

微机械弹性纳米接触问题的建模与计算

樊康旗, 贾建援, 王卫东

(西安电子科技大学 机电工程学院, 陕西 西安 710071)

摘要: 针对 Bradley 方程和刚性纳米接触模型在处理微机械纳米接触问题中的不足, 基于 Lennard-Jones 势能定律将组成两接触球体的原子之间的粘着力等效为两球体表面所受分布作用力, 并根据经典弹性理论建立了一种新型的两球体弹性纳米接触模型. 该模型可以同时得到两球面轮廓随间距的变形过程及两球体间的粘着力和表面变形量随间距的变化规律, 并且与现有的由原子力显微镜扫描实验所得到的结论相一致.

关键词: 微机械系统; 粘着; 纳米接触; 纳米摩擦

中图分类号: O48 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-2400(2007)01-0096-05

Elastic nanocontact model of micro-mechanical systems

FAN Kang-qi, JIA Jian-yuan, WANG Wei-dong

(School of Mechanical-electron Engineering, Xidian Univ., Xi'an 710071, China)

Abstract: Based on the Lennard-Jones potential, the adhesive forces among the atoms of two spheres are considered as the distributing load acting on the surfaces of the two spheres. And according to the classically elastic theory, a novel model of elastic nanocontact of two spheres is established to solve the contact problems emerging in micro-mechanical systems. The model is capable of obtaining the variations with the distance of the adhesive force, the deformations and the contours of the two spheres at the same time. The results from the model established are consistent with the conclusions drawn from the scanning experiments available of atomic force microscopy, which confirms the validity of the model in investigating the nanocontact problems in micro-mechanical systems

Key Words: micro-mechanical systems; adhesion; nanocontact; nanotribology

随着微电子机械系统(MEMS)中器件特征尺寸的不断减小, 面积力与体积力之比迅速增大, 有时甚至成为主导因素, 这就是由尺度效应引起的“表面效应”^[1]. 当研究对象的特征尺寸减小到一定范围时, 粘着能和由其派生的表面力成为决定固体粘着、接触、变形及摩擦等行为的关键因素^[2]. 为了研究发生在固体界面上原子、分子尺度范围内的粘着、接触、变形及摩擦等微观现象, 必须发展微尺度的纳米接触理论.

Bradley^[3,4]将原子之间的粘着力等效为球面所受分布力, 得到了描述两刚性球体间粘着力的 Bradley 方程. 田文超等^[5,6]根据 Hamaker 假设建立了两球体的刚性纳米接触模型. 但是上述两种模型都没有考虑两球体在粘着力作用下的表面变形效应, 无法得到两球体的变形量随间距的变化规律, 而该规律对于微机械系统中的粘着、接触、变形及摩擦等问题的研究都是至关重要的.

笔者基于 Lennard-Jones 势能定律将组成两接触球体的原子之间的粘着力等效为两球体表面所受分布作用力, 并根据经典弹性理论建立了一种新型的两球体弹性纳米接触模型. 由该模型得到的球面随间距的变形过程及两球体间的粘着力随间距的变化规律与现有的由原子力显微镜扫描实验所得到的结论相一致.

收稿日期: 2006-03-16

基金项目: 国家自然科学基金项目资助(10476019)

作者简介: 樊康旗(1979-), 男, 西安电子科技大学博士研究生.

1 弹性纳米接触模型

1.1 粘着的相关理论模型

由固体物理学理论可知两固体相互粘着接触而构成界面后,其 Dupre 粘着能为^[7]

$$\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12} \quad (1)$$

其中 γ_1 和 γ_2 分别为相互接触的两固体表面的自由能, γ_{12} 为界面能. Lennard-Jones 势能定律给出了距离为 h 的两表面单位面积上的粘着力为^[8]

$$p(h) = - (8\gamma/(3\epsilon)) [(\epsilon/h)^3 - (\epsilon/h)^9] \quad (2)$$

其中 ϵ 为分子或原子平衡间距.

