

纳米沟槽表面黏着接触过程的分子动力学模拟研究

司丽娜 王晓力

**A molecular dynamics study on adhesive contact processes of surfaces with nanogrooves**

Si Li-Na Wang Xiao-Li

引用信息 Citation: Acta Physica Sinica 63, 234601 (2014) DOI: 10.7498/aps.63.234601

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.234601>

当期内容 View Table of Contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/volumn/home.shtml>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

[聚酰亚胺/铜纳米颗粒复合物的分子动力学模拟研究](#)

孙伟峰, 王暄

2013, 62(18): 186202. 全文: [PDF](#) (11116KB)

[聚乙烯/银纳米颗粒复合物的分子动力学模拟研究](#)

李琳, 王暄, 孙伟峰, 雷清泉

2013, 62(10): 106201. 全文: [PDF](#) (3839KB)

[堆垛层错和温度对纳米多晶镁变形机理的影响](#)

宋海洋, 李玉龙

2012, 61(22): 226201. 全文: [PDF](#) (10899KB)

[基于非连续能量耗散的滑动摩擦系数计算模型](#)

龚中良, 黄平

2011, 60(2): 024601. 全文: [PDF](#) (763KB)

# 纳米沟槽表面黏着接触过程的分子动力学模拟研究\*

司丽娜<sup>†</sup> 王晓力<sup>‡</sup>

(北京理工大学机械与车辆学院, 北京 100081)

(2014年6月11日收到; 2014年6月19日收到修改稿)

采用大规模分子动力学方法研究了刚性球型探头与具有不同纳米沟槽基体表面的黏着接触过程, 探讨了表面沟槽结构对载荷-位移曲线、接触引力和拉离力以及材料转移的影响规律. 研究表明: 在相同的压入深度下, 与原子级光滑表面的黏着接触过程相比, 刚性探头与具有纳米沟槽结构基体表面的接触压力较小, 接触加载过程中的引力作用范围较大, 并伴随载荷的多次跳跃, 且接触引力和拉离力均有减小; 当沟槽深度相同时, 随着沟槽宽度的增大, 接触引力和拉离力逐渐减小, 当沟槽宽度逐渐接近探头与光滑表面的接触直径时, 接触引力和拉离力又逐渐增大, 趋于接近探头与光滑表面的接触过程; 当沟槽宽度相同时, 随着沟槽深度的增大, 接触引力相对减小, 拉离力变化不大.

**关键词:** 黏着接触, 分子动力学模拟, 纳米沟槽结构, 拉离力

**PACS:** 46.55.+d, 62.20.Qp, 31.15.xv

**DOI:** 10.7498/aps.63.234601

## 1 引言

微/纳器件关键零部件的特征尺度通常在纳米量级. 由于尺寸的减小, 器件系统中表面力作用显著增强, 由此引起的表/界面问题成为微/纳器件可靠运行、实现微/纳器件实用化的重要障碍<sup>[1,2]</sup>. 黏附是微/纳器件中最突出的表面问题之一<sup>[3-6]</sup>. 表面几何结构对微观表面黏附性能具有重要的影响, 许多学者研究了材料表面加工的微结构对表面黏附性能的影响<sup>[7-9]</sup>. 例如, Zou等<sup>[7]</sup>研究了具有镍纳米点图案的硅基体黏附和摩擦学性能, 结果表明, 与光滑硅基体表面相比, 具有镍纳米点图案的表面黏附力减小为原来的92%. Spencer等<sup>[8,9]</sup>通过在硅表面静电吸附和烧结氧化硅颗粒制得具有不同密度的凸起表面, 并利用原子力显微镜研究粗糙表面与聚乙烯颗粒之间的黏附作用. 结果表明, 烧结了颗粒的凸起表面的黏附作用比光滑表面显

著减小. 具有纳米结构表面的黏着接触问题已成为当前纳米摩擦学领域最重要的研究课题之一<sup>[10,11]</sup>. 研究具有纳米结构表面的黏着接触行为, 揭示纳米结构的减黏机理以及对材料机械力学性能的影响规律, 不仅可对现有连续力学接触模型完善补充, 而且可为特定工程应用表面形貌的设计提供理论依据.

本文利用大规模分子动力学方法研究了刚性球型探头与具有纳米沟槽结构基体表面的黏着接触过程, 并与探头和原子级光滑表面的接触过程进行了对比, 探讨了表面沟槽结构对载荷-位移曲线、接触引力、拉离力和材料转移等的影响规律.

