

УДК 539.374

ВЛИЯНИЕ ВЯЗКОУПРУГОГО ОСНОВАНИЯ НА УСТОЙЧИВОСТЬ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОРАЗМЕРНЫХ ПОКРЫТИЙ

© Д.Л. Быков, Д.Н. Коновалов

Россия, Королев Московской области, ЦНИИ машиностроения

Bykov D.L., Kononov D.N. Influence of a viscoelastic base on the stability of metal nanometer coatings. The mathematical modelling of bifurcation of thin metal coatings fastened with a thick polymer bed is performed. The behaviour of the polymer material is described by a non-linear thermoviscoelasticity theory which makes it possible to take account of irreversible modifications of mechanical characteristics of the material, including processes of aging. The obtained numerical results are compared to the experimental data [1] and to the calculations quoted there. *References:* 1. Volynsky A.L., Bazhenov S.L., Lebedeva O.V., Yaminskiy I.V., Ozerin A.N., Bakeev N.F. The phenomenon of the stability loss of rigid coating during tensile drawing of polymer support // *Vysokomolekularnye soedineniya. Ser. A.* 1997. V. 39. № 11. P. 1805-1811. (In Russian).

Проводится математическое моделирование явлений бифуркации тонких металлических покрытий, жестко скрепленных с толстостенным полимерным слоем. Свойства полимерного материала описываются нелинейной теорией термовязкоупругости, учитывающей необратимые изменения его механических характеристик, включая процессы старения. Полученные числовые результаты сравниваются с экспериментальными данными [1] и приведенными там расчетами.

1. Введение. При создании конструкций с использованием нанотехнологий существенное значение имеют соответствующие математические модели, позволяющие объяснять и обобщать результаты тщательно проводимых и зачастую дорогостоящих экспериментов. В работе [1] описаны опыты, в которых наблюдались явления потери устойчивости тонких (от 4 до 42 нм) платиновых покрытий, нанесенных методом ионного напыления на полимерные подложки с толщиной от 100 до 500 мкм. Выпучивание вызывалось деформацией подложки при различных температурах и скоростях деформирования последней.

Анализ, проведенный в указанной работе, основывался на линейно упругих моделях покрытия и подложки. Ниже проблема устойчивости покрытия рассматривается в предположении, что подложка является вязкоупругой, а покрытие может быть упругим или упругопластическим.

2. Выбор математической модели, описывающей бифуркацию тонкого покрытия. Для получения аналитического решения задачи устойчивости, удобного для последующего анализа, допустим, что выпучивание покрытия происходит так же, как выпучивание балки, связанной с вязкоупругим основанием. Это предположение оправдывается отношениями толщин покрытия h и подложки H : $h/H \approx 1/12500$, а также соответствующих модулей упругости E_j и E : $E_j/E \approx 13000$.

Уравнение сжато-изогнутой упругопластической балки можно записать в виде:

$$K_1(\sigma_1)Iw^{(IV)} + \sigma_1 hw^{(II)} + q = 0. \quad (1)$$

Здесь $K_1(\sigma_1)$ – модуль Кармана [2]; I – погонный момент инерции сечения балки, равный $h^3/12$; w – ее прогиб; римские цифры в скобках указывают на порядок дифференцирования по координате, идущей вдоль оси балки; q – нормальная реакция вязкоупругого основания. Функция $K_1(\sigma_1)$ выражается через сжимающее напряжение в покрытии σ_1 по формуле:

$$K_1(\sigma_1) = 4E_1 E_k / \left(\sqrt{E_1} + \sqrt{E_k} \right)^2, \quad E_k = d\sigma_u / de_u, \quad (2)$$

где $d\sigma_u / de_u$ – производная интенсивности напряжений по интенсивности деформаций, зависящая от σ_1 .

При упругих деформациях $K_1(\sigma_1) \equiv E_1$.

Наблюдаемая после потери устойчивости форма покрытия была близка к синусоидальной. Ее можно описать уравнением (1), если считать, что q меняется пропорционально w . Для определения коэффициента пропорциональности введем декартовую систему координат x, y, z , в которой ось y идет по плоской границе покрытия и подложки, ось x перпендикулярна к границе и направлена в сторону подложки, а ось z соответствует направлению растяжения с постоянной и одинаковой скоростью деформации покрытия и подложки. Из-за разности коэффициентов Пуассона двух материалов тонкий слой сжимается и при критической величине сжатия мгновенно переходит в волнообразное состояние.

