

9-2-2020

Analysis the Nano Contact Force of Single Crystal Copper in Contact and Separation Processes

Jianmeng Huang

School of Mechanical Engineering and Automation, Fuzhou University, Fuzhou 350108, China;

Jingjing Chen

School of Mechanical Engineering and Automation, Fuzhou University, Fuzhou 350108, China;

Follow this and additional works at: <https://dc-china-simulation.researchcommons.org/journal>



Part of the Artificial Intelligence and Robotics Commons, Computer Engineering Commons, Numerical Analysis and Scientific Computing Commons, Operations Research, Systems Engineering and Industrial Engineering Commons, and the Systems Science Commons

This Paper is brought to you for free and open access by Journal of System Simulation. It has been accepted for inclusion in Journal of System Simulation by an authorized editor of Journal of System Simulation.

Analysis the Nano Contact Force of Single Crystal Copper in Contact and Separation Processes

Abstract

Abstract: On the basis of considering the adhesive force and copper substrate elastic-plastic deformation, the contact and separation processes between diamond indenter and copper substrate are simulated based on EAM and Morse potentials and Verlet algorithm. The results show that, when diamond indenter approaches slowly to copper substrate during the contact process, *some atoms at the top level of substrate happened "snap back" phenomenon significantly due to the gravity became the main interaction force.* Furthermore, *it can be seen that the contact force and the accumulation phenomenon of dislocation atoms increase gradually with the increment of diamond displacements.* During in separation process, the contact force decreases continuously with the declines of diamond indenter, *the adhesive hysteresis phenomenon* and some atoms adhered to the surface of diamond indenter can be seen obviously after separation absolutely.

Keywords

contact force, molecular dynamics, adhesive contact and separation

Recommended Citation

Huang Jianmeng, Chen Jingjing. Analysis the Nano Contact Force of Single Crystal Copper in Contact and Separation Processes[J]. Journal of System Simulation, 2015, 27(2): 404-409.

单晶铜纳米黏着接触与分离过程的接触力分析

黄健萌, 陈晶晶

(福州大学机械工程及自动化学院, 福州 350108)

摘要: 在考虑黏附力和单晶铜弹塑性变形基础上, 基于 EAM 和 Morse 势函数和 Verlet 算法动态模拟了金刚石压头与单晶铜纳米黏着接触与分离过程。研究表明: 压头尚未接触基体时, 压头与基体之间作用力主要表现为引力, 基体最上层原子易与压头原子发生“突跳”黏着接触现象; 继续下移时, 接触力随压头位移增大而呈增加趋势, 且基体被压正下方不断发生位错原子堆积现象; 压头与基体分离中, 接触力与压头位移曲线呈锯齿状减小趋势, 并且分离过程位移对应于黏着下压接触位移发生明显的黏着滞后现象; 分离后, 部分原子被黏附于压头底表面, 基体已发生明显的塑性变形。

关键词: 接触力; 分子动力学; 黏着接触与分离

中图分类号: TH117.1

文献标识码: A

文章编号: 1004-731X (2015) 02-0404-06

Analysis the Nano Contact Force of Single Crystal Copper in Contact and Separation Processes

Huang Jianmeng, Chen Jingjing

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

Abstract: On the basis of considering the adhesive force and copper substrate elastic-plastic deformation, the contact and separation processes between diamond indenter and copper substrate are simulated based on EAM and Morse potentials and Verlet algorithm. The results show that, when diamond indenter approaches slowly to copper substrate during the contact process, some atoms at the top level of substrate happened “snap back” phenomenon significantly due to the gravity became the main interaction force. Furthermore, it can be seen that the contact force and the accumulation phenomenon of dislocation atoms increase gradually with the increment of diamond displacements. During in separation process, the contact force decreases continuously with the declines of diamond indenter, the adhesive hysteresis phenomenon and some atoms adhered to the surface of diamond indenter can be seen obviously after separation absolutely.

