

文章编号 1004-924X(2008)11-2072-04

基于 AFM 的单晶铜薄膜压痕的分子动力学研究

黄跃飞, 李洪平

(江西理工大学 机电学院, 江西 赣州 341000)

摘要: 为了研究基于 AFM 的单晶铜薄膜压痕过程, 建立了单晶铜薄膜纳米压痕过程的三维分子动力学模型。采用对势 Morse 势计算试件原子之间, 试件原子和压头原子之间的相互作用。模拟了不同压入深度(0、0.361、0.722、1.083 nm)的压痕过程, 分析了压入深度对压头应力、系统势能变化的影响。结果显示, 单晶铜薄膜的纳米压痕的力学机理是非晶态产生的变形。当压入深度增加时, 系统势能变化增大(最大的压入深度对应的系统势能变化为 $-83\ 900 \sim -83\ 400$ eV), 压头受力变化增大(最大压力深度对应的受力为 $-0.3 \sim 70$ nN), 体现出强烈的尺寸效应。

关键词: 原子力显微镜; 单晶铜薄膜; 压痕; 分子动力学

中图分类号: TB43; O484.5 **文献标识码:** A

Molecular dynamics study of AFM-based nanoindentation of monocrystalline copper film

HUANG Yue-fei, LI Hong-ping

(School of Mechanical & Electrical Engineering, Jiangxi University of Science and Technology, Ganzhou 341000, China)

Abstract: In order to investigate the Atomic Force Microscope(AFM) based nanoindentation process of monocrystalline copper film, a three-dimensional molecular dynamic simulation model of nanoindentation process was established. The Morse potential was used to compute both the effect of interactions between the specimen atoms, and between specimen atoms and indenter atoms. Nanoindentation processes were conducted to evaluate the indentation depths (0, 0.361, 0.722, 1.083 nm) on the indenter stress and variations of system potential energies. The results show that the plastic deformation via amorphous transformation is caused by the mechanism of nanoindentation of monocrystalline copper film. With the increase of indentation depth, both of the variations of system potential energies (range of $-83\ 900 \sim -83\ 400$ eV at the maximum indentation depth) and the force (range of $-0.3 \sim 70$ nN at the maximum indentation depth) increase, which shows a strong size effect.

Key words: Atomic Force Microscope(AFM); monocrystalline copper thin film; indentation; molecular dynamics

收稿日期:2007-08-29; 修订日期:2008-04-22.

基金项目:江西省自然科学基金资助项目(No. 0650054)

1 引 言

随着科学技术的发展,薄膜材料在 MEMS 领域得到了广泛应用。由于薄膜材料的力学性能,如硬度、位错运动和杨氏模量等对微纳器件的可靠性和功能有显著影响,因此精确地测量薄膜材料的力学性能已经引起人们的重视^[1]。纳米压痕试验不仅能够施加微小的压痕载荷,而且具有操作方便,试件制备简单的特点,因此纳米压痕试验目前被广泛用来测定薄膜材料的力学性能^[2-3]。然而由于试验条件的限制,薄膜材料在原子尺度的力学特性无法通过试验手段进行研究,而基于分子动力学的纳米压痕,模拟通过描述原子之间相互作用的势能关系,跟踪压痕的动态过程,为我们理解纳米尺度下压痕机理提供了原子尺度的方法。

目前国内外使用分子动力学方法对纳米压痕机理开展了一系列的研究,典型的工作有,Y. Shi 等进行了二维的金属薄膜压痕的分子动力学模拟^[4],C. L. Liu 等使用分子动力学分别模拟了金刚石材料和金材料的在不同加载大小、温度和加载速率下的压痕过程^[5]。哈尔滨工业大学的霍德鸿等使用分子动力学方法对单晶铜薄膜的纳米压痕过程进行了研究,并进行了各种压痕深度下的试验,获得了压痕深度对试件力学性能的影响关系^[6]。

本文建立了纳米压痕过程的三维分子动力学模型,从原子尺度讨论了纳米压痕的变形机理,研究了不同压入深度对压痕过程中压头应力、系统能量变化的影响。

2 分子动力学方法

如图 1 所示,单晶铜薄膜纳米压痕的三维分子动力学模型由单晶铜薄膜试件和金刚石压头组成。

在当前模拟中,单晶铜薄膜试件的尺寸是 $20 \text{ a} \times 15 \text{ a} \times 20 \text{ a}$, a 为铜的晶格常量,包含 25 420 个原子。试件由 3 种原子组成,分别是牛顿层原子,恒温层原子,边界层原子。边界层原子被固定住。试件的初始温度是 293 K,每隔一定步数调整恒温层原子的速度,使恒温层的温度保持在

