

SiC 基底覆多层石墨烯力学强化性能 分子动力学模拟*

陈晶晶^{1)†} 赵洪坡²⁾ 王葵²⁾ 占慧敏²⁾ 罗泽宇¹⁾

1) (南昌理工学院机电工程学院, 南昌 330044)

2) (南昌理工学院计算机信息工程学院, 南昌 330044)

(2023 年 12 月 27 日收到; 2024 年 3 月 8 日收到修改稿)

微机电系统半导体 SiC 器件覆多层石墨烯的力学强化性能与塑性变形微观研究, 将对提升该器件耐久性服役寿命期和强韧化机制理解起到显著作用. 因此, 本文基于分子动力学法探讨了石墨烯堆垛类型 (AA 和 AB 堆垛) 和极端服役温度对其接触力学性能 (最大承载荷、硬度、杨氏模量、接触刚度)、微结构演化、接触质量、褶皱形貌、位错总长的影响, 解释了 SiC 基底覆多层石墨烯力学强化的原子尺度机制. 研究发现: 相同服役温度下, 随覆石墨烯层数增加, SiC 基底微结构的棱柱形位错环演化中越早发生脆断; 石墨烯 AB 堆垛在最大压深时的 C—C 键断裂会导致石墨烯优异面内弹性变形丧失, 以致其最大承载性呈现断崖式下降. 研究表明: SiC 基底覆三层石墨烯的力学强化性能是纯 SiC 的 2 倍, 该强化效应不受石墨烯堆垛类型影响, 其力学强化机制主要源于多层石墨烯受载加大会引起石墨烯面内褶皱增大, 从而增大界面接触刚度, 触发界面接触质量减小所致. 服役温度升高, 会激发原子振动频率增大, 诱导界面接触原子数增多, 以致界面接触质量增大, 而界面接触刚度随之减弱, 最终引起 SiC 基底覆多层石墨烯力学性能随温度升高呈近似直线下降. 此外, SiC 基底的亚表层应力集中会诱导基底内的微结构产生滑移与演变; 基底覆石墨烯层数增加可有效减小基底亚表层的应力集中分布程度, 从而对基底起抗载保护作用.

关键词: SiC, 多层石墨烯, 力学强化, 分子动力学, 接触刚度

PACS: 96.60.th, 96.12.ki, 96.12.Uv, 96.15.Bc

DOI: 10.7498/aps.73.20232031

1 引言

第三代半导体 SiC 器件凭借优异的物理、化学、力学性能, 如电子能带结构^[1]、光学性能^[2]、热导率^[3]、高化学惰性和耐腐蚀性^[4]等特性, 在微/纳机电系统、核燃料组件、微电子元件、光电器件等方面具有广阔应用前景, 该器件也是微电子整流器、微型探测器与传感器、微型集成电路等重大国防装备领域所亟需的关键核心元器件. 而大量实践

表明^[5], 微/纳机电系统半导体器件在极端服役温度和频繁往复接触摩擦的双重耦合影响下, 器件表面经常产生黏着磨粒磨损, 是诱发半导体元器件出现耐久性服役寿命短、界面接触力学性能下降的本质原因. 然而, 石墨烯因其优异的力学性能^[6]、载流子浓度高^[7]、热导率佳^[8,9]、低剪切^[10]等特性, 可对机械电子元器件的界面接触性能起到显著改良作用^[11,12], 常用于制造高速、低功耗的晶体管器件以及高灵敏度、高分辨率的传感器, 被广泛应用于电子产品中.

* 江西省教育厅科学技术研究 (批准号: GJJ2202705)、南昌理工学院校级课题 (批准号: NLZK-22-07, NLZK-22-01)、南昌市重点实验室建设项目 (批准号: 2020-NCZDSY-005) 和南昌理工学院机械表/界面摩擦磨损与防护润滑研究中心资助的课题.

† 通信作者. E-mail: chenjingjingfzu@126.com

Miyoshi 等^[13]研究了单晶和多晶 SiC 摩擦学性能受温度的影响,表明工况温度为 400 °C 时, SiC/Fe 摩擦对偶表面形成了一层润滑膜的石墨层,有效促进了对偶界面的润滑效果,从而引起界面摩擦系数极大降低.而当温度升高到 800 °C 时,摩擦副对偶表面形成的石墨层受摩擦诱导作用产生损伤,导致其润滑效果失效,极大增强了界面摩擦特性. Tapasztó 等^[14]研究了 SiC 基底添加多壁碳纳米管或石墨烯后的机械性能,发现基体中石墨烯的均匀分布较多壁碳纳米管更佳,指出添加低维石墨烯比添加碳纳米管,可使复合材料机械性能整体提高 25%,但缺乏对其机械力学性能提升的幕后机制分析. Li 等^[15]实验研究表明:石墨烯/SiC 复合材料的致密度随着石墨烯含量增大而降低,通过添加少量石墨烯,石墨烯/SiC 复合材料的弯曲强度及断裂韧性得到极大改善,但是当石墨烯添加过量时,石墨烯/SiC 复合材料的弯曲强度和断裂韧性确呈现逐渐下降趋势^[16-19]. 李炯利等^[20]采用实验法研究了石墨烯增强铝基复合材料的力学性能,指出静态载荷下添加石墨烯的铝基复合材料屈服强度虽然可以提高,但缺乏对材料塑性变形的微观理解. 另外, Nawaz 等^[21]对 3C-SiC 的纳米压痕展开实验研究,发现在塑性变形阶段,位错滑移方向沿 {111} 晶面系族,也有学者^[22-25]报道了 SiC 材料的位错滑移和非晶态产生所致的塑性变形行为. Zhao 等^[26]采用实验方法结合有限元模拟技术,从微观角度揭示了室温下 β -SiC 材料的塑性变形行为和脆性断裂特征. 此外, Kondo 等^[27]采用实验方法研究了不同辐照环境下辐照对 β -SiC 材料蠕变的影响. Zhao 等^[28]通过透射电子显微镜观察到

在极高压压缩条件下,非晶原子层局部应力集中可形成纳米带和堆垛层错. Brancia 等^[29]利用分子动力学模拟 (MD) 研究了单一位错核心是否主导了立方晶 SiC 在承载冲击载荷下的塑性变形机制.

研究分析表明,目前主要集中于实验法研究 SiC/石墨烯复合材料的摩擦性能,及运用 MD 法对 SiC 材料纳米压痕的塑性变形行为展开原子尺度研究,极少研究原子尺度的 SiC 覆多层石墨烯的接触力学性能. 因此,本文拟采用 MD 法从界面接触特性角度出发,着重分析 SiC 基底覆多层石墨烯的力学强化机理,深刻揭示其界面接触变形特性与力学性能提升的本质.