Keywords: contact force; molecular dynamics; adhesive contact and separation

引言

目前, 纳米黏着接触失效是阻碍微电子机械 (MEMS) 系统发展的主要因素^[1]。其中, 射频微机械开关因具备低插入损耗、高隔离度等 PIN 开关所无

法比拟的优点, 不仅广泛应用于射频电路、微机械系统或传导器件中, 而且在相控阵天线、X 波段的移相器、微波功率计等电子通讯领域也有着重要作用。然而, 此开关在接触与分离中极易发生黏着接触失效形式, 其主要原因之一是开关中的微悬臂梁在周期性地与基体重复接触-分离过程中, 由于两接触界面和基体的塑性变形不断加剧, 导致接触表面可靠性逐渐下降和黏附力不断增加而发生黏住闭合失效^[2]。文献[3-4]指出表面黏着力会使间隙处于纳



作者简介: 黄健萌(1973-), 女, 福建泉州, 博士, 副教授, 研究方向为摩擦学; 陈晶晶(1989-), 男, 江西临川, 硕士生, 研究方向为摩擦学。
收稿日期: 2014-01-07 修回日期: 2014-03-26
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51205062, 51175085)

<http://www.china-simulation.com>

• 404 •

米级的两表面黏着在一起。这种黏着现象在微悬臂梁与基体接触过程、薄膜微腔加工过程、纳米机械手运动部件中极易发生。因此, 深化对微纳观尺度黏着接触问题的纳观现象了解显得尤为重要。

N.E.McGruer 和 G.G.Adams 的研究小组^[5]通过 LJ 势考虑黏附力的作用, 采用有限元法模拟了球与半空间平面的弹塑性接触加载和卸载过程, 提出了用最大黏着强度与材料硬度的比值来辨识分离模式, 研究表明: 韧性分离的黏着力明显大于脆性分离的黏着力。Sabelkin 和 Mall^[6]在考虑 LJ 势函数引发的黏附力和塑性变形的联合影响下, 采用有限元法研究了弹性圆柱与弹塑性平面接触问题, 发现卸载中存在黏着位移滞后现象。上述文献[5-6]的接触行为研究是基于连续介质力学, 研究对象是基于微观连续性致密实体, 忽略了微小内部结构缺陷和间隙的存在, 使得仿真结果与纳观材料的黏着接触实验结果存在较大误差, 限制了人们探讨纳观尺度的黏着接触和摩擦机理行为。由于纳米级微凸体尺度太小, 以至连续介质力学理论无法刻画出分子或原子的运动轨迹。相反, 分子动力学法(MD)不仅能动态模拟接触过程的每个原子运动状态, 而且还能避免其他环境因素(比如试件表面被氧化, 表面缺陷等)的干扰。因而被认为是除理论分析和实验观察之外的第三种科学研究纳观尺度接触和摩擦问题的方法。Landman 等人^[7]运用 MD 法对压头与基体的黏着接触变形、摩擦等过程机理进行研究。朱世俊等人^[8]基于 LJ 势函数, 运用 MD 法研究了单晶铜纳米圆柱体与平面黏着接触问题, 研究表明: 在黏着接触与分离时, 随着压头尺寸增大, 黏着滞后现象越明显。Van Vliet 等^[9]用 MD 法动态模拟了球形压头对单晶铝的接触过程, 研究表明: 载荷与压深曲线的突跃是因基体亚表面位错的均相成核产生的。上述文献[7-9]皆采用单一势函数来描述压头与基体、基体与基体之间的作用势。目前, 对纳米尺度黏着接触与分离过程的接触力行为与相应的基体弹塑性变形分析的研究还很少。本文基于混合势函数(EAM 和 Morse 结合)作用势, 采用 Verlet 算法^[10],

建立了半球形金刚石压头与单晶铜基体黏着接触与分离过程的三维模型, 分析了金刚石压头与单晶铜基体间接触力变化和单晶铜基体弹塑性变形的原因, 为研究微/纳米机械系统的黏着失效机理提供了一定的理论依据和实际参考意义。

