

纳米级粗糙表面接触行为的分子动力学模拟*

雷海东, 段芳莉, 仇和兵, 杨继明

(重庆大学 机械传动国家重点实验室 重庆 400044)

摘要: 为了研究纳米级粗糙表面接触的微观机理, 以金刚石为例, 采用 Tersoff 势, 用分子动力学方法研究了具有分形粗糙表面的刚性球形探头与弹性平面的接触过程。模拟结果显示, 探头的表面形貌是影响趋近阶段粘附力的重要因素, 分形维数越大, 粘附力越大; 探头的表面形貌对载荷-位移曲线也有影响, 载荷较小时, 探头表面粗糙形貌显著影响载荷的增长规律, 载荷较大时, 表面形貌对载荷-位移曲线变化的影响不再显著, 载荷与位移线性增长; 探头表面的纳米级粗糙峰, 显著地影响了探头与基体之间的接触行为。但这种改变, 并不会影响接触过程中真实接触面积与法向载荷间的线性关系。

关键词: 纳米级粗糙表面; 接触力学; 分子动力学模拟

中图分类号: O485

文献标识码: A

文章编号: 1007-9289(2010)05-0027-05

Molecular Dynamics Simulation of Contact Mechanics Between Nanoscale Rough Surfaces

LEI Hai-dong, DUAN Fang-li, QIU He-bing, YANG Ji-ming

(The State Key Laboratory of Mechanical Transmission, Chong Qing University, Chongqing 400044)

Abstract: We adopted large-scale molecular dynamics simulations with Tersoff potential to establish contact mechanics between nanoscale rough surfaces. Nominally spherical tips with fractal rough surfaces were pressed into atomic smooth diamond substrates. It shows that surface morphology of tip is the critical factor of the adhesion and normal force in the event of the small normal force, and the adhesion force is increased with the fractal dimension of surface. At the large normal force, the critical factor of normal load is the stiffness of the material rather than surface morphology. Normal force depends linearly on the number of atoms that chemically interact across the contact. By defining the contact area as being proportional to the number of interacting atoms, we show that the linear relationship exists also between normal force and contact area.

Key words: nanoscale rough surface; contact mechanics; molecular dynamics simulation

0 引言

在宏观世界中, 两个或两个以上的物体通过局部边界相互接触而实现力传递的问题称为接触问题。严格来讲, 所有机械摩擦副表面之间的接触都是不同粗糙程度的粗糙表面的接触, 一般接触表面都不是光滑的, 它总是由许多不规则的凸峰和凹谷组成。实际接触只发生在摩擦面的较高微凸体上。近来的研究表明, 真实的粗糙表面可由不同尺度级别的具有分形特征或多尺度特征的表面形貌组成^[1]。粗糙表面的接触行为对摩擦、磨

损、润滑、密封和传热等有着重要的影响, 因而一直是摩擦学研究的主要课题之一。

两个粗糙表面接触时, 有大量形状各异、尺寸不同的微凸体相互挤压。为了简化分析, 在连续介质理论中, 粗糙表面接触模型可以转化为粗糙峰或粗糙表面与平面之间的接触。整个系统的响应通常认为代表了多个独立粗糙峰之间的接触行为, 通常把表面微凸体的顶端视作球面^[2]。因此, 粗糙表面的力学和摩擦学研究的模型转化为球形探头与平面基体之间的接触行为。但是, 这种模型没有考虑粗糙峰之间的相互作用, 文中采用的分形粗糙表面探头有效的解决了这一问题。

粗糙表面接触模型的研究还处于初步阶段, 研

收稿日期: 2010-04-07; 修回日期: 2010-05-11

基金项目: *国家自然科学基金 (0301002321037) 和重庆市自然科学基金 (0208002431012)