Величина σ_1 определяется из расчета докритического напряженного состояния покрытия, меняющегося во времени t , а w соответствует вариации прогиба в момент потери устойчивости $t_{кр}$. Условия контакта представляются равенствами:

$$w = u \Big|_{x=0}, \quad q = -\sigma_{xx} \Big|_{x=0}, \quad (3)$$

где u и σ_{xx} – вариации соответственно перемещения и нормального напряжения подложки вдоль оси x в мо-

мент t_{kp} . Для установления связи между σ_{xx} и u воспользуемся уравнениями состояния материала подложки и уравнением равновесия, связывающим σ_{xx} с вариацией касательного напряжения σ_{xy} . Знания этих величин достаточно для решения задачи бифуркации, поэтому ограничимся только их представлениями через вариации деформаций ε_{xx} и ε_{xy} подложки.

Следуя одному из вариантов нелинейной теории термовязкоупругости, получим:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(t_{kp}) - \sigma(t_{kp}) &= \varphi(t_{kp}) \int_0^{t_{kp}} R(t_{kp} - \tau) d \left[\varepsilon_{xx}(\tau) - \frac{\vartheta(\tau)}{3} \right], \\ \sigma_{xy}(t_{kp}) &= \varphi(t_{kp}) \int_0^{t_{kp}} R(t_{kp} - \tau) d\varepsilon_{xy}(\tau), \\ \sigma(t_{kp}) &= \varphi(t_{kp}) \int_0^{t_{kp}} R_g(t_{kp} - \tau) d\vartheta(\tau). \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь R и R_g – ядра сдвиговой и объемной релаксации; ϑ и σ – вариации объемной деформации и среднего напряжения; $\varphi(t)$ – функция, зависящая от температуры $T(t)$ и параметра накопленных повреждений $A(t)$. В частности, $\varphi(t)$ учитывает старение материала. В уравнениях (4) пренебрегалось изменением температуры в момент бифуркации, что соответствует физической постановке задачи.

Для нахождения $\sigma_1(t)$ необходимо применять уравнения указанной теории, связывая докритические напряжения и деформации при $0 \leq t \leq t_{kp}$. Считая равными нулю вариации всех напряжений кроме σ_{xx} и σ_{xy} , из уравнений (4) получим:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx}(t_{kp}) &= \int_0^{t_{kp}} \left[\frac{2}{3} \Pi(t_{kp} - \tau) + \frac{1}{9} \Pi_g(t_{kp} - \tau) \right] d \left(\frac{\sigma_{xx}(\tau)}{\varphi(\tau)} \right), \\ \sigma_{xx}(t_{kp}) &= \varphi(t_{kp}) \int_0^{t_{kp}} H(t_{kp} - \tau) d\varepsilon_{xx}(\tau). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь Π и Π_g – ядра сдвиговой и объемной ползучести, H – ядро-резольвента первого из уравнений (5).

Пренебрегая при вычислении ε_{xx} и ε_{xy} вариациями всех перемещений кроме u и задавая последнюю в виде:

$$\begin{aligned} u &= u_x(x) \sin \frac{2\pi}{\lambda} h(t - t_{kp}), \\ h(t) &= \begin{cases} 0, & t < 0 \\ 1, & t \geq 0 \end{cases}, \end{aligned} \quad (6)$$

где λ – искомая длина волны изогнутого покрытия, из (4) и (5) с учетом (6) получим:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(t_{kp}) &= \varphi(t_{kp}) H(0) \frac{\partial u_x(x)}{\partial x} \sin \frac{2\pi y}{\lambda}, \\ \sigma_{xy}(t_{kp}) &= \varphi(t_{kp}) R(0) \frac{\pi}{\lambda} u_x(x) \cos \frac{2\pi y}{\lambda}. \end{aligned} \quad (7)$$

Определить функцию $u_x(x)$ можно, подставив выражения (7) в уравнение равновесия и проинтегрировав его, считая $\varphi(t_{kp})$ функцией t_{kp} и x . Делается это в общем случае численно, однако при однородной температуре, как это было в опытах [1], и при осредненном по объему подложки параметре поврежденности функция $\varphi(t_{kp})$ оказывается постоянной, что позволяет найти аналитическое решение задачи. Рассмотрим этот случай.

