

磁头/磁盘间润滑剂转移机理及影响因素

潘登 闫辉 姜洪源[†]

(哈尔滨工业大学机电工程学院, 哈尔滨 150001)

(2014年1月16日收到; 2014年2月17日收到修改稿)

硬盘存储密度的增加促使磁头的飞行高度不断降低. 降低磁头飞行高度所导致的润滑剂在磁头与磁盘之间的转移已成为影响磁头飞行稳定性的一个重要因素. 本文采用改进后的粗粒珠簧模型, 应用分子动力学模拟方法, 对磁头/磁盘之间润滑剂转移的机理进行研究. 分析了磁盘表面润滑膜厚度、润滑剂种类以及磁头表面局部温度差对磁头/磁盘之间润滑剂转移量的影响. 研究表明: 转移到磁头上的润滑剂的体积随磁盘表面润滑膜厚度的增加而急剧增加; 增加单个分子中羟基的数量, 可以显著减少转移到磁头上的润滑剂的体积; 磁头表面的局部高温可增加转移到磁头上的润滑剂的体积, 且增加单个分子中羟基的数量可显著改善局部温度差对磁头/磁盘之间润滑剂转移的影响.

关键词: 润滑剂转移, 分子动力学模拟, 磁头/磁盘界面

PACS: 81.40.Pq, 79.60.Dp, 79.60.Fr

DOI: 10.7498/aps.63.128104

1 引言

润滑剂全氟聚醚 (perfluoropolyether, PFPE) 已被广泛应用于硬盘工业, 以减少磁头/磁盘之间的接触^[1]. 目前, 磁头/磁盘之间的最小间隙已下降到2 nm以下. 在如此小的间隙下, 即使磁头/磁盘之间不发生接触, 位于磁盘上的润滑剂也将不可避免地转移到磁头上^[2]. 润滑剂在磁头/磁盘之间的转移会降低磁头飞行的稳定性^[3].

为提高磁头飞行的稳定性, 人们对影响磁头/磁盘之间润滑剂转移的因素进行了研究. 结果表明, 随着润滑剂分子量^[4]和润滑剂吸附率的增加^[5], 磁头/磁盘之间润滑剂的转移量降低. 而且, 学者们还发现, 润滑剂的分子结构、润滑剂末端极性端基的数量也会影响润滑剂在磁头磁盘之间的转移量^[6]. Tani等^[7]发现磁头加载/卸载过程也会导致润滑剂在磁头与磁盘之间转移. 通过减小磁头表面凸台的尺寸可降低润滑剂在磁头与磁盘之间的转移量^[8]. Zhang等^[9]的研究结果表明, 润滑

条件会改变润滑剂的流变特性. Guo等^[10]采用分子动力学方法研究了PFPE分子在固体表面的延展性. 除此之外, 学者们还对硬盘所用磁记录介质^[11,12]及类金刚石薄膜(diamond like carbon, DLC)的结构进行了研究^[13]. Zhang等^[14]将脉冲激光电弧沉积法用于制备DLC, 并研究了DLC层的物理及摩擦学特性.

以上研究成果主要从宏观的角度研究磁头与磁盘之间润滑剂转移的现象和转移量. 为了更好地了解磁头/磁盘之间润滑剂转移现象, 需要综合考虑空气轴承压、磁盘转速等实际情况. 从微观角度解释磁头/磁盘之间润滑剂转移的机理及过程是目前国内外相关学者关注的热点课题. 本文基于Guo等^[15], 李欣等^[16,17]提出的粗粒珠簧原始模型和Li等^[18]的改进模型, 运用分子动力学分析方法, 提出了一种新的粗粒珠簧模型. 采用改进后的粗粒珠簧模型, 从微观角度分析了磁盘表面润滑膜厚度、润滑剂种类以及磁头表面局部温度差对磁头/磁盘之间润滑剂转移量的影响. 本文研究结果对进一步提高磁头飞行的稳定性具有重要参考

[†] 通讯作者. E-mail: jhy_hit@sina.com

价值.