1.2 弹性纳米接触模型

由于两弹性球体间的接触通常被认为是研究微机械系统中纳米接触问题的基本模型,所以这里将微机械系统中的纳米接触问题等效为半径分别为 R_1, R_2 的两球体接触模型,如图 1 所示. 设分别位于上下两球面上,且距对称轴(Z 轴)为 r 的两点间的距离为 $h(r)$. 在微机械系统中,由于两接触球体的半径 R_1 和 R_2 的量级通常在微米级以下,且两球体的纳米接触通常只发生在对称轴附近,所以在接触区域附近可采用抛物面表示球面,这样 $h(r)$ 可表示为

$$h(r) = h_0 + r^2/(2R) + u(r) - \alpha \quad (3)$$

其中 h_0 为两球体未变形时,两球面间的初始间距; α 为两刚性球体的趋近量,即两球体相互接近的距离; R 和 $u(r)$ 分别为

$$1/R = 1/R_1 + 1/R_2 \quad (4)$$

$$u(r) = u_1(r) + u_2(r) \quad (5)$$

其中 $u_1(r), u_2(r)$ 分别为球 R_1, R_2 的表面变形量. 当 $R_2 \rightarrow \infty$ 时, $R = R_1$, 两球体的接触转变为球与平面的接触;也可以将球 R_1 与球 R_2 的接触等效成半径为 R 的球体与平面的接触.

同时将组成两球体的原子之间的粘着力等效为两球体表面之间的分布作用力. 对于两球体接触模型,由于粘着力分布具有轴对称性,所以由弹性理论^[9]可得分布作用力 $p(h)$ 引起球面上任意一点 \hat{r} (该点的矢量为 \hat{r}) 的变形量为

$$u(\hat{r}) = \frac{1}{\pi E} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{p(h)}{(\hat{r}^2 + r^2 - 2\hat{r}r \cos \theta)^{1/2}} r \, d\theta \, dr = \frac{4}{\pi E} \int_0^\infty \frac{r \cdot p(h)}{\hat{r} + r} K \left[\frac{2(\hat{r}r)^{1/2}}{\hat{r} + r} \right] dr \quad (6)$$

两球体间的粘着力为

$$F = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty p(h) r \, dr \, d\theta \quad (7)$$

这里 $K(X)$ 为模 $X = 2(\hat{r}r)^{1/2}/(\hat{r} + r)$ 的第一类完全椭圆积分; $h = h(r)$ 如式(3)所示; θ 为粘着应力 ($r \, dr \, d\theta$) 矢量 r 与矢量 \hat{r} 间的夹角, θ 的积分域 $[0, 2\pi]$ 表示了圆环域 $[r, r + dr]$ 上作用的粘着应力所引起的点 \hat{r} 的变形量; E 为两球体的组合弹性模量:

$$1/E = (1 - \nu_1^2)/E_1 + (1 - \nu_2^2)/E_2 \quad (8)$$

其中 E_1, E_2, ν_1, ν_2 分别为两球体的弹性模量和泊松比.

经典的 Hertz 理论由于没有考虑粘着力的影响,所以很难处理微机械系统中的各种接触问题. Bradley 方程和田文超等的刚性纳米接触模型虽然考虑了两球体间的粘着力,但是都不能给出两球体间的粘着力和两球体的变形量随间距的变化规律. 由式(2), (3), (6)确定的弹性纳米接触模型结合了经典弹性理论和 Lennard-Jones 势能定律,同时考虑了两球面的变形效应和两球体间的粘着力,可以处理两球体间粘着力为引力和斥力时的多种问题. 当两球面间距 $h(r) > \epsilon$ 时,粘着力为引力 ($p(h) < 0$),球面被拉伸 ($u(r) < 0$);当间距 $h(r) < \epsilon$ 时,粘着力为斥力 ($p(h) > 0$),球面被压缩 ($u(r) > 0$).

