

金刚石探针曲率半径对单晶铜表面 粘附接触失效影响分析

陈晶晶^{1,2}, 胡洪钧¹, 赖联锋¹

(1. 宁德师范学院 信息与机电工程学院, 福建 宁德 352100;

2. 福州大学 机械工程及自动化学院, 福州 350108)

摘 要: 目的 降低微机电系统表面粘着接触失效。方法 考虑纳米尺度粘附力、单晶铜弹塑性变形及各向异性影响。基于分子动力学的混合势函数 (EAM 和 Morse) 和 Verlet 算法, 对不同曲率半径探针与单晶铜基底粘着接触失效特性进行研究, 通过计算原子中心对称参数来描述接触区域原子破坏和迁移轨迹变化。

结果 研究发现探针与基底尚未接触时 (即位移小于 1 nm) 的粘附接触力不受探针曲率半径影响; 而探针下降位移大于 1 nm 时, 探针曲率半径对粘附接触力曲线有着重要影响, 即探针曲率半径越大, 粘附接触力也越大, 导致基底弹塑性变形更加剧烈, 易诱导单晶铜基底大量原子粘附于探针底表面, 产生明显的粘着效应; 此外, 探针曲率半径越大, 接触体间粘着滞后现象越明显。**结论** 此研究结果将对微机电系统的粘着接触失效机理和微机械产品表面轮廓设计有着重要的实践指导意义。

关键词: 分子动力学; 粘附接触力; 单晶铜; 探针; 曲率半径

中图分类号: TH117 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3660(2018)08-0170-05

DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2018.08.024

Effect of Adhesive Contact Failures on Single Crystal Copper with Different Diamond Radius

CHEN Jing-jing^{1,2}, HU Hong-jun¹, LAI Lian-feng¹

(1. School of Information and Electrical Engineering, Ningde Normal University, Ningde 352100, China;

2. School of Mechanical Engineering and Automation, Fuzhou University, Fuzhou 350108, China)

ABSTRACT: In order to reduce the adhesive contact failure happens on MEMS products, Some influence factors are considered, including the adhesive force and the elastic-plastic deformation on substrate, and the adhesive contact failures on two body (with different probe radius and copper substrate) were researched by molecular dynamics method based on embedded atom potentials and verlet algorithms. Furthermore, the center-symmetric parameter are applied to described destruction area and migration path changes at nano-scale. This research works found that the adhesion contact force was not affected by different probe radius before contacting (the displacement ≤ 1 nm). As probe displacement increased (the displacement ≤ 1 nm), the curvature

收稿日期: 2018-03-19; 修订日期: 2018-05-22

Received: 2018-03-19; **Revised:** 2018-05-22

基金项目: 福建省自然科学基金项目资助 (2017J01709, 2018J01509); 福建省教育厅科技项目资助 (JAT160540); 宁德师范学院重大科研项目培育计划 (2017ZDK19); 宁德师范学院校级科研项目资助 (2015Q09)

Fund: Supported by Natural Science Foundation of Fujian province (2017J01709, 2018J01509), Education Department Science Foundation of Fujian Province (JAT160540), Major Project Supported by Ningde Normal University (2017ZDK19) and School Foundation of Ningde Normal University (2015Q09)

作者简介: 陈晶晶 (1989—), 男, 硕士, 讲师, 主要研究方向为摩擦学。

Biography: CHEN Jing-jing (1989—), Male, Master, Lecturer, Research focus: friction research.

radius of diamond have an significance influence on adhesion contact force curve. It also found that the larger diamond probe radius was, the more elastic-plastic deformation intense on cooper substrate, and the contact force versus displacement presents saw tooth situation obviously, which result the substrate was destroyed seriously, so that a large number of atoms were adhered on diamond probe surface, which it means that the adhesive contact failure and adhesion hysteresis phenomenon would happened. This result has important practical significance on researching the mechanism of adhesion contact failures and designing device products surface profile on MEMS products.