1 分子动力学模拟

1.1 模型建立

金刚石压头与单晶铜基体纳米黏着接触分子动力学模型如图 1 所示。

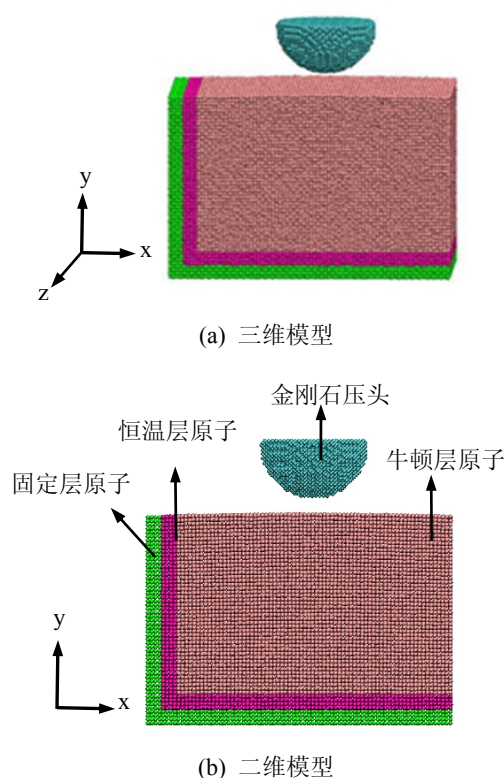


图 1 金刚石压头与单晶铜基体黏着接触分子动力学模型

图 1(a)中, 刚性球形接触表面采用半球形金刚石作为压头, 压头半径为 2.5nm, 因金刚石硬度比单晶铜硬度大的多, 所以对模拟体系的金刚石压头做刚性化处理。另一接触表面选用单晶铜材料作为基体, 基体采用面心立方晶胞结构(FCC), 且 X, Y, Z 轴晶向分别取为[100], [010], [001], 单晶铜基体尺寸为: 40Å×37Å×30Å(Å 为铜的晶格常数: 0.36149 nm), 单晶铜基体原子总数为 132000 个, 金刚石 C 的晶格常数为 0.3567 nm, 刚

性金刚石压头原子总数为 6514 个, 整个模拟体系原子总数为 138514 个, 压头与基体初始距离为 1.08 nm, 此距离可保证压头与基体原子之间相互作用力为 0, 以备模拟中对基体表面进行能量最小化和体系弛豫过程, 使系统达到温度和总能量的稳定平衡状态。模拟中, 单晶铜基体原子分为 3 层(见图 1(b)): 即固定层原子、恒温层原子、牛顿层原子。固定层原子在模拟中对其力和位移不进行修正; 恒温层原子在模拟中通过热浴法^[11]将其温度控制在室温 298 K; 恒温层原子和牛顿层原子在模拟中让其运动按牛顿方程加以描述。压头未下压前, 对牛顿层和恒温层原子施加任一随机初始速度。

1.2 模型边界条件和势函数选择

为了消除因模拟系统中粒子数目少于真实系统粒子数目而带来的“尺度效应”影响, 需要对单晶铜基体施加周期性边界条件来接近宏观真实材料。此模拟中, X 和 Z 方向采用周期性边界条件, Y 方向采用自由边界条件。此外, 准确合理的选择势函数决定了模拟计算的精确性, 而混合势函数是考虑了压头与压头, 基体与基体, 压头与基体为不同材料的原子属性结构, 即整个体系有 C 和 Cu 两种原子。因金刚石被刚性化处理, 即体系有两种原子之间的相互作用力存在: C-Cu, Cu-Cu。采用混合势函数(EAM 和 Morse 结合)来描述 C-Cu 与 Cu-Cu 的相互作用力, 单晶 Cu 基体原子之间相互作用力采用嵌入原子(EAM)势函数^[12], 金刚石 C 与单晶 Cu 基体之间原子作用势采用 Morse 势函数^[13]。Morse 势函数参数设置参考文献[14]。

1.3 MD 模拟过程

首先采用 NVT 系综对整个体系结构弛豫(见图 2), 使体系温度控制在室温 298K, 运行步数 6 000, 弛豫时间为 6ps, NVT 系综弛豫完后, 再采用 NVE 系综对体系结构再次弛豫一段时间(见图 3), 运行步数 6 000, 弛豫时间为 6 ps。弛豫和模拟过程中, 每 100 步输出一次热力学参数, 从图 2

和图 3 的曲线可以明显看出, 经过系统总弛豫时间 12 ps, 体系的温度和总能量可趋于稳定平衡状态。另外, 采用基于 Taylor 展开的 Verlet 算法^[10]对牛顿运动方程进行时间积分求解, 积分步长为 1 fs, 从而得到粒子不同时刻的位置和速度。为了缩短模拟计算所耗时间过长, 金刚石压头下压接触和分离基体的速度皆取恒定值 450 m/s。