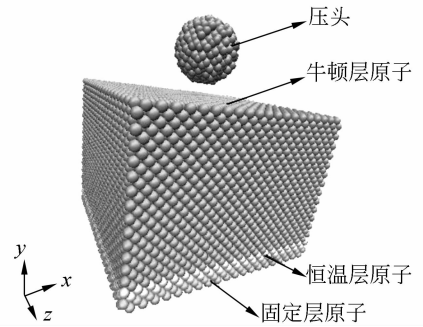


图 1 纳米压痕的三维分子动力学模型

Fig. 1 Three-dimensional MD simulation model for nanoindentation

293 K。沿模拟盒子的 X 和 Z 方向施加周期边界条件^[7]。

压头模拟为圆形金刚石压头,其半径为 1.07 nm。在本模拟中,将压头设置为刚性。

采用对势 Morse 势计算试件原子之间,试件原子和压头原子之间的相互作用。Morse 势具有形式简单、编程方便的特点,其表达式如下:

$$E_{tot} = \sum_{ij} D_0 [e^{-2\alpha(r-r_0)} - 2e^{-\alpha(r-r_0)}], \quad (1)$$

式中, D_0 , α 和 r_0 分别为结合能,弹性模量和平衡位置的原子间距。本文使用的计算参数如表 1 所示。

表 1 Morse 势参数表

Tab. 1 Morse potential parameters

材料	D_0 (eV)	r_0 (nm)	α (1/nm)
Cu-Cu	0.343	0.262 6	13.59
Cu-C	0.100	0.220 0	17.00
C-C	2.423	2.522	0.255 5

表 2 归纳了当前模拟中使用的计算参数。

表 2 纳米压痕的分子动力学模拟计算参数

Tab. 2 Computational parameters of MD simulations for nanoindentation

材料	试件:单晶铜薄膜(FCC) 压头:金刚石(刚性)
尺度	$20 \text{ a} \times 15 \text{ a} \times 20 \text{ a}$ 压头半径:1.07 nm (a 是铜的晶格常量,0.361 nm)
步长	1 fs
初始温度	293 K
压入深度	0~1.08 nm
压入速度	200 m/s

3 结果与讨论

3.1 单晶铜薄膜纳米压痕过程

图 2 所示为单晶铜薄膜的纳米压痕分子动力学仿真不同阶段的图像。其中图 2(a)是压痕过程开始前的初始状态,图 2(b)是压痕过程的某一中间状态,图 2(c)是最大压深状态,图 2(d)是压头完全卸载后的状态。

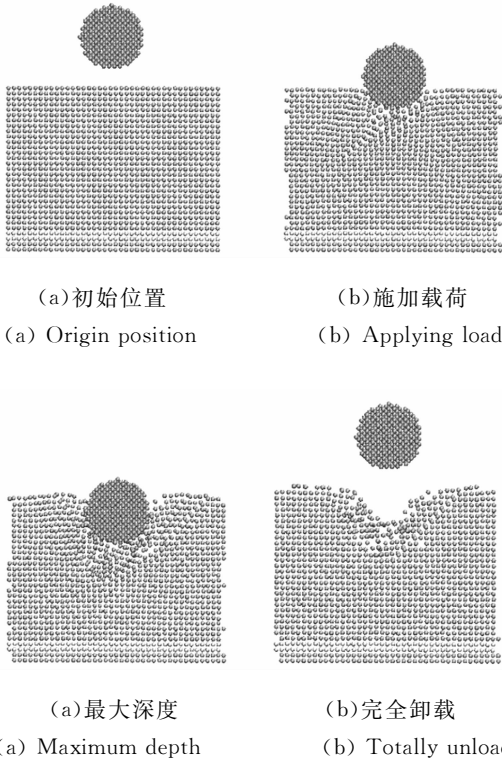


图 2 不同阶段的单晶铜纳米压痕过程

Fig. 2 Indentation process of monocrystalline copper at different stages

由图 2 所示可以看出,当压头逐渐压入试件表面时,压头附近区域的原子晶格受到挤压发生严重变形。当存储在试件变形原子中的应变能超过一个特定值时,原子的晶格重新排列以释放应变能,原子发生复杂的弹性、塑性变形。一部分试件材料在压头挤压作用下被挤出表面形成试件表面的隆起,一部分试件材料向下被压入到基体材料中。由图 2 同时可以看到,塑性变形区域局限在压头周围有限的几层原子内,其余原子基本保持原有的晶格状态。所以可以认为这种塑性变形是单晶铜的非晶态。即使在最大压深状态,也未

发现位错的产生,这与霍德鸿等得到的结论是一致的^[6]。随着压头逐渐离开试件,可以观察到试件材料有严重的塑性变形现象。

3.2 压痕深度对压痕过程的影响程度

从图 3 可以看出,在加载的初始阶段,4 种情况下受力-位移曲线随着压头压入深度的增加而逐渐上升到一个最大值。当压头开始卸载并离开试件时,受力-位移曲线都出现了急剧下降。这表明晶体开始表现为非弹性,晶体内部位错成核。比较 3 条曲线,可以发现压入深度越大,受力-位移曲线斜率越大,说明其加载越困难。压入深度越大,压头在加载过程中达到的受力值越大。

