

各種表面曲率半徑之壓痕研究

Indentation Study of Surfaces with Various Radii

譚仲明¹，張承濬²，陳建安²

¹光機電暨材料研究所

²吳鳳科技大學

摘要

進行有限元素模擬，分析具表面曲率的壓痕試驗。本質上任何一個面是有一定弧度，傳統的硬度試驗是在一個平面上進行，但當曲率半徑明顯時，需要重新評估。模擬結果表示，硬度不具有很強的表面曲率半徑依賴性，Oliver-Pharr 方法高估了硬度。有限元素法模擬的結果也顯示表面曲率半徑的影響，可以通過使用真正的接觸面積，評估硬度予以消除。

關鍵詞：壓痕試驗，硬度，表面曲率，有限元素法

Abstract

A surface is intrinsically with certain curvature. The traditional characterization of hardness based on a flat surface needs to be reevaluated when the effect of curvature is significant. This paper conducts finite element analysis to address the indentation with surface curvature. The simulation results indicate that the hardness does not have strong surface curvature radius dependence and Oliver-Pharr scheme overestimates the hardness. The finite element simulations also show that surface curvature radius effect can be eliminated by using the true contact area to evaluate the hardness.

Keywords : indentation, hardness, surface curvature, FEM.

一、前言

Nanoindentation(奈米壓痕試驗)已變成一個用於辨識薄膜和奈米薄膜力學特性的重要方法[1-4]。直覺地，可能會懷疑曲面上的壓痕試驗是否影響其測量的結果，當然這是一個重要的問題必須進行壓痕的測試來回答。所有曲面在顯微鏡下都是粗糙的，根據傳統硬度的測試是在一個平面上進行的，當曲率的影響明顯時必須重新評估，當設備的特徵長度降低時，呈現了表面曲率對硬度特性的影響。Bobji 和 Biswas [5-8] 顯示了球形表面與球形的壓痕器可從這樣的一個計算公式估計硬度：

$$H = H_s \left(1 - \frac{R_i}{R_a} \right) \quad (1)$$

其中 H_s 是光滑平坦的表面， R_i 和 R_a 是硬度壓痕頭與表面粗糙的半徑。我們以前的研究中曾指出金屬壓痕尺寸效應，其中壓痕的硬度增加或減少，可以用真實的接觸面積來評估硬度予以消除。因此，本文針對使用類似的方法，探討單一個粗糙峰接觸問題。在這篇文章中，我們進行有限元素模擬，探討表面曲率半徑的影響。此外審查了著名的 Oliver-Pharr 方法是否仍然有效。



