

重庆大学本科学士生毕业设计（论文）

含球形孔洞单晶立方碳化硅(3C-SiC)纳米压痕的分子动力学模拟



学 生：王静

学 号：20146206

指导教师：皮文丽

助理指导教师：孙莎

专 业：工程力学

重庆大学航空航天学院

2018 年 6 月

Graduation Design(Thesis) of Chongqing University

**Multimillion-atom nanoindentation
simulation of crystalline silicon carbide with
spherical cavity**



Undergraduate: Wang Jing

Supervisor: Prof. Pi Wenli

Assistant Supervisor : Lecturer Sun Sha

Major: Engineering Mechanics

**College of Aerospace Engineering
Chongqing University**

June 2018

摘 要

目前，纳米晶体的力学性质在实验上和理论上已有广泛的研究，并且得到了许多有意义的结果。如面心立方、体心立方、金刚石结构的晶体，不同的晶体结构使其力学性质表现出了极大的差异。一般来讲，纳米晶体在实际制备的过程中，几乎不存在完美的晶体，总是含有一些缺陷，如孔洞等。而其力学性质则是与其息息相关。因此，探究纳米晶体的力学行为与孔洞的关系是很重要的课题。

本文采用经典分子动力学模拟方法研究了纳米压痕模拟中，单晶碳化硅的位错形成机制以及孔洞缺陷大小对其位错运动的影响。分子动力学模拟采用了开源软件 LAMMPS 实现，并利用 OVITO 等相关可视化工具进行了一系列后处理程序。为验证势函数的准确性，首先，利用 VASHISHTA 势参数计算了单晶碳化硅的晶格常数、结合能、熔点/分解温度、体积模量与弹性模量等，计算数值与实验数值符合很好，这说明 VASHISHTA 势参数可以很好地描述单晶碳化硅中的材料力学行为。

对压痕的详细分析表明：载荷位移曲线中的第一个较小的不连续性突然下降与位错形核有关。而之后位移沿着不同的机制向外增殖扩散，形成位错环。位错的形成导致了加工硬化效应，从而使得薄膜的强度增加。而位错的形成与孔洞的大小存在关联，总体而言，孔洞越大，单晶碳化硅所能承载的外载荷越小。

这些研究结果为其他纳米晶体的力学行为和形变机制的研究提供参考，而且对于含有空洞的碳化硅纳米晶体材料的实际应用提供理论指导。

关键词：纳米晶体；分子动力学；单晶碳化硅；力学行为；位错

ABSTRACT

The mechanical properties of nanocrystals have been extensively studied experimentally and theoretically, and many significant results have been obtained. Such as face-centered cubic, body-centered cubic, diamond cubic crystals, the different crystal structure makes its mechanical properties show a great difference. In general, during the actual preparation of nanocrystals, there are almost no perfect crystals and always contain some defects. Its mechanical properties are closely related to it. Therefore, it is an important issue to explore the relationship between the mechanical behavior of nanocrystals and spherical pores.

In this paper, the classical molecular dynamics simulation method is used to study the mechanism of dislocation formation of single-crystal silicon carbide in nanoindentation simulation and the influence of the size of pore defects on its dislocations. Molecular dynamics simulation applied LAMMPS, and use OVITO and other related visual tools for a series of post-processing procedures. Before the simulation work was started, the lattice constant, binding energy, melting point/decomposition temperature, bulk modulus and elastic modulus of silicon carbide were calculated using the VASHISHTA potential parameters of monocrystalline silicon carbide. The calculated values agree well with experimental values. This shows that the use of VASHISHTA potential parameters in LAMMPS can well describe the interatomic interaction forces in monocrystalline silicon carbide.

A detailed analysis of the indentation shows that the sudden drop in the first small discontinuity in the load-displacement curve is related to dislocation nucleation. Afterwards, the displacement propagates and spreads out along different mechanisms, even forming dislocation loops. The formation of dislocations results in a work hardening effect, which increases the strength of the film. The formation of dislocations is related to the size of the holes. Overall, the larger the holes, the smaller the load value that can be carried by the single crystal silicon carbide.

These findings provide a conductance for the study of the mechanical behavior and deformation mechanisms of other nanocrystals, and Provide theoretical guidance for practical applications of hollow silicon carbide nanocrystalline materials.

Keywords: Nanocrystalline, Molecular dynamics, single crystal silicon carbide, mechanical behavior, dislocations

目 录

中文摘要..... I

ABSTRACT II

1 绪论..... 1

1.1 纳米材料简介..... 1

1.2 碳化硅晶体..... 2

1.3 薄膜..... 3

1.4 单晶碳化硅中的位错..... 4

1.4.1Burgers 回路与 Burgers 矢量 4

1.4.2 刃位错 5

1.4.3 螺位错 6

1.4.4 混合位错 7

1.5 本文的主要内容..... 7

2 分子动力学研究方法..... 9

2.1 纳米压痕技术..... 9

2.2 分子动力学模拟..... 9

2.2.1 分子动力学的基本原理 9

2.2.2 输入文件的编写 12

3 结果及讨论..... 16

3.1 载荷-位移曲线 16

3.1.1 弹性形变 17

3.1.2: 第一个载荷突然下降事件..... 18

3.1.2 孔洞半径为 10Å 的碳化硅薄膜载荷位移曲线产生变化 22

3.1.3 压头准备撤回 23

3.2 讨论总结..... 26

4 结论与展望..... 28

4.1 结论..... 28

4.2 展望..... 28

致谢..... 30

参考文献..... 31

附录 A: 不含孔洞的单晶立方碳化硅 LAMMPS 程序的输入文件	33
附录 B: 孔洞半径为 10Å 的单晶立方碳化硅 LAMMPS 程序的输入文件 .	37
附录 C: 孔洞半径为 20Å 的单晶立方碳化硅 LAMMPS 程序的输入文件 .	42

1 绪论

1.1 纳米材料简介

纳米技术(Nanotechnology)是一门应用科学,其目的在于研究于纳米规模时,物质和设备的设计方法、组成、特性以及应用。纳米技术与众多不同的科学领域相关,在包括物理,生物,化学等多门学科中都有纳米技术的身影。

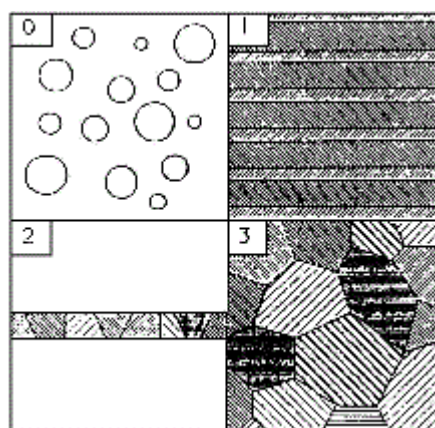


图 1.1 纳米晶体材料结构示意图 0: 零维; 1: 一维; 2: 二维; 3: 三维^[1]

纳米材料是指在三维空间中至少有一维处于纳米尺寸(0.1-100 nm)或由它们作为基本单元构成的材料。广义上,纳米技术包括多用来制造尺寸在 100 纳米以下的结构的技术,包括那些用来制作纳米线的,包括那些用在半导体制造工业上的技术,如深紫外线光刻、电子束光刻、聚焦粒子束光刻、纳米印刷光刻、原子层沉积和化学气相法,更进一步还包括分子自组装技术^[1]。如今,要研究这样一个尺度的材料,有两种方法:自上而下式的(top down),采用宏观到亚微观,比如研磨,剥离,刻蚀等方法;自下而上式的(bottom up),采用微观到亚微观,比如化学合成,聚合,自组装等等。

随着被加工材料粒径的减小,将出现一些独特的性质。这其中包括统计力学效应和量子力学效应。并且,同宏观系统相比,许多物理性质会改变。例如量子尺寸效应、小尺寸效应、表面效应、宏观量子隧道效应等基本特性。同时,由于这些特性的存在,纳米级别的材料会显示出截然不同的性质,这样可以使一些独特的应用成为可能。宏观尺度的材料与微观尺度的材料上的性质如此多样化,使得纳米科技的多样化也成了可能。

但是这些特性使得纳米材料与块状结构材料有着截然不同的力学特性，而且根据经典连续介质力学建立起的分析理论将不再直接适用于纳米材料的分析，应当从跨原子-连续介质的多尺度上进行分析。

1.2 碳化硅晶体

纳米单晶碳化硅（SiC）材料由于拥有高温稳定性、高电场击穿强度、高能带隙、热导率高、介电常数低和抗辐射能力强等特性，在各个领域中拥有极大的研究潜能，目前广泛应用于微机电系统（MEMS）、高能半导体器件等领域。

如今，硅已经成为了现代通讯业和电子产业中不可或缺的部分。包括电子芯片，半导体管，硅的优秀性能为它带来了足够多的欢迎与喜爱。

碳化硅(SiC)拥有多种不同晶体结构，T. Daulton 等人曾引用过 250 多种晶型，每种晶型都有其自己的原子堆积顺序，包括立方结构、六方结构以及菱形结构等^[2]。其中每种结构的碳原子数目都与硅原子数目相等。然而，实际运用广泛的只有三种结构：六方晶体的（4H-SiC 和 6H-SiC），立方晶体的（3C-SiC）。

立方碳化硅(3C-SiC)相较其他晶型 SiC 更易制取，其更高的表面积也使得人们对其性能抱有更多的关注。

目前已有一些学者对单晶立方碳化硅晶体做出了一些研究。H.-P. Chen 等^[3]已经做了对单晶立方碳化硅(3C-SiC)纳米压痕的分子动力学模拟，均产生了 p-h 曲线的不连续处。J.L. Demenet 等讨论了两种单晶碳化硅 4H-SiC 与 3C-SiC 在脆性状态下的位错^[4]。文章运用了纳米压痕法，3C-SiC 位错最终也同样发生于{111}面。而对于 4H-SiC 则是底面。M. Mishra 等讨论了在纳米层级上摩擦与位错机制的关系^[5]。在低位错密度时，摩擦所产生的能量主要使得单晶碳化硅产生塑性变形。而在高位错密度时，则提出了一套模型，用于描述位错与摩擦之间的关系。X. Zhao 等研究了单晶立方碳化硅(3C-SiC)在室温下的塑性变形以及产生的裂纹，采用了纳米压痕法^[6]。在逐渐施加载荷时，前期主要发生的是弹性变形。在约 60nm 的压痕时，p-h 曲线产生了不连续点。超过 60nm 压痕时，发生的是塑性变形。然而，在压痕过程中仍存在许多关于塑性流动的原子细节的开放性问题。例如，Ning 和 Pirouz 研究了压痕变形立方 SiC 中部分位错的核心性质，发现 Si 核和 C 核存在形态差异。Kaiser 等人也研究了立方 SiC 中部分位错和堆垛层错的行为，他们开发了一种确定位错可能类型的柏氏矢量的程序。然而，塑性流动开始的临界分解剪切应力尚未确定。另一个关键的问题是有关在卸载压头之后在表面上形成的堆积图案。例如，

Smith 等人观察到由位错环产生的铁原子的堆积，该位错环在倾斜方向上传播并且在同一族的平面之间发生交叉滑移。Walsh 等人在纳米压痕过程中观察到氮化硅图案中的无定形堆积。Wang 等则观察到了金属中的各向异性堆积模式，陶瓷中的类似效应也十分有意思。

1.3 薄膜

薄膜材料是指厚度介于单个原子和几毫米之间的薄金属层或有机层。其中一层材料是通过化学或物理方法在另一层基体材料上制备，以实现特定的功能，如改善断裂韧性、增加塑性、提高使用寿命和美观度等。这种膜也称为功能膜。功能薄膜是一类具有广阔应用前景的新型材料。它们主要利用粒子的光学、电学和磁学性质，使新材料具有基质所不具备的特殊功能。

电子半导体功能器件和光学薄膜是薄膜技术的主要应用。表面技术的一个众所周知的应用是家中用的镜子：为了形成反射表面，镜子的背面通常镀有一层金属。镀银操作被广泛应用于反射镜的制造中，并且常常是一纳米以下的极薄涂层。对于反射镜而言是一种非常合适的材料。

由不同结构的金属薄层组成的周期排列的薄膜将形成所谓的超晶格结构。在超晶格结构中，电子的运动被限制在二维空间中，不能在三维空间中移动，因此产生量子阱效应。薄膜技术有着广泛的应用。长期以来，铁磁薄膜已广泛应用于计算机存储设备、医药、薄膜电池、染料敏化太阳能电池等领域。陶瓷膜也有广泛的应用范围。由于陶瓷材料的硬度相对较高，这种膜可用于保护衬底免受腐蚀氧化和磨损。陶瓷膜对工具具有特别重要的作用，使用陶瓷膜的工具的使用寿命可以有效地提高几个数量级。

与块体材料相比，薄膜材料具有相对较高的比表面积和相对较小的配位数。因为原子之间的化学键在表面突然断裂，所以它们的表面原子比内部原子具有更高的表面势能与表面应力。制备薄膜的方法有很多种。将薄金属层沉积到基底或先前获得的薄层上的技术称为表面沉积。利用分子束外延技术可以获得单个原子层结构。