作者简介: 雷海东(1984—), 男(汉), 重庆人, 硕士生。

究者在物理、几何等方面做出了不同的假设,形成了多种粗糙表面接触模型。经典接触力学模型,即Hertz模型,只能求解一些几何形状比较规则的物体,应用范围非常有限。统计学接触模型是基于统计特征来描述与理想刚性光滑平面接触的等效粗糙表面特性的模型。各种统计学模型都是经过简化的理想模型,这些简化究竟能导致多大误差目前还没有精确的分析^[3]。与统计学模型相比,分形接触模型的先进性是利用了包含全部表面粗糙度信息的分形参数:分形维数和特征尺度系数。因而能够定量地表达总的真实接触面积、弹性接触面积和塑性接触面积分别与表面粗糙度的关系,以及接触面积与载荷的关系,其对粗糙表面接触性质的预测不受仪器分辨率和取样长度的影响,使预测具有唯一性或确定性^[4]。

Luan和Robbins^[5-7]应用Lennard-Jones (LJ)势进行分子动力学模拟,研究了具有原子级粗糙表面球形与光滑平面的接触。结果表明,在无粘附的弹性接触中,法向位移与载荷的关系可以被Hertz模型准确地描述。最近,Mo和Szulfarska^[8,9]采用了现实的势函数(Reactive Empirical Bond Order Potential)模拟了非晶态碳探针与金刚石基体的摩擦。研究表明,无论界面间有无粘附作用,载荷与真实接触面积成正比,摩擦力与真实接触面积成正比。在无粘附情形,摩擦力与载荷成正比;在粘附

接触情形,表面粘附力使得摩擦力与载荷偏离线性关系,成为亚线性关系。

文中认为,与实际的原子力显微镜探针相比,模拟中采用的原子级粗糙表面太光滑,相对于基体原子,发生接触的原子处于几乎相同的位置结构中,具有几乎相同的剪切强度。如果采用更为复杂的表面形貌,例如纳米级粗糙表面,接触原子各自处于不同的复杂应力场中,其各自不同的剪切强度对接触行为的影响效果将显现出来,Szulfarska和Robbins之间的分歧将有可能得到弥合。

目前,尚未见到关于纳米级粗糙表面接触问题的研究。文中运用分子动力学方法研究了具有纳米级分形粗糙表面的刚性纳米球形探头与弹性平面的接触过程,探讨了纳米级粗糙表面接触的微观机制。分析了纳米级多粗糙峰对接触行为的影响以及接触行为与分形维数的关系。

1 模拟方法

粗糙表面有一个固有特性:自仿射性。所谓自仿射性就是轮廓在不同尺度上呈现的相似性。为了表征粗糙表面的这一特性,可以用处处连续但处处不可导且具有自仿射分形特征的Weierstrass-Man-delbrot函数(简称W-M函数)^[10-12]。其中典型的一种函数由下式表示:

$$z(x, y) = C \sum_{m=1}^M \sum_{n=0}^{n_{\max}} \gamma^{(D_s-3)n} \left\{ \cos \phi_{mn} - \cos \left[\frac{2\pi \gamma^n (x^2 + y^2)^{1/2}}{L} \cos \left(\tan^{-1}(y/x) - \frac{\pi m}{M} \right) + \phi_{mn} \right] \right\} \quad (1)$$

$$\text{其中 } C = L \left(\frac{G}{L} \right)^{(D_s-2)} \left(\frac{\ln \gamma}{M} \right)^{1/2}$$

C 是表面的高度系数, D_s 是空间分形维数且有 $D_s = D + 1$, D 是截面的分形维数, ϕ 是一系列的0到 π 之间的随机相位, γ 是控制表面起伏密度的参量, M 是空间起伏的数量, L 确定了模拟图像的大小, G 则是特征尺度系数。

对于一个完全分形的表面,有 $n_{\max} \rightarrow \infty$,但是由于受到分辨率的限制, $n_{\max}$ 可由下式计算

$$n_{\max} = \text{int} \left[\frac{\log(L_{\max}/L_{\min})}{\log \gamma} \right] \quad (2)$$

其中, $L_{\max}$ 是模拟图像的尺寸, $L_{\min}$ 是最小的分辨率。

由式(1)生成分形粗糙表面。通过拉伸分形表面得到半径为10 nm的分形球面,然后用分形球

面切割理想金刚石晶体,得到有效半径为10 nm的具有分形粗糙表面的探头,设置参数为:表面高度系数为0.095 nm,其分形维数分别为2.4、2.5,所有探头的高度均为3 nm(如图1)。宏观的光滑表面探头具有原子级粗糙形貌,但为简明起见,原子级粗糙表面视为光滑探头。