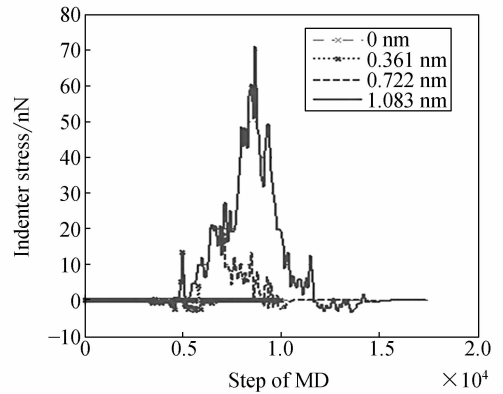


图 3 不同压入深度下压头受力-位移曲线

Fig. 3 Curve of indenter stresses and displacements in different indentation depths

同时观察不同压入深度的压痕过程中系统势能变化曲线如图 4 所示。随着加载的进行,在初始阶段,4 种模型对应的能量均为从小变大,并且其变化斜率基本是相同的。当压头开始卸载并逐

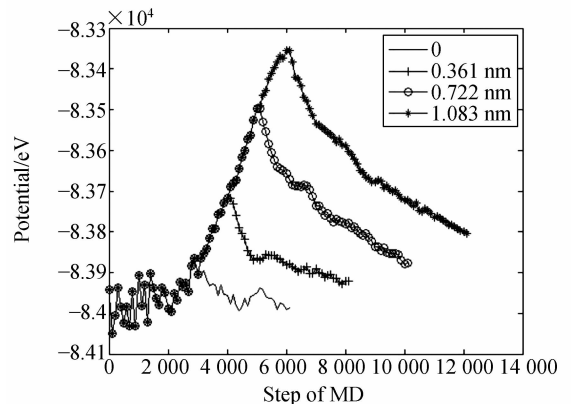


图 4 不同压入深度下系统势能变化曲线

Fig. 4 System potential energies and displacements in different indentation depths

渐离开试件时,系统能量剧烈下降并没有停止的趋势。这说明卸载过程中有复杂的弹性、塑性变形产生。对比 4 种压入深度可以发现,随着压入深度的增加,系统能量达到的最大值随之增加,这是由于压痕过程所包含的原子数目增加而导致的,但是卸载过程中系统能量的变化斜率基本相同。

4 结 论

本文使用三维分子动力学模拟方法对比了 4 种不同压入深度下单晶铜薄膜纳米压痕过程。基

于以上分析可以得到以下结论:

(1)单晶铜薄膜的纳米压痕的力学机理是非晶态产生的变形。

(2)随着压入深度的增加,压头受力随之增加,受力-位移曲线斜率增大,加载困难;随着压入深度的增加(0~1.083 nm)时,系统势能达到的最大值增加,最大压入深度对应的系统变化: -83 900~-83 400 eV,但是不同压入深度的压痕过程中系统势能的变化斜率基本相同;压头受力变化增大(最大压入深度对应的受力:-0.3~70 nN),体现出强烈的尺寸效应。

参考文献:

- [1] OLIVER W C, PHARR G M. Improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiments [J]. *Journal of Materials Research*, 1992, 7(6): 1564-1580.
- [2] 马天飞,程继健. 玻璃-金属复合材料界面应力显微压痕测试方法[J]. *光学机械*, 1988(2): 78-82.
MA T F, CHENG J J. An indentation method for measuring the interface stress in glass-metal composite [J]. *Guangxue Jixie*, 1988(2):78-82. (in Chinese)
- [3] 史立秋,张顺国,孙涛,等. AFM 的纳米硬度测试与分析[J]. *光学精密工程*, 2007, 15(5): 725-729.
SHI L Q, ZHANG SH G, SUN T, *et al.*. Test and analysis on nanohardness using an AFM-based system [J]. *Opt. Precision Eng.*, 2007, 15(5):725-729. (in Chinese)
- [4] SHI Y F, MICHAEL L F. Simulations of nanoindentation in a thin amorphous metal film[J]. *Thin Solid Films*, 2007, 515(6): 3179-3182.
- [5] LIU CH L, FANG T H, LIN J F. Atomistic simulations of hard and soft films under nanoindentation[J]. *Materials Science and Engineering. A, Structural Materials; Properties, Microstructure and Processing*, 2007, 452-453: 135-141.
- [6] 霍德鸿,梁迎春,程凯. 基于原子力显微镜和分子动力学的纳米压痕技术研究[J]. *机械工程学报*, 2004, 40(6): 39-44.
HUO D H, LIANG Y CH, CHENG K. Study on the nanoindentation via atomic force microscope and molecular dynamics [J]. *Chinese Journal of Mechanical Engineering*, 2004, 40(6):39-44. (in Chinese)
- [7] ZHANG J J, SUN T, YAN Y D. MD simulation of effect of crystal orientation and cutting direction on nanometric cutting using AFM pin tool [J]. *Chinese Journal of Chemical Physics*, 2007, 20(6): 619-624.

作者简介:黄跃飞(1974—),男,江西高安人,讲师,主要从事微纳米材料机械性能等方面的研究。E-mail: hyf@mail.jxust.cn