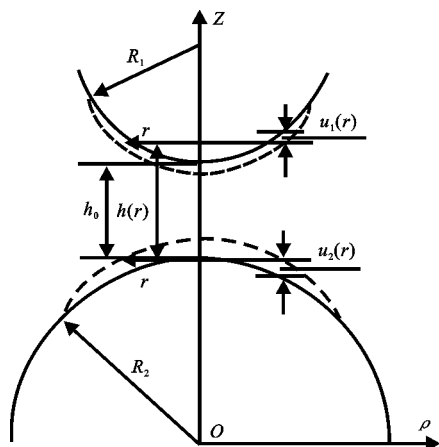


图 1 两球体纳米接触模型

2 计算方法

由于式(6)中存在第一类完全椭圆积分,无法得到解析结果,所以采用自洽迭代算法对由式(2),(3)和式(6)确定的弹性纳米接触模型进行求解。

2.1 离散化

由于间距 $h(r)$ 随 r 的增加而增大,而粘着力 $p(h)$ 随 $h(r)$ 的增加而急剧减小,所以可将式(6)的积分域 $[0, \infty]$ 截断为 $[0, r_\infty]$ (r_∞ 的选择依据是粘着力 $p(h(r_\infty)) < 10^{-5}$ nN). 同时将积分域 $[0, r_\infty]$ 进行等间距离离散化,离散间距为 Δ ,各点位置为

$$r_i = i \cdot \Delta - \Delta/2, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (9)$$

积分域经离散化后,第一类完全椭圆积分采用级数展开,并取前 5 项, $K(2(\hat{r}r)^{1/2}/(\hat{r}+r))$ 转变为 $N \times N$ 阶矩阵,矩阵单元为 $K_{ij} = K(i, j)$. 当 $r_i = r_j$ 时,采用 Johnson^[9] 给出的重叠三角法消除第一类完全椭圆积分的奇异性。

经离散化后的弹性纳米接触模型为(式(2)→式(10),式(3)→式(11),式(6)→式(12)):

$$\begin{cases} p_i = p(h_i) = -(8\gamma/(3\epsilon))[(\epsilon/h_i)^3 - (\epsilon/h_i)^9], & (10) \\ h_i = h(r_i) = h_0 + r_i^2/(2R) + u(r_i) - \alpha, \quad i, j = 1, 2, \dots, N, & (11) \\ u_i = (4\Delta/(\pi E)) \sum_{j=1}^N K_{ij}(r_j \cdot p_j / (r_j + r_i)). & (12) \end{cases}$$

$$\text{两球体间的粘着力 } F \text{ 为} \quad F = \sum_{j=1}^N 2\pi p_j r_j \Delta. \quad (13)$$

2.2 计算细节

球 R_2 保持不动,球 R_1 从一较大初始间距 h_0 ($u(r) \approx 0, p(h(r)) \approx 0$) 开始逐步趋近球 R_2 ,每步趋近量 $d = 0.01$ nm. 球 R_1 每趋近一步,以上一步所确定的球面变形量开始启动迭代算法. 在迭代计算中依次求解球面变形量 u_i (式(12))、两球面间距 h_i (式(11)) 和粘着分布力 p_i (式(10)). 为了加速收敛,在计算两球面变形量时,采用前两次迭代计算所得到的两球面变形量的组合形式,即

$$\bar{u}_i^{k+1} = u_i^k + C(u_i^{k+1} - u_i^k), \quad (14)$$

其中 C 为组合系数,且 $0 < C < 1$; k 为迭代的次数. 在迭代计算中,每当两球面中心点 ($r = 0$) 变形量 $u(0)$ 的收敛精度达到 10^{-4} nm 时,迭代计算终止,球 R_1 趋近一步。

3 结果与讨论

模拟参数为 $R_1 = 200$ nm, $E_1 = E_2 = 10^{11}$ Pa, $\nu_1 = \nu_2 = 0.3$, $\gamma = 0.1623$ Jm⁻², $\epsilon = 0.5$ nm, 离散间距 $\Delta = 0.005$ nm. 通过改变离散间距 Δ ,发现当 $\Delta < 0.005$ nm 时,对于不同的离散间距 Δ ,模拟精度几乎没有改变. 两球面间距 δ 与球 R_1 趋近量 a 间的关系定义为 $\delta = h_0 - a$. 在原子力显微镜(AFM)研究中,通常将 AFM 与样品分别等效为球体与平面,所以为了将由弹性纳米接触模型得到的仿真结果与现有的 AFM 实验结果相比较,仿真中令 $R_2 = \infty$,即对球体与平面的接触模型进行仿真。