薄膜的分类方式有多种。通常，有三种分类方式：按薄膜成型所用原料分类、按薄膜用途分类和按薄膜的成型方法分类。

由于具有独特的微观结构以及物理和化学性能，薄膜材料已经进入了各个领域。例如薄膜光学，薄膜光学是光学的一个分支，处理各种很薄的光学材料（薄膜）。

和薄膜光学有关材料，其厚度需要在可见光波长的等级内（约 500 nm）。此厚度范围的薄膜因为光的干涉，以及薄膜、空间及物质间的折射率差异，可以有显著的折射特性，这些效应称为薄膜干涉，会影响光学材料折射及传输光的特性，像在肥皂泡及水上的油渍就会看到这类的情形。目前许多国家都把薄膜材料的研究设为大型研究项目。

1.4 单晶碳化硅中的位错

位错，在材料科学中，指晶体材料的一种内部微观缺陷，即原子的局部不规则排列（晶体学缺陷）。从几何角度看，位错属于一种线缺陷，可视为晶体中已滑移部分与未滑移部分的分界线。位错对于材料的力学性能有很大的影响。

在理想晶体中，不存在位错。但实际生活中由于压力，热力学效应，或是结晶现象，难免会在晶体中形成位错。

位错的生成可能会导致应变硬化现象。应变硬化现象是指，在实际生活中，随着晶体的逐渐变形，晶体对塑性变形的抵抗性也越来越强。而要使晶体产生塑性变形，又必须不断施加外应力。应变硬化的现象即是随着晶体变形量的增加，其抵抗变形的能力也同时增加的一种现象。应变硬化可以通过单向拉伸试验，通过绘制应力应变曲线和拉伸曲线来描述。材料的屈服极限与硬化速率也可以用于定量描述晶体的硬化行为。随着材料的塑性变形，晶体的强度性能会提高，但其塑性性能会降低。对于面心立方晶体，它的屈服极限相对较低，而其塑性较好，延伸率往往要高于其它晶体，不太容易发生脆性解理断裂。而对于体心立方晶体，它会出现一个明确的屈服点，即弹塑性变形的分界点，而且体心立方晶体同时也会生成一种现象。当它受到的外应力维持在恒定的一个值，它仍然会继续变形。这叫做塑性流动现象。当同时存在明显屈服点和塑性流动现象时，可认为体心立方晶体存在明显屈服点现象。这与材料的纯度和实验温度相关。

理想位错主要有两种形式：刃位错和螺旋位错。混合位错兼有前面两者的特征。

1.4.1 Burgers 回路与 Burgers 矢量

Burgers 回路是在有缺陷的晶体中围绕缺陷区将原子逐个连接而成的封闭回路。根据完整晶体的回路是否封闭可判断出此回路中包含的是缺陷，或者位错。当完整晶体的回路不封闭时，则其包含的是位错。为了使回路封闭，可添加一个向量 \mathbf{b} ，如图 1.2。

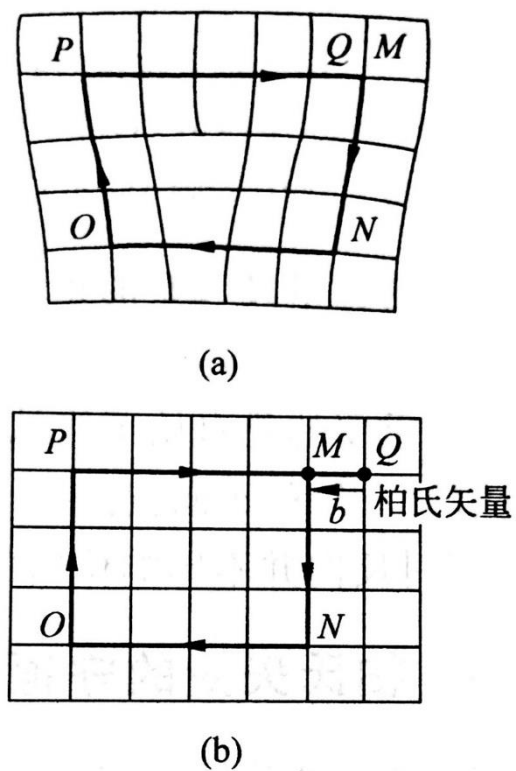


图 1.2 Burgers 矢量的图示

向量 b 便称为位错的 Burgers 矢量。Burgers 矢量也因此是有缺陷的晶体发生了局部滑移或局部位移的结果。因此，对于晶胞结构相同的晶体，其 Burgers 矢量也是相同的。对于面心立方晶体，

$$b = \frac{a}{2} \langle 110 \rangle, \quad (1.1)$$

对于体心立方晶体，

$$b = \frac{a}{2} \langle 111 \rangle, \quad (1.2)$$

对于密排六方晶体，

$$b = \frac{a}{2} \langle 11\bar{2}0 \rangle. \quad (1.3)$$

1.4.2 刃位错

如果晶体平面突然终止于晶体内的某一条线，这种不规则的排列称为刃型位错。边缘位错附近的原子平面将在位错线的方向上变形，从而发生错位。刃型位错可以由两个量来确定：第一个是位错线，它是多余半原子面终结的那一条直线；第二个是 Burgers 向量，它描述了由位错引起的原子平面的畸变大小和方向。对于边缘位错，Burgers 向量的方向垂直于位错线的方向。

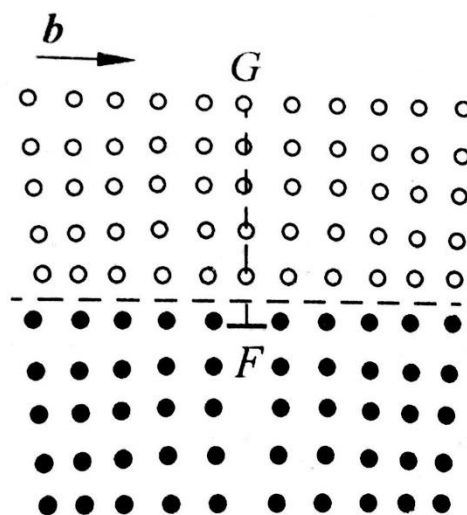


图 1.3 刃位错的图示

由图 1.3 中可以看到，刃型位错的结构就是其存在一个对称的半原子面。同时，它也可以被看作是在完整晶体中插入一个半原子面形成的。

根据附加半原子面的位置，刃位错还可以继续分为正型刃位错与负型刃位错。前者是附加半原子面位于滑移面上方，负型刃位错则位于下方。同时，正型刃位错与负型刃位错没有本质上的差别，二者只要相互各旋转 180° 就形成了不同型的位错。

1.4.3 螺位错

螺型位错与刃型位错，两者的成型原因是不同的。刃型位错可视为插入一个半原子面，而螺型位错则是晶体局部的滑移。相交于刃型位错新产生的半原子面，螺型位错则是原子平面的上升。原子平面围绕轴线螺旋上升。轴线处所产生的位错就是螺型位错。同时，在螺型位错处，不再是原来的平行晶面了，而是沿着位错轴螺旋上升的螺旋晶面。

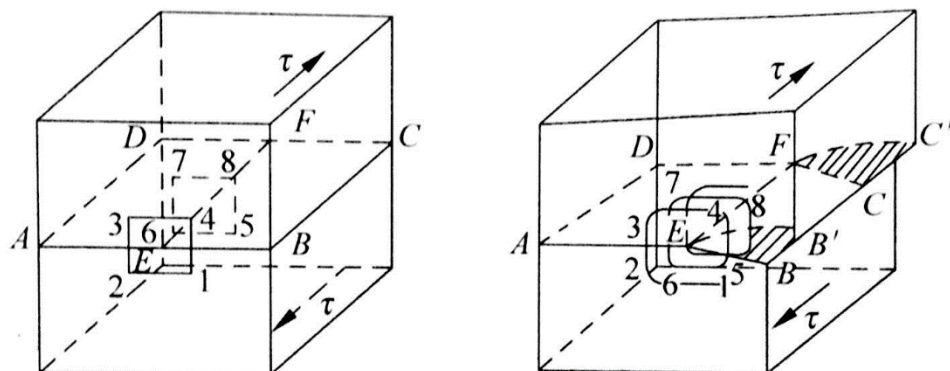


图 1.4 螺旋位错的图示

1.4.4 混合位错

如前所述，刃位错的 Burgers 矢量垂直于位错线的方向，螺位错的 Burgers 矢量则平行于其位错线方向。但正如同实际生活中的完美晶体近乎不存在之外，实际中不可能只存在刃型位错或者螺型位错，通常是以二者并存的形态出现。二者混合起来的位错便是混合位错。混合位错的 Burgers 矢量不会垂直于位错线也不会和位错线平行，而是存在一个角度。但它的 Burgers 矢量仍然可被分解为平行于位错线的矢量与垂直于位错线的矢量。因此，可将混合位错的视作刃型位错和螺型位错的组合。在对混合位错的处理时也可以这么做。

1.5 本文的主要内容

本文将采用经典分子动力学模拟方法研究了纳米压痕模拟实验中单晶碳化硅的位错形成机制以及孔洞缺陷大小对其位错的影响。分子动力学模拟采用了 LAMMPS，并利用 OVITO 等相关可视化工具进行了一系列后处理程序。

分子动力学研究晶体位错需要一些相关理论，所以具体章节安排如下：

第一章绪言，首先介绍纳米材料的一些性质，研究碳化硅晶体的实际意义，对碳化硅晶体已有的研究现状，薄膜材料的介绍以及位错理论，最后介绍本文的研究工作。

第二章，主要介绍分子动力学的研究方法，包括对纳米压痕模拟技术的介绍，

分子动力学的基础理论以及本文将要构建的模拟系统的参数设定。

第三章，运用分子动力学方法研究孔洞尺寸对单晶碳化硅薄膜的力学性能的影响。对其研究表明，孔洞对力学性能的影响主要在于塑性阶段，对位错的生成产生了影响。孔洞的存在会导致材料抵抗变形的能力降低。

第四章，总结全文，提出进一步的可能研究方向。

附录附上 LAMMPS 的输入文件。

本文的研究目的在于为其他纳米晶体的力学行为和形变机制的研究提供参考，而且对于含有空洞的碳化硅纳米晶体材料的实际应用提供理论指导。

2 分子动力学研究方法

2.1 纳米压痕技术

为获得纳米材料的力学性质，有必要去探寻一种新的技术。纳米压痕技术应需求而生，成为了当下对纳米材料力学性质测定的最普遍性的方法。纳米压痕技术，也称深度敏感压痕技术，是最简单的测试材料力学性质的方法之一。传统的纳米压痕技术是采用具有特定形状的金金刚石或者硬质合金压头，对材料表面进行压入，利用传感器记录连续压入载荷和压入深度，观测样品材料压痕区域的微观样貌和组织特性，根据相关的弹性接触理论得出材料的力学参数，包括材料的变形损失情况和组织结构的变化特性。

1992 年，Oliver W C 和 Pharr G M 提出了一种通过分析压痕过程载荷-位移曲线的微纳米压痕理论，通过将最大载荷处的位移和压针常数相结合建立接触面基函数，是目前纳米压入技术中最常用的分析方法^[7]。

但此种方法无法获取材料的动态变化，因此，通过借助分子动力学（MD）仿真技术进行分子划痕技术的模拟是有着重大意义的。随着计算机性能的发展，解释纳米压痕过程中原子尺度形变行为以及形变机理可利用高性能计算机模拟压痕。

2.2 分子动力学模拟

2.2.1 分子动力学的基本原理

分子动力学是一种分子模拟方法。这种方法主要依靠计算机模拟分子和原子系统的运动。它是一种多体仿真方法。通过模拟分子和原子在一定时间内的运动，考察了系统随时间的动态行为。一般来说，分子和原子的轨迹是通过数值求解牛顿运动方程来获得的，而势能（或笛卡尔坐标的一阶偏导数，即力）通常可以由分子间相互作用势能函数、分子力学力场以及全始计算给出。

分子动力学最早在 20 世纪 50 年代由物理学家 Alder 和 Wainght 提出，并于 1957 到 1959 提出基于刚球势的分子动力学法。后续还有很多方法，包括恒压下的动力学方法，第一原理分子动力学方法等。这些方法方法促进了分子动力学模拟综

合体系的发展和完善。目前，分子动力学方法已成为一种重要的研究方法，被广泛应用于物理、材料、力学、生物等各个领域。

分子模拟是一类通过计算机模拟来研究分子或分子体系结构与性质的重要研究方法，包括分子力学（MM）、蒙特卡罗（MC）模拟、分子动力学（MD）模拟等，其中本文将会使用的分子动力学是通过数值求解分子体系经典力学运动方程的方法得到体系的相轨迹，并统计体系的结构特征或者性质^[8]。经典 MD 模拟中，分子的运动由牛顿运动方程决定，

$$m_i d^2 r_i / dt^2 = -\nabla_i V(r_1 r_2 \dots, r_N) \quad (2.1)$$

其中 m_i , r_i 分别为第 i 个原子的质量和位置， $\nabla_i = -\partial/\partial r_i$, $V(r_1 r_2 \dots, r_N)$ 为体系所处的势。