2 分子动力学模拟

2.1 参数设置

图 1 为采用 MD 法建立的 SiC 基底覆多层石墨烯的原子尺度模型. SiC 基底 x, y, z 轴晶向依次为 $[11\bar{2}]$, $[\bar{1}10]$, $[111]$, 模型尺寸分别为 $L_x = 28.8$ nm, $L_y = 33.8$ nm, $L_z = 15$ nm. 模型 X, Y 轴采用周期性边界, Z 轴采用非周期性边界. 模拟时, SiC 基底被划分 3 个区域 (恒温层、固定层、牛顿层), 牛顿层和恒温层原子统称为运动层原子, 遵循牛顿运动规律. SiC 晶格常数为 0.4358 nm. 分别用符号 SiC+1LG, SiC+2LG, SiC+3LG 表示基底覆一层、两层、三层石墨烯 (图 1(b)). 多层石墨烯采用 AA 堆垛和 AB 堆垛 (图 1(d)), 保持层间距为 0.34 nm^[10], 并固定石墨烯四周边界. 运用虚拟压头的纳米压痕法测量 SiC 基底覆多层石墨烯膜的硬度、杨氏模量、接触刚度等力学性能,

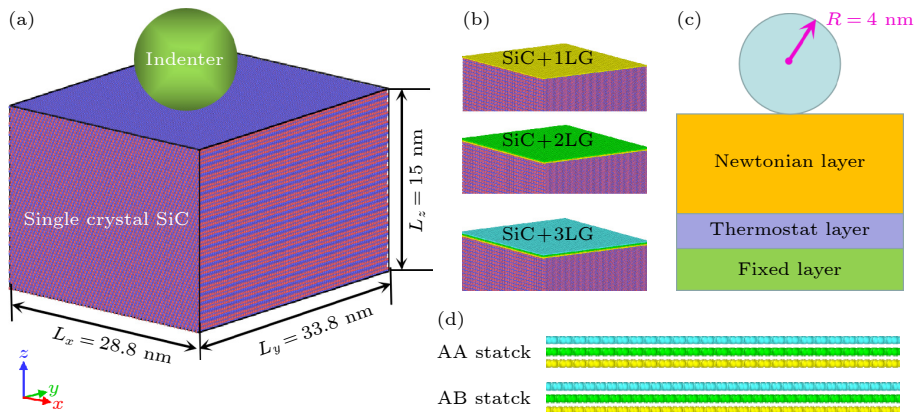


图 1 SiC 基底覆多层石墨烯薄膜的分子动力学模型

Fig. 1. Molecular dynamics model of SiC substrate coated with multilayer graphene films.

虚拟压头视为无原子刚性球, 它排斥与其接触的原子, 是有效测量原子尺度下 SiC 基底覆多层石墨烯膜的接触力学性能方法, 压头与基底相互作用见 (1) 式:

$$V(r) = \begin{cases} k(R-r)^3, & r < R, \\ 0, & r \geq R. \end{cases} \quad (1)$$

式中, k 是压头刚度, 值为 $10 \text{ eV}/\text{\AA}^3$ [30], R 是压头半径, r 是压头中心与其最近邻原子中心之间的距离.

模拟时, 首先用共轭梯度法优化物理模型, 并用 Langevin 控温法维持运动层原子温度在 300 K. 基于 NVE 系综对运动层原子位移和速度更新, 积分时间步长为 1 fs. 模型经 600 ps 的充分弛豫后, 虚拟压头采用 $V = 40 \text{ m/s}$ [31] 的速度沿着模型 Z 轴负方向加载 SiC 基底, 压头下降最大位移 $D = 4 \text{ nm}$, 其最大压深不超过压头半径 R 值. 压头下降到最大压深时, 以原压痕速度沿 z 轴正方向卸载. 整个纳米压痕计算基于 Lammmps 开源软件实施和可视化软件 Ovito 显示.

2.2 势函数描述

为准确描述 SiC 基底受接触载荷产生的微结构演化特征, 其势函数的选取至关重要, 而 Vashishta 势函数可有效描述 SiC 微结构演变和相变微观信息, 其总能量计算公式见 (2) 式. 石墨烯相互作用描述采用 Airebo 势 [10]; 石墨烯与单晶 SiC 基底间的相互作用基于经典伦纳德-琼斯 (Lennard-Jones, L-J) 势 ((3) 式), 其相互作用力数值和第一性原理 (DFT) 计算结果在表 1 列出.

$$U = \sum_i^N \sum_{j>i}^N U_{ij}^2(r_{ij}) + \sum_i^N \sum_{j \neq i}^N \sum_{k \neq i}^N U_{ijk}^3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}), \quad (2)$$

$$U = 4\varepsilon[(\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6], \quad (3)$$

式中, U_{ij}^2 为二体势, U_{ijk}^3 为三体势, ε 为势阱深度, σ 为零势能点, r_{ij} 代表原子间相互作用的距离.

表 1 SiC 基底与石墨烯间的 L-J 势参数值与第一性原理计算验证

Table 1. L-J potential parameter values and first principles calculation verification between SiC substrate and graphene.

Force description	$\sigma/\text{nm}(\text{MD})$	$\varepsilon/\text{eV}(\text{MD})$	$\varepsilon/\text{eV}(\text{DFT})$
C—Si	0.4073	0.008906989	0.00884012
C—C	0.3851	0.00455323	0.00461245

2.3 微结构识别与压痕力学性能

采用 DXA 法 (dislocation analysis) [32] 识别 SiC 相变位错类型, 采用 IDS 法 (identify diamond structure) [33] 识别 SiC 相变结构类型.

载荷与压深曲线关系的表达式为 [34]

$$P = \frac{4}{3} E_r R^{1/2} h^{3/2}. \quad (4)$$

硬度计算表达式为

$$H = \frac{P_{\max}}{A_c}. \quad (5)$$

材料杨氏模量计算表达式为

$$E_r = \frac{\sqrt{\pi} \cdot S}{2\beta \cdot \sqrt{A_c}}. \quad (6)$$

两接触面积 A_c 表达式为 [35]

$$A_c = \pi(2R - h_c)h_c, \\ h_c = h_{\max} - \varepsilon \frac{P_{\max}}{S}. \quad (7)$$

接触刚度计算式为

$$S = \left(\frac{d_p}{d_h} \right)_{h=h_{\max}} = m\alpha(h_{\max} - h_r)^{m-1}. \quad (8)$$

式中, P_{\max} 为最大压深载荷, E_r 是杨氏模量, R 是半球形压头半径, h_c 为接触深度, S 为接触韧性, β 表示与压头形状相关的系数, 球形压头为 1, ε 表示与压头形状相关的系数, 对于球形或锥形压头, $\varepsilon = 0.75$ [36], α 和 m 分别表示完全卸载后的接触刚度系数.

3 结果与分析

3.1 载荷与压深曲线

图 2 为 SiC 基底覆石墨烯薄膜的载荷与压深曲线关系, 考虑了石墨烯堆垛 (AA 和 AB) 形式和服役极端低温 (5 K) 到极端高温 (1000 K) 对载荷与压深曲线关系影响. 从图 2(a) 可知, SiC 基底的载荷随压深增大呈阶梯式的增大, 其主要原因源于 SiC 基底内的位错形核与滑移、位错环交互作用、位错环脆断、位错环湮灭等微观现象产生有关, 获得与文献 [37] 相一致. 从图 2(a)—(f) 可知, 在纳米压痕初期时, 即压深 1.4 nm 之前, 载荷与压深曲线保持线性关系, 且随着基底覆石墨烯层数的增加, 维持载荷与压深曲线线性关系的压深值出现滞后, 主要原因是石墨烯层数越多, 多层石墨烯抵抗