二、有限元素分析

2.1 有限元素模型

模擬系統的配置包括一個球形壓頭和一個二維鋼結構的平板上具相同高度的5個不同半徑的曲面如圖 1 所示。

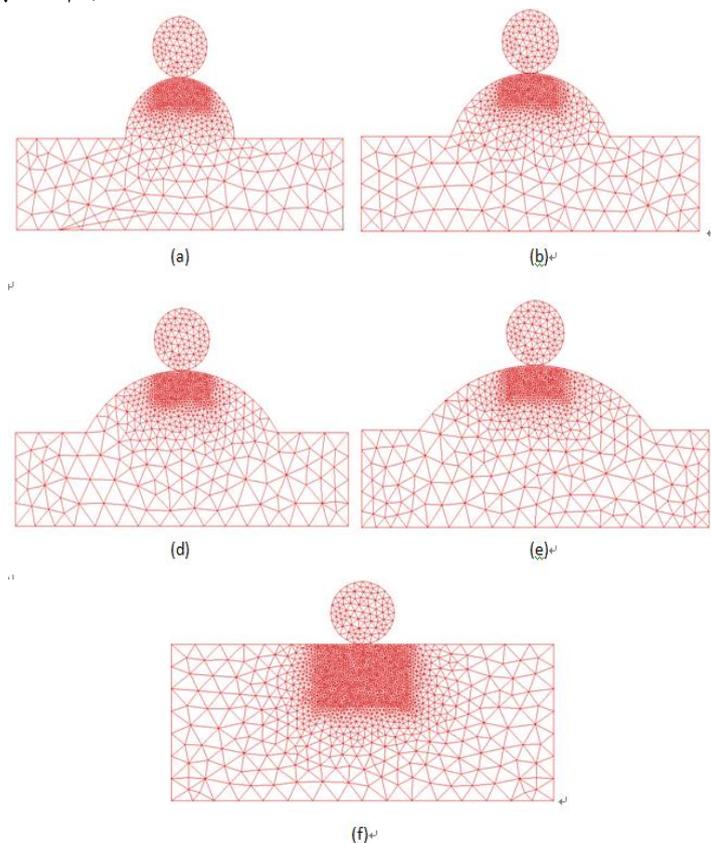


圖 1。具有相同曲面表面高度 (20 毫米)，和不同的曲線曲面半徑的有限元模型：(a) R = 20 毫米 (b) R = 30 毫米 (c) R = 40 毫米 (d) R = 50 毫米 (e) 平表面。

2.2.更新 Lagrangian 公式推導

使用更新 Lagrangian 公式推導系統中每一個機構的平衡方程式。這意味著所有變量和零件在動態平衡被更新到當前位置。

2.2.1 應力和應變測量

整體位移和旋轉在系統中的每個部分，應變張量的量測必須是客觀的，Green-Lagrange 應變測量採用的定義如下：

$${}^t_0\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}({}^t_0u_{i,j} + {}^t_0u_{j,i} + {}^t_0u_{k,i}{}^t_0u_{k,j}) \quad (2)$$

其中 ${}^t_0u_{i,j}$ ：表示從參考時間的位移向量由 $t=0$ 到當前時間 t 與 Green 應變工作共軛之應力測量, Piola - Kirchoff 應力與真實應力，關係 (Cauchy 應力) 如下，

$${}^t_0S = \frac{\rho}{\rho} {}^0X {}^t\tau {}^0X^T \quad (3)$$

其中 ${}^t\tau$ ：表示在時間 t 的 Cauchy 應力。 ${}^0\rho$ ， ${}^t\rho$ ：表示在時間 0 和 t 的密度， 0X ：表示相對於時間 0 時間 t 變形的變形梯度。



2.2.2 運動公式

根據 D'Alembert 的動態均衡概念，對於系統中的每個部位的運動方程，推導出適用的 $t+\Delta t$ 的虛位移原理，

$$\int_{t+\Delta t V} {}^{t+\Delta t} \tau_{ij} \delta {}^{t+\Delta t} \varepsilon_{ij} d {}^{t+\Delta t} V = {}^{t+\Delta t} \mathfrak{R} \quad (4)$$

$${}^{t+\Delta t} \mathfrak{R} = \int_{t+\Delta t V} {}^{t+\Delta t} f_i^B \delta u_i d {}^{t+\Delta t} V + \int_{t+\Delta t S_f} {}^{t+\Delta t} f_i^S \delta u_i^S d {}^{t+\Delta t} S \quad (5)$$

其中 $\delta {}^{t+\Delta t} \varepsilon_{ij}$ ：表示時間 $t + \Delta t$ 的 Green 應變變化。

${}^{t+\Delta t} V$ ：表示 $t + \Delta t$ 的時間量的一部分。

${}^{t+\Delta t} f_i^B$ ：表示在時間 $t + \Delta t$ 的單位體積外部機構力量。

使用 D'Alembert 原則，這體積力量包括加速度造成的慣性力量。

${}^{t+\Delta t} f_i^S$ ：表示在時間 $t + \Delta t$ 表面面積的外部表面應力。

${}^{t+\Delta t} S_f$ ：表示在時間 $t + \Delta t$ 的表面積。

應力與應變增量分解線性與非線性後，線性增量運動方程表示如下

$$\int_{t V} {}^t C_{ijrs} {}^t e_{rs} \delta {}^t e_{ij} d {}^t V + \int_{t V} {}^t \tau_{ij} \delta {}^t \eta_{ij} d {}^t V = {}^{t+\Delta t} \mathfrak{R} - \int_{t V} {}^t \tau_{ij} \delta {}^t e_{ij} d {}^t V \quad (6)$$