3. Решение при упругом деформировании покрытия. Полагая $K_1(\sigma_1) = E_1$ и обозначая $\varphi(t_{kp})H(0) = E$, $\varphi(t_{kp})R(0) = G$, $\sigma_1 h = N$, приходим к упругой постановке задачи, рассмотренной в [1]. Используя полученные там выражения, запишем решение задачи бифуркации при вязкоупругой подложке и упругом покрытии:

$$\begin{aligned} \sigma_1(t_{kp}) &= \frac{3}{2} \sqrt{\frac{E_1 \varphi^2(t_{kp}) R(0) H(0)}{12}}, \\ \lambda_{kp}^* &= 2\pi h \sqrt{\frac{E_1^2}{18 \varphi^2(t_{kp}) R(0) H(0)}}. \end{aligned} \quad (8)$$

Здесь λ_{kp}^* – длина волны, при которой реализуется минимум критического напряжения $\sigma_1(t_{kp})$. Этот минимум соответствует большому числу гармоник по длине покрытия, что исключает влияние граничных условий. Значение $H(0)$ можно представить в виде:

$$H(0) = 9R(0)R_g(0)/(R(0) + 6R_g(0)). \quad (9)$$

Экспериментальные исследования полимерных материалов показывают, что функция $\varphi(t)$ убывает с ростом температуры и ростом параметра поврежденности. Последний является неубывающей функцией времени для всех процессов нагружения [3]. Следовательно, выражения (8) указывают на возрастание длины волны и уменьшение критического напряжения при росте температуры и уменьшении скорости деформирования подложки, когда возрастает время достижения заданного уровня деформации. Эти выводы хорошо согласуются с опытными данными работы [1] (см. рис. 3 и рис. 4 для случая $h = 3,8$ нм, $T = 90^\circ$ С). Заметим, что при $\varphi(t) \equiv 1$ указанные эффекты не могли быть объяснены. Это свидетельствует о необходимости применения более сложных моделей подложки, чем даваемые линейными теориями упругости и вязкоупругости.

Первое из выражений (8) является уравнением для определения t_{kp} и соответствующего значения критического напряжения $\sigma_1(t_{kp})$, а второе позволяет найти λ_{kp}^* , которое можно сравнить с данными опытов.

4. Решение при пластическом деформировании покрытия. При определенных жесткостях покрытия и подложки выражение $\sigma_1(t_{kp})$ может превышать предел текучести покрытия σ_s . В таких случаях $K_1(\sigma_1) \neq E_1$

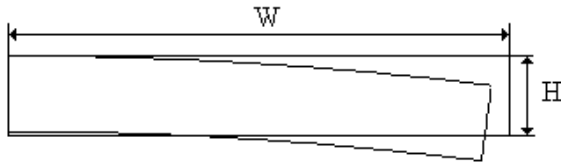


Рис. 1. Деформирование поперечного сечения образца

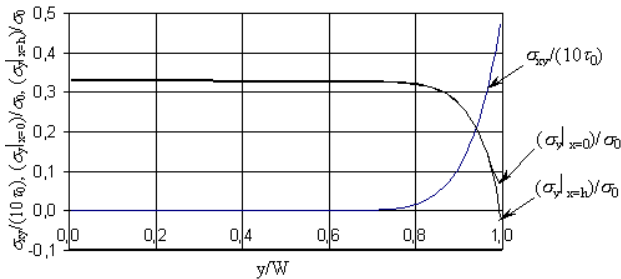


Рис. 2. Распределение напряжений σ_{yy} и σ_{xy} по ширине образца

и нахождение λ_{kp}^* должно вестись из условия минимума неявной функции σ_1 , определяемой уравнением (1). Выполнив соответствующие операции, получим:

$$\sigma_1(t_{kp}) = \frac{3}{2} \sqrt[3]{\frac{K_1(\sigma_1(t_{kp})) \rho^2(t_{kp}) R(0) H(0)}{12}}, \quad (10)$$

$$\lambda_{kp}^* = 2\pi h \sqrt[6]{\frac{K_1^2(\sigma_1(t_{kp}))}{18 \rho^2(t_{kp}) R(0) H(0)}}.$$

Первое из соотношений (10) является уравнением для нахождения t_{kp} и $\sigma_1(t_{kp})$, а второе определяет длину волны в момент выпучивания покрытия.