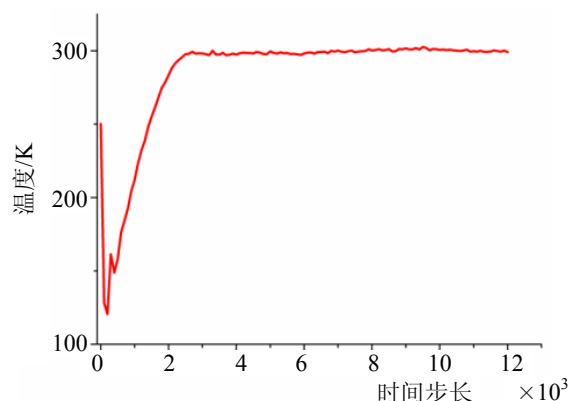


图 2 NVT 和 NVE 温度弛豫过程

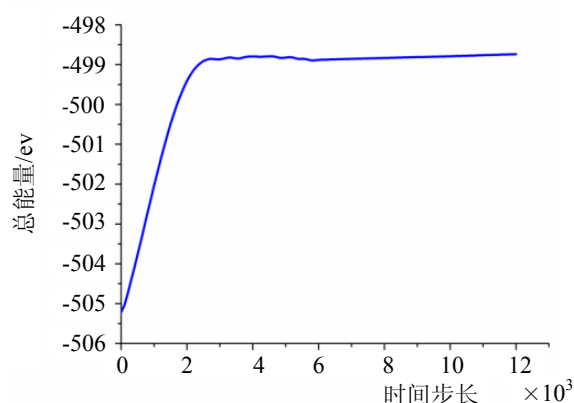


图 3 NVT 和 NVE 总能量弛豫过程

2 模拟结果与分析

图 4 表示的是金刚石压头与单晶铜基体之间接触作用力 P 随压头位移 δ 的曲线变化关系。图 4 中, 规定 Y 轴向下方向的压力为正, 向上方向的拉力为负。整个接触过程分为压头向下接触基体和压头向上分离基体两个阶段。图 5 和图 6 分别表示压头与基体下压接触过程和分离过程。

(1) 压头向下与基体接触过程(如图 4 中 A-B-D-C 线段): 起初, 压头与基体的初始距离为

1.08nm, 此距离可保证压头与基体的相互作用力为 0, 即此时两者之间尚未有范德瓦尔斯力存在。图 4 中的 A-B 段表明: 当压头下压位移为 0.27 nm 时, 压头与基体之间相互作用力主要表现为引力, 引力为 0.002 nN。随着压头下压位移的增大, 引力也随之增大。