① 模拟系统势函数的选取

分子动力学需要准确的描述粒子之间的相互作用与多体系统的状态。经典 MD 模拟结果的可靠性非常依赖分子立场模型的正确性。因此，用于描述体系中个例子间相互作用的势函数的选取十分重要。

势函数的选取与分子或原子间选取的模型筑有极大的关联，常用的势函数有 Lennard-Jones 势函数、Morse 势函数、Born-Huggins-Meyer 势函数、EAM 势函数、 Tersoff 势函数等。P. Vashishta 等提出了一种新的势函数，其包含两体势与三体势的共同作用^[8]。在二体势中描述了原子间排斥力、库伦势、点电荷与偶极子的相互作用势以及偶极子间的相互作用势。而在三体势中描述了 Si-C-Si 与 C-Si-C 之间的原子相互作用。本文选取了 Vashishta 势作为单晶 3C-SiC 的原子间相互作用势函数。其包括了二体势和三体势：

$$V = \sum_{i<j} V_{ij}^{(2)}(r_{ij}) + \sum_{i,j<k} V_{jik}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}) \quad (2.2)$$

其中两体势包括空间斥力，原子间电荷转移以及电荷-偶极子和范德华相互作用的影响：

$$V_{ij}^{(2)}(r_{ij}) = \frac{H_{ij}}{r_{ij}^{n_{ij}}} + \frac{Z_i Z_j}{r_{ij}} e^{-r_{ij}/a} - \frac{D_{ij}}{r_{ij}^4} e^{-r_{ij}/b} - \frac{W_{ij}}{r_{ij}^6} \quad (2.3)$$

等式(2)中， H_{ij} 和 n_{ij} 是空间斥力的参数， Z_i 是库仑相互作用的有效原子电荷， a 和 b 是筛选参数， D_{ij} 是电荷-偶极子相互作用的强度， W_{ij} 是偶极子-偶极子相互作用的参数。三体势通过键的弯曲和键的伸缩产生共价力：

$$V_{jik}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}) = B_{ijk} \exp\left(\frac{\gamma}{r_{ij} - r_0} + \frac{\gamma}{r_{ik} - r_0}\right) \times \frac{(\cos \theta_{jik} - \cos \bar{\theta}_{jik})^2}{1 + C(\cos \theta_{jik} - \cos \bar{\theta}_{jik})^2} \times \Theta(r_0 - r_{ij}) \Theta(r_0 - r_{ik}) \quad (2.4)$$

B_{ijk} 是相互作用力， $\Theta(x)$ 是阶梯函数， γ ， r_0 ， $\bar{\theta}_{jik}$ 是常数。表一展示了用该相互作用势函数和相应的实验值计算的一些物理参数。SiC 相互作用势函数的参数已由 Vashishta 等人给出。

已经通过利用 LAMMPS 程序计算出立方碳化硅的物理性质。在表 1 中给出，可见 MD 值与实验值相近，足以证明 Vashishta 势函数的分子模型是合适的。

表 1.3C-SiC 的选定物理性质的计算值和实验值。

	实验	MD
晶格常数(Å)	4.3596	4.5381
结合能(eV)	6.34	6.3401
熔点/分解温度(K)	3 103±40	3 250±50
体积模量(GPa)	225-270	225.2
弹性模量(GPa)		
C_{11}	390	390.0
C_{12}	142	142.6
C_{13}	142	142.6

②模拟系统的边界条件选取

由于尺度的不同，实际中即使是一小块样品，其粒子数目仍然是非常庞大的。过于庞大的粒子数目使得在相同的时间内，难以模拟体系中粒子的相互作用和运动状态。因此有必要去减少模拟粒子的数目，通过少量粒子的状态来推测宏观体系的性质。由于粒子数目的减少，原胞边缘的粒子数目变多，受力状态也不同于内部粒子。因此，需要提出合适的边界条件使得其状态符合实际情况。

边界条件可分为周期性边界条件和非周期性边界条件。在元胞中，如果一个原子在模拟中离开元胞，可假设一个它的影像原子从反方向进入这个元胞。对于周期性边界条件，采用后可以消除引入原胞引起的表面效应，从而使得可被视作是结构不断重复的无穷大体，从而构建体积增大，更类似于宏观系统。图 2.1 为分子动力学周期性边界的图示。而对于非周期性边界条件，则是在一些本身含有界面的系统中采用，例如液滴；或者是非均匀系统或非平衡系统。非周期性边界条件也被称为孤立性的边界条件。系统中的原子被真空环境所包围，粒子间存在着相互作用，孤立与外界环境，与外界环境不产生力的相互作用。由于不存在边界条件，粒子存在

逃离模型的情况，产生了虚假的表面效应。此时需要采用非周期性边界条件。

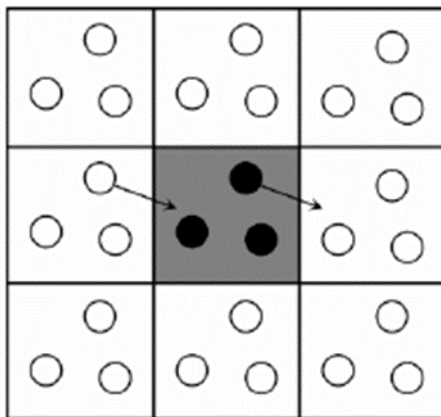


图 2.1 周期性边界示意图。

通常，对于大块体而言，采用三维周期性边界条件，即 XYZ 三个方向上均采用周期性边界条件；对于薄膜而言，则采用二维周期性边界条件，即 XY 两个方向上采用周期性边界条件，而 Z 方向上则采用自由边界条件。本文研究对象是薄膜，因此选用二维周期性边界条件。

2.2.2 输入文件的编写

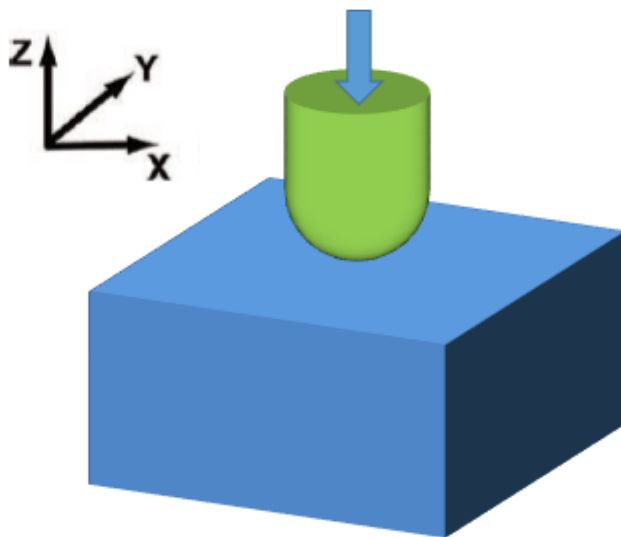


图 2.2 压头/薄膜的示意图。三个薄膜的尺寸均为 $267 \times 247 \times 166 \text{ \AA}$ ，包括 1 056 000 个原子。压头沿着 Z 方向压入。三个主轴方向分别为 $x[\bar{1}\bar{1}2]$, $y[1\bar{1}0]$, $z[111]$ 。

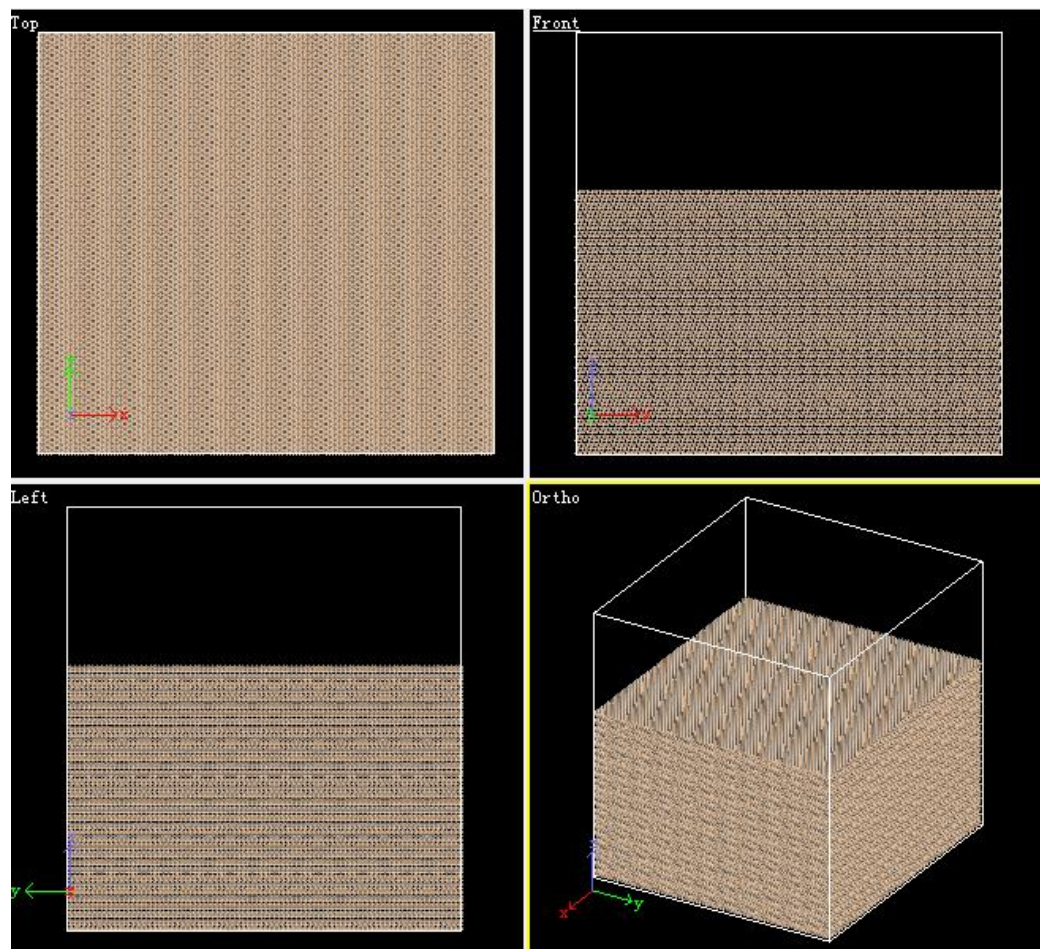
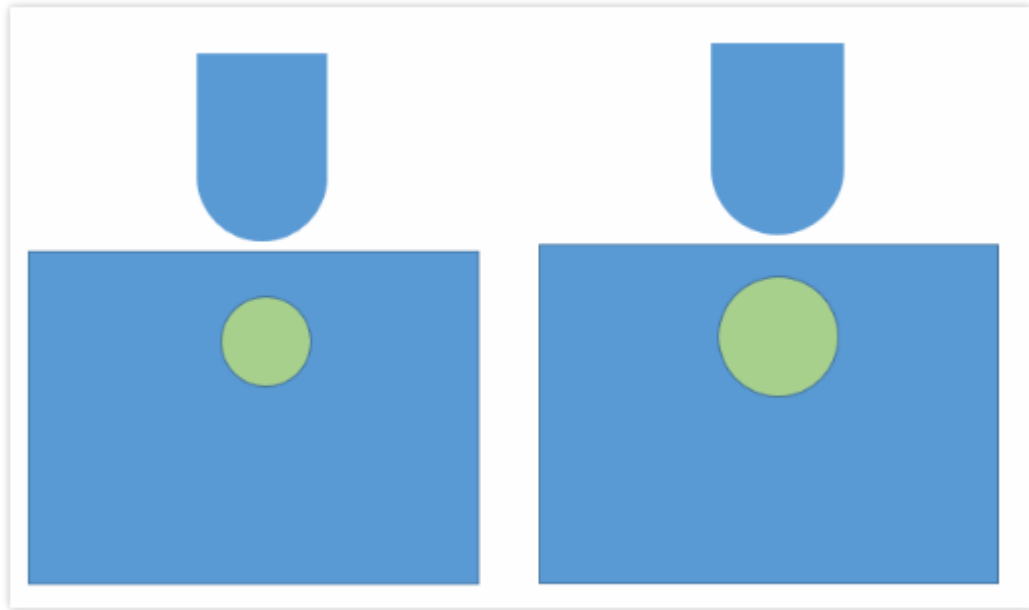