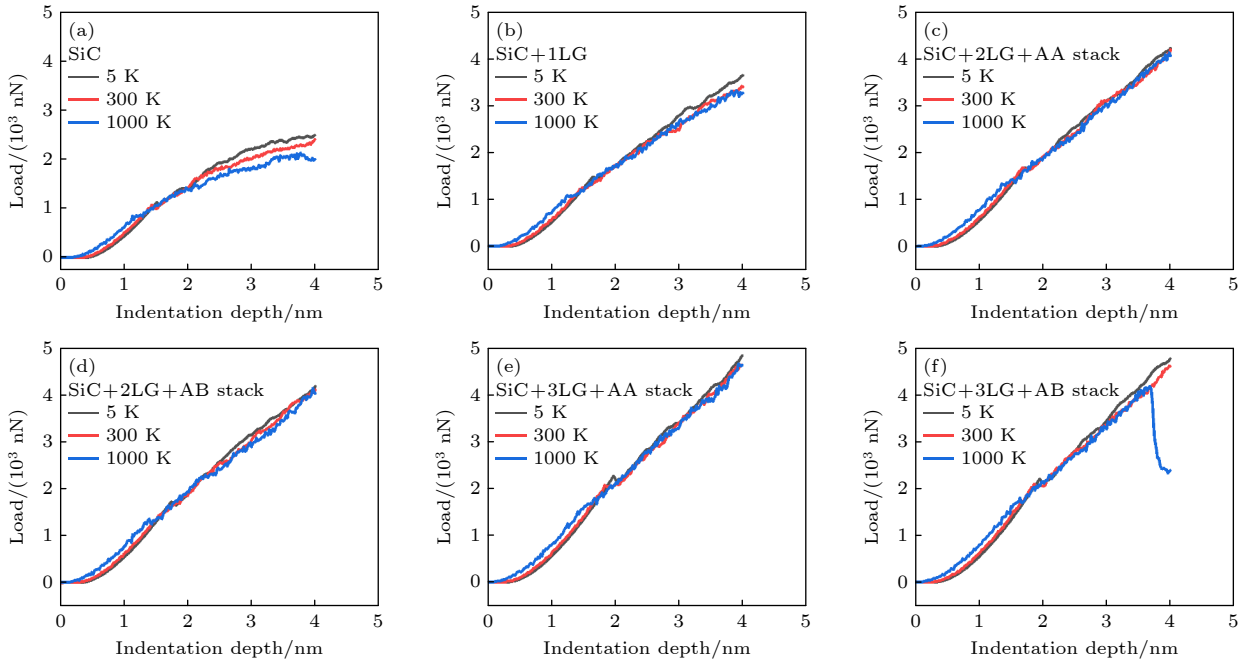


图 2 SiC 基底覆多层石墨烯的载荷与位移曲线关系

Fig. 2. Relation between load and displacement curve of SiC substrate coated with multilayer graphene.

弹性变形能力越强. 此外, 极端使役低温到高温, SiC 基底覆石墨烯的载荷与压深曲线有着显著差异, 主要表现在相同压深时, 弹性变形前期的使役温度越高, 其载荷也越大; 弹性变形后的载荷随着服役温度升高, 逐渐开始降低. 随着石墨烯层数增加, SiC 基底覆石墨烯的承载性越来越高, 与石墨烯堆垛形式无关. 塑性变形时, 相比 SiC 无覆石墨烯薄膜时, 有石墨烯覆盖的 SiC 基底的载荷随压深增大而近似线性呈波浪式增大, 这主要与石墨烯薄膜受载诱导产生的褶皱变形有关.

图 3 为图 2 压深最大时的最大承载荷受石墨烯堆垛形式与极端使役低温和高温的影响. 从图 3 可知, 无论石墨烯是 AA 堆垛还是 AB 堆垛, 随着使役温度的升高, SiC 基底最大承载性近似直线下降趋势. 此外, 相同温度下, 石墨烯 AA 堆垛的 SiC 基底最大承载性相比石墨烯 AB 堆垛要高, 其主要原因归因于虚拟压头与 SiC 基底间的界面接触质量不同所引起的接触刚度不同, 详见下文阐述. 石墨烯为 AA 堆垛时, SiC 基底覆一层石墨烯、两层石墨烯、三层石墨烯从极端低温 (5 K) 到极端高温 (1000 K) 的最大承载性下降幅度分别为 10.32%, 21.85%, 41.53% (见图 3(a)). 可见, 随着 SiC 基底覆石墨烯层数增加, SiC 基底的承载性下降幅度更大, 其主要原因归因于温度的升高容易引起接触边缘石墨烯的褶皱程度更剧烈, 导致石墨烯面内弹性

变受损伤. 石墨烯为 AB 堆垛时, SiC 基底覆一层石墨烯、两层石墨烯、三层石墨烯从极端低温 (5 K) 到极端高温 (1000 K) 的最大承载性下降幅度分别为 10.32%, 36.96%, 12.83% (见图 3(b)), 表明服役温度的升高对 SiC 基底覆石墨烯的最大承载性有着显著影响. 此外, 石墨烯 AA 堆垛时, SiC 基底覆三层石墨烯相比覆单层石墨烯在极端使役温度 (5 K) 到极端使役温度 (1000 K) 的最大承载性分别提高 32.61%, 36.13%, 41.74%; 石墨烯 AB 堆垛时, SiC 基底覆三层石墨烯相比覆单层石墨烯在极端使役温度 (5 K) 到极端使役温度 (1000 K) 的最大承载性分别提高 23.54%, 35.53%, 27.12%. 可见, 石墨烯 AA 堆垛相比 AB 堆垛, 在极端使役低温和高温下的最大承载性幅度要高.

3.2 表面形貌与微结构演化

为更好了解 SiC 基底覆多层石墨烯受载时的微观形貌特征, 图 4 给出最大压深时, 石墨烯 AA 堆垛下, 其面内受载产生的表面形貌受使役温度影响. 从图 4(a) 可知, 随着使役温度上升, 虚拟压头与石墨烯的紧密接触边缘处出现褶皱条纹, 且褶皱程度变得更加剧烈, 这种褶皱程度随着与紧密接触边缘的距离增大而呈逐渐衰减趋势, 可见, 石墨烯褶皱会强烈影响紧密接触边缘的接触质量, 进而调控 SiC 基底力学性能. 从图 4(a)–(c) 可知, 石墨

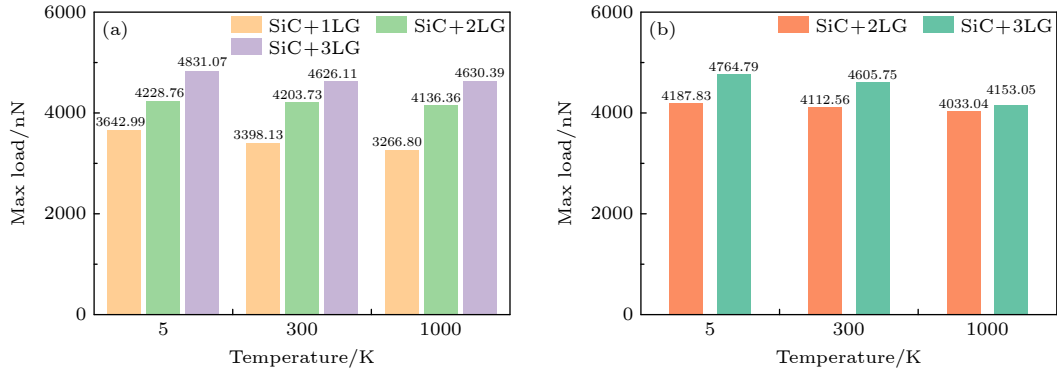


图 3 SiC 基底覆多层石墨烯最大压深时的最大承载荷 (a) AA 堆垛; (b) AB 堆垛

Fig. 3. Maximum load bearing capacity of SiC substrate coated with multilayer graphene at the maximum pressing depth: (a) AA stack; (b) AB stack.

