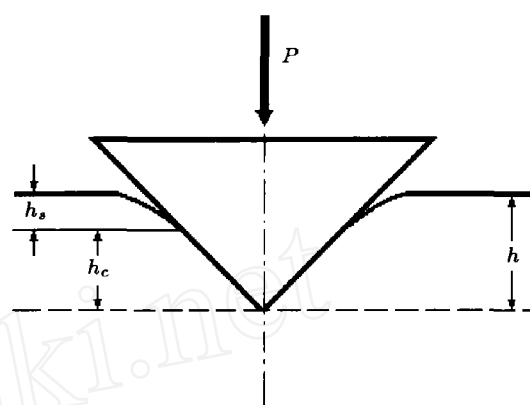
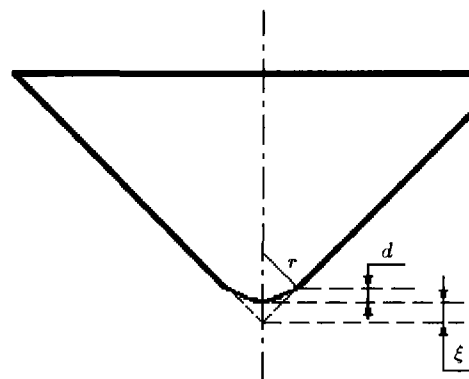
(a) 尖端曲率半径  $r = 0$  的压头压入试件示意图(a) The sketch of indenter with  $r = 0$ (b) 尖端曲率半径为  $r$  的压头示意图(b) The sketch of indenter with  $r \neq 0$ 

图 5

Fig.5

对于纳米压痕过程的载荷 - 位移曲线, 从实验数据的拟合<sup>[16]</sup>、有限元模拟<sup>[15]</sup>以及量纲分析<sup>[10]</sup>均得到载荷与位移满足

$$P = Kh^2 \quad (1)$$

其中: Hainsworth<sup>[16]</sup>从实验数据中得到经验表达式  $K = E(\Phi\sqrt{E/H} + \Psi\sqrt{H/E})^{-2}$ ,  $E$ 与 $H$ 分别是试件材料的弹性模量与硬度,  $\Phi$ 与 $\Psi$ 为与压头几何形状有关的经验常数。Malzbender<sup>[17]</sup>从Oliver, Pharr<sup>[2]</sup>的工作出发, 推导了式(1)的解析表达式。

对于  $r = 0$  的压头，压痕深度由两部分组成

$$h = h_s + h_c \quad (2)$$

纳米压痕硬度

$$H = \frac{P}{A_c} = \frac{P}{24.5h_c^2} \quad (3)$$

或

$$h_c = \sqrt{\frac{P}{24.5H}} \quad (4)$$

其中  $A_c$  为投影面积，由 Oliver, Pharr<sup>[2]</sup>

$$h_s = \varepsilon \frac{P}{S} \quad (5)$$

其中  $\varepsilon$  为与压头几何形状有关的经验常数，而初始卸载刚度  $S$  的计算公式是由 Sneddon<sup>[18]</sup> 针对圆锥体在弹性场推导而后由郑哲敏<sup>[3]</sup> 推广到弹塑性场

$$S = \sqrt{\frac{4}{\pi}} E_r \sqrt{A_c} \quad (6)$$

其中： $\frac{1}{E_r} = \frac{1 - \gamma_i}{E_i} + \frac{1 - \gamma_s}{E_s}$ ； $E_i$  与  $\gamma_i$ ， $E_s$  与  $\gamma_s$  分别为压头与试件材料的弹性模量与泊松比。

将式 (4)，式 (5) 代入式 (2)，得到  $r = 0$  时载荷  $P_p$  与压头位移  $h$  的关系

$$P_p = E_r \left( \frac{1}{\sqrt{24.5}} \sqrt{\frac{E_r}{H}} + \varepsilon \sqrt{\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{H}{E_r}} \right)^{-2} h^2 \quad (7)$$

式 (7) 与 Hainsworth<sup>[16]</sup> 得到的经验表达式类似。

如果压头尖端半径  $r \neq 0$ ，设压痕投影面积与接触深度的关系

$$A_c = C(h_c + \xi)^2 \quad (8)$$

$C$  与  $\xi$  为与压头有关的几何参数，见图 2。式 (8) 在  $h_c > d$  时成立，当  $r = 100 \text{ nm}$  时， $d \approx 6 \text{ nm}$ ，在目前的纳米压痕实验中总是满足  $h_c > d$ 。