這裡是彈性張量和當前配置中的 Cauchy 應力張量和應變增量，當前配置中的線性和非線性部分。

2.2.3 有限元素離散化

我們用兩維平面應變元素離散化系統的每個部分。由於我們使用等向有限元素來離散化，增量元素位移作為當前配置。

$${}^t x_i = \sum_{K=1}^N h_K {}^t x_i^K \quad (7)$$

$${}^t u_i = \sum_{K=1}^N h_K {}^t u_i^K \quad (8)$$

直角坐標和元素通用點，增量位移，與在元素的節點 K 函數。

代入方程 (7) 和式 (6) (8) 元素，增量平衡方程式表示在下面矩陣形式。

$$M {}^{t+\Delta t} \ddot{U}_e + ({}^t K_L + {}^t K_{NL}) U_e = {}^{t+\Delta t} \mathfrak{R} - {}^t F_e \quad (9)$$

其中 M 是獨立質量矩陣； ${}^{t+\Delta t} \ddot{U}_e$ 和 U_e 是結點加速度向量與結點位移向量增量； ${}^t K_L$ 和

${}^t K_{NL}$ 是線性和非線性應變硬化的剛度矩陣； ${}^{t+\Delta t} \mathfrak{R}$ 和 ${}^t F_e$ 是外加結點負載與結點力量向

量。以上有限元素矩陣計算如下公式分別為：

$$M = \int^0 \rho H^T H d^0 V \quad (10)$$



$${}^t\mathbf{K}_L = \int_{{}^tV} {}^t\mathbf{B}_L^T {}^t\mathbf{C} {}^t\mathbf{B}_L d{}^tV \quad (11)$$

$${}^t\mathbf{K}_{NL} = \int_{{}^tV} {}^t\mathbf{B}_{NL}^T {}^t\boldsymbol{\tau} {}^t\mathbf{B}_{NL} d{}^tV \quad (12)$$

$${}^{t+\Delta t}\mathfrak{R} = \int_{S_f} \mathbf{H}^{sT} {}^{t+\Delta t}f^s dS + \int_{0V} \mathbf{H}^T {}^{t+\Delta t}f^B d0V \quad (13)$$

$${}^t\mathbf{F} = \int_{{}^tV} {}^t\mathbf{B}_L^T {}^t\widehat{\boldsymbol{\tau}} d{}^tV \quad (14)$$

在方程 (10) - (14)，剛度矩陣的線性和非線性部分，和相應的線性和非線性，應變-位移變換矩陣。矩陣和 Cauchy 應力在當前配置中的向量時。然後我們組裝部分的元素，獲得增量平衡方程式為整個多體動態系統如下

$$\mathbf{M} {}^{t+\Delta t}\ddot{\mathbf{U}} + {}^t\mathbf{K}\mathbf{U} = {}^{t+\Delta t}\mathfrak{R} - {}^t\mathbf{F} \quad (15)$$

其中 ${}^{t+\Delta t}\ddot{\mathbf{U}}$ 是結點加速度向量； \mathbf{U} 為整個系統的結點位移增量向量； ${}^t\mathbf{K}$ 是整個系統增量剛度矩陣； ${}^{t+\Delta t}\mathfrak{R}$ 是外部施加的結點負載； ${}^t\mathbf{F}$ 是整個系統的結點力量向量。

三、結果與討論

本文進行壓痕試驗之模擬借運動壓印器向下逐步壓印結構鋼材。每次壓痕器向下運動一個位移增量，整個系統能量最小化，以達到力平衡。這項研究中所使用的能量最小化演算法是牛頓法。在這項研究中，我們使用五種不同的半徑的曲面而最大壓痕深度保持為 3 mm 去模擬球形壓痕週期。負載（壓痕器施加之力量）對這些例子紀錄壓痕深度獲得負載/壓痕深度曲線。可以觀察記錄每一個壓痕週期，在加載過程中發生的塑性變形。在此研究中，如圖 2 所示為一典型的負載/壓痕深度曲線(曲面半徑為 20 mm)。從圖 2 中，可以看到從曲線的卸載部分發生極少量的彈性恢復。

