

引用格式: 倪自丰, 范强, 陈国美, 等. 基于分子动力学的 GaN 纳米加工中位错演化机制[J]. 中国材料进展, 2025, 44(6): 552-560.

NI Z F, FAN Q, CHEN G M, *et al.* Dislocation Evolution Mechanism of GaN During Nanofabrication Based on Molecular Dynamics[J]. Materials China, 2025, 44(6): 552-560.

基于分子动力学的 GaN 纳米加工中位错演化机制

倪自丰¹, 范强¹, 陈国美², 刘明³, 陈国华⁴, 钱善华¹, 卞达¹

(1. 江南大学机械工程学院, 江苏 无锡 214122)

(2. 无锡商业职业技术学院机电技术学院, 江苏 无锡 214153)

(3. 福州大学机械工程及自动化学院, 福建 福州 350108)

(4. 无锡格锐德半导体科技有限公司, 江苏 无锡 214000)

摘要: GaN 晶体广泛应用于新能源汽车、航空航天和军事等领域, 但硬脆性限制了其加工效率。研究精密加工中不同形状压头对材料破坏损伤的影响是实现 GaN 高效韧性去除的关键。采用分子动力学对 GaN 晶体 Ga 面的压入和划入过程进行模拟, 分析了球形压头以及不同朝向的 Berkovich 压头对原子堆积和滑移以及刃位错分布和演变规律的影响。在压入过程中, 位错主要分布于压头与材料接触边界的外围; 对于球形压头, Ga 面上的原子滑移主要沿着 $\langle 11-20 \rangle$ 晶向族的 6 个方向; 对于 Berkovich 压头, 尖锐棱边能有效抑制该方向原子的滑移和位错扩展, 当压头一尖锐棱边朝向 $[11-20]$ 晶向时, 原子滑移以及位错现象减少, 原子滑移和堆积主要出现在垂直于压头 3 个侧面的方向上。在划入过程中, 刃位错主要经历了滑移产生、扩展成型和破坏重组 3 个过程。球形压头划入后产生的位错最多, Berkovich 压头尖角朝前划入后产生的位错适中, 且亚表层非晶形变区域均匀, 原子堆积少。

关键词: GaN; 分子动力学; 压入; 划入; 位错

中图分类号: TQ133.5⁺1; O73 文献标识码: A 文章编号: 1674-3962(2025)06-0552-09

Dislocation Evolution Mechanism of GaN During Nanofabrication Based on Molecular Dynamics

NI Zifeng¹, FAN Qiang¹, CHEN Guomei², LIU Ming³,
CHEN Guohua⁴, QIAN Shanhua¹, BIAN Da¹

(1. School of Mechanical Engineering, Jiangnan University, Wuxi 214122, China)

(2. School of Mechanical and Electrical Engineering, Wuxi Vocational Institute of Commerce, Wuxi 214153, China)

(3. College of Mechanical Engineering and Automation, Fuzhou University, Fuzhou 350108, China)

(4. Wuxi Grind Semiconductor Technology Co., Ltd., Wuxi 214000, China)

Abstract: Gallium nitride (GaN) crystals have gained extensive usage in diverse fields such as new energy vehicles, aerospace and military applications. However, the inherent characteristics of GaN, characterized by its hardness and brittleness, adversely affect its processing efficiency. To overcome this limitation and achieve efficient and robust removal of GaN, it is paramount to investigate the influence of indenter shape on material damage during nanofabrication. Molecular dynamics simulations are employed to simulate indentation and scratching experiments on the Ga surface of GaN. The aim is to analyze the influence of employing both spherical and Berkovich indenters with different orientation to distribution and progression of atomic packing, crystal slip and dislocations throughout the machining process. It turns out that the distribution of edge dislocations is predominantly influenced by the contact interface between the indenter's periphery and the material during the nanoindentation process. In the case of the spherical indenter, atomic slip predominantly occurs along $\langle 11-20 \rangle$ crystallographic direction families. For Berkovich indenter, the sharp edges are effective in suppressing slip and dislocation expansion of atoms in that direction. When the one edge of the indenter face to the $[11-20]$ direction, atomic slip and dislocation phenomena are mitigated, and slip and atomic packing are primarily observed perpendicular to the three edges of the indenter. Dur-

收稿日期: 2023-11-30 修回日期: 2023-12-21

第一作者: 倪自丰, 男, 1981 年生, 副教授, 硕士生导师,

Email: nizf@jiangnan.edu.cn

DOI: 10.7502/j.issn.1674-3962.202311035

ing the nanoindentation process. In the case of the spherical indenter, atomic slip predominantly occurs along $\langle 11-20 \rangle$ crystallographic direction families. For Berkovich indenter, the sharp edges are effective in suppressing slip and dislocation expansion of atoms in that direction. When the one edge of the indenter face to the $[11-20]$ direction, atomic slip and dislocation phenomena are mitigated, and slip and atomic packing are primarily observed perpendicular to the three edges of the indenter. Dur-

ing the scratching process, edge dislocations undergo three main processes: initial generation, extended formation and destructive reorganization. The spherical indenter produces the most dislocations, whereas the Berkovich indenter has moderate dislocations when the sharp angle is forward, and the subsurface amorphous deformation zones are uniform, with less atomic packing.

Key words: GaN; molecular dynamics; indentation; scratching; dislocation

1 前言

单晶氮化镓(GaN)是第三代半导体中最具潜力的材料之一,由于在极端工作环境下表现出的优异物化性能^[1,2],如宽带隙^[3]、高导热率^[4]、高击穿电压^[5]等,因此广泛应用于航空航天、5G 通讯和新能源汽车中^[6]。GaN 的微小缺陷会大大降低超精密产品的性能,因此深入研究 GaN 在加工过程中的微观损伤对于减少材料缺陷至关重要,从而为提升 GaN 的生产制造工艺、提高器件性能提供科学指导和保障。