2 分子动力学建模

磁头工作时的飞行高度与所产生的压力分布之间的关系如图 1 所示, 即高压对应低飞行高度, 低压对应高飞行高度. 据此建立的分子动力学模型如图 2 所示. 在所采用的粗粒珠簧模型中, 以 Zdol 型润滑剂为例, 一个 PFPE 润滑剂分子, 由 10 个单体组成: 8 个中间单体 (backbone beads, BB) 和 2 个端基 (end beads, EB). 将空气轴承力以外力的形式施加在每一个润滑剂分子的单体上. 凡处于高压区的单体, 均受较高的压力; 凡处于低压区的单体, 均受较低的压力. DLC 层由三层刚性单体组成. 组成 DLC 层的单体也被划分为两种: 官能团 (functional beads, FB) 和非官能团 (non-functional beads, NB). 不同单体及分子动力学仿真模型尺寸如图 2 所示, 处于平衡态的 2300 个润滑剂分子分布在 DLC 层上, 磁盘在 y 方向上的速度 V_d 为 $0.12\sigma/\tau$.

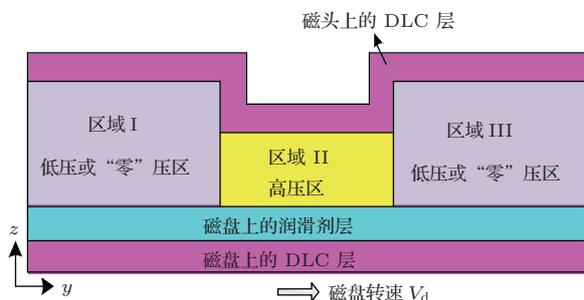


图 1 磁头/磁盘界面原理图

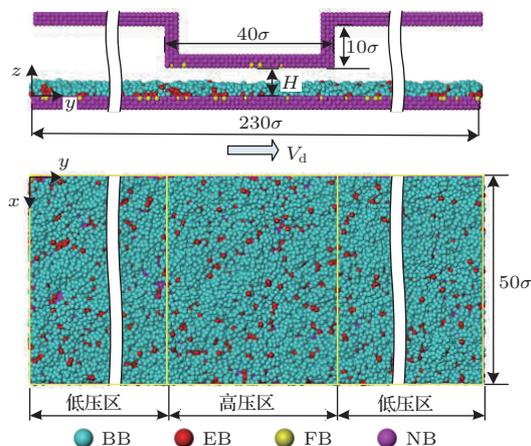


图 2 (网刊彩色) 分子动力学仿真模型

除 DLC 层中单体之间外, 每一对单体之间的相互作用势为截断平移的 Lennard-Jones (LJ) 势:

$$U_{LJ}(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{r_c} \right)^{12} + \left(\frac{\sigma}{r_c} \right)^6 \right], \quad (1)$$

其中, σ (约为 0.7 nm) 为单体直径, ϵ 为势阱深度, r 为单体间距, r_c (约为 2.5σ) 为截断半径. 端基之间的附加作用势为

$$U_{EXP}(r) = -\epsilon^p \exp \left(-\frac{r-r_c}{d} \right), \quad (2)$$

其中, d (约为 0.3σ) 为短程相互作用典型长度, ϵ^p 为势阱深度. 为区分 DLC 表层官能团与非官能团, 端基与 DLC 表层官能团之间的附加作用势也为 (2) 式. 一个 PFPE 分子中, 相邻单体之间的附加作用势为有限扩展非线性弹性势 (FENE):

$$U_{FENE}(r) = -\frac{1}{2}kR_0^2 \ln \left[1 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^2 \right], \quad (3)$$

其中, R_0 (约为 1.5σ) 为最长键长, k (约为 $30k_B T/\sigma^2$) 为弹簧常数, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为绝对温度.