当尖端半径  $r \neq 0$  时，设式 (5) 与式 (6) 依然成立，依照前述  $r = 0$  的推导过程，同样给出当尖端半径为  $r$  时压头载荷  $P_n$  与位移  $h$  的关系

$$P_n = E_r \left( \frac{1}{\sqrt{C}} \sqrt{\frac{E_r}{H}} + \varepsilon \sqrt{\frac{\pi}{4}} \sqrt{\frac{H}{E_r}} \right)^{-2} (h + \xi)^2 \quad (9)$$

尽管式 (7) 与式 (9) 的推导中利用了经验拟合公式 (5)，且对于纳米压痕仪的标准 Berkovich 压头并不严格满足式 (6)，但从式 (7) 与式 (9) 可以定性地看出：如果压痕投影面积  $A_c$  的计算公式仅与压痕

深度  $h$  有关，即  $A_c \propto h^2$ ，则得出两种纳米硬度的测量值  $H_p$  与  $H_n$

$$\left. \begin{aligned} r = 0, & \quad H_p = f(E_r, H, \varepsilon) \\ r \neq 0, & \quad H_n = (1 + \xi/h)^2 f(E_r, H, \varepsilon) \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

如果材料的  $E_r, H$  与压头经验参数  $\varepsilon$  均为常数，由式 (10) 可以看出利用尖端曲率半径  $r = 0$  的压头得到材料硬度的测量值  $H_p$  为常数；而利用  $r \neq 0$  的压头得到的材料硬度测量值  $H_n$  将随压痕深度  $h$  的减小而升高。

以目前较为先进的美国 MTS 公司的纳米压痕仪 Nano indenter XP 为例，其标准 Berkovich 新压头标称尖端曲率半径约  $50 \text{ nm}$ ，稍旧的压头为  $100 \sim 150 \text{ nm}$ 。这里取平均值  $r = 100 \text{ nm}$ ，则可计算得到  $\xi = 6.22 \text{ nm}$ 。如果认为  $H_p$  为常数并作为标准值，则根据式 (10) 定义无量纲数  $RD$  表示  $H_n$  与  $H_p$  的相对差别

$$RD = \frac{H_n - H_p}{H_p} \times 100 \quad (11)$$

由此得到图 6 为  $RD$  随压痕深度的变化。

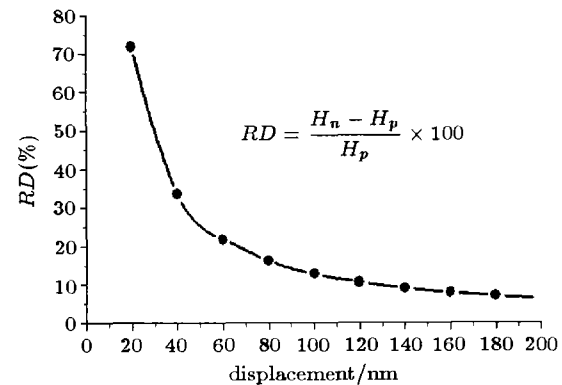


图 6  $RD$  随压痕深度的变化

Fig.6  $RD$  changed with the indentation depth

以上的推导是针对圆锥体压头、线弹性材料，利用经验参数导出的，为了更精确地说明该问题，下面利用有限元方法，结合几种典型材料，针对  $r = 0$  与  $r = 100 \text{ nm}$  两种 Berkovich 压头，模拟其压痕过程并比较它们的结果。

### 3.2 有限元分析

图 7 为 Berkovich 压头尖端的几何形状，可能接触区域的单元长度为  $6 \sim 20 \text{ nm}$ 。与  $r = 0$  的有限元模型不同，当  $r = 100 \text{ nm}$  时，有限元模型中不包含  $OABC$  部分。

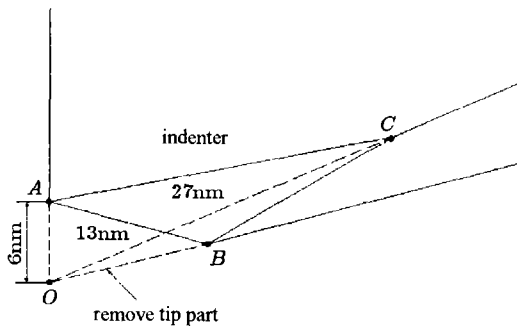


图 7 压头几何形状的处理

Fig.7 The shape of modified Berkovich indenter

利用尖端半径  $r = 0$  与  $r = 100 \text{ nm}$  两个有限元模型分别对金属材料铜、铝与钨进行压痕过程有限元模拟，其结果显示规律完全一致，为简捷此处只给出材料铜的载荷 - 位移曲线与硬度 - 位移曲线。图中点为典型计算值，线为拟合曲线。从图中明显看出：①在相同的载荷下，使用两种模型得到的压痕深度有着显著不同；为了得到相同的压痕深度，对于尖端曲率半径  $r = 100 \text{ nm}$  的压头，需要的载荷偏大，所以得到的材料硬度测量值  $H_n^{\text{FEA}}$  也偏大。