## 2 仿真系统的分子动力学建模

本文研究了球型探头与原子级光滑表面和六种具有不同尺寸沟槽结构的硅基体表面的接触过

\* 国家自然科学基金(批准号: 51275046, 51305029)和中国博士后基金(批准号: 2012M520005, 2013T60066)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: [silina\\_thu@163.com](mailto:silina_thu@163.com)

<sup>‡</sup> 通讯作者. E-mail: [xiaoli\\_wang@bit.edu.cn](mailto:xiaoli_wang@bit.edu.cn)

程. 系统模型如图 1(a) 所示, 研究采用的是半径为 200 Å 的球型探头. 由于接触区域相对于探头直径只是很小的一部分, 为节省计算时间, 仅截取了球型探头的一部分, 高度为 40 Å, 硅氧原子总数为 62224. 原子级光滑表面基体 (图 1(b), 表面 A) 共有 230400 个硅原子, 在  $x, y, z$  三个方向上尺寸为  $60a_0 \times 40a_0 \times 12a_0$ ,  $a_0$  为硅的晶格常数 (5.43 Å). 在表面 A 的基础上加工均匀排布的沟槽结构即得到其他六种表面, 分别命名为表面 B—G. 以表面 B 为例进行说明: 表面 B 为在表面 A 的基础上加工尺寸为  $5 \text{ Å} \times 40a_0 \times 5 \text{ Å}$  ( $x \times y \times z$ ) 的凹槽, 沟槽宽度 ( $b_0$ ) 为 5 Å, 沟槽间隔 ( $c_0$ ) 与沟槽宽度相同, 也为

5 Å, 共有 223920 个原子. 表面 A—G 的结构参数见表 1, 其模型图如图 1 所示.

表 1 具有不同沟槽结构表面的尺寸参数

	原子数目 $N_{\text{atom}}$	沟槽尺寸 ( $x \times y \times z$ )	沟槽间隔 $c_0/\text{Å}$
表面 A	230400	无	0
表面 B	223920	5 Å × 217.2 Å × 5 Å	5
表面 C	223760	10 Å × 217.2 Å × 5 Å	10
表面 D	214880	10 Å × 217.2 Å × 10 Å	10
表面 E	199320	10 Å × 217.2 Å × 20 Å	10
表面 F	224280	20 Å × 217.2 Å × 5 Å	20
表面 G	199320	30 Å × 217.2 Å × 5 Å	30

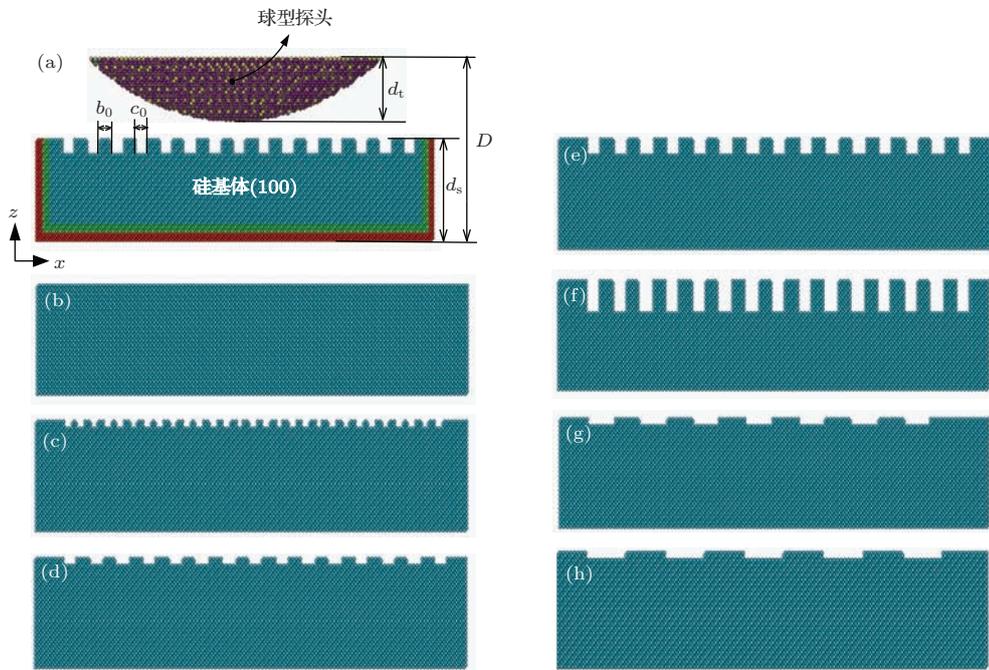


图 1 (a) 氧化硅探头与带有沟槽结构基体表面接触模型示意图; (b)—(h) 分别对应不同基底表面 A—G

在模拟过程中, 将基体划分为三层: 边界层、恒温层和牛顿层, 如图 1(a) 所示. 硅基体的四周和底部厚度为 5 Å 的区域为边界层, 边界层内部厚度为 10 Å 的硅原子层为恒温层, 恒温层内部为牛顿层. 在模拟过程中, 恒温层的温度控制在 293 K, 采用的恒温策略是 Gauss-Hoover 算法 [12]. 边界层的原子被固定住, 在整个仿真过程中保持不动; 恒温层和牛顿层的原子运动都符合牛顿运动定律. 模拟过程的时间步长为 1 fs. 模拟过程中采用 Watanabe 势函数 [13–16] 模拟氧化硅-硅基体系统中原子间的相互作用, 硅氧势函数的截断半径为 4.0 Å.

Watanabe 势函数所有表达式及参数参见文献 [13].