采用分子动力学软件 LAMMPS 进行仿真时, 为减小单体的初始分布对最终结果的影响, 首先在正则系综 (NVT) 下计算 (1) 和 (3) 式. 截断误差设置为 $2^{1/6}\sigma$, 温度 T (约为 ϵ/k_B) 恒定, 时间步长为 0.005τ , τ (约为 $\sigma (m/\epsilon)^{0.5}$) 为无量纲时间单位, m 为单体质量. 经过 30000 个时间步后, 得到随机分布的润滑剂分子. 然后, 在微正则系综 (NVE) 下, 计算 (1)–(3) 式. 此时, 采用 Langevin 热浴控制温度, 截断误差为 2.5σ , 温度与时间步长分别为 $1\epsilon/k_B$ 和 0.005τ . 经过 100000 个时间步后, 分布在 DLC 层上的润滑剂分子达到平衡 (图 2).

3 计算结果与讨论

3.1 润滑膜厚度对磁头/磁盘之间润滑剂转移量的影响

图 3 所示为磁盘表面润滑膜 (Zdol) 的平均厚度随磁盘表面分子数的变化规律. 可见, 磁盘表面润滑膜的平均厚度随着润滑剂分子数的增加而线性增加. 因此, 采用粗粒珠簧模型研究磁头/磁盘之间润滑剂转移时, 可通过控制分布在磁盘表面的润滑剂分子数来控制润滑膜的厚度.

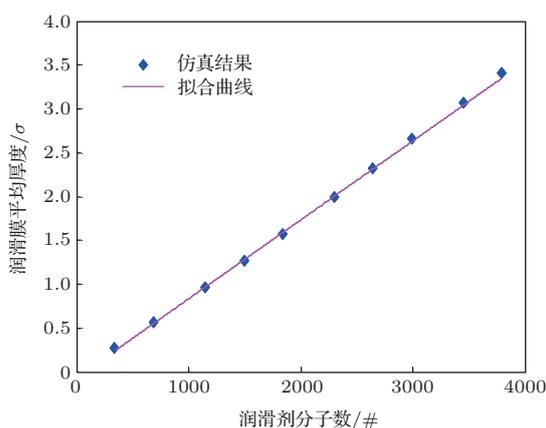


图3 润滑膜的平均厚度随润滑剂分子数的变化

当润滑膜的平均厚度不同时, 润滑剂分子由磁盘表面转移到磁头的瞬时快照 ($t = 500\tau$) 如图4所示. 可见, 在相同的局部压力差 ΔP 和磁盘转速 V_d 下, 随着润滑膜的平均厚度的增加, 润滑剂分子与磁头之间在 y 方向上的链接部分的宽度, 即“连接桥”的宽度逐渐增加(图4(a)—(d)). 当局部压力差作用于磁盘表面时, 局部区域润滑膜的厚度将高出或低于润滑膜的平均厚度. 随着润滑膜的平均厚度的增加, 局部压力差 ΔP 对磁盘表层润滑膜厚度分布的影响增加. 因此, 由局部压力差导致的高出润滑膜的平均厚度的润滑剂分子与磁头表面相互作用增强. 磁盘转动也增加了润滑剂分子在左侧台阶处的堆积, 所以润滑剂分子与磁头之间的“连接桥”宽度逐渐增加.

图5为由磁盘表面转移到磁头上的润滑剂的体积随润滑膜厚度的变化. 当润滑膜的平均厚度低于 1σ 时, 磁头/磁盘之间无润滑剂转移. 一是分布在磁盘表面的润滑剂分子数量较少, 润滑剂分子的端基与 DLC 表层的官能团有足够大的接触面积, 润滑剂分子可以牢牢吸附在磁盘表面. 因此, 位于磁盘上的润滑剂分子不易转移到磁头上. 二是磁头在磁盘上飞行时所产生的局部压力差会影响磁盘表面润滑剂的分布. 高出润滑膜的平均厚度的润滑剂分子与磁头表面的距离超出了磁头表面与润滑剂分子的相互作用范围. 当润滑膜的平均厚度大于 1σ 时, 转移到磁头上的润滑剂的体积呈非线性增加. 在相同的压力差和磁头/磁盘间距下, 润滑膜的平均厚度越高, 局部压力差对润滑膜分布的影响越大, 即润滑膜厚度高出或低于平均厚度的高度越大. 当高出平均厚度的润滑剂分子与磁头之间

的距离在磁头与润滑剂分子相互作用范围内时, 润滑剂分子开始向磁头转移. 润滑膜的平均厚度越大, 转移到磁头上的润滑剂的体积越大, 且呈非线性增加.