模型中基体为理想金刚石晶体,基体的尺寸为 $285.336 \text{ \AA} \times 285.336 \text{ \AA} \times 71.334 \text{ \AA}$,共1 036 800个原

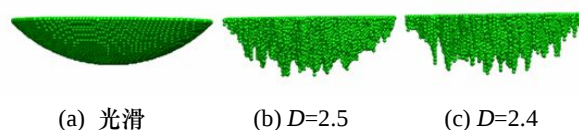


图1 具有粗糙表面的球形探头

Fig.1 Spherical tip with rough surface

子。为了消除分子动力学模拟中因计算规模引起的表面效应,在以 z 轴为法向的接触面上,采用自由表面边界条件,而在以 x 、 y 轴为法向的基体四周表面上,采用周期性边界条件。基体底部的2个晶胞原子层为刚性原子,在整个模拟过程中不发生位移。与之相邻的4个晶胞原子层为控温层,采用速度修正法将其温度控制在300 K。控温层之上的基体原子为自由原子,不对其力和位移进行修正。基体原子之间,以及基体原子与探头原子之间的作用力采用Tersoff势^[13]进行描述。分子动力学模拟软件为美国Sandia国家实验室开发、发布的开源代码Lammps^[14]。图2给出了分形粗糙表面探头与光滑表面基体之间接触行为模拟的原子模型。

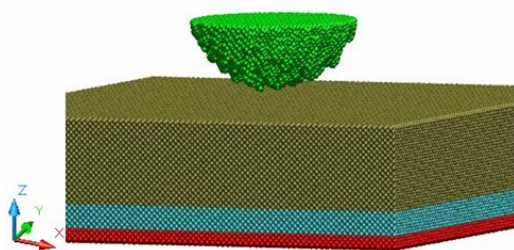


图2 探头与基体的初始构型

Fig.2 Contact geometry of tip and substrate

首先,让探头距离基体约1 nm远,此距离可保证探头与基体之间没有相互作用,对基体进行表面弛豫,使系统达到平衡态。然后,让探头以10 m/s下移2.5 ps,接着让探头停止移动,静止5 ps,使系统达到该压入深度下的平衡态。这个交替下移、静止过程的总效果相当于速度为3 m/s的压入过程。在每一个压入深度,在达到弛豫平衡之后,以2.5 ps内的平均作用力,作为该压入深度下探头与基体之间的作用力。

在原子尺度上,判断两个表面是否发生了接触,有作用力判据和距离判据两种方法^[15,16]。文中采用距离判据,也就是说,如果探头原子与基体原子小于一定距离(0.15 nm),则认为该探头原子与基体发生了接触。通过接触原子数,我们可以定义纳观接触中的真实接触面积为: $A_{\text{real}} = N_{\text{at}} A_{\text{at}}$ ^[8]。其中, N_{at} 为接触原子数, A_{at} 为单个原子的平均接触面积。对于单个原子的平均接触面积,我们选取其截面积 $A_{\text{at}} = \pi r^2$, r 为原子半径。金刚石中碳原子的截面积为 $0.0154 \text{ \AA}^2$ 。

2 模拟结果与分析

2.1 表面粘附作用

在微机电系统中,表面粘附力是影响其性能和可靠性的重要因素。微机电系统常常因为表面粘附及静摩擦力而失效。而在粗糙度较小时,表面粘附力大小主要与表面凸峰分布情况相关^[17]。图3所示为不同分形维数的纳米级粗糙探头在趋近阶段的表面粘附力曲线,图中所示粘附力主要是由于碳-碳原子之间的共价键产生的粘附作用。从图3中可以看出,光滑探头的粘附力最大,其最大值为 -69.53 nN , $D=2.5$ 时,最大粘附力为 -6.15 nN , $D=2.4$ 时,最大粘附力为 -2.40 nN 。纳米级粗糙峰显著地减小了探头与基体之间的粘附作用,并且,随着分形维数的减小,粘附力也越小。

