

单晶硅纳米级磨削过程的理论研究

郭晓光 郭东明 康仁科 金洙吉

大连理工大学精密与特种加工教育部重点实验室, 大连, 116021

摘要: 对内部无缺陷的单晶硅纳米级磨削过程进行了分子动力学仿真, 从磨削过程中瞬间原子位置、磨削力、原子间势能、损伤层深度等角度研究了纳米级磨削加工过程, 解释了微观材料去除、表面形成和亚表面损伤机理。研究表明: 磨削过程中, 单晶硅亚表面损伤的主要形式是非晶结构形式, 无明显的位错产生, 硅原子间势能的变化是导致单晶硅亚表面损伤的重要原因; 另外, 发现磨粒原子与硅原子之间有黏附现象发生, 这是由于纳米尺度磨粒的表面效应而产生的。提出了原子量级条件下单晶硅亚表面损伤层的概念, 并定义其深度为沿磨削深度方向原子发生不规则排列的原子层的最大厚度。

关键词: 纳米级磨削; 分子动力学仿真; 加工机理; 单晶硅

中图分类号: TG580.1 **文章编号:** 1004—132X (2008)23—2847—05

Theoretical Study on the Monocrystal Silicon Nanometric Grinding Process

Guo Xiaoguang Guo Dongming Kang Renke Jin Zhuji

Key Laboratory for Precision & Non-traditional Machining of Ministry of Education,
Dalian University of Technology, Dalian, Liaoning, 116021

Abstract: The molecular dynamics method was employed to simulate the grinding process of defect-free monocrystal silicon, to explain the micro-scale mechanism of material removal, surface generation and sub-surface damage from the viewpoint of instantaneous distribution of atoms, grinding force, potential energy among silicon atoms and depth of damage layers. Under the conditions of present simulation, it is discovered that the subsurface damage is mainly composed of the amorphous layers, no obvious dislocations are found. And the subsurface damage of the monocrystal silicon is mainly concerned with the variation of potential energy among silicon atoms. The sorption among silicon atoms and diamond atoms is occurred due to the surface effect of the single grit. On atomic scales, the depth of subsurface damage layer of monocrystal silicon was defined as the maximal thickness of the atomic layers with random array in the subsurface of monocrystal silicon in the direction of grinding depth.

Key words: nanometric grinding; molecular dynamics simulation; machining mechanism; monocrystal silicon

0 引言

在纳米级磨削过程中, 加工过程中的材料去除、脆性/延性机理转变过程以及加工过程的物理现象、基本规律等都和常规加工存在巨大差别。另外, 由于纳米加工过程难于控制以及测量技术的限制, 使得对纳米加工过程的试验、计算、分析存在着很多困难, 目前通常采用分子动力学仿真技术来分析研究纳米加工过程^[1-3]。20 世纪 90 年代后, 随着计算机硬件的飞速发展, 分子动力学仿真在物理、化学、生物学、材料学、摩擦学等领域得到了很好的应用。在 20 世纪 80 年代末期, 美国劳伦斯实验室 (LLNL)^[4] 首先应用分子动力学研究纳米级机械加工过程, 随后, 日本的 Osaka 大学也开展了这方面的研究工作^[5]。国内分子动

力学模拟的研究工作起步较晚, 清华大学、天津大学、哈尔滨工业大学、大连理工大学等应用分子动力学仿真技术对纳米级切削和磨削过程进行了研究^[1-3, 6-7]。应用分子动力学仿真技术研究纳米级机械加工过程是一个多学科交叉的前沿性课题, 目前主要的工作集中在纳米级切削、压痕、研磨和磨削过程的研究上。

本文应用分子动力学方法建立了单晶硅超精密磨削过程的分子动力学仿真模型, 应用计算机并行技术编制了数十万粒子规模的分子动力学仿真软件, 并进行了模拟计算和分析。

1 分子动力学仿真

1.1 单晶硅磨削过程分子动力学仿真模型

单晶硅磨削过程三维分子动力学模型如图 1a 所示。磨粒由金刚石原子组成, 仿真中认为磨粒是绝对刚性的, 即不因外力作用而变形磨屑。工件由单晶硅原子组成, 分为牛顿层、恒温层和固

收稿日期: 2007—10—17

基金项目: 国家自然科学基金资助重大项目 (50390061); 国家杰出青年科学基金资助项目 (50325518)