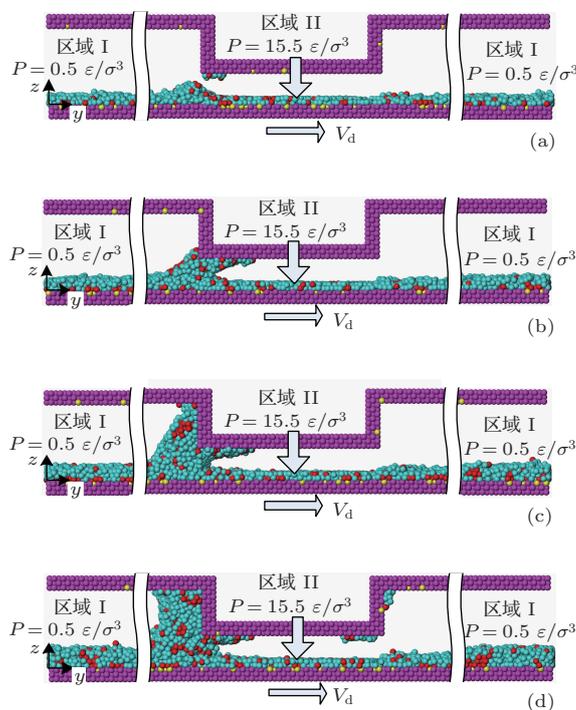


图4 (网刊彩色) 润滑剂从磁盘转移到磁头快照 ($t = 500\tau$, $\Delta P = 15\epsilon/\sigma^3$, $V_d = 0.12\sigma/\tau$, $H = 7\sigma$) (a) 润滑膜平均厚度为 1.3σ ; (b) 润滑膜平均厚度为 2.0σ ; (c) 润滑膜平均厚度为 2.6σ ; (d) 润滑膜平均厚度为 3.3σ

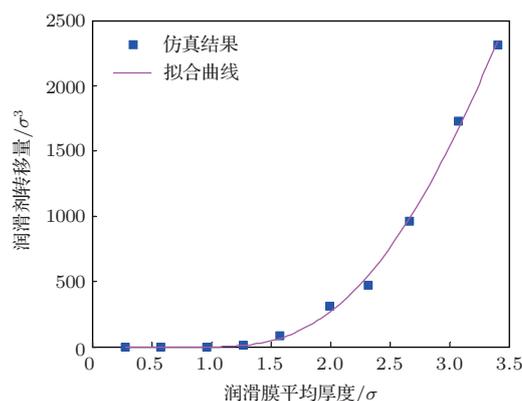


图5 润滑剂转移量随润滑膜厚度的变化 ($\Delta P = 15\epsilon/\sigma^3$, $V_d = 0.12\sigma/\tau$, $H = 7\sigma$)

3.2 不同润滑剂对磁头/磁盘之间润滑剂转移量的影响

图6为根据不同的润滑剂分子结构而构建的粗粒珠簧模型^[19]. ZTMD型润滑剂分子中间有4

个羟基(—OH), 两端分别有 2 个羟基(—OH). 因此, 在所构建的粗粒珠簧模型中, ZTMD 型润滑剂的端基之间, 端基与 DLC 表层官能团之间的相互作用势阱深度 ϵ^P 为 4ϵ , 对于 Zdol 与 Mono 型润滑剂, 端基之间、端基与 DLC 表层官能团之间的相互作用势阱深度 ϵ^P 为 2ϵ .