KEY WORDS: molecular dynamics; adhesive contact force; single crystal copper; probe; curvature radius

相关调查指出, 每年大约有三分之一的能源或资源因两接触表面相互接触和摩擦而损耗, 70% 微/纳器件系统因粘附力导致纳智能系统或电子通信领域的微型元件接触与分离时, 出现稳定性差、可靠性低、次品率高等问题^[1]。实验表明^[2-6], 两接触面间隙处于微/纳尺度范围内时, 微机电系统两接触面间会因粘附力过大, 而出现两接触面元件发生粘着接触的现象, 且粘着磨损随微机电系统往复运动次数的加大而越来越剧烈, 最终发生粘着接触失效, 这不仅使微机电系统的运动性能受到严重破坏, 而且也大大削弱了微机电系统的操作稳定性, 缩短其使用寿命期。此外, 微机电系统的微齿轮传动装置经过长时间的高速运转后, 在齿轮与轴、轴与销以及齿轮与齿轮的配合面间, 都出现了严重的粘着节点增大和材料磨损问题, 且在运行中极易受界面力和粘附力的影响而引发元件表面材料逐渐被磨损, 从而加剧该装置系统运动的波动性, 降低系统运动的精度和可靠性^[7]。可见, 微观尺度粘附接触问题所引发的粘着磨损和粘着接触失效现象, 已严重制约纳智能产品技术的发展, 需亟待解决。

基于上述微机电系统内接触面间存在的严重粘着接触磨损失效问题, 本文建立了一种金刚石探针与单晶铜基底表面的粘附接触模型, 基于此模型来研究分析粘附接触力的变化特征及进行粘着接触失效影响分析。并且, 本文采用分子动力学方法, 运用混合势函数 (EAM 和 Morse) 描述金刚石探针和单晶铜基底间的相互作用力, 采用 Verlet 算法动态研究了探针与基底表面粘着接触与分离过程的粘附接触力与位移的关系, 分析了探针与基底表面接触与分离过程中, 势能和探针表面轮廓曲率半径对粘附接触力和粘着接触失效的影响。研究结果将对改善微纳器件表面轮廓设计和提高微机电系统工作性能有重要的理论和实践指导意义。

1 分子动力学建模和计算

本文采用 lammps 软件建立了微机电系统接触物理运动模型 (见图 1), 半球形表示微机电系统金刚石探针, 单晶铜基底为接触体。运用分子动力学方法研究了两接触体间的粘着接触特性。图 1 的金刚石探

针作一接触体, 并刚性化处理, 探针半径为 2.5 nm, 晶格常数为 0.3567 nm。另一接触体选用面心立方胞单晶铜, 基底 x 、 y 、 z 三维方向尺寸为 $40\text{Å} \times 37\text{Å} \times 30\text{Å}$ 。其中, A 为铜晶格常数, $A=0.361\ 49\text{ nm}$ 。单晶铜基底 x 、 y 、 z 轴的晶向分别为 $[100]$ 、 $[010]$ 、 $[001]$ 。整个体系原子总数为 138 514 个, 金刚石探针原子数 6514 个, 单晶铜基底原子数 132 000 个。为提高计算效率和模拟高速下微机电系统器件的接触情况, 规定探针下压接触和上升分离基底速度均为 450 m/s。此外, 为保证探针与基底尚未接触时的 C 原子与 Cu 原子间相互作用力为零, 设置探针与基底初始距离为 1.1 nm。另外, 为消除体系“尺度效应”和“表面效应”影响, 在单晶铜基底 x 轴和 z 轴方向采用周期性边界条件, y 轴采用自由边界条件, 并把单晶铜基底划分为三个原子层, 即固定层、恒温层、牛顿层。用热浴法^[8]维持恒温层温度为 298 K, 以保证单晶铜基底符合实际运动状态。恒温层和牛顿层原子统称为运动层原子, 接触运动前给予随机初速度, 赋予 298 K 初始温度, 并不施加任何外力作用。整个体系的模拟计算采用 NVT 系综, 时间步长取 1 fs, 弛豫时间 12 ps, 以保证模型结构稳定性及体系的温度和总能量趋于平衡态, 确保计算结果的准确性与可靠性。