定边界层,如图 1b 所示。牛顿层的原子运动可由牛顿方程来描述;恒温层的引入是为了使磨削过程中产生的热量及时传导出去,该层原子需要被标度以保持该区域温度恒定^[7];固定边界层的原子始终保持不动,以减小边界效应和保证晶格的对称性,可不参与计算。

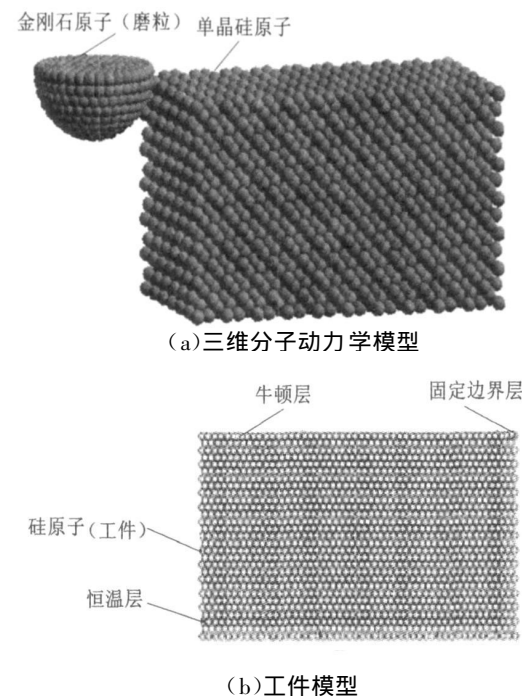


图 1 单晶硅磨削过程分子动力学仿真模型

1.2 势函数的选择和力的计算

单晶硅是金刚石型晶体结构,对硅原子势能的计算应考虑多原子价键之间的相互影响因素,故采用多原子系统的 Tersoff 势函数^[8]对单晶 Si-Si 和金刚石 C-C 以及 Si-C 进行计算:

$$u(r_{ij}) = f_c(r_{ij})[f_r(r_{ij}) + b_{ij}f_a(r_{ij})] \tag{1}$$

式中, $u(r_{ij})$ 为原子 i 与原子 j 之间的势函数; $f_c(r_{ij})$ 为截断函数; $f_r(r_{ij})$ 为排斥项函数; b_{ij} 为低价函数; $f_a(r_{ij})$ 为吸引项函数; r_{ij} 为原子 i 与原子 j 之间的距离。

具体参数值参见文献[8]。

势函数确定以后,原子之间的作用力就可以通过势函数对 r_{ij} 求导得出,即

$$F_{ij} = - \frac{du(r_{ij})}{dr_{ij}} \tag{2}$$

式中, F_{ij} 为原子 i 与原子 j 之间的作用力。

作用在原子 i 上的总原子力等于其周围所有原子对该原子作用力的合力,即

$$F_i = \sum_j F_{ij} = - \sum_j \frac{du(r_{ij})}{dr_{ij}} \tag{3}$$

1.3 温度转换模型

仿真过程中原子动能和温度之间的转换对仿真结果有很大影响,所以建立合理的温度转换模型至关重要。目前常用的温度转换模型主要有 Dulong-Petit 模型、Debye 模型和 Einstein 模型。Sinnott 通

过对比实验证明:在纳米级加工过程中,Debye 模型最适用于硅原子,而 Einstein 模型适用于金刚石原子^[9]。本文对单晶硅原子采用了 Debye 温度转换模型,得到了非常理想的效果,公式如下:

$$c_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = \frac{12\pi^4 N k_B}{15} \left(\frac{T}{\Theta_D}\right)^3 \tag{4}$$

式中, c_V 为质量定容热容; \bar{E} 为固体的平均热力学能(内能); T 为温度; N 为原子总数; k_B 为玻尔兹曼常数; Θ_D 为 Debye 温度。

由式(4)可知,在极低温度下, c_V 与 T^3 成正比,这个关系式与实验相符合,称为德拜定律。温度越低,德拜模型近似越好^[10,11]。

1.4 系统的运动方程及其算法

分子动力学仿真中方程组的建立是通过对物理系统的微观数学描述给出的,系统中每个原子都各自服从经典牛顿力学规律,直接用牛顿运动方程来描述为

$$\frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = \frac{1}{m} \sum_{j \neq i} F_i(r_{ij}) \tag{5}$$