图 2 给出了由仿真计算得到的在球 R_1 趋近过程中,平面轮廓曲线 $u_2(r)$ (对于平面,轮廓曲线与表面变形曲线 $u_2(r)$ 相同) 的变形过程 $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D$. 当间距 δ 较大时,平面几乎未发生变形. 随着间距 δ 的逐渐减小,粘着引力迅速增加,由图 2 可看出平面在粘着引力的作用下发生拉伸变形($A \rightarrow B$). 当间距 δ 小于原子平衡间距 ϵ 时,接触区内的粘着引力转变为粘着斥力,平面在接触区内的部分被球体压缩($B \rightarrow C$). 如果间距 δ 继续减小,即球体继续趋近平面,接触区将逐渐增大($C \rightarrow D$). 所以当球体与平面接触后,平面在接触区内的部分发生压缩变形,而在接触区外的部分发生拉伸变形. 同时由图 2 可以看出,变形后的平面轮廓曲线在接触区内外之间光滑过渡,不存在一个明显的接触区域临界值。

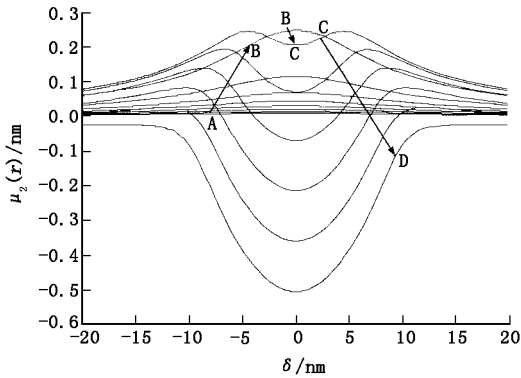


图 2 平面轮廓 $u_2(r)$ 随球 R_1 趋近量 α 的变形过程(A→B→C→D)

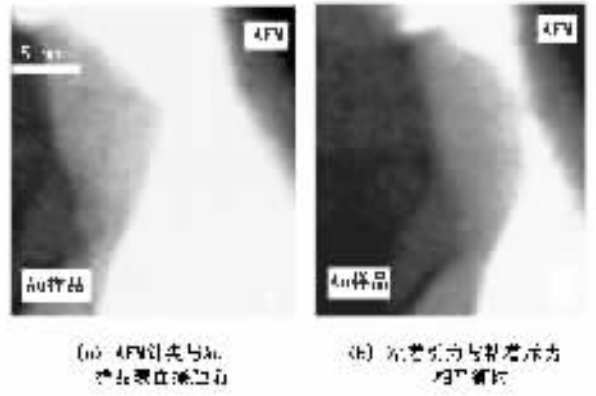


图 3 Au 样品表面的变形

图 3 给出了 Erts 等^[10]利用透射电子显微镜(TEM)观察到的当 AFM 针尖与 Au 样品表面接触前(图 3(a))及当 AFM 针尖与 Au 样品表面间的粘着引力与粘着斥力相平衡时(图 3(b)), Au 样品表面的变形情况. 由图 3(a)可见, 当 AFM 针尖与 Au 样品尚未接触时, Au 样品表面发生拉伸变形而形成一个圆锥形凸包. 当 AFM 针尖与 Au 样品表面间的粘着引力与粘着斥力相平衡时(图 3(b)), 在 AFM 针尖与 Au 样品表面的接触区内样品表面被压缩, 而在接触区外, Au 样品表面的拉伸变形量增大, 使得 Au 样品的表面由圆锥形转变为圆球形. 通过对比图 2 和图 3 可见, 笔者建立的弹性粘着接触模型给出的平面轮廓曲线随间距的变化趋势与实验得到的变化趋势相一致, 证实了弹性接触模型在处理微机械接触问题中的有效性.