仪器化压入^[7]和划入测试^[8]是研究各种固体材料(比如金属^[9,10]、玻璃^[11,12]、涂层^[13,14]、陶瓷^[15,16]、单晶^[17]、高分子^[18,19]和复合材料^[20-23])变形^[24-26]和力学性能(比如弹性模量^[27]、硬度^[28]、蠕变^[29]、摩擦系数^[30]、残余应力^[31,32]和断裂韧度^[33-36])的有效手段。Lu 等^[37]应用不同尺寸的球形压头对 Si 基片上的外延 GaN 薄膜进行压痕实验,发现随着压头半径的增加,第一次出现阶梯滑移(pop-in)现象的临界载荷逐渐下降。Li 等^[38]利用分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟了 GaN 的压入过程,揭示了单晶各向异性、球形压头半径对应力传播、位错成核演变和材料破坏去除的影响。Song 等^[39]利用 MD 模拟发现划痕导致的裂纹主要由剪应力产生,位于划痕槽的两侧,且垂直于划痕方向;压头下方应力集中区域的 GaN 从纤锌矿晶体结构转变为闪锌矿结构。Meng 等^[40]通过 MD 研究了材料进给方向和压头方向对单晶 SiC 的变形和去除机理的影响。Qian 等^[41]采

用 MD 模拟了 0 K 下纤锌矿 GaN 在立方压头作用下的变形,以及不同辐照剂量对 GaN 力学性能的影响;发现在 Ga 面压入时,压头接触区外围下方的滑移面也会受影响,形成大范围的无序区域。关于压头形状及加载角度对 GaN 单晶损伤的影响仍不够明确。

本研究选择纤锌矿 GaN 的极性(0001)c 面(即 Ga 面)作为研究面,采用 MD 比较球形压头和不同角度的 Berkovich 压头对 GaN 单晶在仪器化压入和划入过程中的破坏去除效果,分析加工过程中刃位错的产生和演变过程。此外,采用球形和 Berkovich 压头进行仪器化划入实验,揭示压头形状对单晶损伤变形的影响。研究结果旨在为 GaN 单晶微加工的设计和和应用提供参考。

2 分子动力学模拟及仪器化划入实验

如图 1 所示,模拟采用 Lammmps 软件分别建立了 3 组 GaN 的压入和划入模型。其中 x 、 y 和 z 分别对应晶体^[11-20]、^[-1100]、^[0001]方向。图 1a1~1c1 为压入示意图,图 1a2~1c2 为划入示意图。压入和划入均在 GaN 单晶的 Ga 面,即(0001)c 面进行。压入模型中球形压头直径为 6 nm(图 1a1)。压入模型中 Berkovich 压头一条尖锐棱边分别朝向^[11-20]、^[-1100](图 1b1 和 1c1)。划入模型中 Berkovich 压头一条尖锐棱边平行于^[11-20],分别采取压头尖角朝前和朝后(即面朝前)2 种加工方式(图 1b2 和 1c2)。压入模型 GaN 单晶尺寸为 15 nm×15 nm×9 nm,划入模型 GaN 单晶尺寸为 20 nm×14 nm×9 nm。GaN 工件由外到内分为固定层、恒温层、

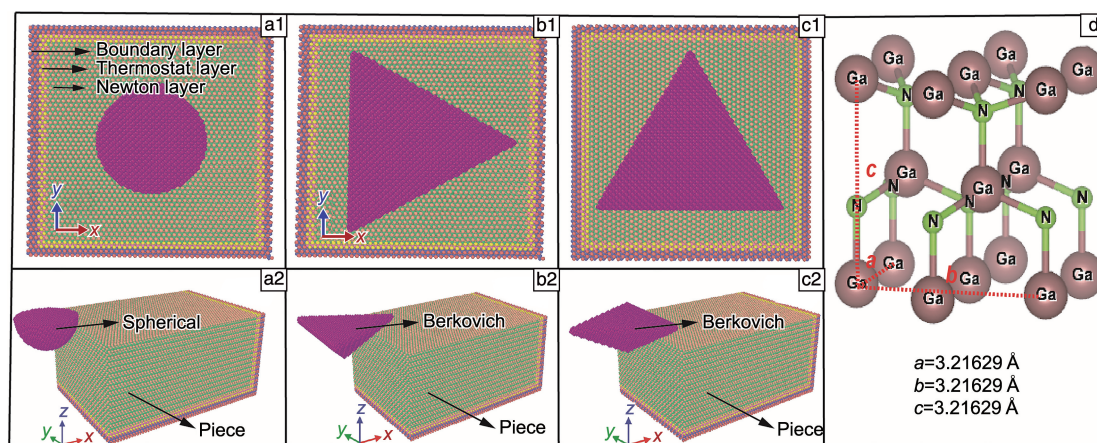


图 1 单晶 GaN 的分子动力学三维模拟图:(a1~c1)压入示意图,(a2~c2)划入示意图,(d)GaN 晶胞

Fig. 1 Three-dimensional molecular dynamics simulation of GaN single crystal: (a1~c1) indentation, (a2~c2) scratch, (d) the unit cell of GaN

牛顿层 3 部分。图 1d 为钷矿 GaN 晶胞的结构示意图^[42]。恒温层温度控制在 300 K, 采用 Nosé-Hoover 方法控温^[43]; 固定层中原子速度为零, 以避免模拟过程中工件移动。由于金刚石压头硬度高于 GaN 晶体, 不考虑压头磨损问题, 将压头设为刚体。选用 Stillinger-Weber 势函数^[44, 45]表达 GaN 晶体中 Ga-Ga、N-N 和 Ga-N 之间的相互作用, 使用 Lennard-Jones 势函数^[46]来表示金刚石压头的 C 原子与 GaN 晶体原子之间的作用。先对初始模型结构进行弛豫, 消除内部应力; 之后在 NVE 系综下以 50 m/s 的压入或划动速率进行模拟, 最大压入深度和恒定划入深度分别为 3 和 2 nm, 划入模式时压头划动距离为 16 nm。GaN 加工过程中原子滑移和亚表层位错演化的模拟结果用开源软件 OVITO 可视化读取分析。

仪器化划入实验在 Anton Paar MST² 型微米划痕仪上进行, 分别利用球形和 Berkovich 压头在恒定法向载荷 $F_n = 50, 100, 200$ 和 500 mN 和滑动速率 $v = 2$ mm/min 下沿 [11-20] 方向在 GaN (0001) 面上划刻出一条沟槽。为得到真实的划入深度 d_p , 划入测试前在前扫描阶段测量试样初始表面轮廓高度。

