

# Si 纳米摩擦影响因素的 MD 研究

由孟鑫 陈少华<sup>†</sup>

(中国科学院力学研究所 LNM 室, 北京 100190)

**摘要** 本文基于 MD 对硅材料界面摩擦力的影响因素进行了研究, 主要考虑了干摩擦时相对滑移速度及湿摩擦界面水膜厚度的影响。结果表明, 与宏观摩擦不同, 相对滑移速度对微观摩擦力有重要影响, 微观摩擦力随滑移速度的增加而增加; 而当界面水膜厚度为单层水分子时, 摩擦力与干摩擦相比有所增加。

**关键词:** 纳米摩擦, MD 模拟, 滑移速度, 水膜厚度

## 一、引言

随着科学技术的不断发展与进步, 器械的微型化已经成为发展的必然趋势, 研究纳米摩擦对于提高微型器械的使用寿命和工作效率起到了至关重要的作用。纳米摩擦学是在原子分子尺度上研究物体相互接触, 以及在滑动过程中表面的微观摩擦、磨损与润滑行为及其机理<sup>[1]</sup>。由于纳米摩擦是有关原子分子尺度上的研究, 所以基于连续介质力学的宏观摩擦理论不再适用。分子动力学模拟作为有效的分析工具在研究微纳摩擦方面得到广泛的应用。尤其近年来随着计算机的发展, 计算效率、模拟空间与时间尺度的扩展使得 MD 在研究微纳摩擦中发挥不可替代的作用。林恩强<sup>[2]</sup>、Hammerberg<sup>[3]</sup>等人分别对不同的金属摩擦的摩擦力进行了研究, 发现摩擦力会随着速度的增加(10~1000m/s)呈现先增加后减小的趋势, 然而他们只解释了在高速运动下摩擦力会因金属发生融化而减少, 并没有对摩擦力会先随速度的增大而增加做出解释。本文基于 MD 模拟研究了硅块体间的摩擦性能, 分析了滑移速度及界面间水膜厚度对界面摩擦的影响。

## 二、数值模型

两个硅晶块体, X、Y、Z 方向的尺寸分别为 10.8nm、5.4nm、10.8nm, X、Y 方向设定周期性边界条件, Z 方向为自由边界; 模拟系统的原子总数为 67302 个, 如图 1 所示。硅块体内部采用的是 tersoff 势<sup>[4]</sup>, 两个硅块体之间采用的是 Lennard-Jones(L-J) 势。模型沿 Z 方向分为 3 个区域: 最外层为刚性原子层(厚度为 1 纳米); 然后是恒温层(厚度为 1 纳米), 采用 Nose-Hoover 热浴把温度控制在 300K; 最中间区域为自由原子区。采用 lammps 分子动力学程序对上述模型建模分析, 整个模拟过程分为两个阶段: 第一阶段, 施加 500MPa 的法向压力, 并弛豫; 第二阶段, 对刚体层施加水平方向的不同速度, 使

<sup>†</sup> 通讯作者: 电话: +86-10-82543960; 传真: +86 10 82543977.

电子邮件: [chenshaohua72@hotmail.com](mailto:chenshaohua72@hotmail.com) (陈少华).

本文得到国家自然科学基金(10972220、11125211、11021262)及国家重大科学研究计划(2012CB937500)的支持.

块体之间产生相对滑动。当界面间含有水膜时，水分子间采用的是SPC模型，水与硅之间的相互作用仍采用L-J势。

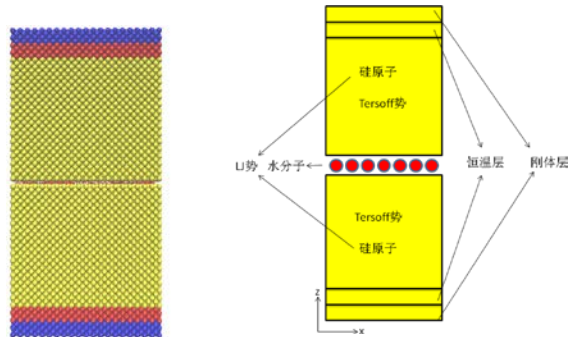


图1 模型示意图

### 三、结论与讨论

最终模拟发现，摩擦力会随着相对滑动速度的增加而呈现增加的趋势。在块体摩擦的过程中，自由原子层的温度随时间不断升高，最终趋于恒定。而相对运动速度越大，自由原子温度越高，原子运动越剧烈。根据Tomlinson模型，单位时间内每个原子克服的能垒就越多，能量消耗越大，摩擦力也就越大。当界面间含有单层水分子厚度的水膜时，计算发现此时的摩擦力比未加水分子时的摩擦力有所增加，主要由于单层水分子与固体表面间的分离压力而导致的单层水分子膜与固体表面间的强黏附作用<sup>[5]</sup>。有关多层水分子对摩擦力的影响情况还在进一步的研究当中。

本文的模拟结果对提高微型器械及微机电系统(MEMS)的使用寿命及工作效率起到了一定的指导作用。

### 参 考 文 献

- 1 温诗铸. 纳米摩擦学. 清华大学出版社, 1998年4月第1版
- 2 Lin EQ, Niu LS, Shi HJ, Duan Z.. Applied Surface Science.2012; 258: 2022-2028
- 3 Hammerberg JE, Holian BL, Germann TC, Ravelo R. Metall. Mater. Trans. A-Phys. Metall. Mater. Sci. Sep 2004;35A(9):2741-2745.
- 4 Tersoff J. Physical Review B. Apr 1988;37(12):6991-7000.5
- 5 Peng ZL, Chen SH. Applied Physics Letter, 2012, 101, 163702