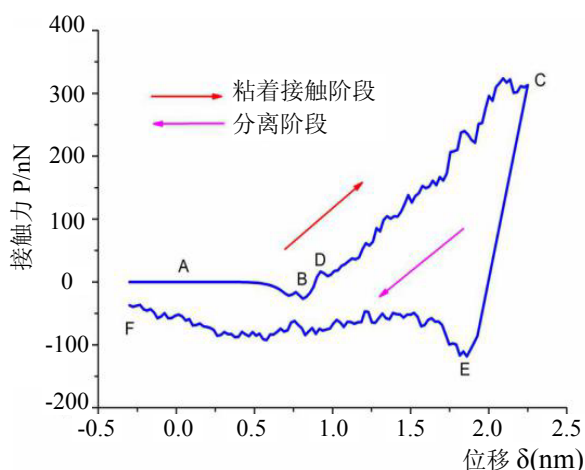


图 4 接触力与压头位移关系

当压头下移位移到 0.81 nm 时, 压头与基体的引力值达到最大值 26.8 nN, 对应的基体变化情况如图 5(b), 从该图可以看出, 基体最上层原子受较

大引力的作用易与压头发生“突跳”黏着接触的纳观现象, 这是因为在压头与基体之间间距很小时, 由于表面黏着力作用, 使得基体的最上层原子以突跳的方式与压头形成黏着接触, 此现象与文献 [15] 获得相一致结果。图 4 中的 B-C 段表明随着压头位移继续增大, 而远离基体铜的压头原子引力微弱, 金刚石压头下面原子与基体铜之间的作用力由引力不断转为斥力, 图 5(c) 表明此时, 压头与基体之间作用力刚好为引力等于斥力, 即接触力为 0。随着压头位移的继续下降, 其接触力也呈现出逐渐增大趋势。从基体变化情况图 5(c-f) 图可以看出, 压头下压接触基体过程中, 基体弹塑性变形不断加剧, 且滑移带逐渐产生并不断向被压的两侧进行扩张; 此外, 因接触力过大, 也易使得基体被压原子不断发生位错堆积和重构现象; 当压头下压位移为 2.09nm 时, 压头与基体之间接触力达到最大值 328.85nN, 其基体变化情况见图 5(f)。此外, 图 4 的 B-C 段呈锯齿状曲线式上升是由于单晶铜内部铜原子在受压时不断发生键的断裂和破坏, 以致基体晶格变形和位错不断发生。

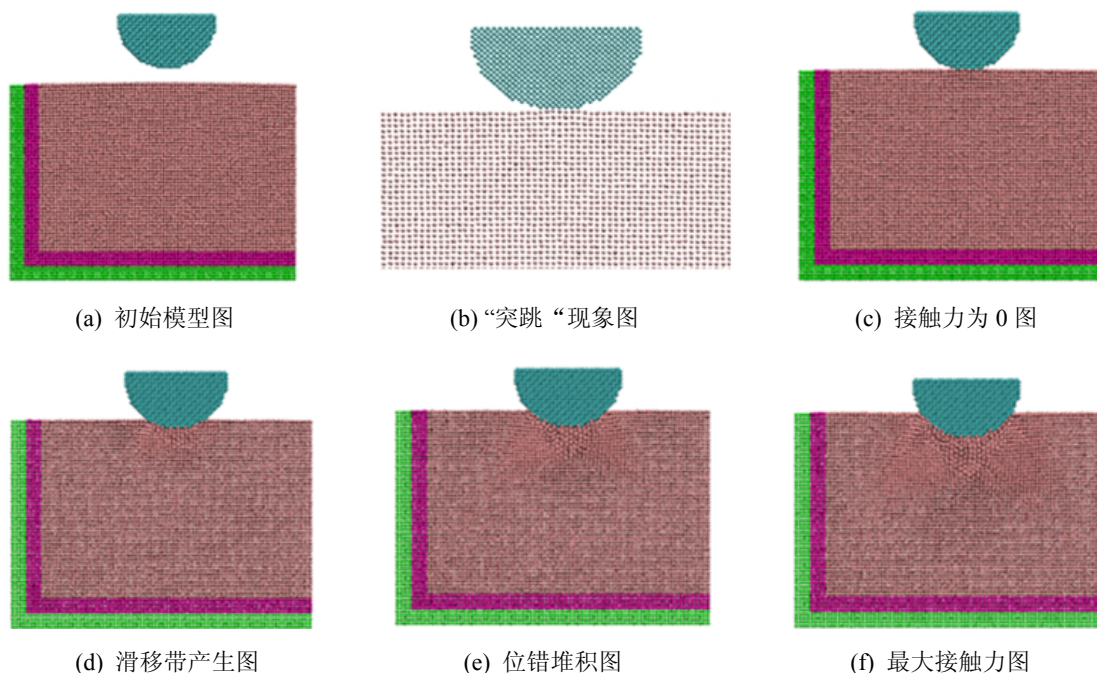


图 5 金刚石压头与单晶铜基体黏着接触过程

(2) 压头向上与基体分离过程(见图 4 中 E-F): 图 4 中 C-E 段表明在分离中, 压头与基体原子之间相互作用力由接触时的斥力逐渐转为引力的过程, 对比图 6(b~d))可知: 基体的位错原子数目逐渐减小, 表明分离过程中, 被压基体发生弹性恢复和塑性变形。比较图 6(d)和(e)可发现: 由于黏附力的存在, 使得基体的部分原子逐渐被压头拖拽出基体表面, 并且基体被压正下方堆积了大量位错原子, 此时基体有着明显的塑性变形。据图 4 接触与分离位移曲线可以得出, 压头与基体分离后的位移小于压头压入基体过程的位移, 是由于在分离过程中, 基体发生能量耗散和黏附力的存在导致分离与接触过程的位移呈现出明显的滞后现象(见图 6(e))。在压头位移为 1.94nm 时, 由于引力等于斥力, 压头与基