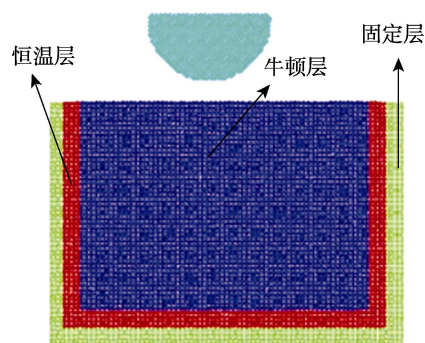


图 1 单晶铜基底与金刚石探针粘附接触模型
Fig.1 Adhesion contact model between single crystal copper substrate and diamond probe

基于 VERLET 算法^[9]对牛顿运动方程进行时间积分, 求解得到不同时刻原子的位置和速度, 并用泰勒公式对第 i 个原子在 $t+\Delta t$ 和 $t-\Delta t$ 时刻的位置坐标用时刻 t 的位置坐标展开, 得到式 (1) 和式 (2), 将式 (1) 和式 (2) 相加可得式 (3), 即原子在 $t+\Delta t$

时刻的位置;将式(1)和式(2)相减可得式(4),即原子在 t 时刻的速度。对Cu-Cu原子间的作用力用EAM势函数描述^[10],总势能表达式见式(5)。C-Cu原子间的作用力采用Morse势函数^[11],其势能表达式见式(6)。

$$r(t+\Delta t) = r(t) + \Delta t \cdot v(t) + (\Delta t)^2 \cdot \frac{a(t)}{2} + \dots \quad (1)$$

$$r(t-\Delta t) = r(t) - \Delta t \cdot v(t) + (\Delta t)^2 \cdot \frac{a(t)}{2} + \dots \quad (2)$$

$$r(t+\Delta t) = 2r(t) - r(t-\Delta t) + (\Delta t)^2 \cdot \frac{F(t)}{m} \dots \quad (3)$$

$$v(t) = \frac{r(t+\Delta t) - r(t-\Delta t)}{2\Delta t} \dots \quad (4)$$

$$\Phi = \sum_i E_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) \dots \quad (5)$$

$$\Phi(r_{ij}) = D \left[e^{-2a(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-a(r_{ij}-r_0)} \right] \dots \quad (6)$$

式中: $\sum_i E_i(\rho_i)$ 为嵌入能; $\sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij})$ 为对势项;

ρ_i 为除第 i 个原子外的其他所有原子的核外电子在第 i 个原子处产生的电子云密度之和; D 为结合能系数; a 为势能曲线梯度系数; r_0 为分子之间作用力为0时的平衡态原子间距。选定 $D=0.087$ eV, $a=51.4$ nm⁻¹, $r_0=0.205$ nm^[12]。

2 结果及分析

2.1 原子间势能分析

图2为金刚石探针与单晶铜基底在接触与分离过程中原子间势能的变化曲线,可以看出,在探针下压过程中,即运行步数为16 000~18 000步(探针下压位移为1 nm,探针压入基底深度为0 nm),此时原子间势能基本维持稳定。随后,在探针下压开始接触基底的过程中,当运行步数为18 000~21 000步时(探针压入基底深度1 nm),随着探针下压位移和与基底接触深度的增加,原子间势能逐渐增大,其主要原因是在探针下压接触基底的过程中,探针与基底间产生了巨大能量,除小部分能量以热能的形式耗散外,其余大部分能量皆以晶格应变能的形式储存于单晶铜基底内,从而转变为单晶铜原子间的相互作用势能,而且探针接触基底时,没有明显的势能涨落趋势。文献[13]表明:在金属键晶体中,位错的产生和运动会使晶体内部原子需要克服高能势垒的影响而导致势能出现涨落趋势。可见,在探针下压与基底接触的过程中,基底内部没有发生明显的塑性变形,这主要与晶格变形、晶格重构和非晶相变的产生有关。

运行步数为21 000~26 000步时(探针向上分离基底过程),单晶铜基底的变形晶格开始恢复,基底内部发生弹塑性变形,其存储的弹性应变能也逐渐被释放,基底原子间势能在很短的时间内短暂上升(即