3 结果与讨论

图 2 为 3 种压入情况下 GaN 单晶的载荷与投影接触面积随压入位移的变化。Berkovich 压头尖锐棱边的不同朝向不影响接触面积。当压入深度较小时, 球形压头与工件的接触面积大于 Berkovich 压头与工件的接触面积; 当压入深度较大时, 情况正好相反, 球形压头的接触面积小于 Berkovich 压头的接触面积, 使得球形压头在压入时载荷小于 Berkovich 压头。球形压头的载荷位移曲线在 0.7 nm 处出现了明显的 pop-in 现象, Berkovich 压头的加载曲线也有 pop-in 现象, 发生在更大的压入深度, 见局部放大插图。一般来说, pop-in 现象的出现意味着材料变形从弹性开始向塑性过渡, 即接触压力超过临界值, 单晶 GaN 内部开始出现明显的原子滑移和位错^[47]。压入时, 晶体出现局部滑移变形产生基面堆垛层错, 层错区和完整区域交界处出现了部分位错, 部分位错滑移及位错之间的交互作用增大了层错区域, 引起附近晶体失配和不均匀性变形, 导致局部应力集中, 载荷曲线出现波动^[48, 49]。

采用 Oliver-Pharr 方法^[50] 计算压入硬度 H 和弹性模量 E , 当压头为刚体时:

$$H = \frac{F_{\max}}{A} \quad (1)$$

$$E = \frac{S\sqrt{\pi}(1-\nu^2)}{2\beta\sqrt{A}} \quad (2)$$

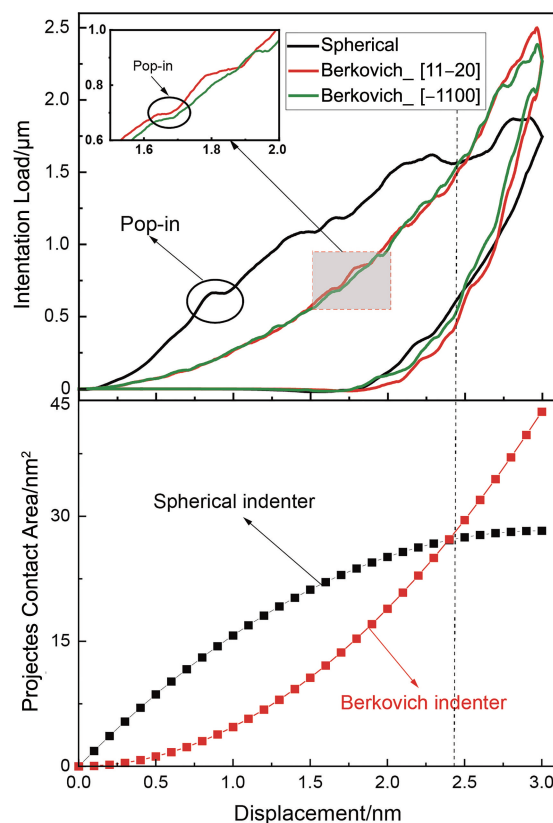


图 2 分子动力学模拟仪器化压入载荷与投影接触面积随压入位移的变化

Fig. 2 The variations of the molecular dynamics simulation instrumented indentation load and the projected contact area with the indentation displacement

式中, F_{\max} 为最大载荷; A 为最大压入位移时投影接触面积; ν 为被测材料的泊松比; β 为与压头形状相关的参数 (对于 Berkovich 压头 $\beta = 1.034$, 对于球形压头 $\beta = 1$)^[51], S 为接触刚度。得到 Berkovich 压头压入硬度和弹性模量大于球形压头, 计算结果见表 1, 这是因为尖锐 Berkovich 压头下材料的应变大于球形压头下材料的应变。并且 Berkovich 压头的尖锐棱边朝向 [11-20] (Berkovich_ [11-20]) 时得到的压入硬度和弹性模量大于尖锐棱边朝向 [-1100] (Berkovich_ [-1100]) 时计算的结果。利用 ELATE 开源程序^[52] 计算了 GaN 单晶的弹性张量 C (单位 GPa):

$$C = \begin{pmatrix} 326 & 112 & 79 & 0 & 0 & 0 \\ 112 & 326 & 79 & 0 & 0 & 0 \\ 79 & 79 & 361 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 95 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 95 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 109 \end{pmatrix} \quad (3)$$

其中, $C_{12} = 112$ GPa 和 $C_{13} = 79$ GPa 分别反映了 [11-20] 和 [-1100] 方向的弹性系数^[53], $C_{12} > C_{13}$ 。当压头尖锐棱边朝

向 $[11-20]$ 晶向时，材料抵抗变形的能力比尖锐棱边朝向 $[-1100]$ 晶向时更强，导致 Berkovich $[-1100]$ 压入情况下计算的硬度和弹性模量高于 Berkovich $[11-20]$ 。

表 1 分子动力学模拟仪器化压入 GaN 在 3 种情况下的硬度及弹性模量

Table 1 Indentation hardness and elastic modulus by instrumented indentation of GaN for three different conditions

	Spherical	Berkovich_ [-1100]	Berkovich_ [11-20]
H/GPa	19.8	29.3	30.1
E/GPa	229	241	259

图 3 为分子动力学模拟仪器化压入 GaN 在最大压入位移时原子绝对位移的分布。图 3a 显示球形压头压入时原子滑移方向主要沿着 $\langle 11-20 \rangle$ 晶向族的 6 个滑移方向^[54]。图 3b 和 3c 分别对应 Berkovich 压头尖锐棱边朝向 $[11-20]$ 和 $[-1100]$ 情况。Berkovich 压头下材料的位移主要出现在压头 3 个侧面的方向上，呈现中间多、两边