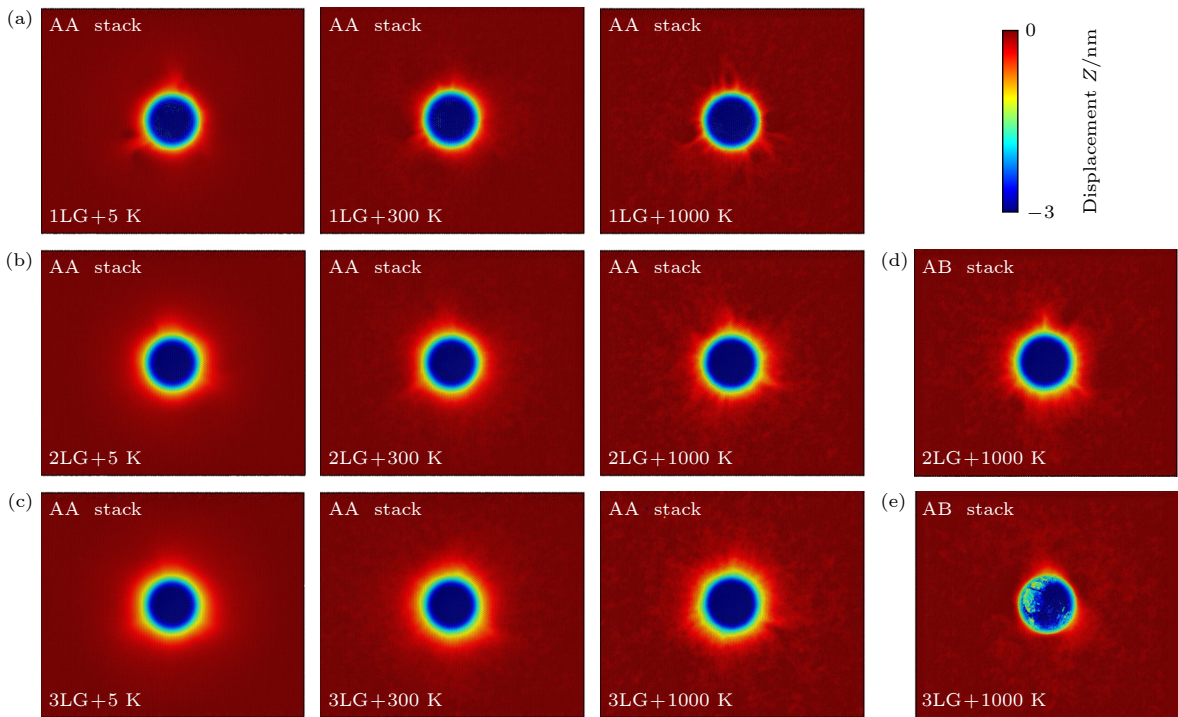


图 4 SiC 基底覆多层石墨烯的表面形貌受温度和石墨烯堆垛类型影响

Fig. 4. Surface morphology of multi-layer graphene coated with SiC substrate is affected by temperature and graphene stacking type.

烯 AA 堆垛时, SiC 基底覆多层石墨烯相比覆单层石墨烯的褶皱波及范围更广, 主要原因在于与石墨烯优异的面内弹性变形紧密相关. 随着 SiC 基底覆石墨烯层数增加, 基底承载性也逐渐增大, 导致紧密接触边缘处的褶皱波及面也越广, 也再次证明石墨烯褶皱程度能显著改变 SiC 基底覆石墨烯层数不同的承载性及接触力学性能. 为了再次验证此结论, 将石墨烯堆垛改为 AB 堆垛, 也可获得相同的研究结论. 从图 4(d), (e) 可知, 在极端服役温度 (1000 K) 时, SiC 基底覆三层 AA 堆垛的石墨烯,

在其紧密接触边缘处的褶皱程度与波及范围远大于覆三层 AB 堆垛的石墨烯, 主要归源于石墨烯 AB 堆垛在最大压深时的 C—C 键受损伤, 导致丧失了其优异的面内弹性变形能力, 这是导致上述图 2(f) SiC 基底覆三层石墨烯的最大承载性呈直线下降的本质原因.

图 5 绘出 SiC 基底覆多层石墨烯受载产生的剪切变形受石墨烯堆垛形式与服役温度的影响. 从图 5(a) 可知, 基底覆石墨烯层数一样时, 随着服役温度升高, 紧密接触区的剪切变形受损更加严重;

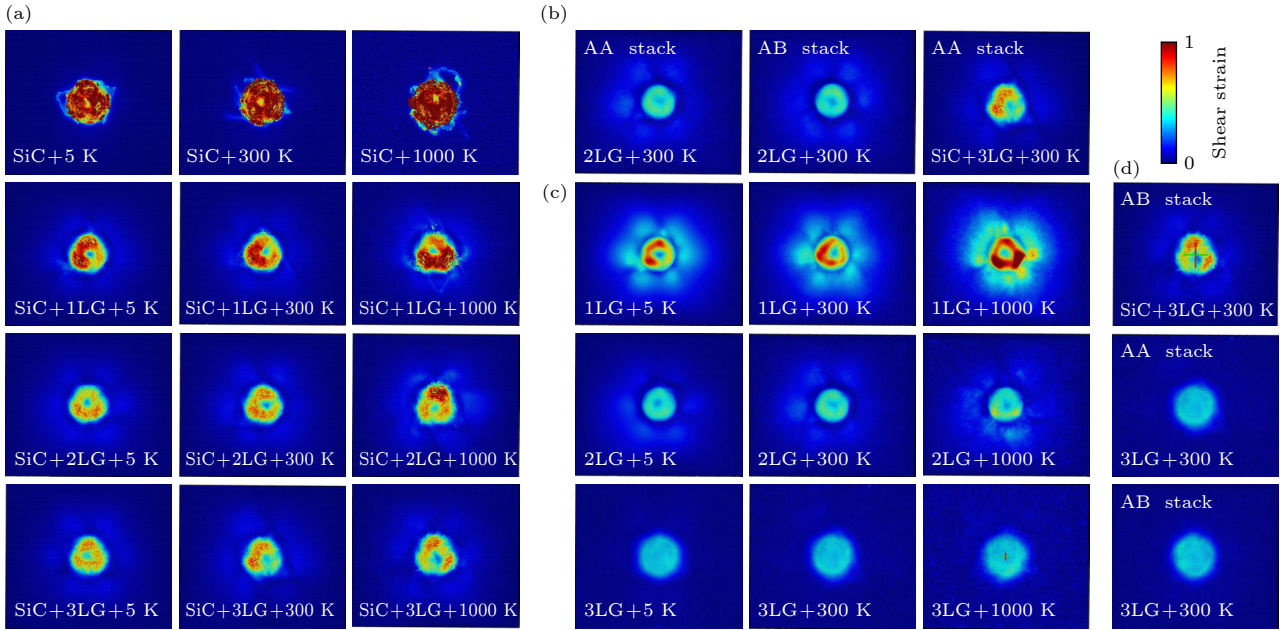


图 5 SiC 基底覆多层石墨烯受载产生的剪切变形受温度和石墨烯堆垛类型影响

Fig. 5. Shear deformation of SiC substrate coated with multilayer graphene under load is affected by the temperature and the type of graphene stacking.

相同使役温度时,随着基底覆石墨烯层数增加,紧密接触区的剪切变形受损也变得更加严重.此外,由于 SiC 受载的增大,导致 SiC 基底覆石墨烯膜的紧密接触边缘处的剪切变形波及范围更广,获得与图 4 一致趋势.从图 5(c) 可知,温度越高,石墨烯褶皱处的剪切变形受损更严重,波及范围也越广,且石墨烯面内弹性变形的 C—C 键更易受损,导致石墨烯出现的褶皱效应受温度影响更大.通过对比图 5(b) 和图 5(d) 可知,石墨烯 AA 堆垛比 AB 堆垛产生的剪切变形更严重,这主要是由于 AA 堆垛的石墨烯比 AB 堆垛的石墨烯在纳米压痕时承受的最大载荷要大,即承受载荷越大,石墨烯产生的剪切变形越严重.