图 2.3 OVITO 中薄膜的示意图

利用 LAMMPS 建立具有闪锌矿结构，晶格常数为 4.5381\AA 的立方 3C-SiC 块体结构。由于闪锌矿结构中的主要位错发生在 $\{111\}$ 面上，建立晶向为 (111) 的纳米压痕的三个模拟盒子。三个主轴方向分别为 $x[\bar{1}\bar{1}2]$, $y[1\bar{1}0]$, $z[111]$ 。薄膜的尺寸为 $267 \times 247 \times 166\text{\AA}$ ，包括 1 056 000 个原子。在 x 和 y 方向上应用周期性边界条件，并且底部 10\AA 高度中的原子位置是固定的。初始 3C-SiC 块体模型如图 2.3 所示。

另外，考虑不同孔洞大小对材料性质的影响，分别在分别在距离底部中心 124.5\AA 处移除部分原子来形成不同大小的原子孔洞。为了研究空洞大小对晶体力学行为的影响，分别挖除半径为 10\AA 与 20\AA 的原子区域，这些区域包括 452 和 3230 个原子。如图 2.4 所示。在所有的模拟中，使用了球形刚体压头。其半径为 40\AA 。压头的初始位置为 208.1\AA ，并以每步 0.0004\AA 的速度匀速下降。模拟采用微正则系统(NVE)，即保持系统原子数 N 、体积 V 、能量 E 不变。模拟系统的初始温度为 0.1K 。为了模拟薄膜的性质，在 X 和 Y 方向采用周期性边界条件， Z 方向上由于有压头作用，采取非周期性边界条件。模拟时间步长选取 1fs ，每隔 100fs 输出数据。



出数据。

图 2.4 含有孔洞的单晶碳化硅薄膜示意图。在距离底部中心 124.5\AA 处移除部分原子来形成不同大小的原子空洞。分别挖除半径为 10\AA 与 20\AA 的原子区域，这些区域包括 452 和 3230 个原子。

在 Sandia 国家实验室提供的 MD 代码 LAMMPS 中对立方 3C-SiC 进行建模和计算，来实现研究体系随时间变化的动力学模拟过程。并利用 OVITO 软件对体系进行可视化分析。

为了达成上述目标，首先要在输入文件中定义原子的类型以及边界条件。将 unit 类型定义为金属，边界条件则为在 X 和 Y 方向上应用周期性边界条件， Z 方向上应用非周期性边界条件。接下来定义参数，将之前 MD 计算出来的晶格常数带入。建立模拟盒子，由于可能会产生位错堆积现象以及压头的存在，模拟盒子在 Z 方向上的尺寸将大于晶体，为 266\AA ， XY 方向上则是 $267 \times 247\text{\AA}$ 。接下来定义晶格类型，一个闪锌矿结构的晶格可视作两个面心立方晶格组合而成。同时定义了晶

格的主向。定义了区域并在其中按照晶格类型填充原子，同时定义了球形孔洞的区域，在两个含有孔洞的单晶碳化硅薄膜模拟中将要删除这些孔洞区域的原子，以达到含有孔洞的效果。接下来定义原子的质量以及势函数的选取。势函数将会选取碳化硅的 VASHISHTA 势函数。之后输出记录原子编号，属性以及位置的 data 文件。固定底部的 10 Å 厚度原子，之后定义需要计算原子的能量以及应力值，这些数值会随着模拟状态的改变而自动计算。最后进行弛豫，保证原子处于能量最低位置。

至此，模型的建立已经完成，接下来继续利用 LAMMPS 软件进行压痕模拟并且计算输出需要的数值。固定底部原子，设置整体为微正则系统(NVE)，保证模型的初始温度与最终温度均为 0.1K。开始施加载荷，定义半径为 40Å 的球形压头，以每步 0.4Å 的速度沿 Z 方向下降。接下来需要输出数值以用于后部分的分析。利用 THERMO 命令输出体系的温度，步数，受压模型的尺寸，三个方向上的压力以及压头所受的载荷数值。利用 DUMP 命令输出每隔一定步数的模型每个原子的数据，包括原子的质量，类型，坐标轴上的位置，XYZ 方向上的应力以及能量。此时以及获取压头加载时的数值。运行一定步数之后，取消施加载荷命令，以获取卸载部分的数值。继续使用 THERMO 与 DUMP 命令获取数值。等到压头回复原位时，模拟结束。

3 结果及讨论

由于力的相互作用，压头下方所有原子相互作用力在 z 方向上之和即为压头的载荷。整个模拟过程可视作三部分：压头接近薄膜、压头压入薄膜、压头升高离开薄膜。在压头压入薄膜阶段，此时压头对薄膜有作用力，并且随着压痕深度的增加，载荷也随之增加，直到达到预定深度。

以不含孔洞的 3C-SiC 薄膜为例。在此阶段，位错开始产生于压头下方的薄膜上。随着压头持续施加载荷，位错环的数目和长度不断增加，不断向外扩张。同时，薄膜上方受压头作用的边缘存在少量原子的向外扩张，表明薄膜在压头的挤压下不断产生塑性变形。当压头达到预定深度时，载荷达到最大值，此时的位错环的长度和数目也随着之前的不断扩张达到了最大值。接下来压头开始升高，虽然压头并没有回复到初始位置，但压头仍然离开了薄膜表面。这是由于薄膜产生了塑性变形，薄膜表面并没有回复到最初的平面状态，而是留下了一个较深的近圆形凹坑，同时产生了位错堆积现象。而随着压头的提高，位错环也随之产生了变化。位错环不断收缩，停止了之前的扩张。但是在压头离开薄膜表面时，位错环与压头分离，残留在薄膜晶体中。因此，残留的位错环是薄膜表现出塑性形变的重要因素。

3.1 模拟结果

压痕模拟可以通过分析载荷-位移曲线来获取信息。图 3.1 分别为三种薄膜的载荷-位移($P-h$)曲线。实线箭头代表加载过程，虚线箭头则代表卸载过程。载荷-位移曲线的滞后现象的存在（即加载曲线和卸载曲线之间的差异）表明在压痕薄膜中

产生了塑性变形。

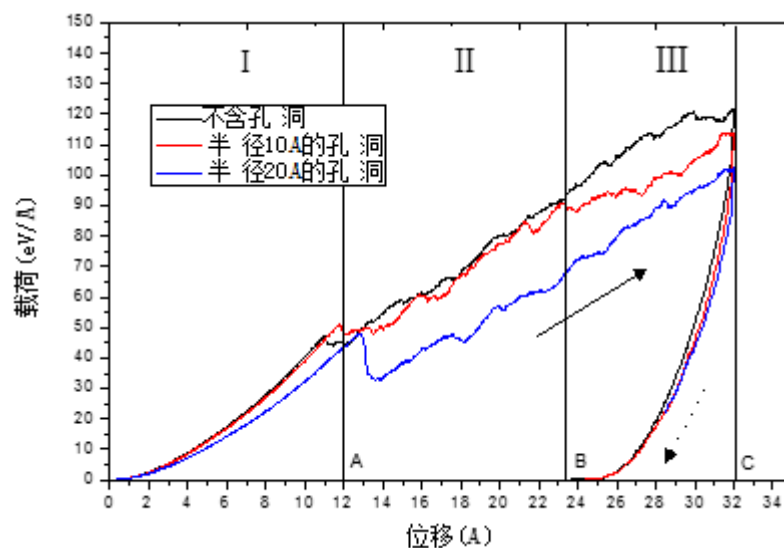


图 3.1 载荷位移曲线图。分别为不含孔洞的碳化硅薄膜，孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜，孔洞半径为 20\AA 的碳化硅薄膜。实线箭头和虚线箭头分别代表加载过程和卸载过程。

图 3.1 中，在 I 区，三条曲线均出现了载荷突然下降的现象，即 pop-in 现象。不含孔洞的 3C-SiC 薄膜与孔洞半径为 10\AA 的 3C-SiC 薄膜的曲线在相近位移处发生下降现象，而含有孔洞半径为 20\AA 的 3C-SiC 薄膜的曲线突然下降现象则发生当压头位移更大处。在 II 区，不含孔洞的 3C-SiC 薄膜与孔洞半径为 10\AA 的 3C-SiC 薄膜的曲线依然保持相近，而含有孔洞半径为 20\AA 的 3C-SiC 薄膜的载荷则低于同位移下的另外两条曲线。在 III 区开始处，孔洞半径为 10\AA 的 3C-SiC 薄膜的载荷的上升速率开始小于不含孔洞的 3C-SiC 薄膜。最终所能达到的最大载荷数值，不含孔洞的 3C-SiC 薄膜大于孔洞半径为 10\AA 的 3C-SiC 薄膜，孔洞半径为 20\AA 的 3C-SiC 薄膜的数值是最小的。

3.1.1 弹性形变

在产生第一个载荷突然下降时刻（A 点）前，三种碳化硅晶体薄膜的载荷步数曲线非常相似，且载荷曲线均随着应变的增大而平滑的增加，而在此阶段产生的主要是弹性形变。可以得出结论：对于弹性形变阶段，孔洞的存在对单晶碳化硅基本没有影响。而在此之后，不同的孔洞则导致了不同的情况。

3.1.2: 第一个载荷突然下降事件

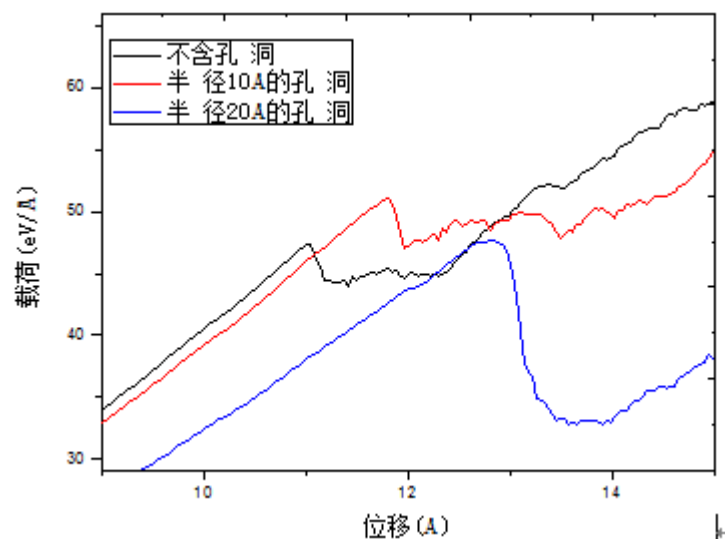


图 3.2 位移值为 9Å-15Å 处的模型载荷位移曲线图。

可以看到，三条载荷位移曲线所产生的载荷突然下降事件发生的顺序不同，载荷下降的范围也由于模型的不同而并不相同。同时，曲线变得不再平滑，出现了台阶状曲线，这代表这晶体产生的变形不再是弹性变形，塑性变形开始在晶体模型中生成。

①不含孔洞的碳化硅薄膜首先产生载荷突然下降现象

由图 3.1 可见，不含孔洞的碳化硅薄膜的载荷位移曲线到达第一个极值点，随后其载荷值随着位移的增加开始下降。

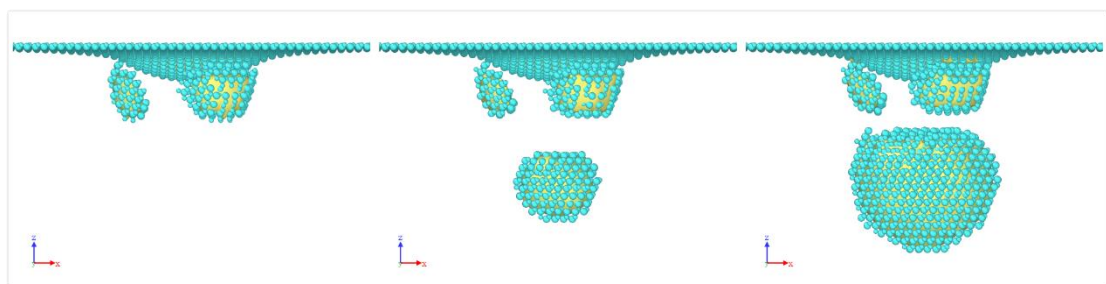


图 3.3-三模型在压痕深度为 10.9Å 时刻的位错分布示意图。图中原子均为由于变形，孔洞的存在或者处于模型边缘，无法被判断晶格类型的原子。

可以从图 3.3 中看到，压痕初始阶段的位错尚未生成。在压痕深度为 10.9Å 时刻，三条载荷位移曲线仍然处于平滑状态，此时还处于弹性形变。

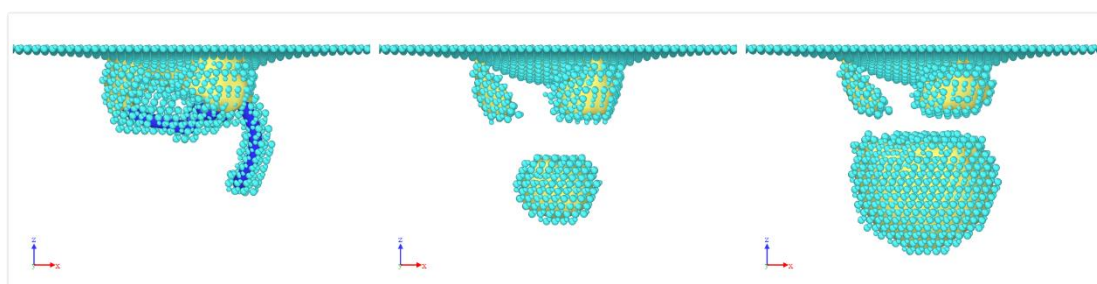


图 3.4 三模型在压痕深度为 11.5\AA 时刻。蓝色线段表示全位错的位错线。

从图 3.4 中可以看到不含孔洞的碳化硅薄膜开始产生位错线，受到变形影响，移动后无法被辨识晶格类型的原子数目和范围也增加了。然而在同一个压痕深度，孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜和孔洞半径为 20\AA 的碳化硅薄膜均尚未产生位错线。这是由于孔洞的存在使得一部分形变被孔洞所承担，因此切应力尚未达到足够的数值使得位错生成。不含孔洞的碳化硅薄膜在 10.9\AA 时尚未产生位错，也没有发生载荷数值突然下降现象；但在 11.5\AA 时刻产生位错，并且载荷突然下降。说明了载荷的突然下降情况是由于位错形核而出现的。从图中可以得知，孔洞的存在会对位错形核产生影响。

②孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜开始出现位错

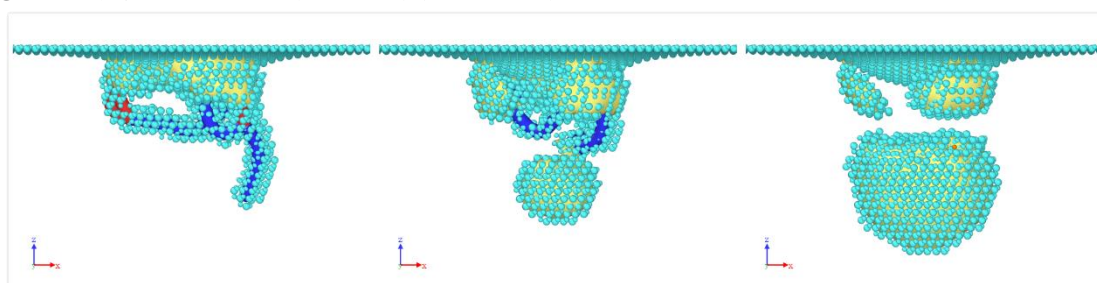


图 3.5 三模型在压痕深度为 12.7\AA 时刻。

此时孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜开始产生位错，同时，受到变形影响，移动后无法被辨识晶格类型的原子数目和范围也增加了。而此时孔洞半径为 20\AA 的碳化硅薄膜尚未产生位错线。说明孔洞的大小会影响形变，进而影响应力集中现象。应力集中现象则与位错形核密切相关，说明孔洞的大小程度会对位错形核产生影响。

③孔洞半径为 20\AA 的碳化硅薄膜开始出现位错

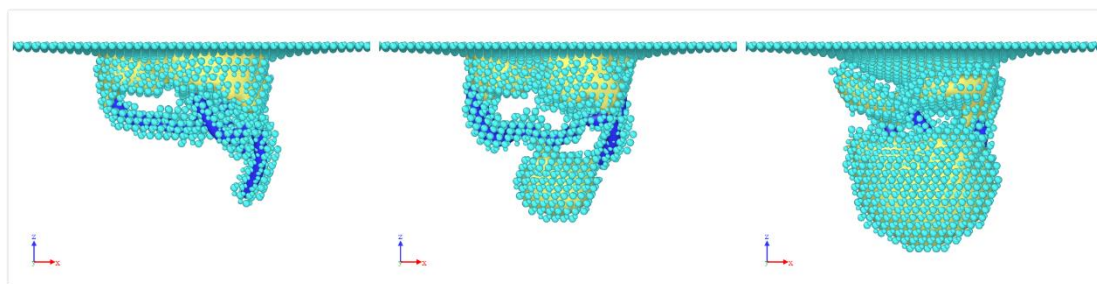


图 3.6 三模型在压痕深度为 12.9\AA 时刻。

孔洞半径为 20\AA 的碳化硅薄膜开始出现位错。由于孔洞靠近薄膜表面，随着由于局部变形导致的原子无序在两个表面同时生成。从而位错位错钉扎点同时在薄膜表面与孔洞表面生成。于此同时，不含孔洞的碳化硅薄膜与孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜中的位错线段开始增殖与运动。

④孔洞半径为 20\AA 的碳化硅薄膜的载荷突然下降值较大的原因

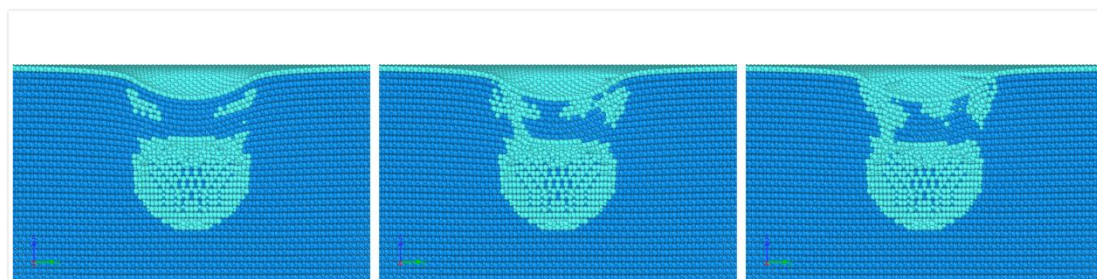


图 3.7 孔洞半径为 20\AA 的碳化硅薄膜在压痕深度为 12.7 , 13.1 , 13.5\AA 时刻结构分布图。深蓝为闪锌矿结构，浅蓝色为原子发生位移以及球形孔洞的原子分布。

从图 3.7 可以发现，由于受到形变，移动后的无法被判断晶格类型的原子逐渐增加，且扩散到孔洞表面。产生的切应力和形变可以通过孔洞耗散。孔洞半径为 20\AA 的碳化硅薄膜抵抗变形的能力便会低于不含孔洞的碳化硅薄膜和孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜。

对于孔洞半径为 20\AA 的碳化硅薄膜，由于孔洞承担了一部分压头下压带来的形变，导致载荷快速下降。同时同样存在孔洞的孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜中没有这种现象，是由于受影响的原子尚未扩散到孔洞。虽然孔洞承担了部分变形，但在这个阶段几乎可以忽略不计。

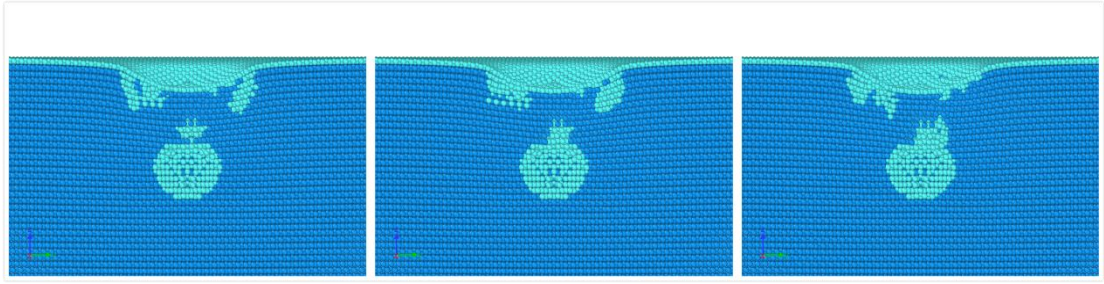


图 3.8 孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜在压痕深度为 12.7 , 13.1 , 13.5\AA 时刻结构分布图。深蓝原子为闪锌矿结构，浅蓝色原子为原子发生位移以及球形孔洞的原子分布。

至此，三个模型均发生了第一个载荷突然下降事件，同时也产生了位错。这个阶段可以得出的结论：塑性变形初期时刻，位错的产生会对孔洞力学性质产生影响，抵抗变形的能力下降。而孔洞的存在与否对位错的生成存在影响，孔洞越大，位错产生时间越晚，载荷值下降程度也变大。

⑤位错起源-应力集中

考虑到位错不可能凭空生成，对于理想晶体，当其开始产生位错时，必定有存在数个位错核。而位错则从这里开始增殖扩散。位错成核的方式分为两种：应力成核与过饱和点缺陷凝聚成核。应力成核中有均匀成核和非均匀成核两种情况。理论分析结果表明，均匀成核所需要的切应力很大，约等于晶体切变模量的十分之一，在实验中很难观察到。

非均匀成核又称应力集中成核，由于应力集中的影响，可以大大地减小位错成核的平均应力。由此可见，晶体中的应力能够一定程度上反应出位错成核现象。



图 3.9 分别为压痕为 11.02\AA , 11.1\AA , 11.18\AA , 11.26\AA , 11.34\AA 与 11.42\AA 下不含孔洞的 3C-SiC 薄膜的 z 方向应力分布图像，图中原子均为 z 方向应力数值大于 2.8GPa 。

由图 3.9 可见，随着压头的逐渐下降，应力存在局部集中的情况。而这些应力集中区域便是位错开始产生的场所。在最初的弹性形变阶段，只有靠近压头接触面区域的部分区域的原子产生了应力集中的现象，这些应力集中的原子即被认定为位错源。之后，随着压头的逐渐压入与载荷的逐渐增加，位错不断增殖，并且存在位错运动的现象。

3.1.3 孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜载荷位移曲线产生变化

从图 3.1 中可以看到，当位移为 23.1\AA 时，孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜的载荷位移曲线的斜率突然变小，而不含孔洞的碳化硅薄膜与孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜的载荷位移曲线也产生了分离。到了 27\AA 时刻，孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜的载荷位移曲线的梯度回到了不含孔洞的碳化硅薄膜的载荷位移曲线梯度的数值。孔洞半径为 20\AA 的碳化硅薄膜的载荷位移曲线则自 A 点的载荷突然下降曲线后保持恒定上升，梯度与不含孔洞的碳化硅薄膜保持相同，但由于第一次载荷突然下降事件的影响，其载荷值要低于不含孔洞的碳化硅薄膜与孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜。此时，同样的位移值时刻，三个模型的载荷数值已经完全不同。

对于孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜的载荷位移曲线产生变化时，依旧是由于位错的影响导致了载荷值的变化。孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜的原理与孔洞半径为 20\AA 的碳化硅薄膜的第一次载荷突然下降原理相同，同样是由于孔洞存在，产生了一部分形变，导致整体压痕深度增加，而承担的载荷则增加程度较小。

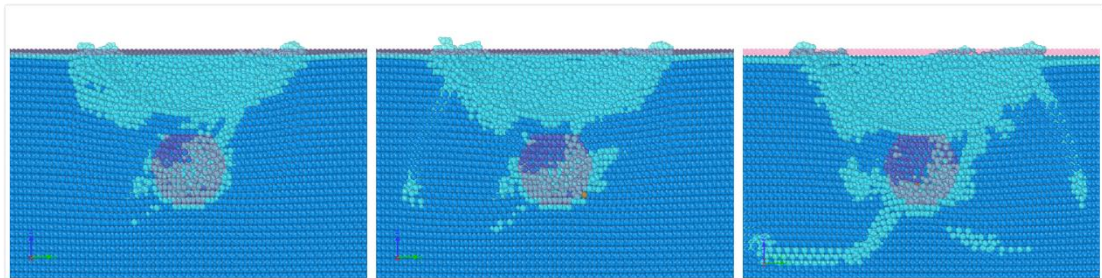


图 3.10 孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜在压痕深度为 22.3 , 23.9 , 27.1\AA 时刻结构分布图。深蓝原子为闪锌矿结构，浅蓝色原子为原子发生位移以及球形孔洞的原子分布。红色球体是压头尚未压入时刻孔洞位置。

在 22.3\AA 时刻孔洞半径为 10\AA 的碳化硅薄膜的载荷位移曲线仍然与不含孔洞的碳化硅薄膜相似，从图 3.10 中看出，此时虽然孔洞承担了一部分形变，但由于截面较小的原因，并不起很大的作用。

在 23.9\AA 时刻，则可以看到当截面足够大时，孔洞的存在开始影响周围的原子，导致载荷的上升速率放缓。

在 27.1\AA 时刻后，上下两部分原子开始接触。此时孔洞半径为 10\AA 的碳化硅

薄膜的结构可近似认为是不含孔洞的碳化硅薄膜。之后，载荷随压痕增加的速度达到了先前的位置。

现在可以得出结论：孔洞的大小会对薄膜力学性质产生影响，而且，尺寸较小的孔洞开始产生影响所需要的形变程度较高，且影响较弱；对于较小孔洞的薄膜，经过一段时间的压缩过后，上下部分原子接触，之后可被视作不存在孔洞的薄膜。

3.1.4 压头撤回

压头已经到达预定深度，后撤回。此时相较于压头刚开始压入薄膜的时刻，三个模型均产生了一定量的形变，并且其抵抗形变的力也达到了最高值。三个模型的强度均增加了。这是由于位错密度的逐渐增加所导致。