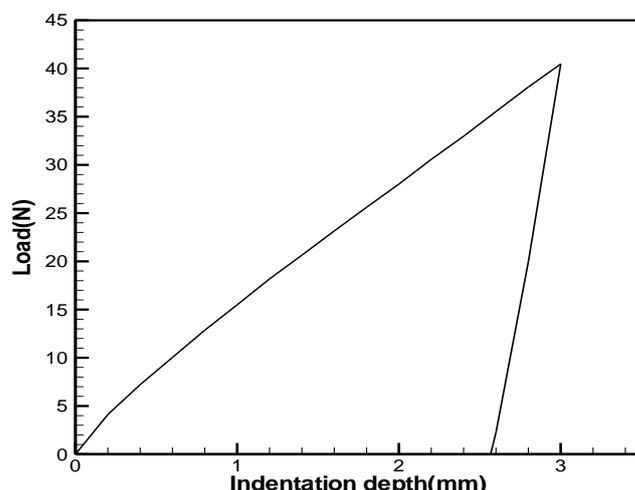


圖 2 一個典型的負載與壓痕深度曲線(曲面為 20 毫米半徑)

圖 3 呈現了在最大壓痕深度 20 mm 半徑曲面內之 von Mises 應力分佈。von Mises 應力值超過機械強度，導致發生塑性變形。從圖 3，可以看到 von Mises 在整個接觸的壓痕與曲面上，區域應力超過 200 MPa 用於結構鋼材屈服應力。換句話說，圖 3 所示的接觸條件是完全塑性。這也解釋為什麼只有極少量的彈性恢復在卸載過程中發生。Brinell hardness 的測試，硬化的鋼球金屬表面光滑，使壓痕大小能方便地在顯微鏡的測量，正



在計算的壓痕和壓力已知悉，計算每單位面積當在一定的限度內獲取的值，大小球和壓力的數量無關。

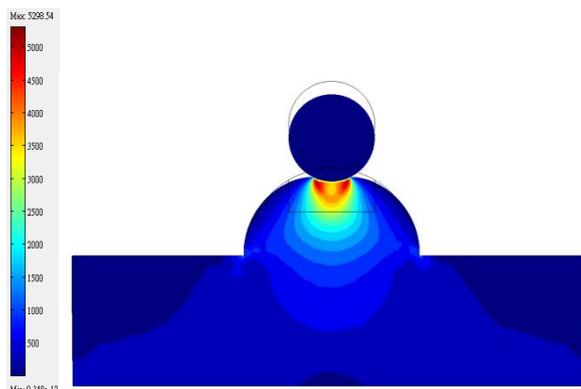


圖 3 von Mises 應力分佈的曲面在最大的壓痕深度 20 mm 半徑內曲面。

Brinell hardness 試驗與測試材料，材料強度極限確定的硬度值之間的存在，硬度與強度極限的關係，是一個常數。硬度數字必須乘以係數，以獲得最終強度在每平方毫米公斤，可由此經試驗式獲得，並不斷測試各種材料，並以相同的方式處理不同材質和材料。以下係數給出了不同等級的鋼材：