体之间接触力再一次为 0; E-F 段表明随着压头位移的继续减小, 其接触力也呈逐渐减小趋势。图 4 中的 E-F 段曲线呈锯齿状形式减小趋势是因分离过程中的单晶铜基体发生弹性恢复和塑性变形原因, 此现象依据可参考文献^[7,16]。整个接触与分离过程中的接触作用力波动现象重复出现, 其主要原因是因为接触作用力达到铜原子键结合的临界值, 造成键的断裂, 晶格破坏, 接触作用力会突然陡降。比较图 6(b)和(c)可以发现, (c)图两侧滑移带数量较(b)图明显减少, 说明此时分离过程中部分滑移带并未发生明显的位错变化, 仍可以弹性恢复。此外, 从图 6(e)还可知, 分离之后, 基体部分原子黏附于压头底表面上, 此时的基体已发生明显的塑性变形。

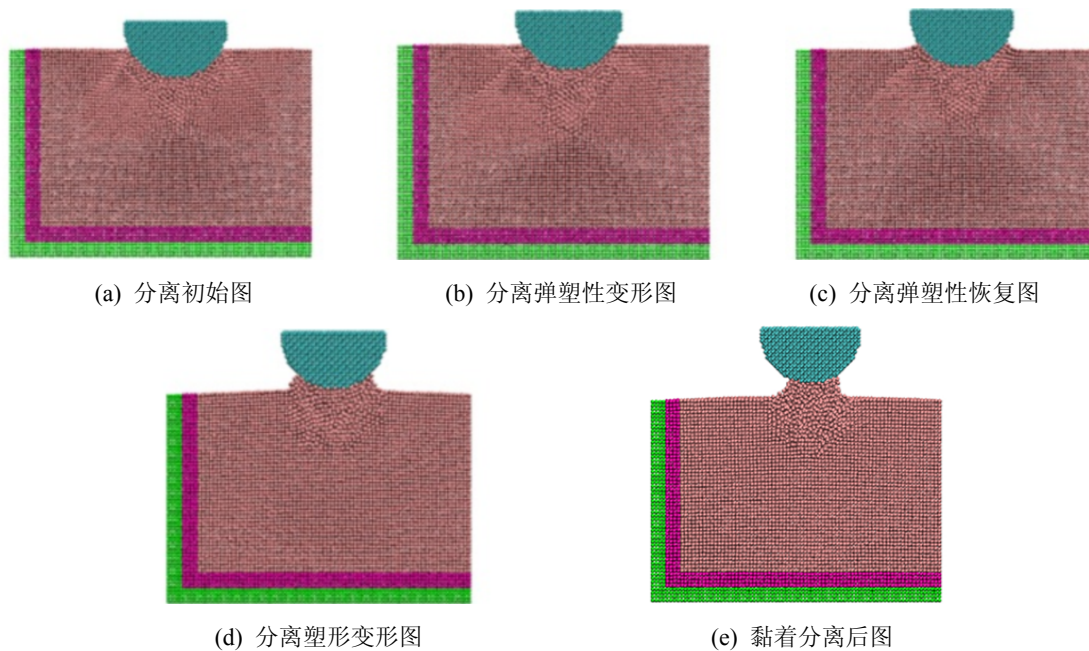


图 6 金刚石压头与单晶铜基体黏着分离过程

3 结论

(1) 金刚石压头与单晶铜基体还尚未接触时, 基体最上层原子易跃出基体表面与压头原子发生“突跳”黏着接触实验现象。随压头位移的继续增大, 基体与压头之间主要作用力由引力逐渐转为斥力, 且下压接触过程的接触力随压头位移的增加而呈锯齿状的逐渐增大趋势。

(2) 金刚石压头在压入基体的黏着接触过程中, 被压基体两侧相继出现滑移带, 并向两侧逐渐扩张, 而被压正下方的基体也不断发生原子位错堆积现象, 当压头位移下压到 2.09 nm 时, 接触力达到最大值 328.85 nN。

(3) 金刚石压头分离基体过程中, 被压两侧的滑移带数量逐渐减少, 基体发生明显的弹性恢复和塑性变形。随着压头位移的下降, 其接触力也逐渐

减小, 压头分离基体后, 基体部分原子因黏着力的存在容易被黏附于压头底表面, 且分离过程位移较下压接触的位移出现明显的黏着滞后现象。

参考文献:

- [1] 田文超, 贾建援. MEMS 亟待解决的七个问题[J]. 仪器仪表学报, 2004, 25(4): 95-97.
- [2] G M Rebeiz. RF MEMS Theory[M]. USA: Design and Technology, John Wiley & Sons, 2003.
- [3] 张态华, 杨业敏, 赵亚溥. MEMS 材料力学性能的测试技术[J]. 力学进展, 2002, 32(4): 543-562.
- [4] Merlijn V S, Robert P, Ingrid D W. A physical model to predict stiction in MEMS[J]. Journal of Micromechanics and Microengineering (S0960-1317), 2002, 5(12): 702-713.
- [5] Du Y, Chen L, McGruer N E, Adams G G, Etsion I. A finite element model of loading and unloading of an asperity contact with adhesion and plasticity [J]. Journal of Colloid and Interface Science (S0021-9797), 2007, 312(2): 522-528.
- [6] Sabelkin V, Mall S. Combined adhesion and friction effects on cylinder-on-flat/elastic-plastic microcontact [J]. Journal of Adhesion Science and Technology (S0169-4243) 2009, 6(23): 851-879.
- [7] U Landman, W.D. Ludetke. Atomistic dynamics of interfacial Process: films, junctions, and nanostructures [J]. Applied Surface Science (S0169-4332), 1996, 92: 237-256.
- [8] 朱世俊, 刘更, 刘天祥. 纳米圆柱体与平面黏着接触的分子动力学模拟[J]. 西北工业大学学报, 2007, 25(3): 461-465.
- [9] Van Vliet J K, Li J, Zhu T, Yip S, Suresh S. Quantifying the Early Stage of Plasticity through Nanoscale Experiments and Simulations [J]. Physical Review B (S1040-2519), 2003, 67(10): 104105.
- [10] Verlet L. Computer 'experiments' on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules [J]. Physical Review(S1050-2947), 1967, 159: 98-103.
- [11] Berendsen H J C, Postma J P M, Vangunsteren W F, Dinola A, Haak J R. Molecular dynamics with coupling to an external bath [J]. Journal of Chemical Physics(S0021-9606), 1984, 81: 3684-3690.
- [12] Daw Murray S, Baskes M. I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals [J]. Physical Review B (S1098-0121), 1984, 29(12): 6443-6453.
- [13] Hsieh J Y, Ju S P, Li S H, *et al.* Temperature dependence in nanoindentation of a metal substrate by a diamond like tip [J]. Physical Review B(S1098-0121), 2004, 70(19).
- [14] 黄跃飞. 纳米压痕过程温度影响的分子动力学研究[J]. 系统仿真学报, 2009, 21(14): 4454-4456.
- [15] 杨晓京, 詹胜鹏, 迟毅林. 纳米尺度接触过程的分子动力学模拟[J]. 农业机械学报, 2012, 43(11): 250-255.
- [16] Donna M Ebenstein, Kathryn J. Wahl. A comparison of JKR-based methods to analyze quasi-static and dynamic indentation force curves [J]. Journal of Colloid and Interface Science (S0021-9797), 2006, 2(298): 652-662.

《系统仿真学报》荣获“2014 中国最具国际影响力学术期刊”证书

由中国学术期刊(光盘版)电子杂志社与清华大学图书馆联合成立的中国学术文献国际评价研究中心, 以美国汤森路透 Web of Science 收录的 1.2 万余种期刊为引文统计源, 首次研制发布了 2012《中国学术期刊国际引证年报》(CAJ-IJCR 年报), 第一次给出了我国 5600 余种中外文学学术期刊总被引频次、影响因子、半衰期等各项国际引证指标, 并采用了新的国际影响力综合评价指标 CI 对期刊排序, 发布了“中国最具国际影响力学术期刊”(排序 TOP5%)和“中国国际影响力优秀学术期刊”(排序 TOP5-10%), 在国内外学术界产生了较大反响。之后, 2013 年版年报, 将引文统计源期刊扩展到 1.44 万多种。目前, 2014 版国际、国内年报与 TOP5%和 TOP5-10%期刊的遴选业已完成, 《系统仿真学报》被列入“2014 中国最具国际影响力学术期刊”行列。

我学报连续三年被列入 TOP5%国内一流的中国最具国际影响力学术期刊, 走向世界, 进入国际一流, 指日可待!