少的现象。当 Berkovich 压头尖锐棱边朝向 $[11-20]$ 时，原子滑移的方向为 $\langle 11-20 \rangle$ 晶向族中的 3 个方向；当 Berkovich 压头尖锐棱边朝向 $[-1100]$ 晶向时，压头每个侧面都存在着 2 个滑移方向，原子滑移沿着 $\langle 11-20 \rangle$ 晶向族的 6 个滑移方向，6 个方向上原子滑移程度不同，沿着 $[11-20]$ 、 $[-1-120]$ 和 $[1-210]$ 晶向的原子滑移比另外 3 个晶向（即 $[-12-10]$ 、 $[-2110]$ 和 $[2-1-10]$ ）更大。图 3d 显示不同位移区间的原子比例，0~0.1 nm 位移区间内球形压头压入的原子比例明显高于 Berkovich 压头，因为最大压入时，球形压头投影接触面积小于 Berkovich 压头（图 2）。Berkovich 压头尖锐棱边朝向 $[11-20]$ 情况下，移动的原子中大约 45% 的原子位移在 0.1~0.3 nm 小位移区间，高于 Berkovich 压头尖锐棱边朝向 $[-1100]$ 情况，表明 Berkovich $[11-20]$ 情况下晶体抵抗变形能力更强，计算得到的弹性模量和压入硬度也较大。GaN 单晶的压入过程中 $\langle 11-20 \rangle$ 方向族的滑移占主导，受到压头形状及加载方向的影响。

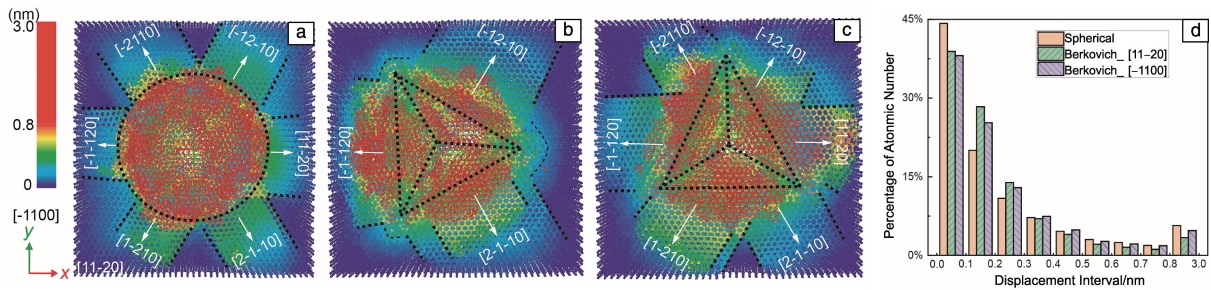


图 3 仪器化压入最大深度时 3 种情况下分子动力学模拟得到的原子绝对位移幅值图像：(a) 球形压头，(b) Berkovich $[11-20]$ ，(c) Berkovich $[-1100]$ ，(d) 不同位移区间的原子比例

Fig. 3 Distribution of atomic displacement (absolute amplitude) at the maximum indentation displacement during molecular dynamics simulation instrumented indentation for three different conditions: (a) the spherical indenter, (b) Berkovich $[11-20]$, (c) Berkovich $[-1100]$, (d) the percentage of atomic number of different displacement intervals

图 4 显示纳米压痕卸载后 Ga 原子和 N 原子的堆积以及缺陷分布。图 4a 显示球形压头压入后在接触边界存在一圈堆积的原子，球形压头晶体表面较平整。图 4b 和 4c 分别显示 Berkovich $[11-20]$ 和 Berkovich $[-1100]$ 2 种

情况的结果，发现 Berkovich $[11-20]$ 压入后原子堆积主要出现在 3 个边的中间部分，Berkovich $[-1100]$ 压入后原子堆积明显偏向于一侧的尖角。

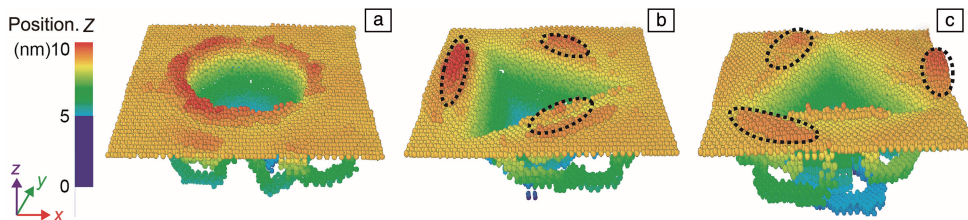


图 4 分子动力学模拟仪器化压入最大深度时 3 种情况下原子堆积和缺陷分布（颜色对应位置，剔除晶体结构完整性部分）：(a) 球形压头，(b) Berkovich $[11-20]$ ，(c) Berkovich $[-1100]$

Fig. 4 Atomic accumulation and defect distribution during molecular dynamics simulation instrumented indentation for three different conditions (the position is indicated by color, and the crystal structure integrity part is eliminated): (a) the spherical indenter, (b) Berkovich $[11-20]$, (c) Berkovich $[-1100]$

图 5 为压入卸载时晶体位错在 GaN 表层区域的分布, 位错主要分为两部分: 接触区域外围的完整位错, 长度较长, 结构稳定, 主要为刃位错 (a-type, $b = 1/3\langle 1-210 \rangle$), 随着原子滑移方向逐渐往外围扩展; 压头底部主要为

部分位错, 种类复杂, 长度短且不稳定^[55]。随着压头深入, 部分位错会逐渐滑移到接触区域边缘, 并演变为完整刃位错, 同时新的部分位错会出现在压头下方区域^[56]。

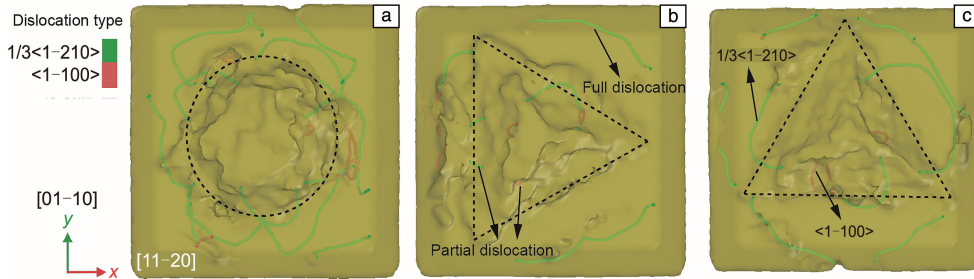


图 5 分子动力学模拟压入卸载后 GaN 表层区域的位错分布: (a) 球形压头, (b) Berkovich_ [11-20], (c) Berkovich_ [-1100]

Fig. 5 Molecular dynamics simulation of dislocation distribution in GaN surface region after indentation unloading; (a) spherical indenter, (b) Berkovich_ [11-20], (c) Berkovich_ [-1100]