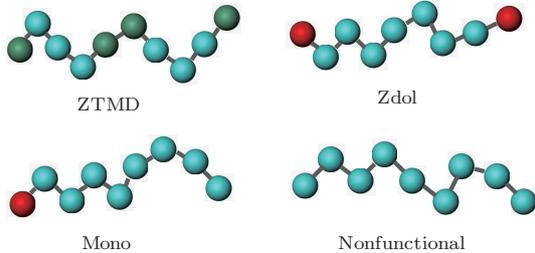


图6 (网刊彩色) 不同类型润滑剂分子的粗粒珠簧模型

图 7 为不同种类润滑剂所形成的润滑膜的厚度及表面粗糙度. 从 ZTMD 型润滑剂到 Nonfunctional 型润滑剂, 润滑膜的厚度逐渐增高, 表面粗糙度逐渐增大. 原因在于从 ZTMD 型润滑剂到 Nonfunctional 型润滑剂, 润滑剂分子中羟基数量逐渐减少, 润滑剂分子之间、润滑剂分子与 DLC 层的相互作用逐渐减弱, 导致吸附在 DLC 层上的润滑剂分子数减少. 因此, 润滑膜的平均厚度及表面粗糙度增加.

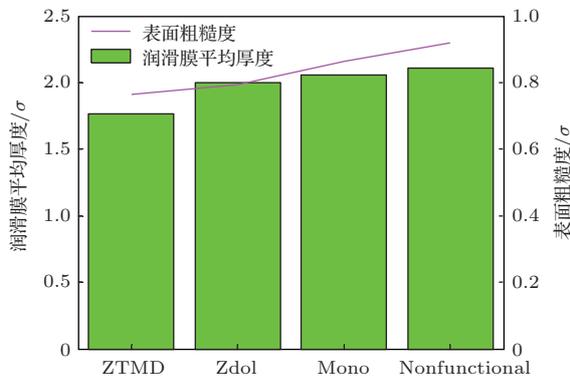


图7 不同种润滑剂所形成的润滑膜厚度及表面粗糙度

由图 8 可见, 在相同的压力差 ΔP 和磁盘转速 V_d 下, 润滑剂转移量随单个分子中羟基数量的增加而降低. 从 Nonfunctional, Mono, Zdol, 到 ZTMD 型润滑剂, 润滑剂分子之间, 润滑剂分子与 DLC 层之间的相互作用逐渐增强, 使得润滑膜抵抗压力差的能力逐渐增强, 进而由压力差导致的高出润滑膜平均厚度的润滑剂分子与磁头表面的相互作用减弱, 所以转移到磁头上的润滑剂的体积

减小.

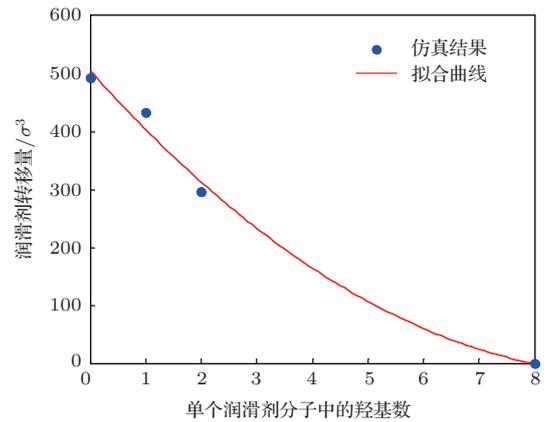


图8 润滑剂转移量随羟基数量的变化 ($\Delta P = 15\epsilon/\sigma^3$, $V_d = 0.12\sigma/\tau$, $H = 7\sigma$)

3.3 温度差对润滑剂转移量的影响

热辅助磁记录 (heat assisted magnetic recording, HAMR)^[20] 技术在硬盘中的应用导致了磁头末端读写区域温度升高. 因此, 在分子动力学模型中划分出了高温区和低温区. 采用不同的 Langevin 热浴温度来控制不同区域润滑剂分子的温度, 处于高温区的润滑剂分子始终受高温热浴的控制, 而处于低温区的润滑剂分子始终受低温热浴控制. 经过 500τ 后, 不同温度载荷 (temperature load, TL) 下, 磁盘表面润滑剂的温度在 y 方向的分布如图 9 所示. 当磁盘转速为零时, 中间高温区的温度向两侧低温区扩散. 当磁盘转速为 $0.12\sigma/\tau$ 时, 温度扩散偏向磁盘移动的方向, 即右侧的温度高于磁盘转速为零时的温度, 而左侧的温度则低于磁盘转速为零时的温度. 图 10 为不同种类的润滑剂在相同的压力差 ΔP 、磁盘转速 V_d 及磁头/磁盘间隙 H 下, 转移到磁头上的体积随温度的变化. 由图可见, 当温度差从 0.2 增加到 0.7 时, 未在磁头上发现到 ZTMD 型润滑剂分子. 随着润滑剂分子中羟基数量的减少, 转移到磁头上的润滑剂的体积不断增加. 而且随着局部温度差的增加, 润滑剂的转移量也不断增加. 分子中羟基个数较多的润滑剂 (Zdol) 的转移量随温度差的增加量明显低于分子中羟基个数少 (Mono) 或无羟基 (Nonfunctional) 的润滑剂. 由此可见, 适量增加分子中羟基的个数, 可以减小磁头/磁盘之间的润滑剂转移量, 提高润滑剂抵抗温度变化的能力.