鋼材，比較軟 $k = 0.360$

鋼材，柔軟和半硬 $k = 0.355$

鋼材，半硬 $k = 0.353$

鋼材，硬 $k = 0.349$

將會看到，這些係數不同，但是輕微不同成分的鋼，作為一般規劃，可用於所有等級的鋼因子 0.355。

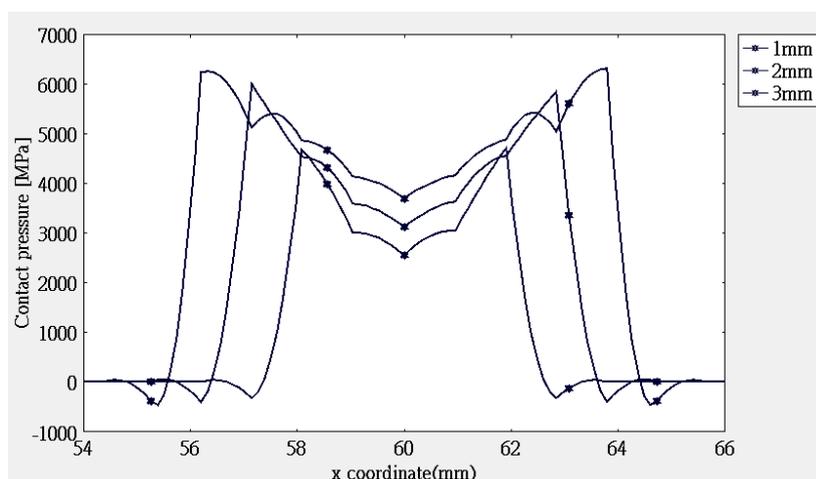


圖 4 20 mm 半徑下，三個壓痕深度時的接觸壓力分佈。

這些的硬度的定義是用於測量壓痕的標準。在近年來主要用於奈米壓痕測試，硬度的定義是在該負荷預測時使用硬度除以負荷預測裡接觸面積中的最大負載。硬度的傳統定義是方法是負荷除以負荷去除後的殘餘壓痕面積。兩個硬度值明顯不同。例如，在橡膠壓痕的情況下，這兩個的硬度值大不相同。但是，我們在本文中使用的第一個定義。這項工作，我們第一次使用接觸壓力來標示滿負荷時模擬真實的接觸面積。圖 4 顯示 20



mm 半徑在三個壓痕深度時的接觸壓力分佈。一旦我們有了真正的接觸面積，可以從該負載接觸後的投影面積除以負荷計算硬度。以這種方式，我們評估硬度球形壓痕週期對用五個不同半徑曲面如圖 5 中所示。

在奈米壓痕測試中，接觸深度 (h_c) 是從總壓痕深度 (h_t) 來估計如下式:

$$h_c = h_t - \varepsilon P_{\max} / S_{\max}$$

(16)

其中錐體壓痕器 $\varepsilon = 0.72$ ，球形壓頭 $\varepsilon = 0.75$ ， S_{\max} 為剛度，等於卸載曲線在最大負載 (P_{\max}) (dP/dH) 之斜率，從壓痕器的幾何關係，然後計算接觸面積。我們還利用從模擬得到負載/深度之曲線，計算上述分析方法的硬度，顯示在圖 5 硬度的三種計算值中，與真實接觸面積獲得之硬度值相較之下確定計算出的結果較高。因此，公式 (16) 明顯低估了接觸深度。也就是說，硬度確實有強烈的曲面半徑依賴性如使用 Oliver-Pharr 方法。且該方法顯示了根據 Bobji and Biswas [5-8] 論文之公式 (1) 匹配的曲面半徑依賴性。

由公式 (1) 顯示，表面半徑影響是從彎曲表面上壓痕試驗獲得的硬度會因減少表面半徑而減少。Bobji and Biswas 解釋說，最大負載保持相同的同時，因為幾何關係在同一壓痕深度的接觸面積會增加當曲面的半徑減少。為了進一步檢查 Oliver-Pharr 方法，我們檢視模擬獲得之壓痕器下的接觸壓力分佈計算結果，發現對於接觸面積大多數的部分，觀察到有發生塑性變形，但沒有明顯的應變硬化。這可以得出結論，對具曲度表面進行壓痕試驗時使用 Oliver 方法是不恰當的。