При линейном упрочнении материала, если

$$\sigma_1(t_{kp}) > \sigma_s,$$

$$d\sigma_u / de_u \equiv \gamma = \text{const},$$

$$K_1(\sigma_1(t_{kp})) \equiv 4E_1 \gamma / (\sqrt{E_1} + \sqrt{\gamma})^2 = \text{const}.$$

Сравнение выражений (8) и (10) показывает уменьшение длины волны при пластическом деформировании покрытия по сравнению со случаем упругих деформаций, так как $K_1(\sigma_1) \leq E_1$. По мере роста растягивающих деформаций вдоль оси z пластичность покрытия увеличивается и одновременно возрастают сжимающие деформации в поперечном направлении. Это приводит к сокращению наблюдаемых длин волн после потери устойчивости, что необходимо учитывать при анализе экспериментальных результатов (см. рис. 8 работы [1]). При расчете пластических деформаций коэффициент Пуассона покрытия постепенно возрастает, приближаясь к аналогичному коэффициенту подложки, поэтому уменьшение λ происходит в ограниченных пределах.

5. Численный анализ однородности докритического напряженного состояния покрытия. Использованная выше математическая модель бифуркации покрытия существенно опиралась на допущение об однородности его докритического напряженного состояния. Проведем проверку этого допущения для двухслойного образца, описанного в работе [1]. Для простоты примем подложку упругой, поскольку ее вязкость слабо влияет на зависимость напряжений от пространственных координат. Объектом расчета являлся двухслойный образец со следующими геометрическими и жесткостными параметрами: модуль Юнга материала покрытия (платина) $E_1 = 1,5 \cdot 10^5$ МПа; коэффициент Пуассона материала покрытия $\nu_1 = 0,36$; толщина покрытия $h = 40$ нм; модуль Юнга материала подложки (каучук НК) $E = 0,8$ МПа; коэффициент Пуассона материала подложки $\nu = 0,4999$; толщина подложки $H = 500$ мкм; полуширина образца $W = 3$ мм.

Расчет обобщенного плоско-деформированного состояния образца проводился методом конечных элементов. Деформации в направлении оси z принимались одинаковыми для покрытия и подложки. Для расчетов использовалась регулярная сетка плоских изопараметрических конечных элементов второго порядка, имеющая 98 разбиений по полуширине образца (в направлении оси y) и 32 разбиения по толщине образца. Покрытие аппроксимировалось двумя, а подложка – тридцатью слоями конечных элементов. На рис. 1 показано деформированное поперечное сечение образца при его растяжении в направлении оси z до деформации $\varepsilon_0 = 10\%$.

На рис. 2 изображены распределения напряжения σ_{yy} на скрепленной ($x = 0$) и свободной ($x = h$) поверхностях покрытия, а также распределение сдвигового контактного напряжения σ_{xy} по ширине образца. Для нормировки напряжений σ_{yy} и σ_{xy} использовались соответственно величины σ_0 и τ_0 , определяемые следующим образом:

$$\sigma_0 = (\nu_1 - \nu) \varepsilon_0 E H / h; \quad \tau_0 = |\sigma_0| h / W.$$

Как видно из рис. 2, неоднородность напряженного состояния покрытия имеет вид краевого эффекта. Длина зоны краевого эффекта составляет приблизительно 20% от полуширины образца. При этом максимальная величина сжимающего напряжения в покрытии достигается в средней по ширине части образца, где напряженное состояние является практически однородным. Этот результат обосновывает принятый подход к решению задачи о бифуркации покрытия.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Вольинский А.Л., Баженов С.Л., Лебедев О.В., Янинский И.В., Озерин А.Н., Бакеев Н.Ф.* Явление потери устойчивости жесткого покрытия при деформировании полимера-подложки // *Высокомолекулярные соединения. Сер. А.* 1997. Т. 39. № 11. С. 1805-1811.
2. *Ильюшин А.А.* Пластичность. М.; Л.: ГИТТЛ, 1948. 376 с.
3. *Быков Д.Л.* Об учете повреждений в наполненных полимерных материалах // *Изв. РАН МТТ.* 1998. № 1. С. 19-28.

БЛАГОДАРНОСТИ: Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 99-01-00316).