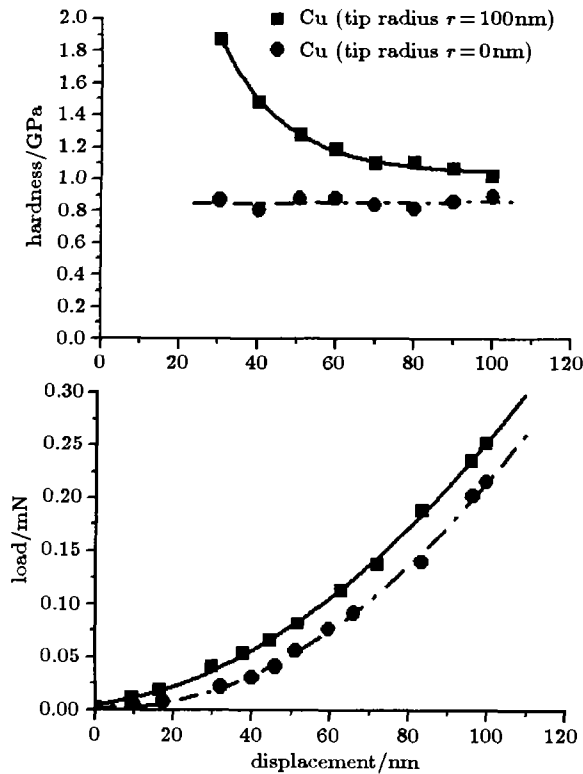


图 8 铜的硬度 - 位移曲线 (上) 与载荷 - 位移曲线 (下)

Fig.8 The hardness-displacement curve and load-displacement curve of copper

②在一定的计算误差范围内，使用  $r = 0$  的模型得到的硬度值  $H_p^{\text{FEA}}$  不随压痕深度的变化而变化，这一点与文献 [11] 是相同的，但  $H_n^{\text{FEA}}$  会随压痕深度的减小而逐步增加。

同样，以  $H_p^{\text{FEA}}$  为标准值，比照式 (11) 计算  $H_n^{\text{FEA}}$  与  $H_p^{\text{FEA}}$  的差别  $RD^{\text{FEA}}$  随压痕深度的变化，其结果见图 10 中前三组数据点；同时为了考察式 (9) 中  $\xi$  的影响 (在有限元计算中  $\xi = 6 \text{ nm}$ )，对  $r = 100 \text{ nm}$  模型，在计算压痕硬度时考虑  $\xi$  对接触面积的修正： $A_c = 24.56(h_c + \xi)^2$ ，同样用式 (11) 得到经修正的硬度测量值  $H_{n1}^{\text{FEA}}$  相对  $H_p^{\text{FEA}}$  的相对差别  $RD_1^{\text{FEA}}$ ，其结果如图 9 中后三组数据。

用  $RD_2^{\text{FEA}} = RD^{\text{FEA}} - RD_1^{\text{FEA}}$  表示仅与  $\xi$  相关的相对差别，其结果如图 10 中数据点；图 10 中的实线表示前述理论分析中的  $RD$  随压痕深度的变化。

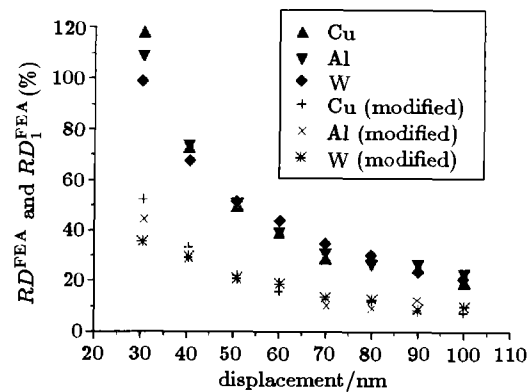


图 9  $RD^{\text{FEA}}$  与  $RD_1^{\text{FEA}}$  随压痕深度的变化

Fig.9  $RD^{\text{FEA}}$  and  $RD_1^{\text{FEA}}$  changed with the depth of indentation