初始时刻探头与基体表面的间隙为 10 Å, 并根据 Maxwell 分布给定原子的初始速度; 然后对初始模型弛豫 10000 步使系统达到平衡态; 待系统充分弛豫后, 探头以  $0.5 \text{ Å}\cdot\text{ps}^{-1}$  的速度压入具有不同结构的基体表面, 到达指定的压入深度 (5 Å), 使系统重新弛豫 10000 步, 系统重新恢复平衡; 最后探头以  $0.5 \text{ Å}\cdot\text{ps}^{-1}$  的速度卸载. 其中压入深度是指压入过程结束时探头最底部与基体初始表面之间的距离.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 接触过程中的载荷-位移曲线

图2给出了探头与原子级光滑表面(表面A)接触过程中的载荷-位移曲线. 载荷即探头受到的基体作用力(所有探头原子受到的基体原子作用力总和)的法向力( $F_z$ ). 如果探头与基体之间的作用力为吸引力, 则 $F_z$ 为负; 如果相互作用力为排斥力, 则 $F_z$ 为正. 接触过程各个时刻的位移 $d_z$ 可用公式 $d_z = d_t + d_s - D$ 求解, 其中 $D$ 为接触过程各个时刻探头顶端到基体底部的距离,  $d_t$ 为探头的高度,  $d_s$ 为硅基体的高度, 如图1(a)所示.

从图2可以看出, 加载和卸载过程的力曲线并不完全相同, 即存在“黏着滞后”现象. 这主要是由于两接触表面在分离过程中耗散了更多的能量[17,18]. 有学者认为此现象主要是由于探头和基体在接触过程中形成的化学键, 在卸载过程中需要更大的力拉断分离, 进而导致卸载过程中力的增加[19]. 也有研究指出, 黏着滞后现象是由于在加载过程中压力超过材料的屈服点导致材料发生塑性变形所致[20]. 本文将加载过程中最大引力定义为“接触引力”, 卸载过程中的最大引力定义为“拉

离力”[21,22], 它们都是衡量表面间黏附性能的重要指标.

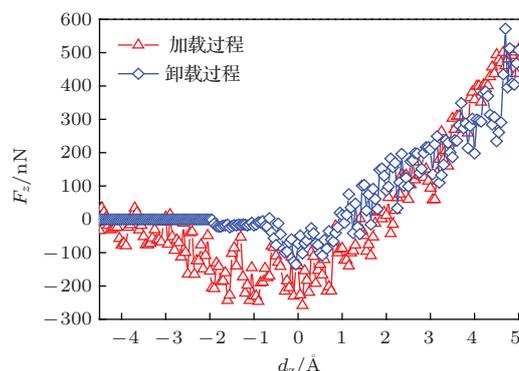


图2 (网刊彩色) 探头与光滑表面(表面A)接触过程的载荷-位移曲线

#### 3.2 沟槽宽度对纳米接触过程的影响

图3给出了探头与表面B, C, F和G黏着接触过程的载荷-位移曲线. 表面B, C, F和G具有相同的沟槽深度(5 Å), 宽度分别为5, 10, 20和30 Å. 从图2和图3可以看出, 在相同的压入深度下, 加载过程中探头与带有沟槽结构表面的接触压力比其与光滑表面的接触压力较小. 这是由于沟槽结构可以