在本文中的硬度定義，可直接代表元件上的平均接觸壓力。從圖 5 中，當降低表面的曲率半徑硬度很明顯是沒有下降的趨勢。此外，Chiu et al. [11] 利用 TEM 測量 Ni₃Al (鉻，硼) 單晶奈米壓痕誘發之塑性區域。他們的研究表示，奈米硬度保持不變，假設硬度是由負荷除以塑性區的投影面積來計算。根據連續介質力學，Cheng et al. [12] 進行了一系列的有限元素分析檢查表面上的壓痕試驗中 Oliver 方法的有效性。他們的研究方法，大多數的材料裡含彈塑性固體的接觸面積。同樣，我們通過 COMSOL 3.4 進行有限元素模擬來檢查曲線表面壓痕相同的問題。圖 5 顯示相同的方式模擬結果與 Jeng et al 的報告一致 [12]。出人意料的是，即使在巨觀尺度，半徑大小的影響可透過使用真實的接觸面積計算硬度來確保。然而，我們也注意到如使用 Oliver 方法元件硬度會有如式(1)下降的趨勢。



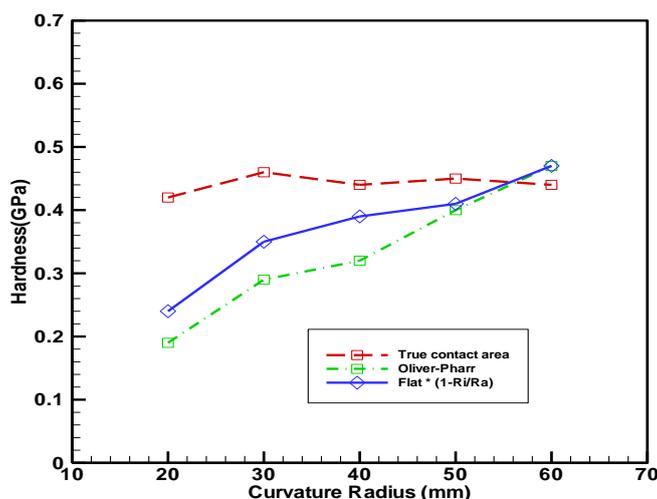


圖 5 硬度由三個不同的方法計算對不同曲率半徑變化圖。

四、結論

總之，我們在多個曲率半徑曲面上進行壓痕的有限元素模擬。模擬結果顯示，硬度不具有很強的曲率半徑依賴性。硬度定義採用最大負荷除以該負荷下的接觸面積。如使用在奈米壓痕測試普遍採用的分析方法硬度明顯被高估了。同時，大部份的接觸面積內具有塑性變形的發生，但沒有明顯的變形硬化且壓痕器下的接觸壓力分佈分析發現，如硬度的計算使用真實接觸面積就沒有明顯曲率半徑效應。

五、參考文獻

- [1] B. N. Lucas, W. C. Oliver, and J. E. Swindeman, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 522, 3 (1998)
- [2] J. L. Hay, M. E. O'Hern, and W. C. Oliver, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 522, 27 (1998)
- [3] J. C. Hay, and G. M. Pharr, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 522, 39 (1998)
- [4] W. Lu, and K. Komvopoulos, *J. Tribo.* 123, 641 (2001)
- [5] M. S. Bobji and S. K. Biswas, *Tribo. Lett.* 2, 381(1996)
- [6] M. S. Bobji and S. K. Biswas, *Appl. Phys. Lett.* 71, 1059(1996)
- [7] M. S. Bobji and S. K. Biswas, *J. Mater. Res.* 13, 3227(1998)
- [8] M. S. Bobji and S. K. Biswas, *Tribo. Lett.* 7, 51(1999)
- [9] Y. R. Jeng and C. M. Tan, *Appl. Phys. Lett.* 71 251901(2006)
- [10] C. M. Tan and Y. R. Jeng, *Int. J. Solids Struct.* 46 1884(2009)
- [11] Y. L. Chiu and A. H. W. Ngan, *Acta Mat.* 50, 2677 (2002)
- [12] Y. T. Cheng, C. M. Cheng, *Phil. Mag. Lett.* 78, 115 (1998)