3.3 微结构演化与力学强化性能

图 6 展示了极端使役低温到高温对 SiC 基底覆多层石墨烯的微结构演化和位错总长的影响分布情况.从图 6(a)—(c) 可知, SiC 基底覆石墨烯层数对其微结构演化具有显著影响,主要表现在:一方面使役温度越高,越容易激活 SiC 基底的位错萌芽和滑移产生,且 SiC 基底越容易发生位错环的脆断,形成棱柱形位错环.此外, SiC 基底在高温极易发生相变结构的转化,即立方 SiC 向闪锌矿 SiC 的相变转化.另一方面,随着石墨烯层数增加,导

致 SiC 基底承载性的提高,进而易诱导 SiC 基底微结构演变产生螺杆位错,在载荷的持续作用力引诱下,螺杆位错更易与相邻位错间发生位错的交互作用,从而导致棱柱形位错环的生成与演变.此外载荷越大, SiC 基底微结构演化出的位错环数目也越多,且闪锌矿相变结构的数目也随之增多.另外,从图 6(a)—(c) 还可知,相同温度下,随着覆石墨烯膜的层数增加, SiC 基底微结构演化的棱柱形位错环越早发生脆断,并向底部发生迁移.为了研究 SiC 基底受载诱导下的位错演变规律,定量统计出图 6(a)—(c) 的位错总长随石墨烯堆垛类型和使役温度的差异性(见图 6(d), (e)).从图 6(d), (e) 可知,使役温度越高, SiC 基底点阵结构易发生破坏,从而滋生基底位错产生,导致其位错总长越高.此外,石墨烯 AA 堆垛下, SiC 基底覆单层石墨烯、两层、三层石墨烯分别从使役温度低温到高温下的位错总长度涨幅分别为 74.73%, 85.82%, 79.91% (见图 6(d)); 石墨烯 AB 堆垛下, SiC 基底覆两层、三层石墨烯分别从使役温度低温到高温下的位错总长度涨幅分别为 53.39%, 64.20% (见图 6(e)).可见,石墨烯 AA 堆垛下的基底产生位错总长增幅比 AB 堆垛要大的多.

图 7 给出了石墨烯 AA 堆垛的 SiC 基底覆多层石墨烯的力学强化性能(最大承载性、硬度、杨

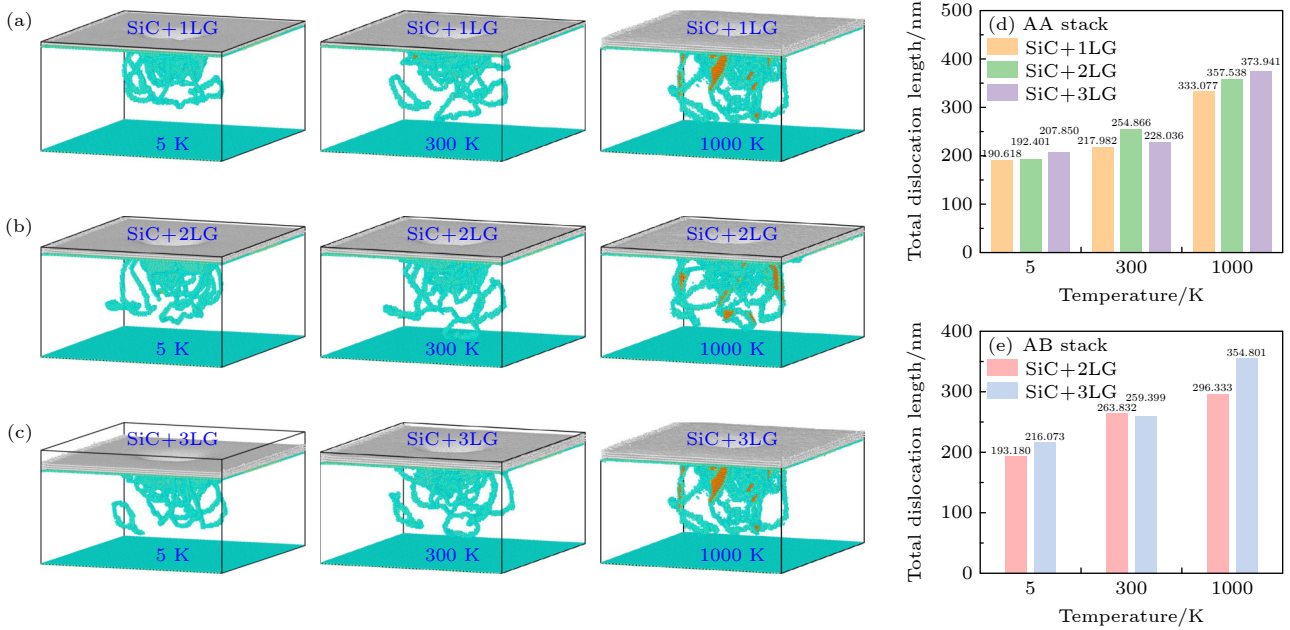


图 6 SiC 基底覆石墨烯层数的微结构演化和位错总长随服役温度的影响变化

Fig. 6. Effect of service temperature change on microstructure evolution and dislocation length of SiC substrate with multilayer graphene coated.

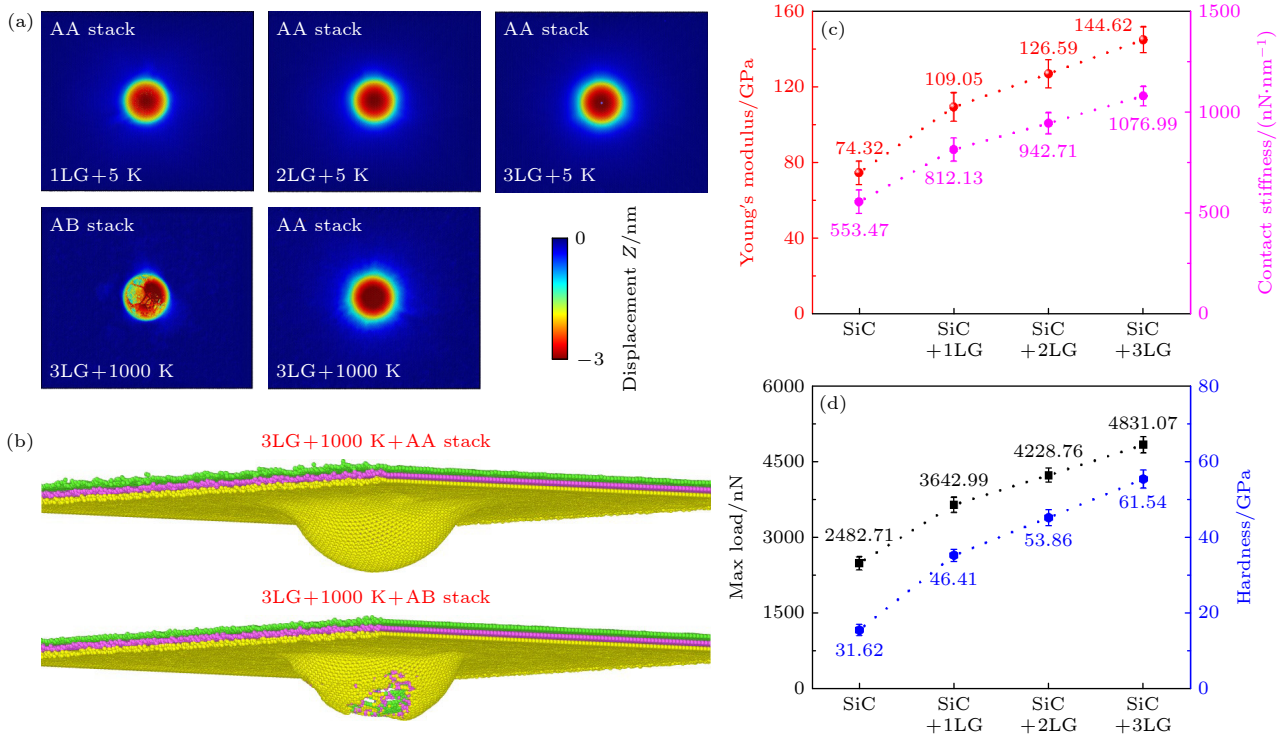


图 7 SiC 基底覆石墨烯层数的力学性能量化分析

Fig. 7. Quantitative analysis of mechanical properties of SiC substrate coated with graphene layers.