$$\frac{dr_{ij}(t)}{dt} = v_i(t) \tag{6}$$

式中, v_i 为粒子 i 的速度; t 为时间; m 为原子的质量。

牛顿运动方程描述了粒子的运动轨迹,它是一个二阶微分方程,其解可通过对时间积分得到。首先求出速度,然后求得位置。为了求牛顿运动方程数值解,可用差分算子系统来近似求解。当求出新的位置方程和速度方程后,即可得到被广泛采用的 Verlet 算式:

$$r_i^{n+1} = 2r_i^n - r_i^{n-1} + F_i^n t_s^2 / m \tag{7}$$

$$v_i^n = (r_i^{n+1} - r_i^{n-1}) / (2t_s) \tag{8}$$

式中, t_s 为计算的时间步长; t_n 为第 n 个时间步长。

Verlet 算法的速度变型形式即为 Velocity Verlet 法,它将会使数值计算的稳定性得到加强,而且可以在计算中得到同一时间步长上的空间位置和速度,故本文采用了此种算法,其算式如下:

$$r_i^{n+1} = r_i^n + t_s v_i^n + F_i^n t_s^2 / (2m) \tag{9}$$

$$v_i^n = v_i^n + t_s (F_i^{n+1} + F_i^n) / (2m) \tag{10}$$

建立上述模型后,根据现有计算机的能力,选择适合的计算量,编制分子动力学计算机仿真程序,具体仿真实验的参数见表 1。

表 1 单晶硅磨削过程仿真实验参数

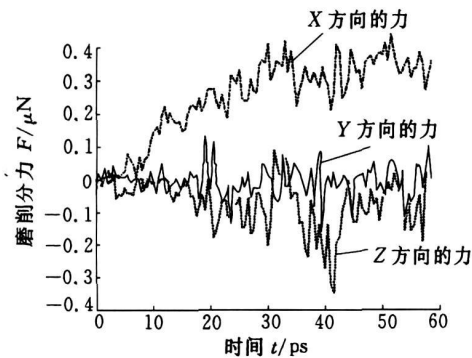
仿真图形	3D 图形显示
工件与磨粒的材料	单晶硅、金刚石
工件原子数	27 007
磨粒原子数	9019
磨削速度 v (m/s)	100
磨削平面	(1 0 0)
磨削方向	[1 0 0]
仿真温度 T (K)	293
时间步长 t (fs)	10
磨削深度 d (nm)	0 ~ 4

2 仿真结果分析

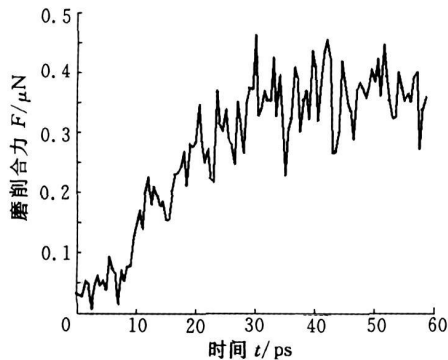
2.1 磨削力分析

磨削力是理解磨削过程的一个重要物理参数,它清晰反映了材料的去除过程。纳米级磨削过程中磨削力的来源与宏观磨削过程中磨削力的来源有很大区别,宏观磨削过程中磨削力是磨削过程中产生的切削力和摩擦力的总和,而超精密磨削过程中磨削力主要来源于单晶硅原子和金刚石磨粒原子之间的相互作用力。

磨削过程中,单晶硅受到磨粒的作用,其受力情况如图2所示,图2中, X 方向的磨削力为剪切力,随着磨削过程的进行,合力和 X 方向的剪切力在不断波动中逐渐增大,增大到一定值以后不再增大但还有微小的波动,这主要是因为磨粒进入工件后磨削过程逐渐趋于稳定。 Y 方向和 Z 方向的力虽然有微小波动但变化不显著,故认为单晶硅磨削过程中剪切力占主导地位。从仿真结果看,原子晶阵是在剪应力的作用下发生原子键断裂,同时受到磨粒前下方的压应力的挤压,导致晶格变形、晶格重构和非晶相变。由于磨粒不断前移,故处在磨粒下方的非晶层原子在压应力的作用下与已加工表层断裂的原子键结合,重构形成已加工表面变质层,而处在磨粒前方的原子在剪切力作用下被去除掉,形成切屑。