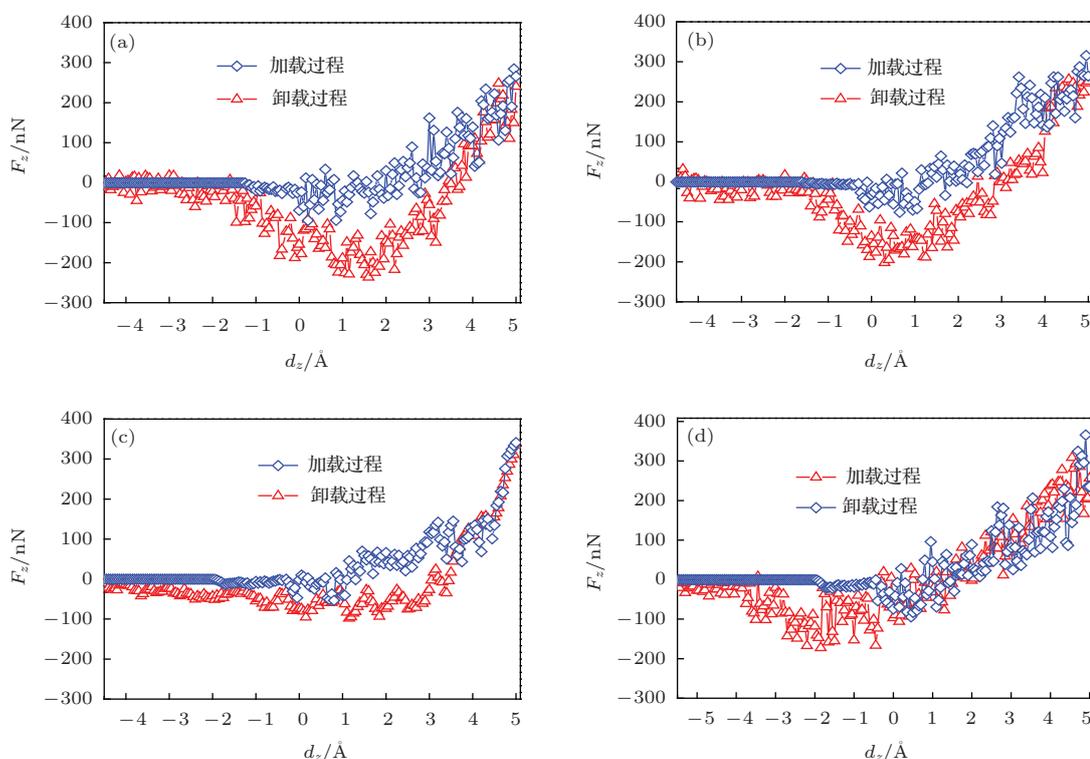


图3 (网刊彩色) 探头与不同沟槽结构表面接触过程的载荷-位移曲线 (a) 表面B; (b) 表面C; (c) 表面F; (d) 表面G

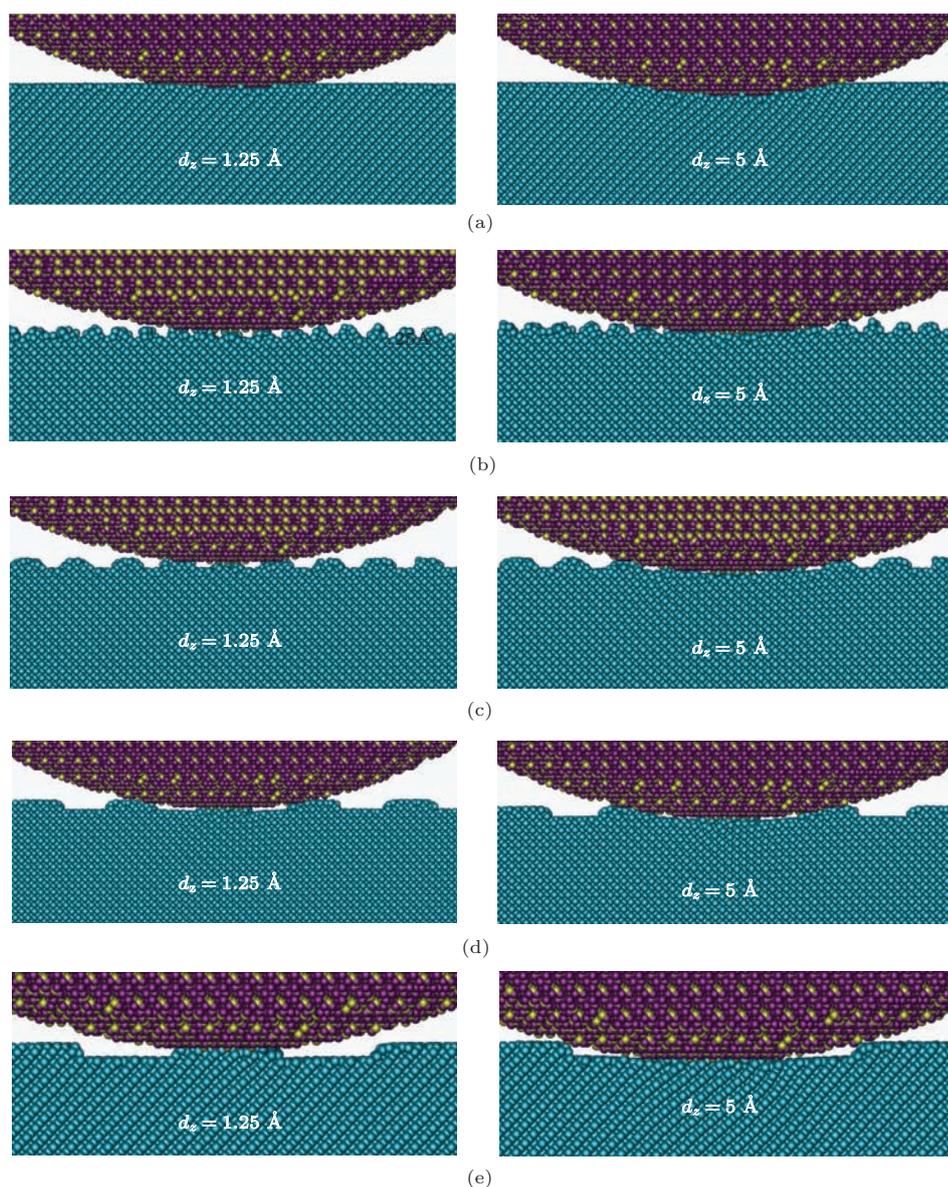


图4 探头与表面 A, B, C, F 和 G 接触加载过程的  $xz$  平面原子构型 (a) 表面 A; (b) 表面 B; (c) 表面 C; (d) 表面 F; (e) 表面 G