图2中的A点),随后原子间势能逐渐下降,直到运行步数为23 000步(探针向上分离距基底1 nm,即图2中的B点)。随着探针进一步上升(运行步数为23 000~26 000步),原子间势能呈逐渐上升的趋势,其主要原因是受探针与基底粘着接触拉力作用影响,使得单晶铜基底晶格发生明显的弹塑性变形,且探针脱离基底上表面后,探针与基底出现连接颈缩小的现象,此时基底表面已发生明显的塑性变形。

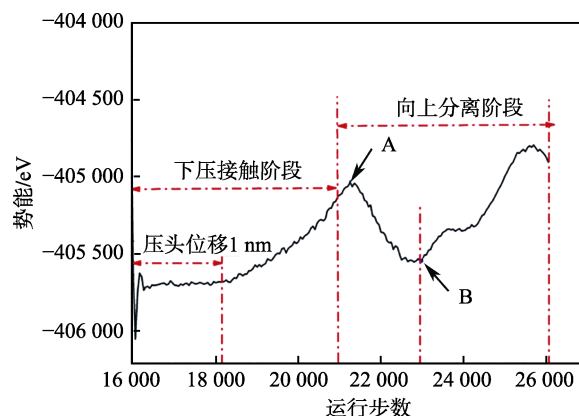


图2 接触与分离过程的原子间势能与运行步数关系曲线

Fig.2 The relationship curve between Potential energy interaction and running steps during contacting and separation process

2.2 探针曲率半径对粘着接触特性的影响

随着材料尺寸不断减小,纳尺度往往表现出与宏观尺度所不具备的力学和物理性质,纳观材料极易受表面效应、尺寸效应和边效应的影响,特别是在原子力显微镜探针与被测样品接触的过程中,探针的曲率半径直接影响被接触基底的变形特性和力学性质。图3为不同曲率半径的半球形金刚石探针与单晶铜基底粘附接触力与位移的关系,从图3可知,在未接触前(探针下压位移小于1 nm),粘附接触力几乎不受探针曲率半径的影响,随着压深的增加,粘附接触

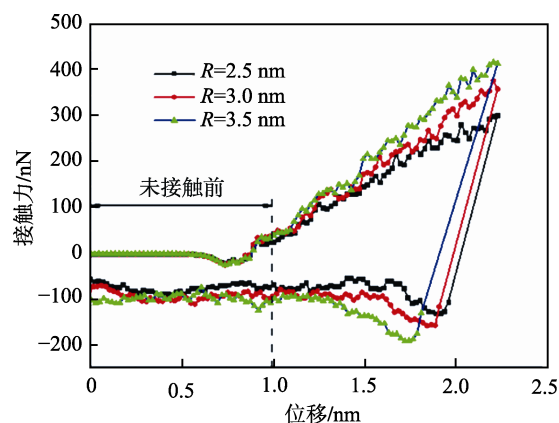


图3 不同曲率半径探针的粘附接触力与位移的关系

Fig.3 the cure relationship between adhesive contact force and displacement with different diamond radius

力随探针曲率半径的增加而增大。其原因是探针曲率半径越大, 探针与基底的实际接触面积也越大, 而同等载荷下, 接触面积越大, 两接触体之间的粘附接触力随之增大, 更易加剧基底弹塑性变形 (见图 4)。此外, 从图 3 还可知, 探针曲率半径越大, 越容易与基底分离时发生粘着接触失效。因此, 为了避免因接触体曲率半径过大而加重对基底的破坏及粘着力影响, 导致两接触面最终发生粘着接触失效, 进而影响整个微机电系统系统运动的稳定性和可靠性, 应设计接触体表面轮廓外形。

图 4 为不同曲率半径探针对单晶铜基底(010)晶面位错原子失效形式的变形图, 黑色圆圈表示探针曲率半径大小, 基底内原子变形情况根据 CSP 的计算值着色。图中圆圈内的蓝色原子 (CSP<3) 可视为处于完好的 FCC 晶格 (即发生弹性变形) 内^[14]。从图 4 可清楚观察到, 下压过程中, 基底内发生了剧烈的弹塑性变形, 有大量位错原子失效发生和缺陷及滑移面产生。从圆形区域内的失效原子可看出, 探针正下