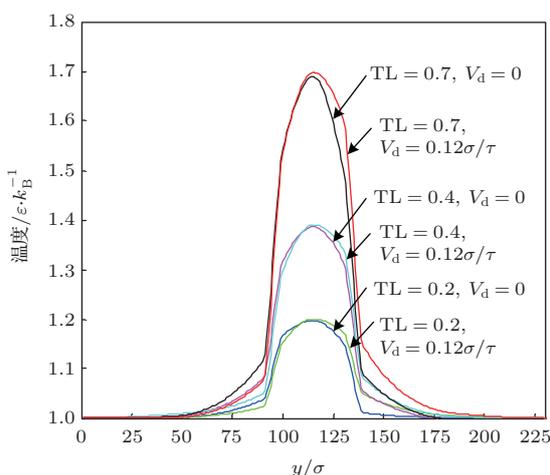


图9 不同温度载荷下, 润滑剂的温度在 y 方向的分布 ($\Delta P = 0\epsilon/\sigma^3$)

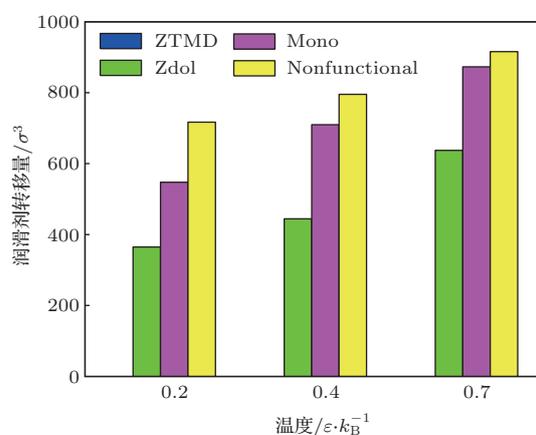


图10 (网刊彩色) 温度差对润滑剂转移量的影响 ($\Delta P = 15\epsilon/\sigma^3$, $V_d = 0.12\sigma/\tau$, $H = 7\sigma$)

4 结 论

运用分子动力学方法, 研究了润滑剂由磁盘转移到磁头的机理. 磁盘表面润滑膜的厚度对磁头/磁盘之间润滑剂的转移起着至关重要的作用. 磁头/磁盘之间润滑剂转移量随着润滑膜的平均厚度的增加而非线性增加. 这与 Waltman 等^[6]的实验研究结果相符. 单个润滑剂分子中羟基的数量越多, 转移到磁头上的润滑剂的体积越少. 因为单个分子中的羟基数越多, 润滑剂分子之间, 润滑剂分子与 DLC 层之间的相互作用越强, 润滑剂越不容易转移到磁头上. 增加单个分子中羟基的数量, 将会增强润滑剂抵抗温度变化的特性, 这为实现 HAMR 技术在硬盘中的应用提供了依据. 需要指

出, 本文所采用的分子动力学模型适用于磁头/磁盘之间局部区域润滑剂转移机理的研究, 该模型可对磁头/磁盘之间润滑剂的转移进行定性分析, 且可从微观角度解释磁头/磁盘之间润滑剂转移的过程.