图 6a 为 MD 模拟 GaN 纳米划入时 3 种不同情况下压头所受的法向力 F_n 和切向力 F_t 变化情况。划痕初始阶段, 随着切削距离增加, 载荷逐渐变大, 当切削距离大于 6 nm 以后, 载荷逐渐趋于平稳, 划痕进入稳定阶段^[57]。球形压头的法向载荷最大, Berkovich 压头尖角朝前次之, Berkovich 压头面朝前最小。相同条件划入 GaN 单晶 Ga 面时, 球形压头需要更大的载荷来克服材料变形。在稳定阶段, 3 种不同情况下切向力大小基本相同, 这主要与压头切削方向的投影接触面积相关^[58]。图 6b 为压头切向投影面积, 两种情况面积计算公式为:

$$S_{\text{Spherical}} = \alpha R^2 - (R - h) \sqrt{R^2 - (R - h)^2} \quad (4)$$

$$S_{\text{Berkovich}} = h^2 \tan \beta \quad (5)$$

其中, $\alpha = \arctan \frac{\sqrt{R^2 - (R - h)^2}}{R - h}$, $\beta = 64^\circ$, R 和 h 分别为 3 和 2 nm。计算出球形和 Berkovich 压头面积分别为 8.25 和 8.20 nm²。

对 Berkovich 压头面朝前的情况来说, 划入时 F_t 的波动较另外 2 种情况更稳定, 这是因为另外 2 种情况划入时产生较多的位错 (图 7a), 造成局部材料硬化, 引起 F_t 上下波动较大^[59]。载荷位移曲线的 pop-in (载荷曲线平移) 代表内部出现位错, 之后的曲线波动明显变大, 也说明了位错增多会影响载荷值的波动。

图 7 为纳米划入时 3 种情况下的晶体位错分布和演化情况, Ga 面划入时主要产生刃位错和少量混合位错。球形压头划入后位错最为严重, 主要集中于划入轨迹的左右两侧和前方, 其中存在较多的部分位错, 说明球形压头划入过程中造成的晶体破坏较多, 晶体滑移严重, 产生较多的畸形位错 (图 7b)。图 7a 中 Berkovich 压头尖

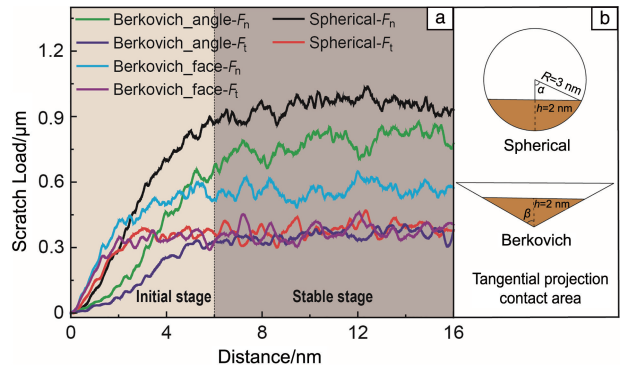


图 6 分子动力学模拟 GaN 纳米划入时 3 种不同情况下切削力在划入过程中的变化 (a) 和压头切向面积示意图 (切削距离 16 nm, 切削深度 2 nm, 切削速率 50 m/s, Berkovich 压头下 2 种情况面积相同) (b)

Fig. 6 The cutting force of GaN for three different conditions during molecular dynamics simulation nano-scratching (a) and the schematic diagram of the tangential contact area of the indenter (distance = 16 nm, cutting depth = 2 nm, cutting speed = 50 m/s, Berkovich indenter with the same area in two conditions) (b)

角朝前情况下位错主要存在于两侧的接触面, 压头前方和划入轨迹上基本没有位错。图 7c 为 Berkovich 压头尖角朝前划入过程中的位错产生演变图, 压头刚开始接触晶体时, 压头前方两个接触面外围出现位错, 随着划入进行, 压痕两侧位错增多, 并不断向外滑移扩展, 逐渐与划痕轨迹线平行。又因为压头前进时挤压作用, 位错受外力堆积到一起, 互相抵消重新生成部分红色畸形位错^[60, 61]。

Berkovich 面朝前情况下压头产生的位错最少, 基本都在划痕轨迹的正下方, 且主要是部分位错, 与之前 2 种情况存在明显差异。结合图 7d 位错演变图可以发现, 压头在刚开始划入时, 压头正前方存在因原子滑移

而产生的位错，且随着划痕深入，压头前方产生的位错逐渐增多，在划入 4 nm 处压头正前方较远处产生了 3 条平行的刃位错，说明晶体加工中位错扩展范围较大^[62]。随着压头移动位置超过外围扩展位错的位置，压头便会

穿过位错线，破坏掉原有的位错，如图 7d 中压头在 6 nm 处时。MD 模拟中，压头从工件一端移动到另一端，会将前方所有的位错破坏掉，划入过后，只在划痕底部存在部分不完整位错。