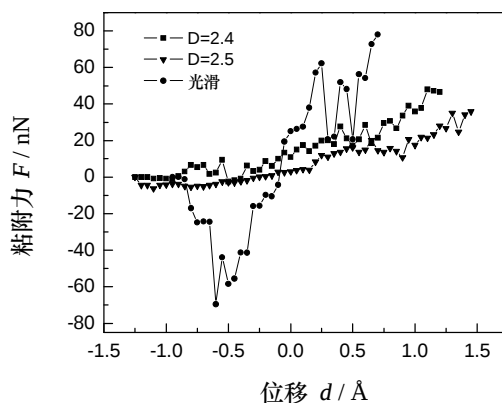


图3 趋近阶段的表面粘附力

Fig.3 Adhesive force in the approach phase

2.2 载荷一位移曲线

载荷位移曲线能有效地描述整个接触过程。但是位移原点很难通过实验的方法确定,通常把它认为是一个拟合参数。按照原子尺度上接触的判断标准来定义位移原点,当接触原子数首次不为0时,判断此时的探头高度为位移原点,此时位移 δ 为0。这种方法很大程度上受探头最低原子高度的影响,因此,曲线的高度会改变,但是,曲线的变化趋势不会受到影响^[6]。图4是不同分形维数下载荷位移曲线关系图。

由图4可知,在较小载荷情况下,分形维数不同,载荷随位移的增长速度明显不一样,这是由于表面粗糙形貌对表面粘附力有显著影响;当载荷增大到一定值,载荷位移曲线线性增长,即载荷与位移呈线性关系,且斜率相同,充分说明,此阶段与

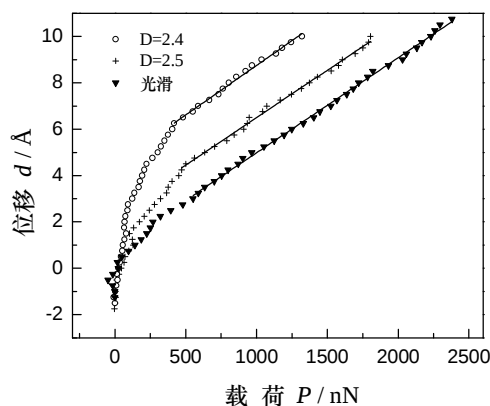


图 4 载荷位移曲线

Fig.4 Normal force versus displacement

探头表面的形貌无关。载荷从弧线到直线增长的转变,对应着金刚石基体结构的物理变化。在弧线增长部分,加载并没有使模型的结构产生太大的变形,原子基本构型也没发生太大变化,但随着载荷的增加,当载荷超过碳-碳原子之间结合力的临界值时,原子点阵出现滑移,导致晶体变形,载荷会出现陡降至一个较低水平的波动,载荷位移曲线上表现为pop-in现象^[16]随后,载荷位移曲线以相同的斜率线性增长,斜率为0.004。

斜率的大小表征了材料的硬度。硬度的计算公式为: $HV = P/\pi a^2$, 其中: P 为载荷; a 为探头与基体的接触半径; 通常认为: $a = \sqrt{2R\delta}$, R 为探头半径, δ 为位移。将模拟结果带入计算可得金刚石的硬度为 80 GPa, 与金刚石的绝对硬度 70~100 GPa 相一致。

Hertz理论是建立在Boussinesq方程并假设材料是均匀和各项同性,符合胡克定律基础上的。Hertz理论考虑了两个接触面的变形,对于光滑球形探头与光滑平面的接触模型,其接触面积可用下式计算^[18]:

$$A = \pi \left(\frac{RP}{E} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (3)$$

其中 R 为球的半径, E 为有效的弹性模量。

$$E = \frac{4}{3} \left(\frac{1-\nu_1}{E_1} + \frac{1-\nu_2}{E_2} \right) \quad (4)$$