(a) 作用在工件上各方向的分力



(b) 作用在工件上的合力

图2 单晶硅磨削过程分子动力学仿真磨削力的变化

从图2可以看出,各方向上的分力及其合力——磨削力都在往复波动,有些地方波动很剧烈。力的这种波动与晶格的变形、晶格重构和非晶相变有密切关系,当磨削力增大并超过原子之间结合力临界值且不足以形成位错时,原子点阵被破坏,导致原子键断裂,成为非晶态原子,此时磨削力会陡降至一个较低水平波动,而且这种作用力的波动在整个磨削过程中不断重复,因此可以认为这是由于非晶相变而产生的作用力波动现象。晶格变形和重构也是压应力、剪切力和磨削力波动的原因。波动现象产生的另一个主要原因是由于切屑的产生,磨粒给切屑一个向上的力,使其脱离加工表面。这个向上的力的方向与磨粒给工件原子的磨削力方向相反,抵消了一部分磨削力,也导致了磨削力的波动^[12]。

2.2 势能分析

图3所示为单晶硅纳米级磨削仿真过程中的势能变化曲线,随着磨削过程的进行,硅原子间的势能不断增大,增大到一定值后开始稳定,这也是因为磨粒进入工件后磨削过程逐渐趋于稳定,磨削的整个过程中硅原子间势能伴有一定的往复波动。硅原子间势能的增大和波动的原因与磨削力增大和波动的原因类似,这里不再赘述。由图3可以断定磨削过程中没有明显的位错发生,在共价键晶体中位错的发生和运动要克服高能势垒,其结果必然导致能量的涨落,而图3中势能仅有很小的波动,所以单晶硅的纳米级磨削过程中没有明显的位错产生。

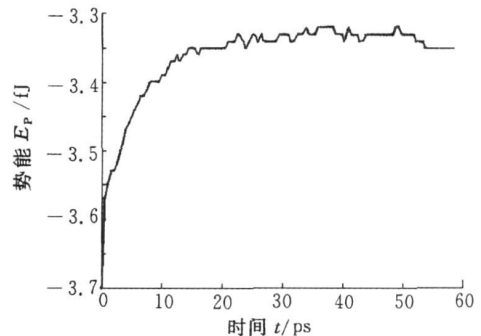


图3 单晶硅磨削过程分子动力学仿真势能的变化

2.3 亚表面损伤和材料去除机理分析

本文选取了三维仿真过程中4个瞬间原子位置图,包括磨削方向和垂直于磨削方向的原子位置图(图4)来进行研究。

结合图4以及力和能量的分析可知,磨粒附近的单晶硅表面及内部有晶格变形存在,但无明显的裂纹产生,材料的去除方式应为塑性变形方式,无明显的位错产生,因此可以把磨削过程解释为:随着磨粒的运动,与金刚石磨粒接触的最外层