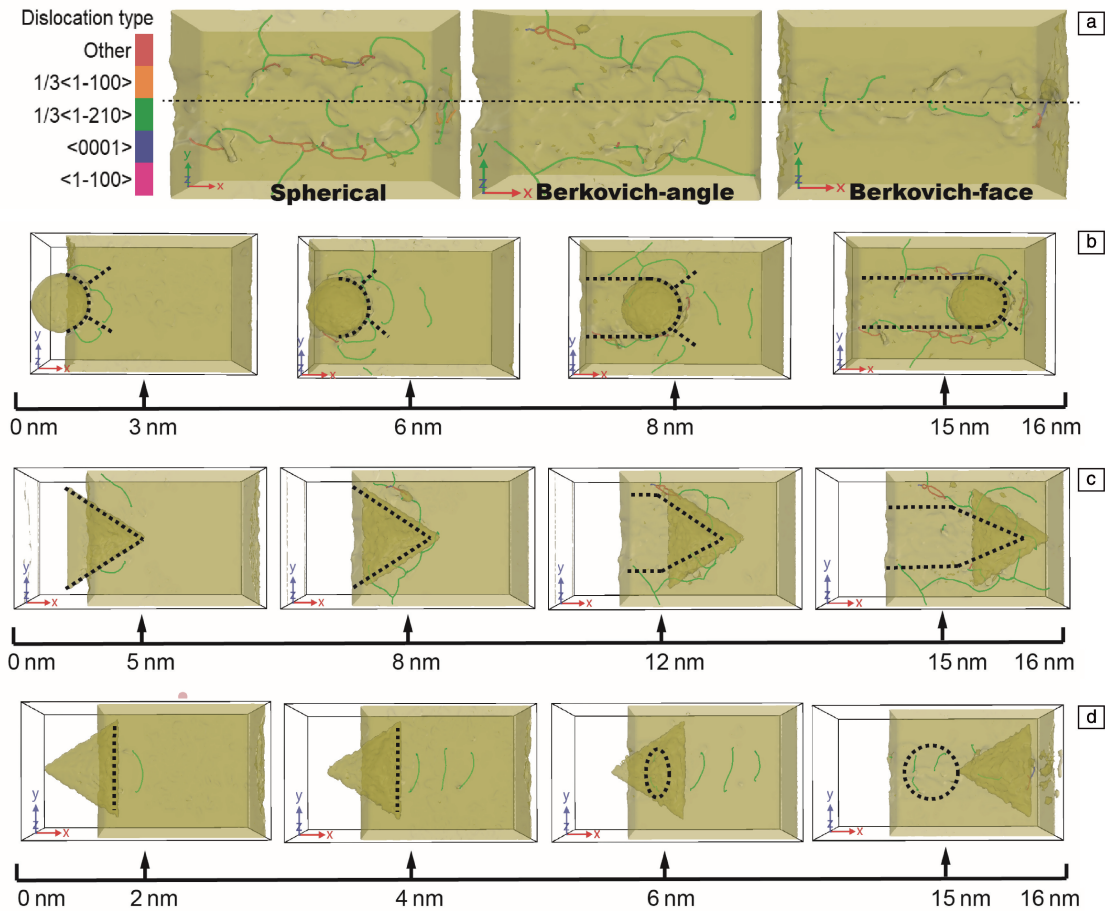


图 7 分子动力学模拟 3 种情况划入时 GaN 表层位错分布：(a) 划入后位错分布；(b~d) 球形压头、Berkovich 压头尖角朝前和面朝前划入时的位错演变

Fig. 7 Distribution and evolution of dislocation on GaN subsurface for three different conditions during molecular dynamics simulation scratching: (a) dislocation distribution after scratching; (b~d) the dislocation evolution under the spherical indenter, Berkovich indenter with the sharp angle forward and the face forward

图 8 为划入后晶体结构剖视图，主要体现了划入过后晶体亚表层结构的转变以及原子堆积情况。划入后半部分晶体变形区域深度明显大于划入前半部分的深度，说明弛豫作用对加工后的晶体结构损伤具有一定的恢复效果^[63]。

对于球形压头来说，划入后的变形区域范围较大，晶体变形区域较深，另外，图 8 中球形压头加工后的晶体存在较多的四面体晶体结构（蓝色原子），Berkovich 尖角朝前情况的四面体结构原子最少，说明相同加工深度下球形压头对晶体具有更大的应力作用^[64]。

图中虚线为 GaN 工件的初始高度和加工深度，球形剖视图中的原子明显高于工件初始高度，表面原子堆积

发生在压头的两侧和正前方；Berkovich 压头尖角朝前情况下晶体变形区域范围集中，深度较浅，原子堆积主要发生在沟槽两侧内壁；Berkovich 压头面朝前情况下，晶体变形情况较轻，但划痕下方存在几处较深的结构损伤，划痕两侧无原子堆积，堆积集中在压头的正前方。综合比较可得，Berkovich 尖角朝前情况下压头对晶体损伤较小且范围稳定，表面无明显的原子堆积现象，有利于材料的加工去除。

图 9 比较了球形压头和 Berkovich 压头尖角朝前 2 种情况在恒定正压力 F_n 划入时正压力对侧向力 F_t 和划入深度 d_p 的影响，得出 Berkovich 压头尖角朝前的 F_t 和 d_p 大于球形压头，载荷越大，2 种压头之间的差别越明显。

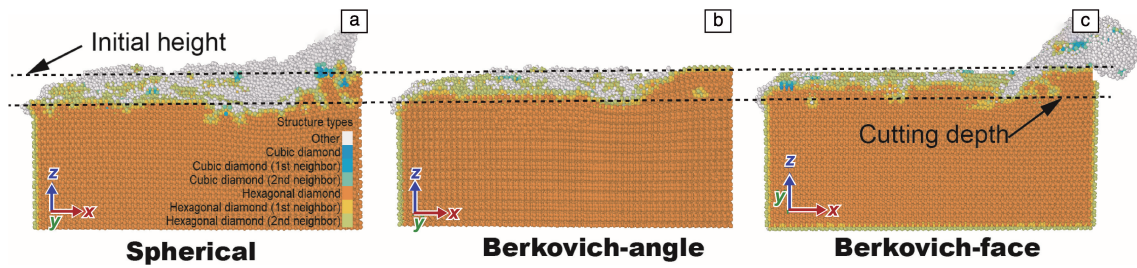


图 8 3 种情况划入时 GaN 的亚表面损伤: (a) 球形压头, (b) Berkovich 压头尖角朝前, (c) Berkovich 压头面朝前

Fig. 8 Subsurface damage of GaN during scratching for three conditions: (a) spherical indenter, (b) Berkovich indenter with the sharp angle forward, (c) Berkovich indenter with the face forward

图 10 显示了球形压头和 Berkovich 压头尖角朝前 2 种情况在 500 mN 正压力下的划痕形貌: 球形压头主要引起弹性变形, 材料几乎没有发生破坏; Berkovich 压头划过后, 晶体表面有明显的鱼骨状塑性变形和小裂纹^[65]。同深度下球形压头较 Berkovich 压头的 F_n 更大, 与 MD 模拟结果一致。