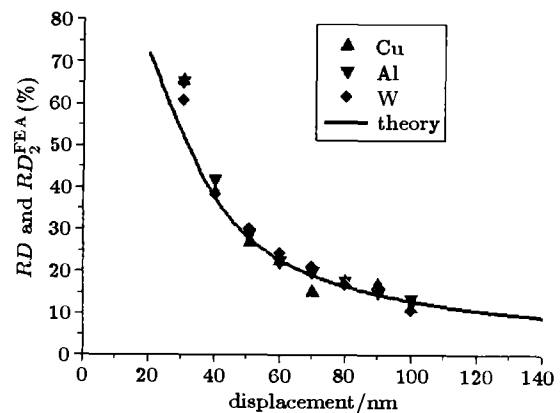


图 10  $RD_2^{\text{FEA}}$  与  $RD$  随压痕深度的变化

Fig.10  $RD_2^{\text{FEA}}$  and  $RD$  changed with the depth of indentation

尽管 3 种材料的特性参数各不相同, 但从图 9 可以看出不同材料的  $RD^{FEA}$  与  $RD_1^{FEA}$  随压痕深度的变化趋势基本相同. 经过接触面积的修正,  $RD_1^{FEA}$  相比  $RD^{FEA}$  有了明显的减小, 但  $RD_1^{FEA}$  随压痕深度减小而升高的现象仍然十分明显. 分析两种硬度测量值  $H_n^{FEA}$  与  $H_p^{FEA}$  的差别主要由两部分组成:

(1) 对于实际使用的纳米压痕仪, 压头尖端曲率半径  $r$  不能确切地得到, 接触面积的计算公式如果缺少  $\xi$  必然造成硬度值的高估, 对于特定的压头状态  $\xi$  是一个常量, 所以随着压痕深度的增大误差逐步减小. 该部分差别仅与接触面积计算公式中  $\xi$  有关, 这一点可从图 10 中得到验证: 3 种材料计算结果中仅与  $\xi$  相关的  $RD_2^{FEA}$  与理论分析得到的  $RD$  吻合较好. 尽管目前的纳米压痕技术<sup>[2]</sup>具有一定的压头几何形状标定功能, 但标定一般都在较大压痕深度(如  $2\mu\text{m}$  或以上)下进行, 从文献<sup>[2]</sup>的图 23~图 25 上看其标定结果在小压痕深度下误差较大, 所以在小压痕深度下测量结果出现硬度值的偏高是正常的.

(2) 即使在接触面积的公式中考虑  $\xi$  的影响, 对于  $r = 100\text{nm}$  的模型, 压痕硬度测量值  $H_{n1}^{FEA}$  仍然随压痕深度的减小而升高. 这是因为在同样的载荷下, 两种不同压头下被测材料的应变场有区别: 曲率半径  $r = 0$  的压头尖端下形成的应力集中更严重, 被测材料更易屈服而使压痕深度大于尖端半径  $r \neq 0$  的压头压入的深度, 这种效应也随着压痕深度的增大而减小. 这是由于几何非相似性引起的物理非相似性. 这也组成了两种压痕硬度测量值的差别.

## 4 结 论

(1) 利用有限元方法进行压痕过程的三维模拟是可行的, 这种数值模拟不仅是压痕过程的再现, 更可以作为工具研究真实压痕仪不便或不可能完成的研究. 它可以提供位移场、塑性应变场等不能由真实仪器提供的信息, 还能不受实验条件的影响, 方便地构造单参量变化材料特性、不同的边界条件以及复杂的材料微结构组织, 得出结果以指导实验.

(2) 利用经典连续介质力学的本构理论, 由理想压头得到的材料硬度不随压痕深度变化; 而实际压头尖端曲率半径不为零, 得到的压痕硬度测量值会随着压痕深度的减小而升高. 主要因素有二: 一是对压痕接触面积的低估; 二是两种压头不同的应力场.