为接触区原子迁移提供空间, 减弱原子之间的相互挤压作用, 进而降低接触区的接触压力. 而光滑表面接触区原子在探头下压过程中只能向基体内部迁移, 产生较大的接触反力. 图4给出了探头与不同表面接触加载过程中  $xz$  平面原子构型. 为方便观察, 仅给出了原子坐标满足  $102.175 \text{ \AA} < y < 142.175 \text{ \AA}$  的原子构型. 从图4可以看出, 在接触加载过程中, 光滑表面接触区原子在探头压力作用下趋向于基体内部, 而具有沟槽结构的表面接触区原子向沟槽区域迁移并将其填充. 从图3还可以看出, 沟槽结构的存在使得接触加载过程的载荷-位移曲线变得较为复杂, 引力作用范围增大, 且伴随多次载荷跳动. 探头与具有沟槽结构表面

最先发生接触的是沟槽顶部, 与光滑表面相比, 其接触面积较小, 因此探头和基体的黏附作用较弱; 随着探头缓慢压入基体内部, 探头与沟槽底部的距离减小, 探头和基体黏附作用重新增强, 即引力增大, 载荷相应减小. 图5对比给出了探头与表面 A, B, C, F 和 G 接触过程中的接触引力(加载过程中最大引力). 由图5可知, 当沟槽深度同为  $5 \text{ \AA}$  时, 接触引力随沟槽宽度的增加而减小; 当沟槽宽度为  $20 \text{ \AA}$  时, 接触引力约为光滑表面的 35%. 但当沟槽宽度增大到  $30 \text{ \AA}$  时, 接触引力重新增大. 这是由于沟槽宽度缓慢接近探头与光滑表面接触的直径, 沟槽间隔部分与探头的接触趋于接近探头和光滑表面的接触. 因此纳米接触过程的载荷-位移曲线也

逐渐接近探头和光滑表面接触的载荷-位移曲线, 接触引力增大.

另外从图3还可以看出, 当沟槽宽度为5 Å和10 Å时, 卸载过程的载荷-位移曲线中引力区域变化不大; 当沟槽宽度增加到20 Å时, 卸载过程的引力明显减小. 图5给出了探头与表面A, B, C, F和G接触卸载过程中的拉离力(卸载过程中的最大引力). 从图5可以看出, 当沟槽宽度增加到20 Å时, 卸载过程中的拉离力明显减小. 图6为探头与不同表面接触卸载过程中不同时刻  $xz$  平面的原子构型. 从图6可以看出: 当沟槽宽度为5 Å时, 加载过程中的接触区原子在探头压力作用下向沟槽区域迁移并将其填充, 探头与基体脱离接触后沟槽结构形