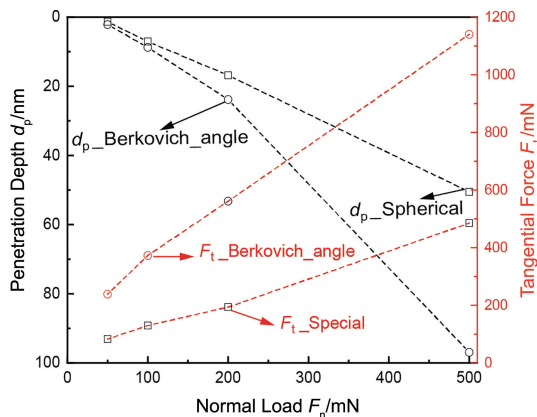


图 9 恒载划痕实验的正压力 F_n 对侧向力 F_t 和划入深度 d_p 的影响
Fig. 9 The changes of penetration depth d_p and tangential force F_t with normal load F_n in the constant load scratch

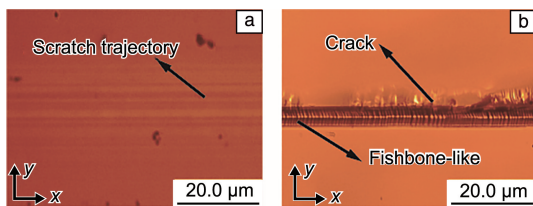


图 10 正压力为 500 mN 时残余划痕光学形貌照片: (a) 球形压头, (b) Berkovich 压头尖角朝前

Fig. 10 Optical morphology of residual scratches under positive pressure of 500 mN: (a) spherical indenter; (b) Berkovich indenter with the sharp angle forward

4 结论

采用分子动力学模拟球形压头和不同角度的 Berkovich 压头对 GaN 单晶仪器化压入和划入过程的影响。通

过对 3 种情况压入的载荷位移曲线进行分析, 发现 Berkovich 压头一尖锐棱边朝向 $[11-20]$ 晶向时, 晶体的硬度和弹性模量最大, 计算得出该方向的弹性张量偏大验证了这一结果。压入过程中, 位错主要分布于压头与材料接触边界的外围; 对于球形压头, Ga 面上的原子滑移主要沿着 $\langle 11-20 \rangle$ 晶向族的 6 个方向; 对于 Berkovich 压头, 尖锐棱边能有效抑制该方向原子的滑移和位错扩展, 当其中一尖锐棱边朝向 $[11-20]$ 晶向时, 原子位移以及位错现象减少, 原子滑移和堆积主要出现在垂直于压头 3 个棱边的方向上。说明晶体加工受到变形破坏时, 晶体本身的各向异性影响以及压头形状和角度共同作用, 造成了晶体表面的最终破坏形貌。

划入过程中, 刃位错主要经历了滑移产生、扩展成型和破坏重组 3 个过程。球形压头划入后产生的位错最多; Berkovich 压头面朝前情况下位错最少, 但压头前方存在大量的材料堆积; Berkovich 压头尖角朝前时位错适中, 且亚表层塑性变形区域均匀, 原子堆积较少。恒载划痕实验验证了模拟时球形压头较 Berkovich 压头具有更大的正压力和材料破坏效果。

参考文献 References

- [1] GANCHENKOVA M G, NIEMINEN R M. Physical Review Letters [J], 2006, 96: 196402.
- [2] 季启政, 王一凡, 胡小锋, 等. 材料导报[J], 2022, 36(22): 22050023-22050026.
JI Q Z, WANG Y F, HU X F, *et al.* Materials Reports[J], 2022, 36(22): 22050023-22050026.
- [3] 杜小娟, 刘晶, 董海亮, 等. 中国材料进展[J], 2023, 42(7): 597-604.
- [4] DU X J, LIU J, DONG H L, *et al.* Materials China[J], 2023, 42(7): 597-604.
- [5] MARI D. Cermets and Hardmetals[M]. Amsterdam: Elsevier, 2001: 1118-1122.
- [6] FLETCHER A S A, NIRMAL D. Superlattices and Microstructures [J], 2017, 109: 519-537.
- [6] LI G, WANG W, YANG W, *et al.* Reports on Progress in Physics