①位错扩散

在压头达到预定深度之前，随着压头的不断载入，载荷的加载，使得晶体存在的应力集中现象以及能量必须要以某种方式释放出来。位错的增殖正是这一行为的结果。

对于螺型位错，由于其不存在附加的半原子面，就不存在半原子面扩大或者缩小的问题，所以螺型位错只能滑移，不能攀移。由于这一特性，即便螺型位错上的原子开始向晶体其它缺陷区扩散，或是其他缺陷区的原子开始向螺型位错扩散，都不会改变螺型位错的位置。而对于螺型位错，交滑移增殖机制是它产生增殖的主要机制。

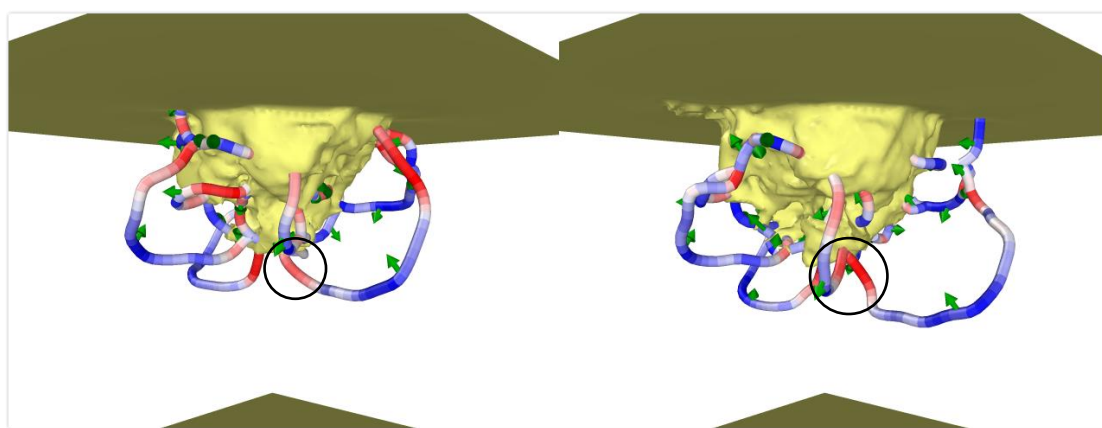


图 3.11 孔洞半径为 10\AA 的 3C-SiC 薄膜分别在 27.9 与 31.9\AA 时刻的薄膜位错分布图。红色区域代表螺旋位错。蓝色区域代表刃型位错。黑色圆圈部分为一个位错交滑移的图示。

而对于刃型位错，滑移与攀移均可能导致其位错的增殖。图 3.4 中为孔洞半径为 10\AA 的 3C-SiC 薄膜分别在 75ps 与 85ps 时刻的薄膜位错分布图。蓝色线段的刃

型位错沿着柏氏矢量和其位错线共同构成的晶面向下移动。

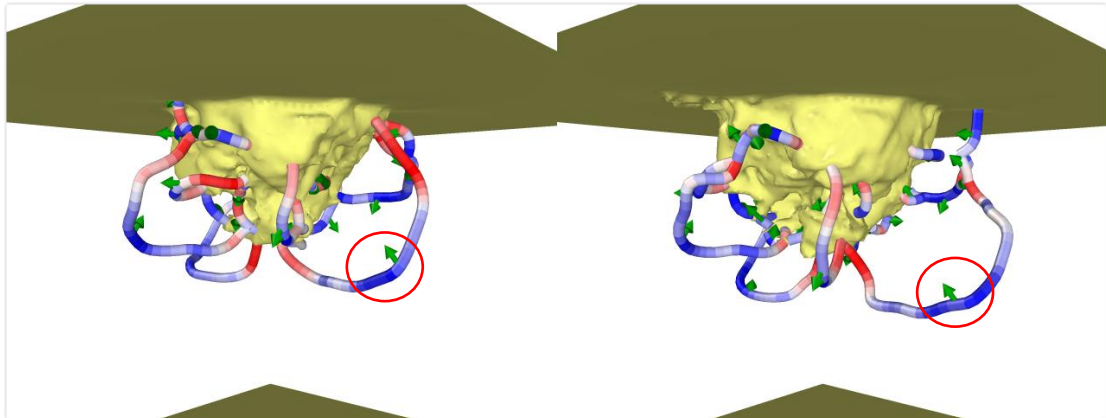


图 3.12 孔洞半径为 10\AA 的 3C-SiC 薄膜分别在 27.9 与 31.9\AA 时刻的薄膜位错分布图。红色区域代表螺旋位错。蓝色区域代表刃型位错。红色圆圈部分为位错滑移的图示。

当位错线两端由位错源所决定后，它的两端便被固定住了。然而位错线上的应力并不会停止不变。随着切应力的增加，一旦切应力达到了位错运动所需要的大小时，位错就会开始运动。同时，描述位错范围的位错线也会同时产生变化，由直线变为曲线，以减小位错线上所受的切应力。在这个过程中晶体中的能量也会同时增加。当位错线的弧度达到最大时，若切应力继续作用，则其弧度反而会变小，位错则变得更容易运动。最后，位错线可以相遇，形成一个位错环。相遇的另外一部分位错线慢慢恢复成运动前的形状。至此，一个位错环的增殖就完成了，如图 3.13 所示。

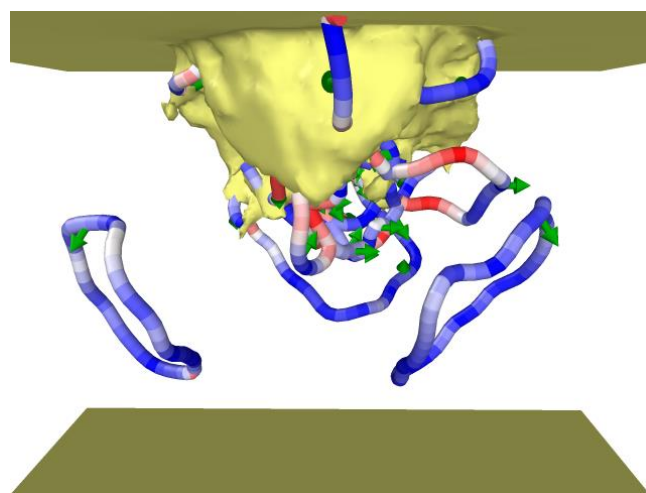


图 3.13 为不含孔洞的 3C-SiC 薄膜分别在 31.9\AA 时刻的位错分布图。可以观察到图中形成了两个位错环。

随着压头的逐渐压入，位错线逐渐扩散。不同的碳化硅薄膜的位错线移动位置

与速率也表现出不同。

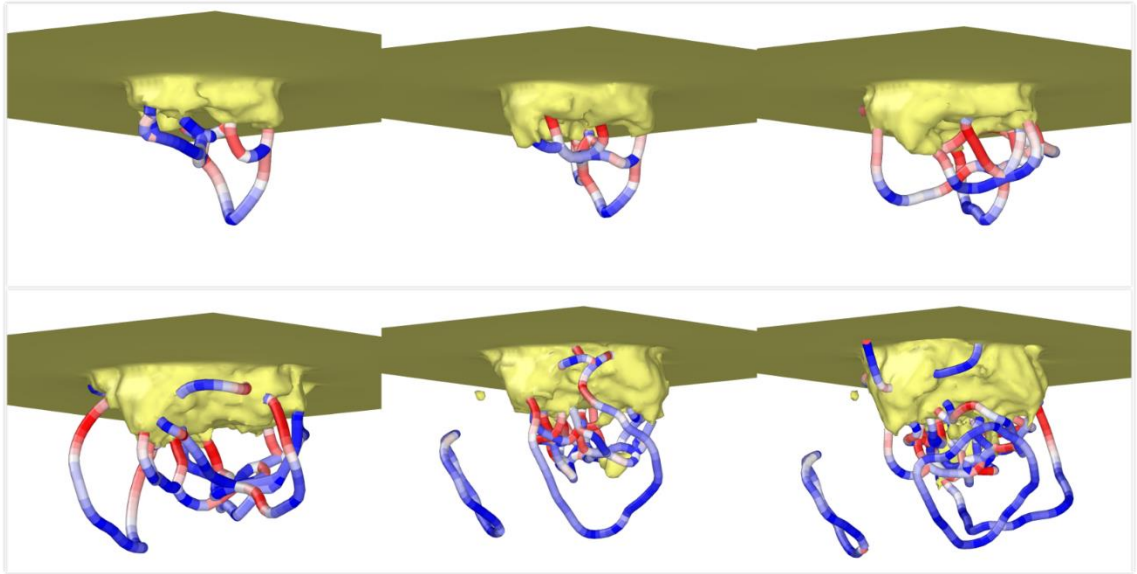


图 3.14 不含孔洞的碳化硅薄膜的位错分布图。分别为在压痕深度 11.9,13.5,16.3,21.9,27.9,31.9Å 时刻的位错分布图。红色线段代表螺旋位错。蓝色线段代表刃型位错。

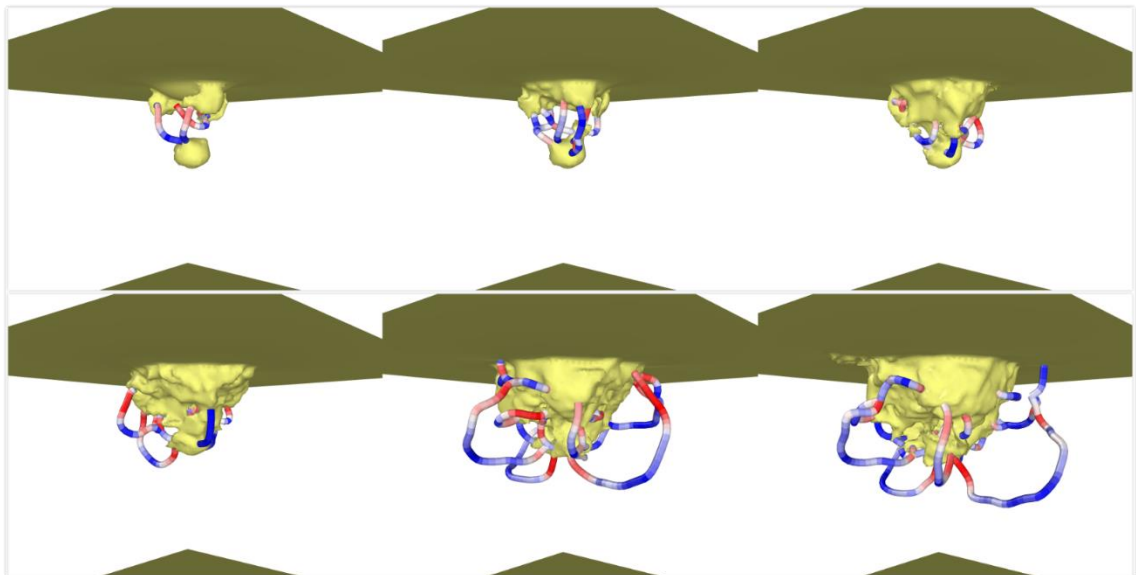


图 3.15 孔洞为 10Å 的碳化硅薄膜的位错分布图。分别在压痕深度 11.9,13.5,16.3,21.9,27.9,31.9Å 时刻的位错分布图。

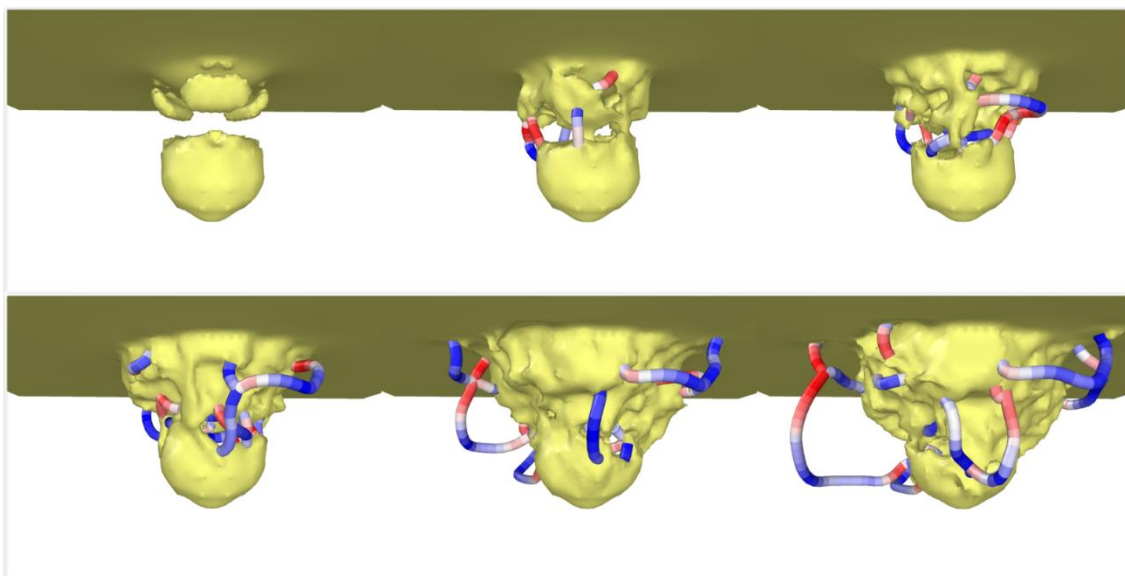


图 3.16 孔洞为 20\AA 的碳化硅薄膜位错分布图。分别在压痕深度 $11.9, 13.5, 16.3, 21.9, 27.9, 31.9\text{\AA}$ 时刻的位错分布图。