态不再清晰; 随着沟槽宽度的增大(如沟槽宽度为20 Å), 在探头压入过程中, 原子不能将沟槽区域完全填充, 在卸载过程中探头与接触区域内沟槽间隔

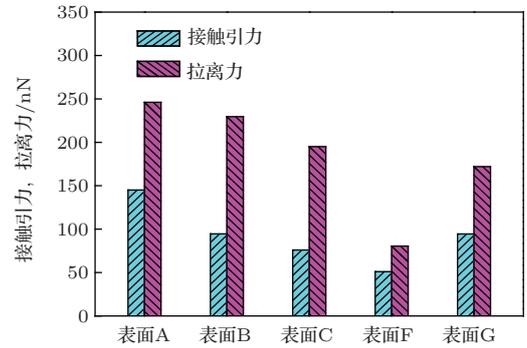


图5 探头与表面A, B, C, F和G接触过程中的接触引力和拉离力

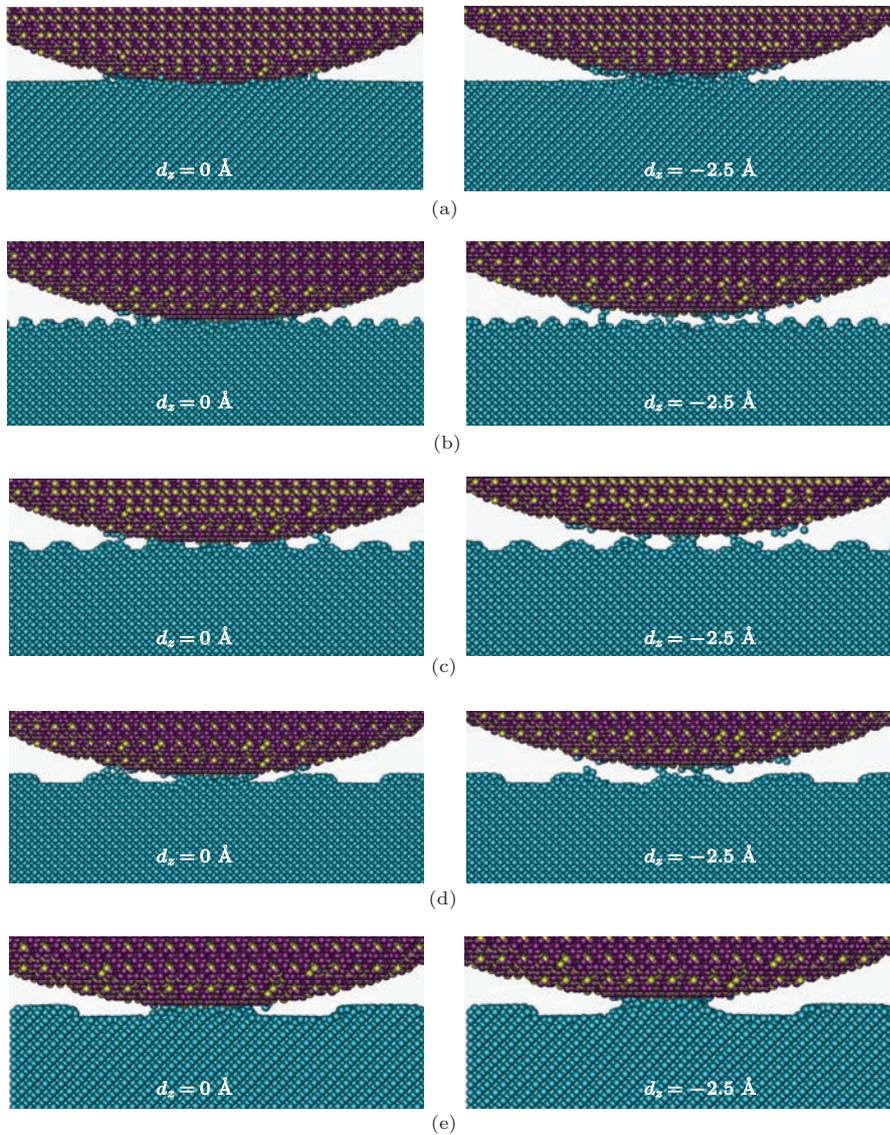


图6 探头与表面A, B, C, F和G接触卸载过程中各个时刻的  $xz$  平面原子构型 (a) 表面A; (b) 表面B; (c) 表面C; (d) 表面F; (e) 表面G

部分先后脱离接触. 与光滑表面相比, 探头和沟槽间隔部分的接触面积较小, 因而接触区需要拉断的化学键数量减少, 即卸载过程中所需克服的外力较小. 当沟槽宽度为 20 Å 时, 探头与基体脱离接触后沟槽形状变化较不明显; 当沟槽宽度增大至 30 Å 时, 卸载过程的拉离力再次增大 (如图 3 和图 5 所示). 与前面接触引力的分析相似, 当沟槽宽度较大时, 探头和单个沟槽间隔部分的接触逐渐接近探头和光滑表面的接触, 因而卸载过程的拉离力开始接近探头和光滑表面的拉离力.

接下来考察不同沟槽结构表面在接触过程中的材料转移情况. 在黏着接触过程中, 一些基体表面原子会黏附在探头表面被带走并成为零配位原子. 图 7 给出了探头与表面 B, C, F 和 G 卸载过程中接触区配位数为零的原子数目. 当沟槽宽度为 5 Å 时, 卸载过程中配位数为 0 的原子数目最多 (128), 表明接触过程中材料转移最严重. 这是由于沟槽结构尺寸较小, 导致基体表面原子间的结合力减弱, 使基体原子较容易黏附在探头表面成为零配位原子. 当沟槽宽度为 10 Å 和 20 Å 时, 黏附在探头表面的原子数目为 85 左右, 比光滑表面的情形少; 当沟槽宽度为 30 Å 时, 零配位原子数目为 92, 转移的原子数再次增多. 这表明合适尺寸的沟槽结构的存在不仅降低了黏附力, 而且减少了材料转移.

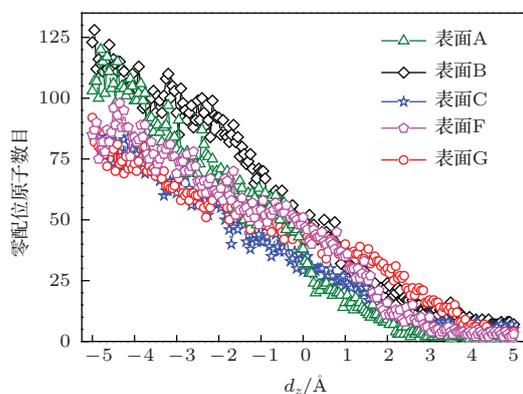


图 7 (网刊彩色) 探头与表面 A, B, C, F 和 G 接触卸载过程中配位数为 0 的原子数目变化趋势

### 3.3 沟槽深度对纳米接触过程的影响

图 8 给出了探头与表面 D 和 E 黏着接触过程的载荷-位移曲线. 表面 C, D 和 E 具有相同的沟槽宽度 (5 Å), 深度分别为 5, 10 和 20 Å. 结合图 3(b) 和图 8 可以看出, 沟槽深度变化对加载过程有一定的影响. 一方面, 在相同压入深度下, 沟槽深度越