式中 ν_1 、 E_1 、 ν_2 、 E_2 分别为两接触面材料的泊松比和弹性模量。而变形量(压入量)为:

$$d = a^2/R$$

$$\text{可得: } P = ER^{\frac{1}{2}} d^{\frac{3}{2}} \quad (5)$$

文中按照以上所述的接触模型,对模拟结果进

行数据拟合,并将拟合结果与分子动力学模拟的结果进行了对比,图 5 为拟合结果及分子动力学模拟结果。

将探头压入阶段分子动力学模拟的载荷一位移曲线与Hertz理论曲线进行对比,可以看出当间距相同时,分子动力学模拟所得的载荷大于Hertz理论计算所得的载荷,这是由于Hertz理论虽然考虑了接触面的变形,却没有考虑粘着力造成的。在小载荷情况下,由于粘附力作用的影响,载荷与位移的关系不符合Hertz理论,载荷较大时,粘附力影响作用减小,载荷与位移的关系符合Hertz理论。

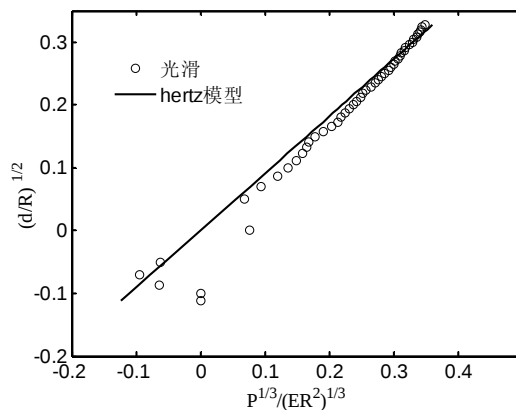


图 5 载荷位移曲线与赫兹模型曲线拟合

Fig.5 Fitting the simulation data of normal force and displacement to the Hertz model

2.3 载荷与接触面积的关系

图 6 是载荷为 1800 nN 时分形维数为 2.4 的粗糙表面探头、光滑表面探头分别与基体之间的接触原子分布。由图 6 可知,探头的表面粗糙形貌显著地影响了探头与基体之间的接触区域分布。与光滑表面探头相比,分形粗糙表面探头的接触原子分布明显地更不均匀,这种不均匀与纳米级粗糙峰的随机分布相对应。接触区域的整体形状也没呈现原子级粗糙表面具有的圆形。

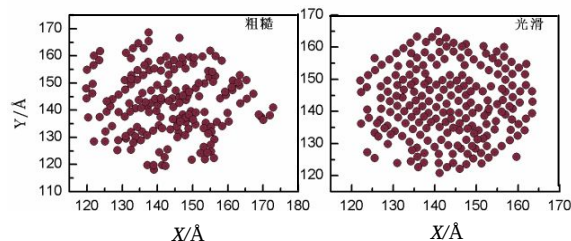


图 6 探头与基体之间的接触原子分布

Fig.6 Distribution of contact atom between tip and substrate

这种改变, 是否影响接触过程中载荷与接触面积的关系呢? 图7所示为应用分子动力学模拟得到的载荷与接触面积的关系曲线, 其中, 载荷定义为由化学键引起的粘附力与弹性恢复力的总和。结果显示, 对于光滑表面探头接触, 载荷—接触面积曲线呈线性关系, 与Hertz模型认为接触面积 $S \propto N^{2/3}$ 相分歧^[3], 这充分说明Hertz模型不再适合有粘附接触情况, 因此采用粗糙表面接触的G-W模型与模拟结果进行对比。Greenwood和Williamson^[19]提出了基于统计分析的粗糙表面和光滑表面之间弹性和弹塑性混合接触模型, 即G-W模型。研究表明, 当粗糙表面微凸体为球形, 在弹性变形的条件下, 真实接触面积和接触微凸体数目都与载荷成线性关系; 当实际粗糙表面处于塑性变形接触时, 真实接触面积同样与载荷成线性关系, 而与微凸体的分布状态无关。由图7结果显示可知, 我们的结论与G-W模型比较吻合, 即: 载荷与真实接触面积呈线性关系 $S \propto N$, 表面粗糙形貌对于接触区域分布的改变, 不会影响载荷与接触面积的线性关系。