②不同的位错密度导致了不同的抵抗变形的能力

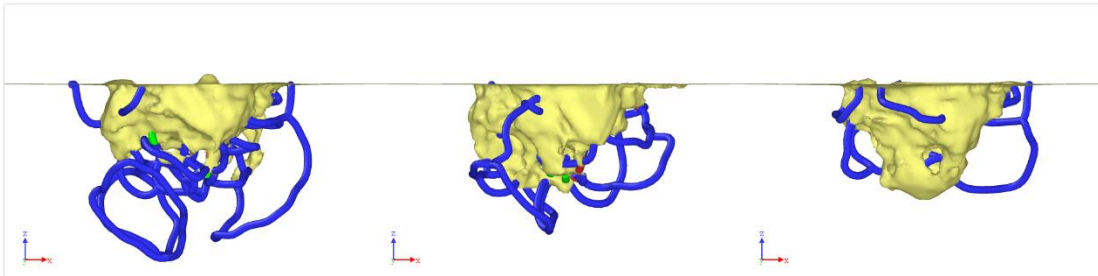


图 3.17 三模型在压痕深度为 31.9\AA 时刻。黄色曲面是对晶体边缘原子的平滑化处理。蓝色线段表示全位错。绿色线段表示肖克莱不全位错。

位错缠结现象导致了位错硬化的现象。模型抵抗变形的能力主要是通过位错硬化获得。不含孔洞的碳化硅薄膜位错密度最大，因此在同样的压痕深度下抵抗变形的能力最强。

3.2 讨论总结

通过对模型载荷位移曲线的分析和对位错分布图的观察，可以得出一些结论：

1) 对于弹性形变阶段，孔洞的存在对单晶碳化硅基本没有影响。继续加载，

不同的孔洞则导致了不同的情况。

2) 在塑性形变阶段，而孔洞的存在与否会对位错形核存在影响，孔洞越大，位错形核时间越晚，载荷下降程度也更大；

3) 尺寸较小的孔洞开始产生影响所需要的形变程度较高，且影响位错增殖的能力较弱，对于较小孔洞的薄膜，经过一段时间的压缩过后，上下部分原子接触，之后可被视作不存在孔洞的薄膜。而不同的位错密度导致了不同的抵抗变形的能力，孔洞越大，位错密度越低，材料抵抗变形的能力就越弱。

4 结论与展望

4.1 结论

本文采用经典分子动力学模拟方法研究了纳米压痕模拟中，单晶碳化硅的位错形成机制以及孔洞缺陷大小对其位错的影响。

对压痕的详细分析表明：孔洞的存在会影响薄膜的分子压痕模拟，对其位错的形成，扩散和增殖产生明显的影响。载荷位移曲线中的第一个不连续性突然下降与位错形核有关。单晶碳化硅薄膜中的孔洞通过在孔洞表面形成新的无序原子导致其与压痕表面的无序原子共同形成了位错源，之后位错源的形成则导致了载荷的突然下降。对于孔洞较大的单晶碳化硅薄膜，这个突然下降的程度更剧烈。

位错通过攀移和滑移共同作用，位错线逐渐扩散，甚至形成了位错环。

由于孔洞的存在，承担了一部分的形变。导致了含有孔洞的单晶碳化硅的位错密度要显著低于不含孔洞的单晶碳化硅。但当孔洞的位置远离压头压入的位置时，材料的形变无法传递到孔洞位置。反映在载荷位移曲线上就是前期阶段，含有较小孔洞的单晶碳化硅曲线与不含孔洞的单晶碳化硅薄膜曲线十分相似。而直到压头压入一定位置后，两者曲线才分离。而位错导致的加工硬化能使材料的强度上升。这个结果是含有孔洞的单晶碳化硅的承受载荷明显低于不含孔洞的单晶碳化硅。含有的孔洞越大，其承受的载荷数值越小。

4.2 展望

纳米材料在高压下的力学行为是当前材料科学领域的热点问题，我们的研究对于深入探讨纳米材料在高压下的一般机理提供了有意义的参考。为更深入的探究包括单晶碳化硅纳米晶体等纳米颗粒的力学性能，还能从以下几个方面进行进一步的探讨：

- 1、温度、压缩方向、压头选取对碳化硅纳米多晶材料力学行为的影响；
- 2、杂质原子、替代原子、间隙原子等缺陷对单晶碳化硅纳米晶体力学性能的影响。

总之，纳米材料力学性能的研究是材料物理、材料化学、微纳电子器件等领域的重要分支，由于存在诸多因素对力学性能的影响以及分子动力学方法本身的局限性，已完成的工作十分有限，希望将来的学者们能进行更系统详细的研究。

致谢

在经历近一个学期的努力后，终于完成了这次设计。在繁忙而又充实的设计过程中，我学到了很多，得到了很多老师、同学朋友们的支持和帮助。在设计完成之际，心中充满了无限感激。在此，我想感谢所有帮助过我的人。

在这次设计中，我要特别感谢我的导师皮老师。从选题开始，她帮助了我很多：从一开始的选题，到之后的资料、设备提供，开题报告的建议，中途也给我讲解我如何去收集数据，选择分析方法以及最终论文的定稿。

同时也要感谢孙莎学姐，帮助我掌握了 `lammps` 软件，不辞辛苦的教我如何安装 `lammps`，如何写 `in` 文件，如何从 `dump` 文件中读取我想要的的数据，以及在我遇上困难的时候提供帮助，没有她，我很难完成这份毕业设计。

此外，我还要感谢尹老师，当我的思想疲惫，需要我重新获得灵感时，他帮助了我很多。不仅如此，在四年的大学学习和生活中，牙老师的教诲也教会了我在大学里学到很多东西，并给予了我很多的鼓励和支持。感谢牛老师，感谢他在实习中给我的帮助，并与我们分享了他对学习和工作的见解，使我对未来的工作有了更清晰的认识。

多亏了学校的老师，他们的细心教学使我学到了很多知识。同时，他们也赋予了我他们自己的生活体验经验。这是一笔宝贵的财富，我将会受益一生。

感谢我的室友们，感谢他们为我创造了一个更好的生活环境和一个良好的设计氛围。这是他们的宽容理解，让我有机会完成我的毕业设计。我也希望他们能给我一个回报的机会。我感谢我的同班同学，感谢他们在我四年的大学学习和生活中带给我的美好时光。这将是一个我永远无法忘记的美好回忆。我感谢 20 年来一直陪伴我的人，帮助我，指导我，教育我。谢谢我的父母！

最后要感谢毕设，这个课题不仅使我对 `LAMMPS`, `OVITO`, `ORIGIN` 等软件有了更深入的了解，在跨专业学习知识能力上，我又有了进一步的提升。

最后，再次衷心地说一句：谢谢！

参 考 文 献

- [1] Yoffe A. Low-dimensional systems: quantum size effects and electronic properties of semiconductor microcrystallites (zero-dimensional systems) and some quasi-two-dimensional systems[J]. *Advances in Physics*. 1993, 42(2): 173-262.
- [2] T. Daulton, T. Bernatowicz, R. Lewis, S. Messenger, F. Stadermann and S. Amari. Polytype distribution in circumstellar silicon carbide. *Science* 296 (2002) 1852.
- [3] H.-P. Chen, R.K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta, I. Szlufarska, Multimillion-atom nanoindentation simulation of crystalline silicon carbide: Orientation dependence and anisotropic pileup, *Journal of Applied Physics*, 102 (2007) 063514.
- [4] J.L. Demenet, M. Amer, C. Tromas, D. Eyidi, J. Rabier, Dislocations in 4H- and 3C-SiC single crystals in the brittle regime, in: P. Komninou (Ed.) *Physica Status Solidi C: Current Topics in Solid State Physics*, Vol 10, No 1, 2013, pp. 64-67.
- [5] M. Mishra, I. Szlufarska, Dislocation controlled wear in single crystal silicon carbide, *Journal of Materials Science*, 48 (2013) 1593-1603.
- [6] X. Zhao, R.M. Langford, I.P. Shapiro, P. Xiao, G. Pharr, Onset Plastic Deformation and Cracking Behavior of Silicon Carbide under Contact Load at Room Temperature, *Journal of the American Ceramic Society*, 94 (2011) 3509-3514.
- [7] An improved technique for determining hardness and elastic modulus using load and displacement sensing indentation experiment. Oliver WC, Pharr GM. *Journal of Materials Research*. 1992
- [8] 严六明等, 分子动力学模拟的理论与实践, 北京: 科学出版社, 2013。
- [9] P. Vashishta, R.K. Kalia, A. Nakano, J.P. Rino, Interaction potential for silicon carbide: A molecular dynamics study of elastic constants and vibrational density of states for crystalline and amorphous silicon carbide, *Journal of Applied Physics*, 101 (2007).
- [10] 刘卫国等, 薄膜材料科学 (第二版), 北京: 国防工业出版社, 2013。
- [11] 范镜泓, 材料变形与破坏的多尺度分析, 北京: 科学出版社, 2008。
- [12] 翟文杰, 杨德重. 立方碳化硅 CMP 过程中机械作用分子动力学仿真[J/OL]. *材料科学与工程*: 1-6 [2018-03-31]. <http://kns.cnki.net/kcms/detail/23.1345.TB.20171204.1202.002.html>.
- [13] 杨德重. 立方碳化硅化学机械抛光的分子动力学仿真[D]. 哈尔滨工业大学, 2017.
- [14] 韩静, 孙甲鹏, 方亮. 单晶硅的纳米力学响应及其相变机制[J]. *摩擦学学报*, 2016, 36(05): 562-570.

- [15] 孙甲鹏. 单晶硅纳米压痕所致相变机理的原子模拟[A]. 中国科学院兰州化学物理研究所固体润滑国家重点实验室、中国机械工程学会摩擦学分会.第十一届全国摩擦学大会论文集[C].中国科学院兰州化学物理研究所固体润滑国家重点实验室、中国机械工程学会摩擦学分会:,2013:1.
- [16] 于楠. 单晶硅纳米加工仿真及实验研究[D].哈尔滨工业大学,2013.
- [17] 杜宪成. 温度对典型单晶材料纳米压痕/划痕响应影响的分子动力学解析[D].吉林大学,2016.
- [18] 吕国才,宿彦京,褚武扬,乔利杰.基于分子动力学的纳米压痕形变过程模拟[J].北京科技大学学报,2012,34(08):898-902.
- [19] 潘金生,田民波,仝健民.材料科学基础[M].北京:清华大学出版社,2011:216-218.
- [20] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces[J]. Modelling Simul.mater.sci.eng, 2012, 20(8):085007.