大, 表面接触压力越小. 前面已提到, 具有沟槽结构表面可以为接触区原子迁移提供空间, 降低接触过程中的接触压力. 随着沟槽深度的增加, 原子可迁移的空间增大. 图 9 给出了探头与表面 D 和 E 接触加载过程中最大压深时  $xz$  平面的原子构型. 从图 9 可以看出, 在压入过程中, 接触区原子在探头压力作用下向沟槽区移动. 但是当沟槽深度较大时, 迁移原子不足以全部填充沟槽, 导致接触压力下降. 另一方面, 沟槽深度增大, 接触引力减小. 如前面所述, 探头和具有沟槽结构的基体表面最先接触的部分为沟槽顶部. 随着探头逐步压入基体内部, 探头与沟槽底部的距离减小, 二者之间的引力增加. 对于沟槽深度较大的基体, 探头与沟槽底部距离较大, 由范德华力导致的吸引作用较弱, 因此接触引力相对减小.

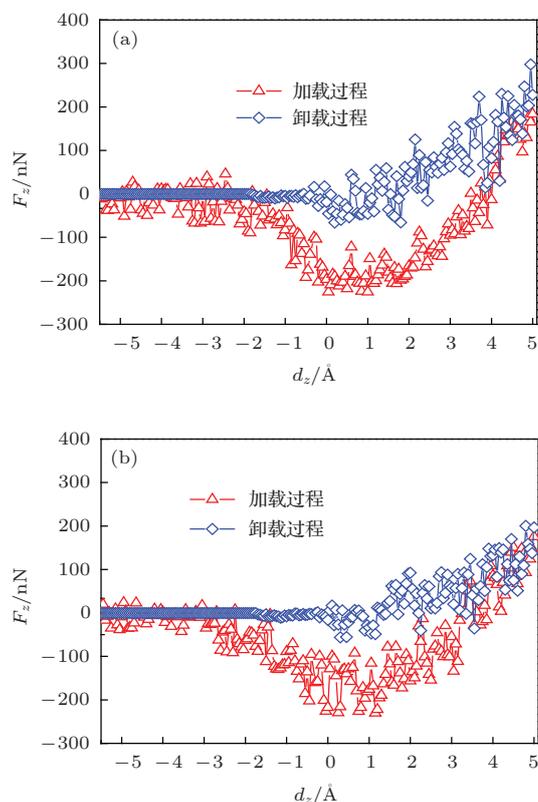


图 8 (网刊彩色) 探头与不同沟槽结构表面接触过程的载荷-位移曲线 (a) 表面 D; (b) 表面 E

结合图 3(b) 和图 8 可以看出, 在卸载阶段, 沟槽深度的变化对拉离力的影响很小, 而加载过程产生的变形不断恢复. 同时, 需要施加一定外力来克服原子间的键合作用从而使探头与基体分离, 此外力主要与探头和基体之间的接触面积有关. 对于表面 C, D 和 E 而言, 虽然沟槽高度不同, 但是其宽度

相同,即探头与表面C, D和E的接触面积相同,因此沟槽高度变化不会对拉离力产生较大影响。

对探头与表面C, D和E接触卸载过程中配位数为零的原子数目进行了统计,以考察不同基体表面在接触过程中的材料转移情况,结果如图10所示。表面C在卸载过程中配位数为0的原子数目最多(85),表明接触过程中材料转移最为严重。表面D和E配位数为0的原子数目均约为60,表明沟槽高度的增大可以减弱原子迁移。



图9 探头与表面D,表面E接触加载过程中 $xy$ 平面的原子构型(压入深度为5 Å) (a)表面D; (b)表面E

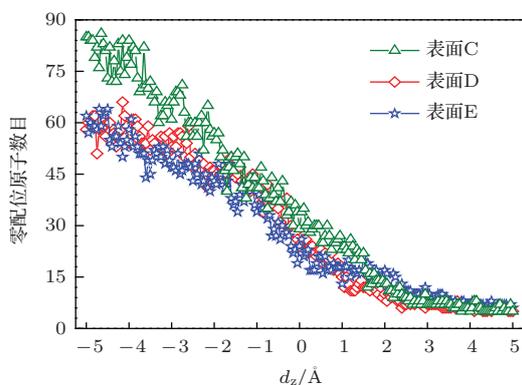


图10 (网刊彩色) 探头与表面C, D和E接触卸载过程中配位数为零的原子数目变化

## 4 结 论

本文采用分子动力学方法研究了刚性球型探头与具有不同纳米沟槽结构表面的黏着接触过程,探讨了表面沟槽结构对载荷-位移曲线、接触引力和拉离力以及材料转移的影响规律。主要结论如下:

1) 在相同压入深度下,由于沟槽结构为接触区原子提供了迁移空间,降低了原子之间相互挤压作用,与原子级光滑表面相比,具有沟槽结构表面的

黏着接触过程的表面接触压力较小;

2) 在探头与具有沟槽结构的表面接触加载过程中,引力作用范围较大并伴随载荷多次跳跃,且接触引力和拉离力均有减小;