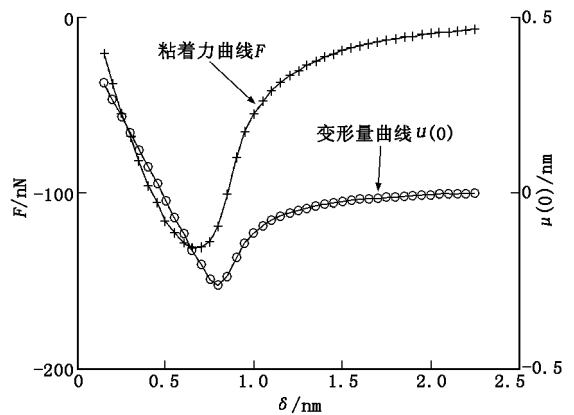


图 4 粘着力 F 和接触区中心点的变形量 $u(0)$ 随间距 δ 的变化曲线

图 4 给出了由仿真计算得到的球体与平面间的粘着力 F 和中心点($r = 0$)的变形量 $u(0)$ 随间距 δ 的变化曲线. 当间距 δ 较大时, 粘着力近似为零, 变形量 $u(0)$ 也近似为零, 球体与平面几乎没有发生变形. 随着间距 δ 的逐渐减小, 粘着力逐渐增加, 球体与平面的拉伸变形量 $u(0)$ 也逐渐增加. 随着间距 δ 的进一步减小, 球体与平面开始接触, 接触区内的粘着力转变为粘着斥力, 所以粘着力在到达最大值后开始减小, 粘着力曲线开始上升; 同时拉伸变形量 $u(0)$ 在到达最大值后也开始减小, 并逐渐发生压缩变形.

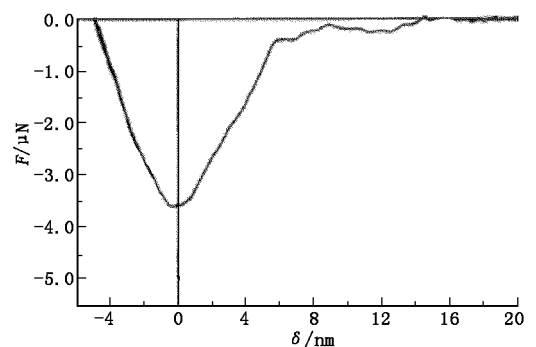


图 5 Landma 等^[11]给出的 AFM 针尖与 Au 样品表面间的粘着力 F 随间距 δ 变化的实验曲线

图 5 给出了 Landman 等^[11]应用镍针尖的 AFM 在趋近 Au 样品表面的过程中, AFM 针尖与 Au 样品间的粘着力随间距的变化曲线. 由图 5 可见, Landman 等得到的粘着力实验曲线与图 4 中给出的粘着力曲线的变化趋势基本一致. Landman 等认为当粘着力最大时, AFM 针尖开始与样品表面发生接触, 并定义该间距为零. 但是由 Lennard-Jones 势能定律可知当间距为零时, 粘着力趋于无穷大, 所以 Landman 等定义的 AFM 针尖与样品间的间距与文中定义的间距 δ 不一致. 同时实验中所使用的 AFM 针尖并非理想的球体模型, Au 样品表面也并非理想的光滑平面, 这些因素导致仿真结果与 AFM 实验结果给出的粘着力最大值出现的间距并不相同. 虽然仿真模型与 AFM 针尖的等效球体模型的实际大小并不相同, 导致仿真与实验得到的粘着力的大小有所差异, 但模型大小的差异并不影响粘着力曲线随间距的变化规律.

图 6 给出了由仿真计算得到的刚性粘着接触模型、Bradley 粘着模型和笔者所建立的弹性纳米接触模型分别给出的粘着力 F 随间距 δ 的变化曲线。由图 6 可见,当间距 δ 较大时,3 种粘着模型给出的粘着力 F 相差较小。随着 δ 的逐渐减小,3 种模型给出的粘着引力都逐渐增大,但它们之间的差值也逐渐增大,且 3 种模型所给出的粘着引力的最大值和其所在的位置也互不相同,这是由于在相同的趋近量下(即 $\delta = h_0 - a$ 相同),弹性粘着接触模型考虑了球体和平面在粘着引力作用下的拉伸变形效应,该效应使得球体与平面的实际间距比 δ 小,所以弹性纳米接触模型给出的粘着力曲线整体向右偏移。随着 δ 的进一步减小,刚性粘着模型和 Bradley 粘着模型给出的粘着力急剧趋向于无穷大,这一不合理的结论显然是由于没有考虑球体和平面的变形效应引起的,而弹性粘着模型由于考虑了球体和平面的变形效应,给出的粘着力的增加速度比其他两个粘着模型小,可以更加准确地反映出球体和平面的实际接触情况。