附录 A: 不含孔洞的单晶立方碳化硅 LAMMPS 程序的输入文件

不含孔洞的单晶立方立方碳化硅 LAMMPS 程序的输入文件:

```
#The style of atoms=====
units                metal
boundary             p p f
atom_style           atomic
newton on

#The variable=====
variable             latparam0      equal 4.3582
variable             x1dim           equal sqrt(6)*${latparam0}*25
variable             y1dim           equal sqrt(2)*${latparam0}*40
variable             z1dim           equal sqrt(3)*${latparam0}*22+100
# 165.75+100
variable             z10dim          equal sqrt(3)*${latparam0}*22+0.001
#lattice topology=====
lattice              custom ${latparam0} a1 1 0 0 a2 0 1 0 a3 0 0 1 basis 0 0 0 &
basis 0.5 0.5 0.0 basis 0.0 0.5 0.5 basis 0.5 0.0 0.5 basis 0.25 0.25 0.25 basis 0.75 0.75 &
0.25 basis 0.25 0.75 0.75 basis 0.75 0.25 0.75
region whole        block -0.01  ${x1dim} -0.01  ${y1dim} -0.01  ${z1dim} units box
create_box          2 whole
region upper block -0.01  ${x1dim} -0.01  ${y1dim} -0.01  ${z10dim} units box
lattice              custom ${latparam0} a1 1 0 0 a2 0 1 0 a3 0 0 1 basis 0 0 0 &
basis 0.5 0.5 0.0 basis 0.0 0.5 0.5 basis 0.5 0.0 0.5 basis 0.25 0.25 0.25 basis 0.75 0.75 &
0.25 basis 0.25 0.75 0.75 basis 0.75 0.25 0.75 orient x -1 -1 2 orient y 1 -1 0 orient z 1 1 1

create_atoms 2 region upper basis 1 1 basis 2 1 basis 3 1 basis 4 1 basis 5 2 basis 6 2 basis
7 2 basis 8 2
```



```

#the mass of atom(include Si and C)=====
mass 1 12.01
mass 2 28.086

#potential=====
pair_style vashishta
pair_coeff * * SiC.vashishta C Si

neighbor 2.0 bin
neigh_modify once no every 1 delay 0 check yes

write_data data.SiC25111

# define groups#####

region slab block INF INF INF INF INF 10 units box
region sub block INF INF INF INF INF 10 INF units box

group slab region slab
group sub region sub

#### Computes Required
compute eng all pe/atom
compute eatoms all reduce sum c_eng
compute strs all stress/atom NULL

#-----Run Minimization-----
reset_timestep 0
timestep 0.001

thermo 100
thermo_style custom step press pxx pyy pzz c_eatoms pe ke etotal lx ly lz pe ke
thermo_modify lost ignore flush yes

```

```
min_style cg
minimize 1.0e-15 1.0e-15 5000 5000

# ----- Run deformation -----

reset_timestep 0
timestep 0.001

fix 1 slab setforce 0.0 0.0 0.0
fix 2 sub nve
fix 3 sub langevin 0.1 0.1 0.1 587283

variable k equal 100

variable z equal "208.1 - elapsed*dt*0.4"

fix 4 sub indent $k sphere 133.5 123.3 v_z 40.0 units box

thermo 100
thermo_style custom step temp lx ly lz press pxx pyy pzz f_4 f_4[1] f_4[2] f_4[3]

thermo_modify lost ignore flush yes

dump 3 all cfg 200 dump.ind_*.cfg mass type xs ys zs c_strs[1] c_strs[2] c_strs[3]
c_eng
dump_modify 3 element C Si

run 85000
```

```
undump 3

unfix 4

#run without indenter

variable k equal 100
variable z equal "174.1 + elapsed*dt*0.8 "
fix 4 sub indent $k sphere 133.5 123.3 v_z 40.0 units box

thermo 100
thermo_style custom step lx ly lz press pxx pyy pzz f_4 f_4[1] f_4[2] f_4[3]
thermo_modify lost ignore flush yes

dump 2 all cfg 1000 dump.no.ind_*.cfg mass type xs ys zs c_strs[1] c_strs[2] c_strs[3]
c_eng
dump_modify 2 element C Si
run 42500
# SIMULATION DONE
print "All done"
```

附录 B: 孔洞半径为 10Å 的单晶立方碳化硅 LAMMPS 程序的输入文件

孔洞半径为 10Å 的单晶立方立方碳化硅 LAMMPS 程序的输入文件:

```
#The style of atoms=====
units                metal
boundary             p p f
atom_style           atomic

newton on

#The variable=====
variable    latparam0    equal    4.3582
variable    x1dim        equal    sqrt(6)*${latparam0}*25
variable    y1dim        equal    sqrt(2)*${latparam0}*40
variable    z1dim        equal    sqrt(3)*${latparam0}*22+100
variable    z10dim       equal    sqrt(3)*${latparam0}*22+0.001

variable    x1ldim       equal    sqrt(6)*${latparam0}*25/2-5
variable    x1rdim       equal    sqrt(6)*${latparam0}*25/2+5
variable    y1ldim       equal    sqrt(2)*${latparam0}*40/2+5
variable    y1bdim       equal    sqrt(2)*${latparam0}*40/2-5
variable    z1ldim       equal    sqrt(3)*${latparam0}*22/2-5
variable    z1bdim       equal    sqrt(3)*${latparam0}*22/2+5

variable    x1cdim       equal    sqrt(6)*${latparam0}*25/2
variable    y1cdim       equal    sqrt(2)*${latparam0}*40/2
variable    z1cdim       equal    sqrt(3)*${latparam0}*22/4*3
variable    r             equal    10

#lattice topology=====
```

```

lattice      custom ${latparam0}  a1 1 0 0 a2 0 1 0 a3 0 0 1 basis 0 0 0 &
basis 0.5 0.5 0.0 basis 0.0 0.5 0.5 basis 0.5 0.0 0.5 basis 0.25 0.25 0.25 basis 0.75 0.75 &
0.25 basis 0.25 0.75 0.75 basis 0.75 0.25 0.75

region whole  block  -0.01  ${x1dim} -0.01  ${y1dim}  -0.01 ${z1dim} units box

create_box  2 whole

region upper block -0.01  ${x1dim} -0.01  ${y1dim}  -0.01  ${z10dim} units box

lattice      custom ${latparam0}  a1 1 0 0 a2 0 1 0 a3 0 0 1 basis 0 0 0 &
basis 0.5 0.5 0.0 basis 0.0 0.5 0.5 basis 0.5 0.0 0.5 basis 0.25 0.25 0.25 basis 0.75 0.75 &
0.25 basis 0.25 0.75 0.75 basis 0.75 0.25 0.75 orient x -1 -1 2 orient y 1 -1 0 orient z 1 1 1

create_atoms 2 region  upper basis 1 1  basis 2 1  basis 3 1  basis 4 1 basis 5 2  basis 6 2  basis
7 2  basis 8 2

#region void block ${x1ldim}  ${x1rdim}  ${y1udim}  ${y1bdim}  ${z1udim}  ${z1bdim}
units box
region void sphere ${x1cdim}  ${y1cdim}  ${z1cdim}  ${r}  units box

delete_atoms region void compress yes

#the mass of atom(include Si and C)=====
mass 1  12.01
mass 2  28.086

```

```
#potential=====
pair_style      vashishta
pair_coeff      * * SiC.vashishta      C  Si

neighbor        2.0 bin
neigh_modify    once no every 1 delay 0 check yes

write_data      data.SiCvoid

# define groups#####

region          slab block INF INF INF INF INF 10  units box
region          sub block  INF INF INF INF INF 10  INF units box

group           slab region slab
group           sub region sub

#### Computes Required
compute eng all pe/atom
compute eatoms all reduce sum c_eng
compute strs all stress/atom NULL

#-----Run Minimization-----
reset_timestep  0
timestep        0.001

thermo          100
```

```
thermo_style      custom step press pxx pyy pzz c_eatoms pe ke etotal lx ly lz pe ke
thermo_modify     lost ignore flush yes

min_style cg
minimize 1.0e-15 1.0e-15 5000 5000

# ----- Run deformation -----

reset_timestep    0
timestep          0.001

fix              1 slab setforce 0.0 0.0 0.0
fix              2 sub nve
fix              3 sub langevin 0.1 0.1 0.1 587283

variable         k equal 100

variable         z equal "208.1 - elapsed*dt*0.4"

fix 4 sub indent $k sphere 133.5 123.3 v_z 40.0 units box

thermo           100
thermo_style     custom step temp lx ly lz press pxx pyy pzz f_4 f_4[1] f_4[2] f_4[3]
thermo_modify    lost ignore flush yes

dump             3 all cfg 500 dump.ind_*.cfg mass type xs ys zs c_strs[1] c_strs[2] c_strs[3]
c_eng
```

```
dump_modify      3 element      C Si

run              85000

undump 3

unfix            4
# run without indenter

variable         k equal 100
variable         z equal "174.1 + elapsed*dt*0.8 "
fix              4 sub indent $k sphere 133.5 123.3 v_z 40.0 units box

thermo           100
thermo_style     custom step lx ly lz press pxx pyy pzz f_4 f_4[1] f_4[2] f_4[3]
thermo_modify    lost ignore flush yes

dump             2 all cfg 1000 dump.no.ind_*.cfg mass type xs ys zs c_strs[1] c_strs[2] c_strs[3]
c_eng
dump_modify      2 element C Si
run              42500

#####
# SIMULATION DONE
print "All done"
```


附录 C: 孔洞半径为 20Å 的单晶立方碳化硅 LAMMPS 程序的输入文件

孔洞半径为 20Å 的单晶立方立方碳化硅 LAMMPS 程序的输入文件:

```
#The style of atoms=====
units                metal
boundary             p p f
atom_style           atomic

newton on

#The variable=====
variable    latparam0    equal    4.3582
variable    x1dim        equal    sqrt(6)*${latparam0}*25
variable    y1dim        equal    sqrt(2)*${latparam0}*40
variable    z1dim        equal    sqrt(3)*${latparam0}*22+100
variable    z10dim       equal    sqrt(3)*${latparam0}*22+0.001

variable    x1ldim       equal    sqrt(6)*${latparam0}*25/2-5
variable    x1rdim       equal    sqrt(6)*${latparam0}*25/2+5
variable    y1ldim       equal    sqrt(2)*${latparam0}*40/2+5
variable    y1bdim       equal    sqrt(2)*${latparam0}*40/2-5
variable    z1ldim       equal    sqrt(3)*${latparam0}*22/2-5
variable    z1bdim       equal    sqrt(3)*${latparam0}*22/2+5

variable    x1cdim       equal    sqrt(6)*${latparam0}*25/2
variable    y1cdim       equal    sqrt(2)*${latparam0}*40/2
variable    z1cdim       equal    sqrt(3)*${latparam0}*22/4*3
variable    r             equal    20

#lattice topology=====
```

```

lattice      custom ${latparam0}  a1 1 0 0 a2 0 1 0 a3 0 0 1 basis 0 0 0 &
basis 0.5 0.5 0.0 basis 0.0 0.5 0.5 basis 0.5 0.0 0.5 basis 0.25 0.25 0.25 basis 0.75 0.75 &
0.25 basis 0.25 0.75 0.75 basis 0.75 0.25 0.75

region whole  block  -0.01  ${x1dim} -0.01  ${y1dim}  -0.01 ${z1dim} units box

create_box  2 whole

region upper block -0.01  ${x1dim} -0.01  ${y1dim}  -0.01  ${z10dim} units box

lattice      custom ${latparam0}  a1 1 0 0 a2 0 1 0 a3 0 0 1 basis 0 0 0 &
basis 0.5 0.5 0.0 basis 0.0 0.5 0.5 basis 0.5 0.0 0.5 basis 0.25 0.25 0.25 basis 0.75 0.75 &
0.25 basis 0.25 0.75 0.75 basis 0.75 0.25 0.75 orient x -1 -1 2 orient y 1 -1 0 orient z 1 1 1

create_atoms 2 region  upper basis 1 1  basis 2 1  basis 3 1  basis 4 1 basis 5 2  basis 6 2  basis
7 2  basis 8 2

#region void block ${x1ldim}  ${x1rdim}  ${y1udim}  ${y1bdim}  ${z1udim}  ${z1bdim}
units box
region void sphere ${x1cdim}  ${y1cdim}  ${z1cdim}  ${r}  units box

delete_atoms region void compress yes

#the mass of atom(include Si and C)=====
mass 1  12.01
mass 2  28.086

```

```
#potential=====
pair_style      vashishta
pair_coeff      * * SiC.vashishta      C  Si

neighbor        2.0 bin
neigh_modify    once no every 1 delay 0 check yes

write_data      data.SiCvoid

# define groups#####

region          slab block  INF INF INF INF INF 10  units box
region          sub block  INF INF INF INF INF 10  INF units box

group           slab region slab
group           sub region sub

#### Computes Required
compute eng all pe/atom
compute eatoms all reduce sum c_eng
compute strs all stress/atom NULL

#-----Run Minimization-----
reset_timestep  0
timestep        0.001

thermo          100
```

```
thermo_style      custom step press pxx pyy pzz c_eatoms pe ke etotal lx ly lz pe ke
thermo_modify     lost ignore flush yes

min_style cg
minimize 1.0e-15 1.0e-15 5000 5000

# ----- Run deformation -----

reset_timestep    0
timestep          0.001

fix              1 slab setforce 0.0 0.0 0.0
fix              2 sub nve
fix              3 sub langevin 0.1 0.1 0.1 587283

variable         k equal 100

variable         z equal "208.1 - elapsed*dt*0.4"

fix              4 sub indent $k sphere 133.5 123.3 v_z 40.0 units box

thermo           100
thermo_style     custom step temp lx ly lz press pxx pyy pzz f_4 f_4[1] f_4[2] f_4[3]
thermo_modify    lost ignore flush yes

dump             3 all cfg 500 dump.ind_*.cfg mass type xs ys zs c_strs[1] c_strs[2] c_strs[3]
c_eng
```

```
dump_modify      3 element      C Si

run              85000

undump 3

unfix            4
# run without indenter

variable         k equal 100
variable         z equal "174.1 + elapsed*dt*0.8 "
fix              4 sub indent $k sphere 133.5 123.3 v_z 40.0 units box

thermo           100
thermo_style     custom step lx ly lz press pxx pyy pzz f_4 f_4[1] f_4[2] f_4[3]
thermo_modify    lost ignore flush yes

dump             2 all cfg 1000 dump.no.ind_*.cfg mass type xs ys zs c_strs[1] c_strs[2] c_strs[3]
c_eng
dump_modify      2 element C Si
run              42500

#####
# SIMULATION DONE
print "All done"
```