氏模量、接触刚度) 量化统计结果. 从图 7(a), (b) 可知, 极端服役温度 5 K 下, 石墨烯紧密接触区原子位移幅度最大, 且紧密接触区边缘意外的原子位移幅度涉及面广, 尤其在极端服役高温 1000 K 时, 石墨烯紧密接触区的原子位移幅度在石墨烯 AA

堆垛和 AB 堆垛下呈现截然不同形式, 主要表现在石墨烯 AB 堆垛时的 C—C 键能遭受重载荷的破坏 (见图 7(b)), 以致于石墨烯丧失面内弹性变形能力, 导致石墨烯接触区边缘的原子位移幅度下降. 从图 7(c), (d) 可知, 相比无石墨烯覆盖的 SiC

基底, SiC 基底覆石墨烯的最大载荷、硬度、杨氏模量、接触刚度随覆石墨烯层数增加近似线性增大. 此外, SiC 基底覆三层石墨烯的最大载荷、硬度、杨氏模量、接触刚度相比 SiC 基底无石墨烯覆盖时增幅分别增大 94.58%, 94.62%, 94.59%, 94.59%; SiC 基底覆三层石墨烯的力学性能(最大载荷、硬度、杨氏模量、接触刚度)是纯 SiC 基底力学性能的 2 倍, 表明 SiC 基底覆多层石墨烯能极大增强基底的承载性和力学性能, 起到更好保护基底的作用, 对极端使役温度下的 SiC 基底力学性能提升起到显著的提升作用.

图 8 绘制了石墨烯堆垛类型不同的 SiC 基底覆三层石墨烯的接触刚度随使役温度影响差异. 相同使役温度时, 石墨烯 AA 堆垛比石墨烯 AB 堆垛的界面接触刚度要大, 且界面接触刚度随温度升高近似线性下降趋势, 与石墨烯堆垛类型无关, 表明温度升高, 会极大降低 SiC 覆多层石墨烯的力学性能, 改变界面接触刚度特性.

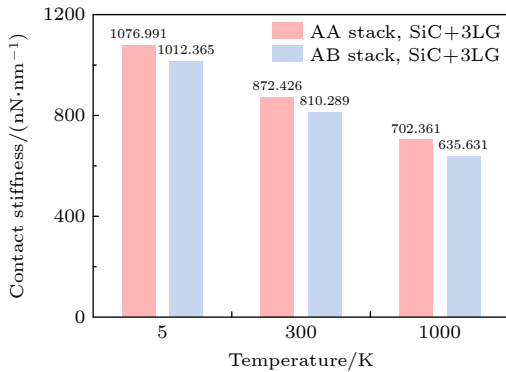


图 8 SiC 基底覆三层石墨烯的接触刚度随使役温度变化的影响

Fig. 8. Influence of the contact stiffness of SiC substrate coated with three layers of graphene with the change of service temperature.

3.4 界面接触质量与应力分布

为更好描述 SiC 基底覆多层石墨烯比无石墨烯覆盖所引起的力学强化性能机制, 及分析石墨烯堆垛类型和极端使役温度对其力学性能差异化的理解, 依据发表在 *Nature* 期刊的界面接触质量计算法^[10], 统计了最大压深时的界面接触质量分布情况(见图 9). 从图 9 可知, 随着 SiC 覆石墨烯层数的增加, 石墨烯受载产生的褶皱增大(见图 4), 导致基底与虚拟压头间界面接触原子数减小, 而接触刚度随覆石墨烯膜层数的增加而增大, 说明基底

覆石墨烯的面内抵抗变形能力增强, 从而表明纳米压痕时, 随着基底覆石墨烯层数增加, SiC 基底受载产生的褶皱情况增大, 会引起基底与虚拟压头间的接触质量减小, 从而增大界面接触刚度, 引发 SiC 基底覆石墨烯层数的力学强化性能高于无石墨烯覆盖的基底. 为排除此强化机制不受石墨烯堆垛类型的影响, 如图 9 所示, 石墨烯堆垛类型改变时, 即石墨烯 AA 堆垛比 AB 堆垛类型产生的接触原子数相对较多, 与图 8 示出石墨烯堆垛类型不同时的接触刚度趋势获得一致. 随着使役温度升高, 温度升高会激发原子振动频率增大, 导致界面接触原子数极大增加. 而界面接触刚度随之减弱, 引发界面接触质量增大, 以致于石墨烯优异的面内弹性变形发生阻滞作用, 降低了其面内变形能力, 使得 SiC 基底覆多层石墨烯力学性能随使役温度增加而极剧降低.

为更好了解 SiC 基底覆多层石墨烯的亚表层损伤应力状态, 图 10 给出了 AA 堆垛石墨烯在极端使役低温时的 SiC 基底应力分布情况. 随着基底覆石墨烯层数增加, 石墨烯面内应力分布逐渐增加(图 10(a)), 主要集中于石墨烯面内变形的底部中央处, 这是因为覆石墨烯三层最大承载性要远高于覆一层石墨烯, 而 SiC 基底亚表层应力分布却随基底覆石墨烯层数增加而逐渐减弱(图 10(b)). 可见, SiC 基底覆石墨烯的层数增加可有效减小基底亚表层应力集中分布, 从而对基底起到抗载保护作用. SiC 基底亚表层应力分布主要集中于微结构演化的集中处及位错环滑移处, 表明 SiC 基底受载产生的微结构演化是应力集中驱动所致. 从图 10(c) 可知, SiC 基底的应力分布随覆石墨烯层数增加而逐渐呈现减小趋势, 覆三层石墨烯比覆一层石墨烯的最大应力降幅为 7.13%.

4 结论

基于分子动力学的纳米压痕法, 研究了 SiC 基底覆多层石墨烯的力学强化性能原子尺度机制, 对比分析了石墨烯堆垛类型和极端使役低温到高温的接触力学性能、微结构演化、接触质量、褶皱形貌、位错总长的差异性. 基于上述定量和定性结合的讨论分析, 现概况出以下重要结论.

1) 石墨烯为 AA 堆垛时, SiC 基底覆一层石墨烯、两层石墨烯、三层石墨烯从极端低温 (5 K)