结合图 4 和图 6 可以看出,在微机械纳米接触中,随着间距 δ 的逐渐减小,球体与平面的变形效应逐渐增强,表面变形量 $u(0)$ 逐渐达到不可忽略的程度,而没有考虑接触体表面变形效应的 Bradley 方程和刚性纳米接触模型的误差逐渐增大。所以,Bradley 方程和刚性纳米接触模型仅在间距 δ 较大时才能比较准确的反映出粘着力 F 随间距 δ 变化的规律。

4 结束语

针对 Bradley 方程和刚性纳米接触模型在处理微机械纳米接触问题中的不足,基于 Lennard-Jones 势能定律将组成两接触球体的原子之间的粘着力等效为两球体表面所受分布作用力,并根据经典弹性理论建立了一种新型的两球体弹性纳米接触模型。由该模型得到的球面轮廓随间距的变形过程及两球体间的粘着力随间距的变化规律与现有的由原子力显微镜扫描实验所得到的结论相一致,证明了所建模型在研究微机械纳米接触问题中的有效性。

参考文献:

- [1] Horstermeyer M F, Baskes M I. Atomistic Finite Deformation Simulation; a Discussion on Length Scale Effects in Relation to Mechanical Stresses [J]. Journal of Engineering Materials and Technology, 1999, 121 (1): 115-119.
- [2] 温诗铸. 纳米摩擦学[M]. 北京:清华大学出版社, 2001.
- [3] Johnson K L, Kendall K, Roberts A D. Surface Energy and the Contact of Elastic Solids [J]. Proceedings of the Royal Society of London, 1971, 324(1): 301-313.
- [4] Greenwood J A. Adhesion of Elastic Spheres [J]. Proceedings of the Royal Society of London, 1997, 453 (9): 1277-1297.
- [5] 田文超,贾建援. Hamaker 均质材料假设修正[J]. 物理学报, 2003, 52 (5): 1061-1065.
- [6] Tian Wenchao, Jia Jianyuan. Analysis of the Micro-cantilever Rough Surface Adhesion Model [J]. Journal of Xidian University, 2004, 31 (5): 749-752.
- [7] Maugis D. Adhesion of Sphere; the JKR-DMT Transition Using a Dugdale Model [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1992, 150(1): 243-269.
- [8] Muller V M, Yushchenko V S, Derjaguin B V. On the Influence of Molecular Forces on the Deformation of an Elastic Sphere and Its Sticking to a Rigid Plane [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1980, 77(1): 91-101.
- [9] Johnson, K L. Contact Mechanics [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1985.
- [10] Ertz D, Lohmus A, Lohmus R, et al. Force Interactions and Adhesion of Gold Contacts Using a Combined Atomic Force Microscope and Transmission Electron Microscope [J]. Applied Surface Science, 2002, 188 (3): 460-466.
- [11] Landman U, Luedtke W D, Nancy A B. Atomistic Mechanisms and Dynamics of Adhesion, Nanoindentation, and Fracture [J]. Science, 1990, 248 (4): 454 - 461.

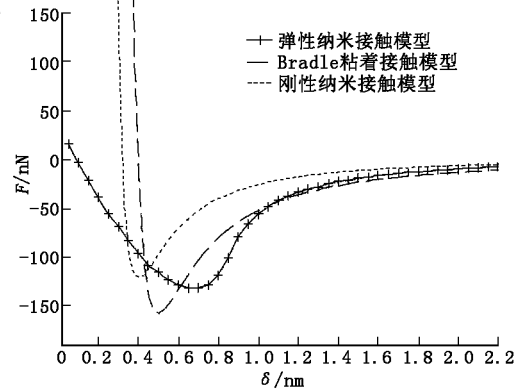


图 6 3 种模型给出的粘着力 F 随间距 δ 的变化曲线