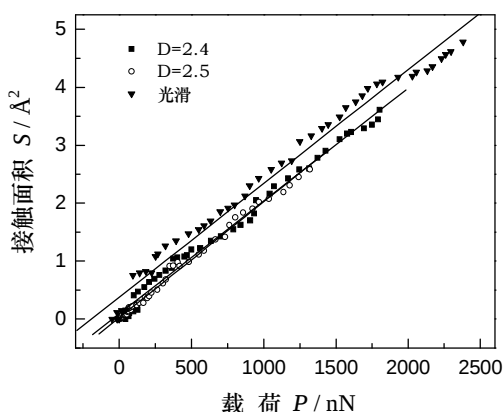


图7 接触面积与载荷关系曲线

Fig.7 Contact area versus normal force

但是, Robbins^[6]等研究后得出, 在无粘附的弹性接触中, 法向位移与载荷的关系可以被Hertz模型准确地描述。Szlufarska^[8]等认为无粘附情况下, 真实接触面积与载荷成正比; 有粘附接触情形, 作者将载荷定义为粘附力与弹性恢复力的和, 研究表明, 真实接触面积与弹性恢复力成正比, 与Hertz理论并不吻合。由于粘附力作用, 真实接触面积与载荷成亚线性关系。而Robbins和Szlufarska的研究都是针对原子级粗糙表面接触, 研究表明原子级粗糙表面的粘附力明显大于纳米级粗糙表面, 与真实的粗糙表面间的粘附力不吻合, 结果误差较大。

3 结 论

(1) 探头的表面形貌是影响趋近阶段粘附力的重要因素, 分形维数越大, 粘附力越大。

(2) 探头的表面形貌对载荷—位移曲线也有影响, 载荷较小时, 探头表面粗糙形貌显著影响载荷的增长规律, 载荷较大时, 表面形貌对载荷—位移曲线变化的影响不再显著, 载荷与位移线性增长。

(3) 探头表面的纳米级粗糙峰, 显著地影响了探头与基体之间的接触行为。但这种改变, 并不会影响接触过程中真实接触面积与法向载荷间的线性关系, 这一结论与G-W模型相吻合。

参考文献:

- [1] 刘更, 刘天祥, 温诗铸. 微纳尺度接触问题计算方法研究进展 [J]. 力学进展, 2008, 38(5): 521-544.
- [2] Bhushan B. 摩擦学导论 [M]. 葛世荣, 译. 机械工业出版社, 2006.
- [3] 魏龙, 顾伯勤, 等. 粗糙表面接触模型的研究进展 [J]. 润滑与密封, 2009, 34(7): 112-117.
- [4] 陈辉, 胡中元, 等. 粗糙表面分形特征的模拟及其表征 [J]. 机械工程学报, 2006, 42(9): 219-223.
- [5] Luan B, Robbins M O. The breakdown of continuum models for mechanical contacts [J]. Nature, 2005, 435: 929-932.
- [6] Luan B, Robbins M O. Contact of single asperities with varying adhesion: Comparing continuum mechanics to atomistic simulations [J]. Physical Review, 2006, 74(2): 1539-3755.
- [7] Chen S, Luan B, Robbins M O. Contact and friction of nano-asperities: effects of adsorbed monolayers [J/OL]. Ar-Xiv, 2009, 1-17.
- [8] Mo Y, Turner K T, I Szlufarska. Friction laws at the nanoscale. Nature [J]. 2009, 457: 1116-1119.
- [9] Szlufarska I, Chandross M, Carpick R W. Recent advances in single-asperity nanotribology [J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2008, 41: 123001.
- [10] Yan W, Komvopoulos K. Contact analysis of elastic-plastic fractal surfaces [J]. Journal of Applied Physics, 1998, 84(7): 3617- 3624.
- [11] Boraa C K, Flatera E E, et al. Multiscale roughness and modeling of MEMS interfaces [J]. Tribology Letters, 2005, 19(1): 37-48.

(下转第35页)