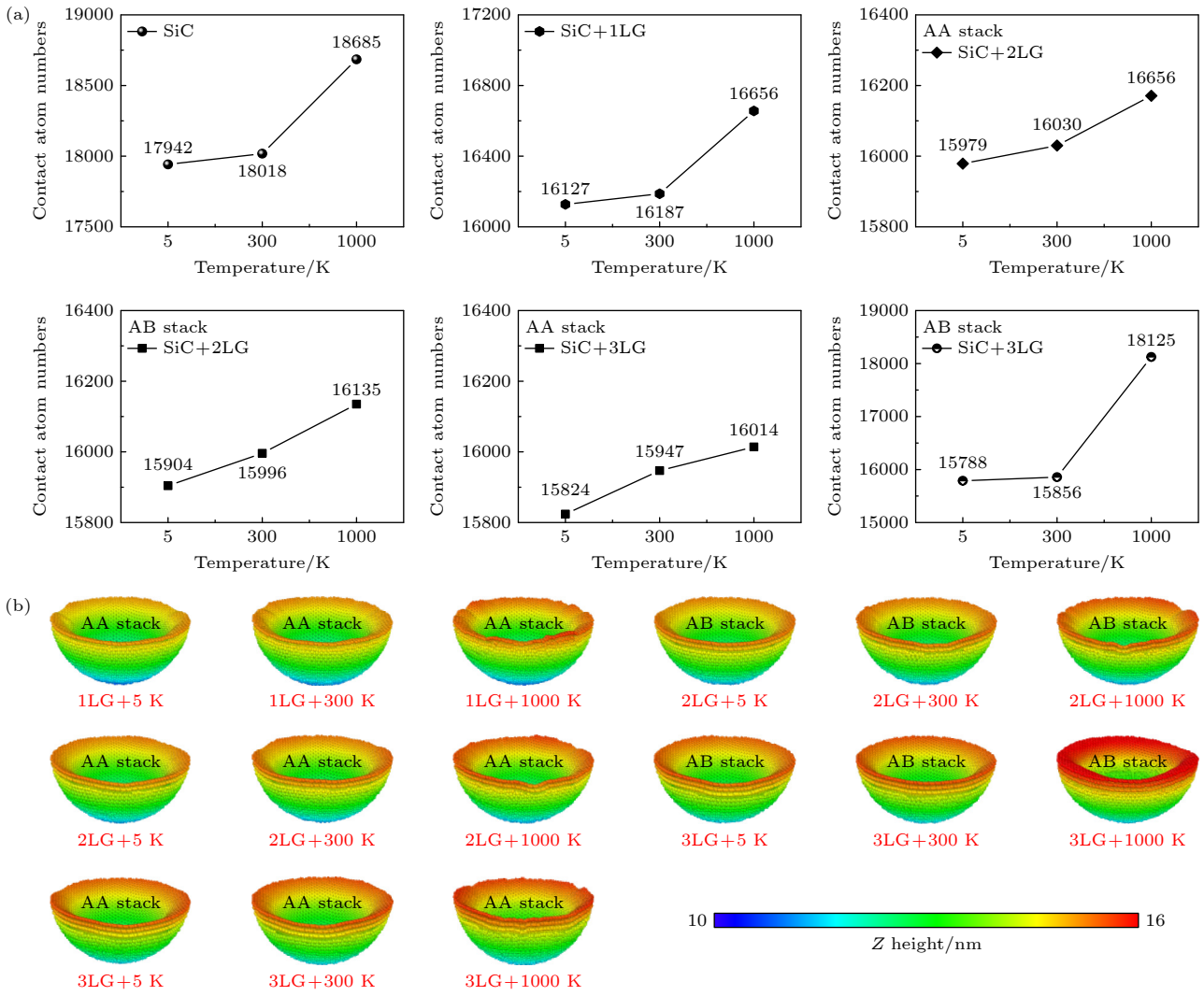


图 9 使役温度和石墨烯堆垛类型对界面接触质量分布影响

Fig. 9. Effect of service temperature and graphene stacking type on interface contact mass distribution.

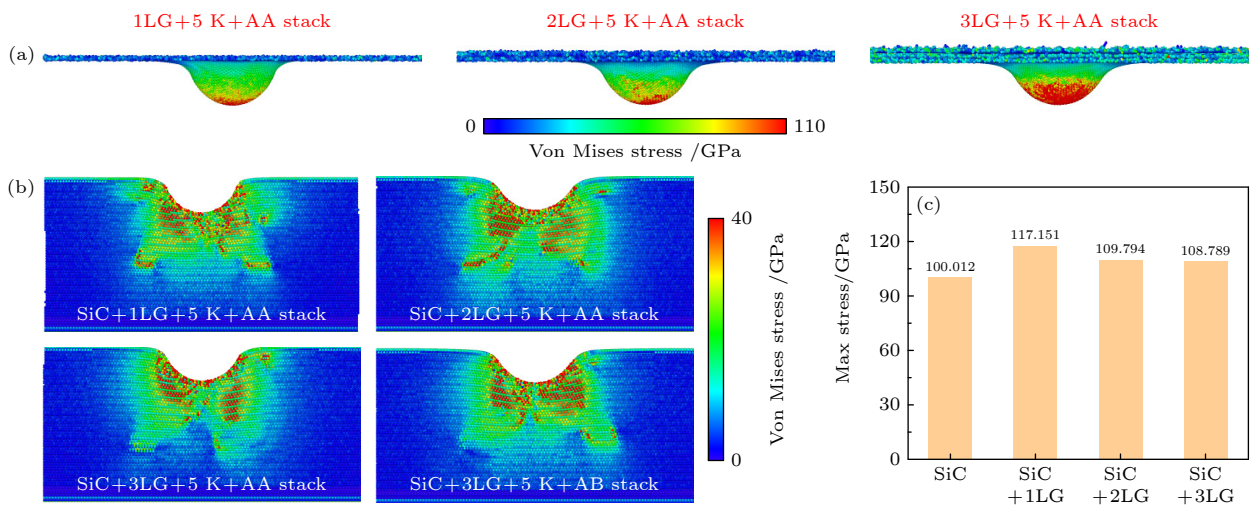


图 10 石墨烯堆垛类型对石墨烯和SiC基底的应力分布影响

Fig. 10. Effect of graphene stacking type on stress distribution of graphene and SiC substrates.

到极端高温 (1000 K) 的最大承载性下降幅度分别为 10.32%, 21.85%, 41.53%; 石墨烯为 AB 堆垛时, SiC 基底覆一层石墨烯、两层石墨烯、三层石墨烯从极端低温 (5 K) 到极端高温 (1000 K) 的最大承载性下降幅度分别为 10.32%, 36.96%, 12.83%.

2) SiC 基底覆多层石墨烯的力学强化性能是纯 SiC 基底 2 倍, 该强化效应不受石墨烯堆垛类型影响, 且随着使役温度升高, SiC 基底覆多层石墨烯的力学性能呈现近似直线下下降趋势.

3) 极端使役温度 (1000 K) 时, SiC 基底覆三层 AA 堆垛的石墨烯在紧密接触边缘处的褶皱程度与波及范围远大于覆三层 AB 堆垛的石墨烯, 主要归源于 AB 堆垛石墨烯在最大压深时的 C—C 键受损, 以致丧失了优异面内弹性变形能力, 导致 SiC 基底覆三层石墨烯最大承载性呈断崖式下降.

4) SiC 基底覆多层石墨烯的应力主要集中在接触区的中央底部和基底亚表层处, 基底亚表层的应力集中会诱驱基底微结构发生演变, 且 SiC 基底覆石墨烯的层数增加可有效减小基底亚表层的应力集中分布, 对基底起抗载保护作用. 相比覆一层石墨烯, 覆三层石墨烯的最大应力降幅为 7.13%.