方堆积的失效原子数受探针与基底间的接触面积影响大, 且失效原子数量随接触面积的增大而增多。另外, 圆圈外产生大量的位错带和滑移面, 位错带的滑移方向为[101]和[101], 并且滑移带的扩展延伸随探针曲率半径的增大而加长。由此表明, 探针的曲率半径越大, 对基底的弹塑性变形越剧烈, 基底被损坏的程度也越深。

图 5 为在粘着接触与分离过程中, 不同曲率半径的探针底面对单晶铜基底(010)面的原子粘附于探针底表面的原子数量的影响分布。其中, 红色原子表示单晶铜基底粘附于探针底表面的原子数量, 蓝色原子表示金刚石探针外形轮廓线。比较图 5a—c 可明显得出: 相比其余两个探针曲率半径, $R=3.5\text{ nm}$ 的底表面所粘附单晶铜原子数目较多, 主要原因是探针与基底分离时, 探针与基底间的粘附力大, 且粘附力与探针的曲率半径呈正比, 导致单晶铜基底内原子粘附于探针底表面的数目越多, 且探针分离位移较下压接触位移更容易发生粘着滞后现象。

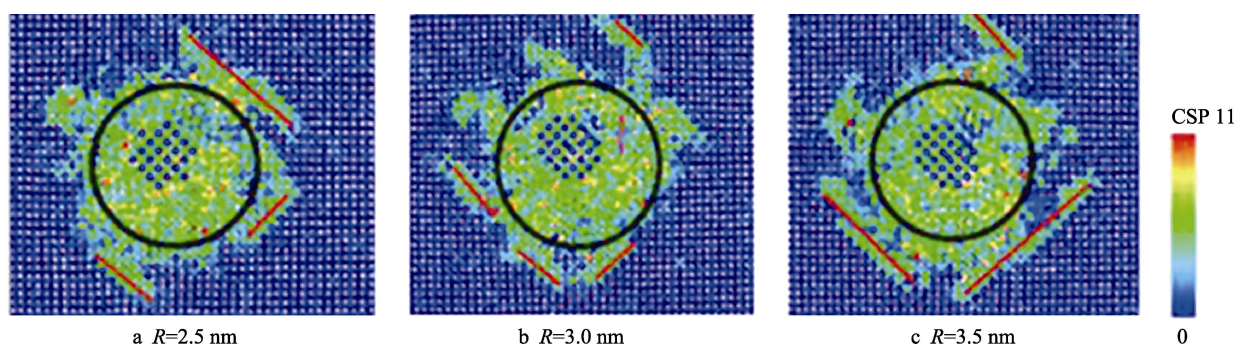


图 4 不同曲率半径探针对基底(010)面变形的影响

Fig.4 the influence of substrate (010) deformation on different diamond radius

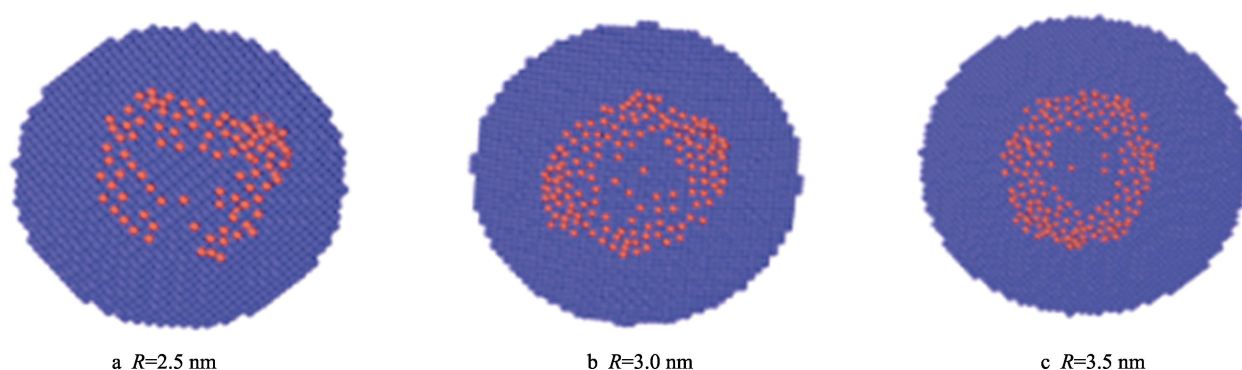


图 5 不同曲率半径探针对探针底表面粘着接触数目的影响

Fig.5 the influence of adhesive atoms on diamond surface with different diamond radius