## 参 考 文 献

- 1 Tabor D. Indentation hardness: fifty years on a personal view. *Philos Mag A*, 1996, 74(5): 1207~1212
- 2 Oliver WC, Pharr GM. An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments. *J Mater Res*, 1992, 7(6): 1546~1583
- 3 Cheng Che-min, Cheng Yang-tse. On the initial unloading slope in indentation of elastic-plastic solids by an indenter with an axisymmetric smooth profile. *Appl Phys Lett*, 1997, 71(18): 2623~2625
- 4 Pethica JB, Hutchings R, Oliver WC. Hardness measurement at penetration depths as small as 20nm. *Philos Mag A*, 1983, 48: 593
- 5 Xu KW, Hou GL, et al. Prediction of nanoindentation hardness profile from a load-displacement curve. *J Mater Res*, 1998, 13(12): 3519~3526
- 6 Iost A, Bigot R. Indentation size effect: reality or artefact. *J Mater Sci*, 1996, 31: 3573~3577
- 7 Begley MR, Hutchinson JW. The mechanics of size dependent indentation. *J Mech Phys Solids*, 1998, 46(10): 2049~2068
- 8 Shu JY, Fleck NA. The prediction of a size effect in microindentation. *Int J Solids and Structures*, 1998, 35(13): 1363~1383
- 9 Ma Q, Clarke R. Size dependent hardness of silver single crystals. *J Mater Res*, 1995, 10(4): 853~863
- 10 Cheng Yang-tse, Cheng Che-min. Scaling relationships in conical indentation of elastic-perfectly plastic solids. *Int J of Solids and Structures*, 1999, 36: 1231~1243
- 11 Bhattachary AK, Nix WD. Finite element simulation of indentation experiments. *Int J of Solids and Structure*, 1988, 24(9): 881~891
- 12 Sun Y, Bell T, Zheng S. Finite element analysis of the critical ratio of coating thickness to indentation depth for coating property measurement by nanoindentation. *Thin Solid Films*, 1995, 258: 198~204
- 13 Bolshakov A, Oliver WC, Pharr GM. Influences of stress on the measurement of mechanical properties using nanoindentation: Part II: Finite element simulations. *J Mater Res*, 1996, 11(3): 760~768
- 14 Laursen TA, Simo JC. A study of the mechanics of microindentation using finite elements. *J Mater Res*, 1992, 7(3): 618~626
- 15 Zeng K, Rowcliffe D. Analysis of penetration curves produced by sharp indentations on ceramic materials. *Philos Mag A*, 1996, 74(5): 1107~1116
- 16 Hainsworth SV, Chandler HW, Page TF. Analysis of nanoindentation load-displacement loading curves. *J Mater Res*, 1996, 11(8): 1987~1995
- 17 Malzbender J, de With G, den Toonder J. The P-h<sup>2</sup> relationship in indentation. *J Mater Res*, 2000, 15(5): 1209~1212

18 Sneddon IN. The relation between load and penetration in the axisymmetric boussinesq problem for a punch of arbitrary profile. *Int J Engng Sci*, 1965, 3: 47~57

### 3D FINITE ELEMENT SIMULATION OF THE NANOINDENTATION PROCESS<sup>1)</sup>

Li Min<sup>\*,†</sup> Liang Naigang<sup>\*</sup> Zhang Taihua<sup>\*</sup> Wang Lindong<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup>(State Key Lab. of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, CAS, Beijing 100080, China)

<sup>†</sup>(Dept. of Flight Vehicle Design and Applied Mechanics, Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100083, China)

**Abstract** In recent years, micro-scale indentation, especially nanoindentation has become a standard test to measure mechanical properties of various new type surface materials. However, numerical simulation by finite element method (FEM) to simulate the micro-scale indentation process plays an important role as well in explaining experimental phenomena and obtaining more accurate parameters of material surface mechanical properties. Bhattacharya, Nix, Laursen and Sino developed the research in this field earlier. In order to save computation cost, Vickers indenter and Berkovich indenter as a standard indenter of microhardness and nanoindentation equipment with geometrical shapes of regular four-sided pyramid and triangular pyramid were substituted by conic indenter and thus the 2D axial symmetrical element model was adopted to simulate the micro-indentation process in their study. As a matter of fact, the micro-scale indenters are not axisymmetric due to unevenness of all material in micro-scale. These properties could not be presented in 2D cone model. In this paper 3D finite element method is used to explore the mechanics of the nanoindentation process for Berkovich indenter. The mesh and boundary condition of this model and the material property of sample in FE simulation are introduced. The tests of standard sample are conducted for FEA. The influence of friction, slide and sample size on the results is discussed. Based on the 3D finite element simulation, the effects of tip radius on nano-indenter are investigated. The nanoindentation results obtained by ideal Berkovich indenter and blunt tip indenter are comparatively analyzed, indicating that the measured hardness by using of blunt tip indenter decrease with the depth of indentation, even for the materials complying with traditional homogeneous continuum constitutive relation under regular testing and evaluating condition. The effect of tip radius on nanoindentation is an explanation other than the strain gradient effect.

**Key words** nanoindentation, finite element simulation, hardness, indentation size effect

Received 12 January 2002, revised 10 March 2003.

1) The project supported by the Chinese Academy of Sciences Foundation(KGCX1-11) and Post Doctor Science Foundation of China.