3) 当沟槽高度相同时,随着沟槽宽度的增大,接触引力和拉离力逐渐减小;当沟槽间隔部分宽度逐渐接近探头与光滑表面接触直径时,接触引力和拉离力又逐渐增大,趋于接近探头与光滑表面接触过程;当沟槽宽度相同时,接触引力随沟槽深度的增大而减小,而拉离力变化不大;合理尺寸的沟槽结构可以显著减少黏着接触过程中的材料转移。

## 参考文献

- [1] Wei Z, Zhao Y P 2004 *Chin. Phys.* **13** 1320
- [2] Xie G, Ding J, Liu S, Luo J 2009 *Surf. Interf. Anal.* **41** 338
- [3] Jacobs T D B, Ryan K E, Keating P L, Grierson D S, Lefever J A, Turner K T, Harrison J A, Carpick R W 2013 *Tribol. Lett.* **50** 81
- [4] Xie G, Ding J, Zheng B, Xue W 2009 *Tribol. Int.* **42** 183
- [5] Zhao Y P, Wang L S, Yu T X 2003 *J. Adhesion Sci. Technol.* **17** 519
- [6] Chen S H, Chen P J 2010 *Chin. Phys. Lett.* **27** 108102
- [7] Zou M, Wang H, Larson P R, Hobbs K L, Johnson M B, Awitor O K 2006 *Tribol. Lett.* **24** 137
- [8] Ramakrishna S N, Nalam P C, Clasohm L Y, Spencer N D 2013 *Langmuir* **29** 175
- [9] Ramakrishna S N, Clasohm L Y, Rao A, Spencer N D 2011 *Langmuir* **27** 9972
- [10] Pastewka L, Robbins M O 2014 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **111** 3298
- [11] Hsu S, Ying C, Zhao F 2014 *Friction* **2** 1
- [12] Rapaport D C 1995 *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (Cambridge: Cambridge University Press) pp10-82
- [13] Watanabe T, Fujiwara H, Noguchi H, Hoshino T, Ohdomari I 1999 *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** L366
- [14] Chen R L, Luo J B, Guo D, Lu X C 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 104907
- [15] Si L N, Guo D, Luo J B, Lu X C 2011 *J. Appl. Phys.* **109** 084335
- [16] Duan F L, Wang G J, Qiu H B 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 016201 (in Chinese) [段芳莉, 王光建, 仇和兵 2012 物理学报 **61** 016201]
- [17] Chen Y L, Helm C A, Israelachvili J N 1991 *J. Phys. Chem.* **95** 10736
- [18] Zhu P Z, Hu Y Z, Ma T B, Wang H 2011 *Tribol. Lett.* **41** 41
- [19] Ryan K E, Keating P L, Jacobs T D, Grierson D S, Turner K T, Carpick R W, Harrison J A 2014 *Langmuir* **30** 2028
- [20] Walsh P, Omeltchenko A, Kalia R K, Nakano A, Vashishta P, Saini S 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 118

[21] Duan F L, Wang G J, Qiu H B 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 046801 (in Chinese) [段芳莉, 王光建, 仇和兵 2012 物理学报 **61** 046801]

[22] Duan F L, Luo J B, Wen S Z 2005 *Chin. Sci. Bull.* **50** 1661

# A molecular dynamics study on adhesive contact processes of surfaces with nanogrooves\*

Si Li-Na<sup>†</sup> Wang Xiao-Li<sup>‡</sup>

(School of Mechanical Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

( Received 11 June 2014; revised manuscript received 19 June 2014 )

## Abstract

The adhesive contact processes between a rigid spherical tip and substrates with nanogrooves of different sizes have been investigated with a large-scale molecular dynamics simulation method. Influences of the surface grooves on the load-displacement curves, the attractive forces in the loading/unloading processes, and material transfer have been discussed. Results show that compared with the contact between a tip and a smooth surface, the attractive force range becomes larger in the loading process, accompanied by several jumps of the load, and the maximum attractive forces both in the loading and unloading processes are smaller. When the groove depths are the same, the maximum attractive forces in the loading and unloading processes decrease gradually with the increase of the groove width. However, when the groove width becomes close to the contact diameter between the tip and the smooth surface, the maximum attractive force would increase slowly, tending to be close to the case of smooth surface. When the groove width is kept the same, the maximum attractive force in the loading process decreases with the increase of the groove depth, while the maximum attractive force in the unloading process is almost unchanged.

**Keywords:** adhesive contact, molecular dynamics simulation, nanogrooves, pull-off force

**PACS:** 46.55.+d, 62.20.Qp, 31.15.xv

**DOI:** 10.7498/aps.63.234601

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51275046, 51305029) and the China Postdoctoral Science Foundation (Grant Nos. 2012M520005, 2013T60066).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [silina\\_thu@163.com](mailto:silina_thu@163.com)

<sup>‡</sup> Corresponding author. E-mail: [xiaoli\\_wang@bit.edu.cn](mailto:xiaoli_wang@bit.edu.cn)