- [J], 2016, 79(5): 056501.
- [7] TRICHAS E, PELEKANOS N T, ILIOPOULOS E, *et al.* Applied Physics Letters[J], 2011, 98: 221101.
- [8] LIU M, XIE P. Journal of Materials Engineering and Performance[J], 2023, 32: 9323-9343.
- [9] LIU M, XU Z, FU H, *et al.* Fusion Engineering and Design[J], 2023, 193: 113857.
- [10] ZHANG Z, DUAN Y, WANG S, *et al.* Journal of Iron and Steel Research International[J], 2023, 31: 464-474.
- [11] LIU M, WU J, GAO C. Journal of Non-Crystalline Solids[J], 2019, 526: 119711.
- [12] LIU M, HOU D, GAO C. Journal of Non-Crystalline Solids[J], 2021, 561: 120750.
- [13] LIU M, YAN F. Thin Solid Films[J], 2022, 756: 139351.
- [14] LIU M, XU Z, ZHANG G. Journal of Materials Engineering and Performance[J], 2023, 32: 6092-6106.
- [15] LIU M, XU Z, FU R. Ceramics International[J], 2022, 48(1): 992-1005.
- [16] LIU M, XU Z. Journal of Advanced Ceramics[J], 2023, 12(6): 1136-1165.
- [17] LIU M, ZHENG Q, WANG X, *et al.* Mechanics of Materials[J], 2022, 164: 104143.
- [18] 刘明, 刘星君, 高诚辉. 摩擦学学报[J], 2021, 41(6): 890-901.
LIU M, LIU X J, GAO C H. Tribology[J], 2021, 41(6): 890-901.
- [19] LIU M, YAN F, GAO C. Polymer Testing[J], 2022, 109: 107542.
- [20] LI S, ZHANG J, LIU M, *et al.* Polymer Bulletin[J], 2021, 78: 6493-6515.
- [21] LIU M, HOU D, WU L. Materials Today Communications[J], 2022, 33: 104480.
- [22] LIU M, HOU D, ZHENG K, *et al.* Materials Today Communications[J], 2023, 35: 106361.
- [23] ZHENG K, LIN Y, LAI T, *et al.* Tribology International[J], 2024, 191: 109110.
- [24] 刘明, 严富文, 高诚辉. 金属学报[J], 2021, 57(10): 1333-1342.
LIU M, YAN F W, GAO C H. Acta Metallurgica Sinica[J], 2021, 57(10): 1333-1342.
- [25] 刘明, 伍家楠. 材料研究学报[J], 2022, 36(3): 191-205.
LIU M, WU J N. Chinese Journal of Materials Research[J], 2022, 36(3): 191-205.
- [26] LIU M, XU Z. SCIENTIA SINICA Physica, Mechanica & Astronomica[J], 2023, 53: 244612.
- [27] LIU M, CONG Z, FU H, *et al.* Journal of Materials Research[J], 2022, 37: 4084-4102.
- [28] 刘明, 李国翔, 周超, 等. 摩擦学学报[J], 2021, 41(4): 467-473.
LIU M, LI G X, ZHOU C, *et al.* Tribology[J], 2021, 41(4): 467-473.
- [29] LIU M, XU Z. SCIENTIA SINICA Physica, Mechanica & Astronomica[J], 2023, 53: 214605.
- [30] 刘明, 黄承馨, 高诚辉. 摩擦学学报[J], 2021, 41(1): 27-37.
LIU M, HUANG C X, GAO C H. Tribology[J], 2021, 41(1): 27-37.
- [31] LIU M, ZHENG Q, WANG X, *et al.* Metals and Materials International[J], 2023, 29: 2257-2286.
- [32] WANG X, XU C, ZHAI A, *et al.* Journal of Alloys and Compounds[J], 2023, 933: 167796.
- [33] 刘明, 李烁, 高诚辉. 摩擦学学报[J], 2019, 39(5): 556-564.
LIU M, LI S, GAO C H. Tribology[J], 2019, 39(5): 556-564.
- [34] LIU M. Nanotechnology and Precision Engineering[J], 2021, 4: 033003.
- [35] LIU M. Engineering Fracture Mechanics[J], 2023, 281: 109126.
- [36] LIU M, HOU D, WANG Y, *et al.* Ceramics International[J], 2023, 49(3): 4482-4504.
- [37] LU J Y, REN H, DENG D M, *et al.* Journal of Physics D: Applied Physics[J], 2012, 45: 085301.
- [38] LI R, WU G, LIANG K, *et al.* Materials Science in Semiconductor Processing[J], 2022, 145: 106648.
- [39] SONG J, ZHOU H, XU Y M, *et al.* Solid State Communications[J], 2022, 353: 114866.
- [40] MENG B, YUAN D, ZHENG J, *et al.* Applied Surface Science[J], 2020, 500: 144039.
- [41] QIAN Y, SHANG F L, WAN Q, *et al.* Computational Materials Science[J], 2018, 149: 230-242.
- [42] PETKOV V, GATESHKI M, CHOI J, *et al.* Journal of Materials Chemistry[J], 2005, 15(43): 4654-4659.
- [43] 吴珍珍, 刘一扬, 韩涛, 等. 微纳电子技术[J], 2022, 59(12): 1368-1374.
WU Z Z, LIU Y Y, HAN T, *et al.* Micronanoelectronic Technology[J], 2022, 59(12): 1368-1374.
- [44] BÉRÉ A, SERRA A. Philosophical Magazine[J], 2006, 86(15): 2159-2192.
- [45] 邓师哲, 千宇, 尚福林. 应用力学学报[J], 2021, 38: 1775-1781.
DENG S Z, QIAN Y, SHANG F L. Chinese Journal of Applied Mechanics[J], 2021, 38: 1775-1781.
- [46] GUO J, CHEN J J, WANG Y Q. Ceramics International[J], 2020, 46(8): 12686-12694.
- [47] ZHANG Z, CAI W, FENG Y, *et al.* Materials Characterization[J], 2023, 200: 112883.
- [48] CORFDIR P, LEFEBVRE P, RISTIĆ J, *et al.* Physical Review B[J], 2009, 80: 153309.
- [49] 张波, 李杰, 吴凯迪, 等. 金属热处理[J], 2023, 48(8): 225-234.
ZHANG B, LI J, WU K D, *et al.* Heat Treatment of Metals[J], 2023, 48(8): 225-234.
- [50] ZENG Q, FENG Y, XU S. Journal of Natural Gas Science and Engineering[J], 2017, 42: 187-189.
- [51] 马德军, 刘建敏, ONG C W, 等. 中国科学: 技术科学[J], 2004(5): 493-509.
MA D J, LIU J M, ONG C W, *et al.* Science CHINA Technological Sciences[J], 2004(5): 493-509.

- [52] GAILLAC R, PULLUMBI P, COUDERT F X. *Journal of Physics: Condensed Matter*[J], 2016, 28: 275201.
- [53] 李明强, 杜梅芳, 乌晓江, 等. *燃料化学学报*[J], 2013, 41(2): 157-162.
LI M Q, DU M F, WU X J, *et al.* *Journal of Fuel Chemistry*[J], 2013, 41(2): 157-162.
- [54] HUANG J, XU K, GONG X J, *et al.* *Applied Physics Letters*[J], 2011, 98: 221906
- [55] WU Z, LIU W, ZHANG L. *Ceramics International*[J], 2019, 45(11): 14229-14237.
- [56] YU D L, LIU D L, YI J Q, *et al.* *Crystals*[J], 2022, 12(9): 1223.
- [57] ZHANG C Y, DONG Z G, ZHANG S H, *et al.* *International Journal of Mechanical Sciences*[J], 2022, 214: 106888.
- [58] 孙宝元. *大连工学院学报*[J], 1987(4): 63-68.
SUN B Y. *Journal of Dalian University of Technology*[J], 1987(4): 63-68.
- [59] DING Z, ZHAO Y, GUO M, *et al.* *Journal of Manufacturing Processes*[J], 2023, 86: 311-325.
- [60] ZHAO P, GAO X, ZHAO B, *et al.* *Journal of Manufacturing Processes*[J], 2023, 102: 429-442.
- [61] PENG R, HAO Y, MENG X, *et al.* *IEEE Transactions on Electron Devices*[J], 2019, 66(5): 2243-2248.
- [62] LI Y, YANG X, DENG J, *et al.* *Materials Today Communications*[J], 2023, 35: 106134.
- [63] LI C, HU Y X, ZHANG F H, *et al.* *International Journal of Mechanical Sciences*[J], 2023, 239: 107856.
- [64] CHEN J. *Materials Science in Semiconductor Processing*[J], 2023, 165: 107651.
- [65] LIU M. *SCIENTIA SINICA Physica, Mechanica & Astronomica*[J], 2023, 53: 214601.