参考文献

- [1] Woodilla D, Buonomo M, Bar-On I, Katz R N, Whalen T 1993 *J. Am. Chem. Soc.* **76** 249
- [2] Talwar D N, Sherbondy J C 1995 *Appl. Phys. Lett.* **67** 3301
- [3] Demenet J L, Amer M, Tromas C 2013 *Phy. Status Solidi* **10** 64
- [4] Miranda A, Cuevas J L, Ramos A E, Cruz-Irisson M 2009 *Microelectron. J.* **40** 796
- [5] Wang G B, Lei Y Z 2005 *Prog. Nat. Sci.* **10** 571
- [6] Sakhaee A 2009 *Solid State Commun.* **149** 91
- [7] Morozov S V, Novoselov K S, Katsnelson M I 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 016602
- [8] Balandin A A, Ghosh S, Bao W 2008 *Nano Lett.* **8** 902
- [9] Tang Y L, Peng P, Wang S Y 2017 *Chem. Mater.* **29** 8404
- [10] Li S Z, Li Q Y, Carpick R W 2016 *Nature* **539** 541
- [11] Wang S Y, Han S B, Xin G Q 2018 *Mater. Design* **139** 181
- [12] Xu K, Duan X Y, L Y 2020 *J. Exp. Nanosci.* **15** 417
- [13] Miyoshi K, Buckley D H, Srinivasan M 1983 *Am. Ceram. Soc. Bull.* **62** 454
- [14] Tapasztó O, Tapasztó L, Markó M 2011 *Chem. Phys. Lett.* **511** 340
- [15] Li Q, Zhang Y, Gong H 2015 *Ceram. Int.* **41** 13547
- [16] Kun P, Tapasztó O, Wéber F 2012 *Ceram. Int.* **38** 211
- [17] Shin J H, Hong S H 2014 *J. Eur. Ceram. Soc.* **34** 1297
- [18] Dusza J, Morgiel J, Duszová A 2012 *J. Eur. Ceram. Soc.* **32** 3389
- [19] Nieto A, Bisht A, Lahiri D L 2017 *Int. Mater. Rev.* **62** 241
- [20] Li J L, Wang X D, Wu Y, Cao Z, Guo J Q, Zhang H P 2018 *Chin. J. Rare Metals* **42** 252 (in Chinese) [李炯利, 王旭东, 武岳, 曹振, 郭建强, 张海平 2018 稀有金属 **42** 252]
- [21] Nawaz A, Islam B, Mao W G, Lu C S, Shen Y G 2019 *Int. J. Appl. Ceram. Tec.* **16** 706
- [22] Zhao K, Aghababaei R 2020 *Phys. Rev. Mater.* **4** 103605
- [23] Juan C C, Tsai M H, Tsai C W, Hsu W L, Lin C M, Chen S K, Lin S J, Yeh J W 2016 *Mater. Lett.* **184** 200
- [24] Subin L, Aviral V, Jiseong I, Kim B, Sang H O 2020 *Nat. Comm.* **11** 2367
- [25] Wang J, Zhang X, Fang F, Chen R 2018 *Appl. Sur. Sci.* **455** 608
- [26] Zhao L, Zhang J J, Janine P, Alam M, Hartmaier A 2021 *Mater. Design* **197** 109223
- [27] Kondo S, Koyanagi T, Hinoki T 2014 *J. Nucl. Mater.* **448** 487
- [28] Zhao S, Flanagan R, Hahn E N, Kad B, Remington B A, Wehrenberg C E, Cauble R, More K 2018 *Acta Mater.* **158** 206
- [29] Branicio P S, Kalia R K, Nakano A, Vashishta P 2010 *Appl. Phys. Lett.* **97** 111903
- [30] Xiang H G, Li H T, Fu T 2017 *Acta Mater.* **138** 131
- [31] Guo J, Chen J J, Wang Y Q 2020 *Ceram. Int.* **46** 12686
- [32] Xiang H G, Guo W L 2022 *Int. J. Plasticity* **150** 103197
- [33] Xiang H G, Guo W L 2022 *Acta Mech. Sin.* **38** 121451
- [34] Oliver W C, Pharr G M 2011 *J. Mater. Res.* **7** 1564
- [35] Fan X, Rui Z, Cao H, Fu R, Feng R, Yan C 2019 *Materials* **12** 770
- [36] Oliver W C, Pharr G M 2011 *J. Mater. Res.* **19** 3
- [37] Chen J J, Wu H, Bai S H 2023 *Mat. Sci. Semicon. Proc.* **165** 107651

Molecular dynamics simulation of mechanical strengthening properties of SiC substrate covered with multilayer graphene*

Chen Jing-Jing^{1)†} Zhao Hong-Po²⁾ Wang Kui²⁾

Zhan Hui-Min²⁾ Luo Ze-Yu¹⁾

1) (*School of Mechanical and Electrical Engineering, Nanchang Institute of Technology, Nanchang 330044, China*)

2) (*School of Computer and Information Engineering, Nanchang Institute of Technology, Nanchang 330044, China*)

(Received 27 December 2023; revised manuscript received 8 March 2024)

Abstract

A large number of practices have shown that under the coupling influence of complex working conditions and frequent reciprocating contact, the surfaces of semiconductor devices in micro/nano electromechanical systems often produce adhesive wear, which is the essential reason resulting in short durability service life and declining contact mechanical properties for microelectronics semiconductor devices. However, graphene can significantly improve the interface properties of mechanical components and electronic components due to its excellent mechanical properties, such as high carrier concentration, good thermal conductivity, and low shear. Thus, the study of mechanical strengthening properties and plastic deformation of SiC material with covered multi-layer graphene in MEMS devices will play a significant role in improving the durability service life of MEMS device, and understanding its strengthening and toughening mechanism. Therefore, this paper studies and discusses the effects of stacking type and extreme service temperature with low and high levels on the contact mechanical properties (maximum load, hardness, Young modulus, contact stiffness), micro-structure evolution, contact mass, fold morphology, and total length of dislocation. The atomic-scale mechanism of enhanced mechanical properties of SiC material with multi-layer graphene is explained. The research shows that the damage to carbon-carbon bond at the maximum indentation depth will lead graphene to lose the excellent in-plane elastic deformation capability when the graphene stacking type is AB stacking, so that the maximum load-bearing capacity of the substrate covered by three layers of graphene will drop linearly. In addition, the mechanical property of SiC material coated with three graphene layers is twice that of pure SiC substrate, and the strengthening mechanism is mainly due to the increase of wrinkle caused by the increase of multilayer graphene loading, which causes the quality of contact between the SiC substrate and the virtual indenter to decrease, thus increasing the interface contact stiffness. The increase of the active temperature will trigger off the increase of the atomic vibration frequency, which will cause the number of interface contact atoms to increase greatly, and the interface contact stiffness will weaken, and finally lead the interface contact quality to improve. This is because the mechanical properties of SiC substrate coated with multilayer graphene will decrease approximately linearly with the extreme service from low temperature to high temperature. In addition, the stress concentration in the subsurface layer of SiC substrate can induce the evolution of its micro-structure, and the increase of the number of graphene layers on the substrate can effectively reduce the stress concentration distribution in the subsurface layer of the substrate.

Keywords: SiC material, multilayer graphene, mechanical strengthening, molecular dynamic method, contact stiffness

PACS: 96.60.th, 96.12.ki, 96.12.Uv, 96.15.Bc

DOI: 10.7498/aps.73.20232031

* Project supported by the Science and Technology Research Project of Department of Education of Jiangxi Province, China (Grant No. GJJ2202705), the University-level Research Center of Nanchang Institute of Technology (Grant Nos. NLZK-22-07, NLZK-22-01), the Nanchang Key Laboratory Construction Project of Jiangxi Province, China (Grant No. 2020-NCZDSY-005), and the Nanchang Institute of Technology Mechanical Watch/Interface Friction and Wear and Protective Lubrication Research Center, China.

† Corresponding author. E-mail: chenjingjingfzu@126.com



SiC基底覆多层石墨烯力学强化性能分子动力学模拟

陈晶晶 赵洪坡 王葵 占慧敏 罗泽宇

Molecular dynamics simulation of mechanical strengthening properties of SiC substrate covered with multilayer graphene

Chen Jing-Jing Zhao Hong-Po Wang Kui Zhan Hui-Min Luo Ze-Yu

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 109601 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20232031

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20232031>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

退火温度调控多层折叠石墨烯力学性能的分子动力学模拟

Manipulations on mechanical properties of multilayer folded graphene by annealing temperature: a molecular dynamics simulation study

物理学报. 2020, 69(19): 196102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200836>

基于分子动力学模拟的铜晶面石墨烯沉积生长机理

Deposition and growth mechanism of graphene on copper crystal surface based on molecular dynamics simulation

物理学报. 2020, 69(22): 226102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200781>

基于分子动力学模拟的石墨烯镁基复合材料力学行为

Mechanical behavior of graphene magnesium matrix composites based on molecular dynamics simulation

物理学报. 2022, 71(8): 086201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211753>

石墨烯碳纳米管复合结构渗透特性的分子动力学研究

Molecular dynamics study on permeability of water in graphene-carbon nanotube hybrid structure

物理学报. 2018, 67(5): 056102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172424>

石墨烯表面的特征水分子排布及其湿润透明特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of characteristic water molecular arrangement on graphene surface and wetting transparency of graphene

物理学报. 2019, 68(8): 086801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182307>

界面结构对Cu/Ni多层膜纳米压痕特性影响的分子动力学模拟

Influence of interface structure on nanoindentation behavior of Cu/Ni multilayer film: Atomic scale simulation

物理学报. 2018, 67(19): 190202 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180958>