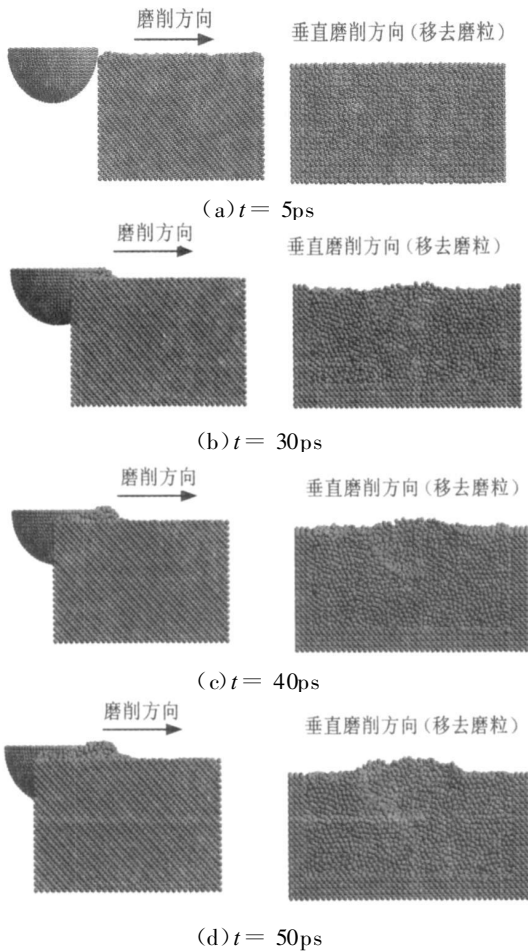


图4 单晶硅超精密磨削过程分子动力学仿真结果

硅原子与金刚石原子间的作用力由引力转化为排斥力,同时它们又受到内部硅原子的作用力,由于金刚石原子的结合能大,在磨削过程中不会变形磨损,因此最外层的硅原子受到的排斥力占主导地位,从而使得磨粒前下方的硅晶格在磨粒的作用下发生剪切挤压变形;随着金刚石原子与硅原子之间距离的不断减小,原子间的排斥力增大,由于磨粒作用产生的能量以晶格应变能的形式贮存在单晶硅的晶格中,因而此能量也随着力的增大而不断增大,当贮存在变形晶格中的应变能超过一定值且不足以形成位错时,硅的原子键就会断裂,规则的晶格结构将被打破,原子排列逐渐变为无序状态(也就是非晶态),此时也就形成了非晶层;当处在磨粒下方的非晶层原子在磨粒的作用下与已加工表层断裂的原子键结合,晶格进行重构,那么就形成了已加工表面的变质层,这个无序区域逐渐向前向深处延伸和扩展,造成了单晶硅亚表面的损伤;另外,随着磨粒的移动,与磨粒前方接触的硅表面原子受到磨粒的挤压和剪切,堆积在磨粒的前方和两侧(图4c和图4d),当贮存在变形晶格中的应变能超过一定值且不足以形成位错时,硅的原子键断裂,形成切屑,即完成材料的

去除过程。

在图4b~图4d中,我们发现在磨削过程中,非晶层的硅原子所受金刚石的引力似乎非常大,将非晶层的原子几乎都吸了起来。实际上,金刚石磨粒对单晶硅原子的引力并不至于此,这种现象与纳米级条件下磨粒的表面效应有关。纳米级条件下,纳米级结构表面原子数随纳米结构尺寸的减小而急剧增大,引起的性质上的变化称为表面效应。由于纳米级结构尺寸减小,表面原子数急剧增加,比表面积、表面结合能迅速增大,根据最小能量原理,它将自发地向最低能量状态变化,从而使系统的表面能减小。另外,由于表面原子数的增加,原子配位的不足必然导致纳米结构表面存在许多缺陷,使这些表面具有很高的活性和极不稳定性,很容易与其他原子结合,所以磨粒具有很高的表面能,对单晶硅原子的黏附作用比较显著,因此出现了图4b~图4d中的现象。

2.4 损伤层深度分析

在宏观状态下,硅片的亚表面损伤深度(subsurface damage depth, SDD)通常是指沿硅片轴线方向从硅片表面到亚表面无缺陷硅晶体的厚度,它是评价硅片质量的一个重要参数。弄清楚每一道加工工序对硅片亚表面损伤深度的影响,不但可以对该道工序作出合理的评价以及进行适当的工艺参数优化,而且还有利于下一道工序的加工时间以及去除量等参数的确定,从而能够显著降低生产成本,也能进一步有效控制最终硅片的质量,提高硅片的良品率。

仿真结果表明:磨削过程中,由于金刚石磨粒的作用,单晶硅晶格发生了挤压剪切变形、晶格重构以及非晶相变等。虽然没有明显的位错产生,但也不能完全肯定损伤仅由非晶层组成,所以我们为了分析方便,借鉴了宏观条件下硅片亚表面损伤深度的定义,提出了原子量级条件下单晶硅亚表面损伤层的概念,即原子发生不规则排列的硅晶层,其深度可定义为:沿磨削深度方向原子发生不规则排列的原子层的最大厚度。

图5所示为单晶硅纳米级磨削过程损伤层深度随时间的变化曲线,随着磨削过程的进行,损伤层深度不断增大,这是因为在磨粒的作用下,磨粒前下方原子发生非晶态转变,一部分向后运动与已加工表面原子重构形成加工变质层,另外一些不断向深处延伸和扩展,这些都构成了单晶硅表面和亚表面的损伤,并且随着磨削进入到稳定状态,损伤层深度逐渐趋于稳定。

综上所述,单晶硅纳米级磨削后硅片亚表面

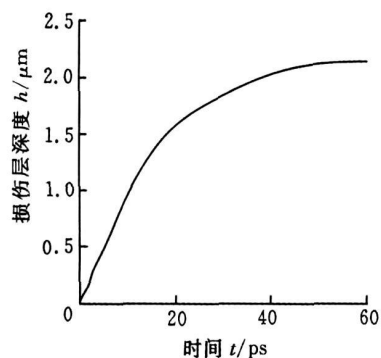


图5 单晶硅磨削过程中损伤层深度的变化

的损伤主要是由非晶层组成, 另外还有晶格变形和晶格重构, 硅片亚表面损伤主要是由硅晶格内存储的能量的变化引起的, 即单晶硅纳米级磨削后亚表面的损伤是基于能量的原理, 随着硅原子间势能的增大, 硅片亚表面损伤层的深度也随之增加。要控制单晶硅纳米级磨削后亚表面损伤层的深度, 就要控制硅原子间势能的增大, 由于硅原子间势能与磨削力有密切关系, 因此可以通过减小磨削力的方法来控制磨削后的工件亚表面的加工质量。由于在纳米级磨削过程中磨削力主要来源于单晶硅原子和金刚石磨粒原子之间的相互作用力, 所以只要控制磨削深度、磨粒钝圆半径和磨削速度等参数即可控制纳米级磨削后的亚表面损伤。