3 结论

1) 下压接触时, 粘附接触力曲线呈锯齿状增加趋势。分离后的位移较接触前的位移发生明显的粘着滞后现象, 表明微机电系统接触表面间分离时有着粘着接触效应, 部分单晶铜基底原子跃出表面而粘附于探针底表面上。

2) 探针与单晶铜基底接触前, 探针曲率半径对单晶铜表面的粘附接触力曲线无影响, 随着探针后续位移继续下降, 探针曲率半径对粘附接触力及粘着接触失效有着重要影响, 且探针曲率半径越大, 产生的粘附力也越大, 越容易导致基底表面原子粘附于探针底表面, 且分离中的粘着滞后现象与探针曲率半径成正比, 越容易发生粘着接触失效形式。

参考文献:

- [1] WANG G B, LEI Y Z. Concerning and developing tribology, promoting sustainable economic development[J]. Prog nat sci, 2005(15): 571.
- [2] 国家自然科学基金委员会工程与材料科学部. 机械工程学科发展战略报告(2011—2020)[R]. 北京: 科学出版社, 2010.
Ministry of Engineering and Materials of National Natural Science Foundation in China. Report on the development strategy of mechanical engineering(2011—2020)[R]. Beijing: Science Press, 2010.
- [3] MERLIJN V S, ROBERT P, INGRID D W. A physical model to predict stiction in MEMS[J]. Journal of micro-mechanics and microengineering, 2002, 12: 702-713.
- [4] ZHAO Y P, YU T X. Failure modes of MEMS and micro-scale adhesive contact theory[J]. International journal of nonlinear sciences and numerical simulation, 2000(1): 361-372.
- [5] REDRMOND J. Microscale modeling and simulating[J]. Numerical methods for partial differential equations, 2010, 10(1): 65-83.
- [6] DEBOER M P, CLEWS P J, SMITCH B K, et al. Adhesion of polysilicon microbeams in controlled humidity ambient[J]. Material research soc sym proc, 2001, 518: 131-136.
- [7] FONSECA D J, SEQUERA M. On MEMS reliability and failure mechanisms[J]. International journal of quality, statistics, and reliability, 2011, 82: 243.
- [8] BHUSHAN B. Nano microscale wear and mechanical characterization using scanning probe microscopy[J]. Wear, 2001, 251(1): 1105-1123.
- [9] LOUP V. Computer experiments on classical fluids I: Thermodynamical properties of Lennard-Jones Molecules[J]. Physical review, 1967, 159: 98-103.
- [10] MISHIN Y, MEHL M J, VOTER A F, et al. Structural stability and lattice defects in copper: Ab initio, tight-binding, and embedded-atom calculations[J]. Physical review B, 2001, 63: 224106.
- [11] MORSE P M. Diatomic molecules according to the wave mechanics II: Vibrational levels[J]. Physical review, 1929, 34: 57-64.
- [12] ZHU Peng-zhe, HU Yuan-zhong, WANG Hui, et al. Study of effect of indenter shape in nano-metric scratching process using molecular dynamics[J]. Materials science and engineering, 2011, 528(13-14): 4522-4527.
- [13] 郭晓光, 郭东明, 康仁科, 等. 单晶硅纳米级压痕过程分子动力学模拟[J]. 大连理工大学学报, 2008, 48(2): 205-209.
GUO Xiao-guang, GUO Dong-ming, KANG Ren-ke, et al. Molecular dynamics simulation in monocrystal silicon indentation[J]. Journal of Dalian University of Technology, 2008, 48(2): 205-209.
- [14] PEI Q, LU C, LEE H. Large scale molecular dynamics study of nanometric machining of copper[J]. Computational materials science, 2007, 41(2): 177-185.