参考文献

- [1] Chen C Y, Bogy D B, Bhatia C S 2001 *Tribol. Lett.* **10** 195
- [2] Ambekar R P, Bogy D B, Bhatia C S 2009 *J. Tribol.* **131** 031901
- [3] Hua W, Liu B, Yu S, Zhou W 2009 *IEEE Trans. Magn.* **45** 4998
- [4] Marchon B, Dai Q, Knigge B, Pit R 2007 *IEEE Trans. Magn.* **43** 3694
- [5] Ma Y, Liu B 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 143516
- [6] Waltman R J, Deng H, Wang G J, Zhu H, Tyndall G W 2010 *Tribol. Lett.* **39** 211
- [7] Tani H, Iwasaki K, Maruyama Y, Ota I, Tagawa N 2011 *IEEE Trans. Magn.* **47** 1837
- [8] Man Y, Liu B, Zhang M, Gonzaga L 2009 *Microsyst. Technol.* **15** 1515
- [9] Zhang X J, Huang Y, Guo Y B, Tian Y, Meng Y G 2013 *Chin. Phys. B* **22** 016202
- [10] Guo X Y, Li X, Hu Y Z, Wang H 2008 *Chin. Phys. B* **17** 1094
- [11] Zhang L, Zu X T 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4271 (in Chinese) [章黎, 祖小涛 2006 物理学报 **55** 4271]
- [12] Wang H, Yang F J, Xue S X, Cao X, Wang J A, Gu H S, Zhao Z Q 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1415 (in Chinese) [王浩, 杨辅军, 薛双喜, 曹歆, 王君安, 顾豪爽, 赵子强 2005 物理学报 **54** 1415]
- [13] Li H X, Xu T, Chen J M, Zhou H D, Liu H W 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 1885 (in Chinese) [李红轩, 徐洮, 陈建敏, 周惠娣, 刘惠文 2005 物理学报 **54** 1885]
- [14] Zhang Z Y, Lu X C, Luo J B 2007 *Chin. Phys.* **16** 3790
- [15] Guo Q, Izumisawa S, Phillips D M, Jhon M S 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 8707
- [16] Li X, Hu Y Z, Wang H, Chen H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4094 (in Chinese) [李欣, 胡元中, 王慧, 陈辉 2007 物理学报 **56** 4094]
- [17] Li X, Hu Y Z, Wang H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3787 (in Chinese) [李欣, 胡元中, 王慧 2005 物理学报 **54** 3787]
- [18] Li Y, Wong C H, Li B, Yu S, Hua W, Zhou W 2012 *Soft Matter* **8** 5649
- [19] Chen H, Guo Q, Jhon M S 2007 *IEEE Trans. Magn.* **43** 2247
- [20] Bechtel J E, Bogy D B 2011 *IEEE Trans. Magn.* **47** 2379

Lubricant transfer mechanism and process between slider and disk

Pan Deng Yan Hui Jiang Hong-Yuan[†]

(School of Mechatronics Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

(Received 16 January 2014; revised manuscript received 17 February 2014)

Abstract

The increasing of areal density of hard disk drives promotes the decreasing of the slider flying height. Lubricant transfer between slider and disk, caused by reducing slider flying height, plays an important role in affecting slider flying stability. In this study, the improved coarse-grained, bead-spring model is used to investigate the mechanism of lubricant transfer between slider and disk by molecular dynamics simulation. The effects of lubricant thickness on disk surface, lubricant type, and local temperature difference on the slider surface on lubricant transfer are studied. We observe that the amount of lubricant transferred to the slider sharply increases with the increase of lubricant thickness value on the disk surface. Increasing the number of hydroxyl groups in an individual lubricant molecule can greatly reduce the volume of the lubricant transferred to the slider. In addition, the local temperature difference on the slider surface can increase the volume of lubricant transferred to slider. What is more, the increasing of the number of hydroxyl groups contained in an individual molecule can considerably improve the influence of the local temperature difference on the lubricant transfer between slider and disk.

Keywords: lubricant transfer, molecular dynamics simulation, head/disk interface

PACS: 81.40.Pq, 79.60.Dp, 79.60.Fr

DOI: [10.7498/aps.63.128104](https://doi.org/10.7498/aps.63.128104)

[†] Corresponding author. E-mail: jhy_hit@sina.com