3 结论

(1)磨削过程中, 随着磨粒不断切入工件, 磨削力往复波动, 并且有些地方波动很剧烈, 力的这种波动与晶格的变形、晶格重构和非晶相变有密切关系。波动现象产生的另一个主要原因是由于切屑的产生, 磨粒给切屑一个向上的力, 使其脱离加工表面, 这个向上的力与磨粒给工件原子的磨削力反方向相反, 抵消了一部分磨削力, 也导致了磨削力的波动。

(2)材料的去除过程可解释为: 随着磨粒的向前运动, 与磨粒接触的硅表面原子受到磨粒的挤压和剪切, 发生变形, 堆积在磨粒的前方, 当贮存在变形晶格中的应变能超过一定值时, 硅的原子键断裂, 即完成了材料的去除。

(3)提出了原子量级条件下单晶硅亚表面损伤层的概念, 仿真结果表明单晶硅纳米级磨削后硅片亚表面的损伤主要形式是非晶结构形式, 另外还有晶格变形和晶格重构, 无明显的位错产生。硅原子间势能的变化是导致单晶硅亚表面损伤的重要原因。

(4)磨削过程中, 磨粒原子与硅原子之间有黏

附现象发生, 这是由于纳米尺度磨粒的表面效应而产生的。

参考文献:

- [1] 郭晓光, 郭东明, 康仁科, 等. 单晶硅超精密磨削过程的分子动力学仿真[J]. 机械工程学报, 2006, 42(6): 46-49.
- [2] 于思远, 林滨, 韩雪松, 等. 分子动力学仿真技术在超精密加工领域中的应用[J]. 中国机械工程, 2002, 13(1): 22-25.
- [3] 林滨, 韩雪松, 于思远, 等. 纳米磨削过程中分子动力学计算机仿真实验[J]. 天津大学学报, 2000, 33(5): 652-656.
- [4] Hoover W G, Groot A J D. Large-scale Elastic-plastic Indentation Simulation via Nonequilibrium Molecular Dynamics[J]. Physics Review, 1990, A42(10): 5844-5853.
- [5] Shimada S, Ikawa N, Tanaka H. Feasibility Study on Ultimate Accuracy in Micro Cutting Using Molecular Dynamics Simulation[J]. Annals of the CIRP, 1993, 42(1): 91-94.
- [6] 温诗铸. 纳米级摩擦学进展[M]. 北京: 清华大学出版社, 1996.
- [7] Kang R K, Guo X G, Guo D M, et al. Study of Molecular Dynamics Simulation in Nanometric Grinding[J]. Key Engineering Materials, 2004, 257-258: 33-38.
- [8] Tersoff J. Modeling Solid-state Chemistry: Interatomic Potentials for Multicomponent System[J]. Physics Review, 1989, B39(8): 5566-5568.
- [9] Cheong W C D, Zhang L C, Tanaka H, et al. Some Essentials of Simulating Nano-surfacing Processes Using the Molecular Dynamics Method[J]. Key Engineering Materials, 2001, 196: 31-42.
- [10] 黄昆, 韩汝琦. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1985.
- [11] 房晓勇, 刘竞业, 杨会静. 固体物理学[M]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学出版社, 2004.
- [12] 田珺, 梁迎春. 基于分子动力学的单晶硅压痕过程计算机仿真研究[J]. 江苏机械制造与自动化, 2001(4): 139-141.

(编辑 袁兴玲)

作者简介: 郭晓光, 女, 1976年生。大连理工大学机械工程学院讲师、博士。主要研究方向为超精密加工技术和分子动力学仿真。发表论文7篇。郭东明, 男, 1959年生。大连理工大学机械工程学院教授、博士研究生导师。康仁科, 男, 1962年生。大连理工大学机械工程学院教授、博士研究生导师。金洙吉, 男, 1967年生。大连理工大学机械工程学院教授、博士研究生导师。