

基于分子动力学的单晶硅纳米研磨演化机理研究

沈礼昊, 王 艳

上海理工大学机械工程学院, 上海

收稿日期: 2025年3月28日; 录用日期: 2025年4月21日; 发布日期: 2025年4月29日

摘 要

单晶硅在电子领域应用广泛, 由于其硬脆特性, 加工效率低下, 加工质量不稳定, 加工技术仍有待改进, 为了研究单晶硅微观状态下的材料去除机理, 本研究构建了单晶硅研磨的分子动力学模型, 通过模拟了金刚石在纳米级研磨深度下对单晶硅的加工过程, 分析了表面形貌、亚表面损伤和应力分布的变化规律。研究表明, 随着研磨深度的增加, 单晶硅表面由弹性形变转变为脆性断裂从而达到材料去除的目的, 单晶硅表面形貌从光滑逐渐转变为粗糙, 亚表面损伤层厚度和应力分布范围显著增大。通过对单晶硅研磨的分子动力学模型仿真的研究, 为深入理解微观状态下单晶硅研磨机理、优化加工工艺提供了理论依据。

关键词

分子动力学, 表面形貌, 亚表面损伤, 相变

Study on the Evolution Mechanism of Monocrystalline Silicon in Nanoscale Grinding Based on Molecular Dynamics

Lihao Shen, Yan Wang

School of Mechanical Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai

Received: Mar. 28th, 2025; accepted: Apr. 21st, 2025; published: Apr. 29th, 2025

Abstract

Monocrystalline silicon is widely used in the electronics field. However, due to its hard and brittle nature, it suffers from low processing efficiency, unstable machining quality, and requires further improvement in processing technology. To investigate the material removal mechanism of mo-

monocrystalline silicon at the microscopic level, this study established a molecular dynamics model for monocrystalline silicon grinding. By simulating the machining process of monocrystalline silicon with diamond tools at nanoscale grinding depths, we analyzed the evolution patterns of surface morphology, subsurface damage, and stress distribution. The results indicate that as grinding depth increases, the material removal mechanism transitions from elastic deformation to brittle fracture in monocrystalline silicon. Correspondingly, the surface morphology gradually changes from smooth to rough, while both the thickness of the subsurface damage layer and the stress distribution range significantly increase. Through molecular dynamics simulation of monocrystalline silicon grinding, this research provides theoretical foundations for deeper understanding of microscopic grinding mechanisms and optimization of machining processes.

Keywords

Molecular Dynamics, Surface Morphology, Subsurface Damage, Phase Transition

Copyright © 2025 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

单晶硅作为半导体工业中至关重要的基础材料, 具有优异的物理、化学和机械性能, 是制造半导体器件、太阳能电池等产品的理想材料, 其加工质量直接影响着电子产品的性能与可靠性[1]。然而, 由于单晶硅的高硬脆特性也给它加工带来了巨大挑战。传统的机械研磨方法虽然能够实现较高的材料去除率, 但容易在表面引入裂纹、位错等缺陷, 影响器件的性能和可靠性。化学机械抛光[2]虽然能够获得原子级光滑表面, 但加工效率低、成本高, 难以满足大规模生产的需要。随着纳米科技的飞速发展, 对单晶硅表面质量和加工精度的要求日益提高, 为了克服传统加工方法的局限性, 研究人员开始探索新的加工机理和方法。分子动力学模拟作为一种原子尺度的模拟工具, 能够揭示材料在加工过程中的微观机制, 为优化加工工艺、提高加工质量提供理论指导[3]。近年来, 分子动力学模拟在单晶硅加工领域得到了广泛应用, 并取得了丰硕的成果。

分子动力学(MD)研磨通过计算机模拟, 从原子尺度深入探究单晶硅在研磨过程中的行为变化, 为理解微观加工机理、优化加工工艺提供了强有力的理论支撑[4]。它不仅有助于揭示材料去除机制、表面形成过程以及亚表面损伤产生的本质, 还能精准预测和调控加工过程中的各种物理量, 如磨削力、温度分布等[5], 进而实现对加工质量和效率的有效控制。

本研究聚焦于单晶硅分子动力学研磨过程, 旨在运用先进的分子动力学模拟手段, 系统地分析不同研磨深度下磨粒对单晶硅材料去除、单晶硅表面形貌的形成以及研磨过程中单晶硅亚表面损伤的形成的影响规律。通过对模拟数据的深入挖掘和细致分析, 建立准确的模型, 将为实际加工生产的单晶硅超精密加工提供参考依据, 助力半导体制造产业迈向更高的技术水平, 推动电子科技领域的持续进步与创新发展。

2. MD 仿真模型的建立

本次 MD 仿真单晶硅磨粒研磨单晶硅基于模拟软件 LAMMPS [6]进行计算, 后处理使用软件 OVITO 进行可视化操作, MD 仿真模型如图 1 所示。

模型中单晶硅尺寸为 $20 \times 25 \times 15$ nm, 其材料设置为边界层、弛豫层和牛顿层[7]。其中, 提供系统的几何稳定性, 防止边界原子因外力作用而发生移动, 在模拟过程中保持系统的形状和尺寸, 避免因

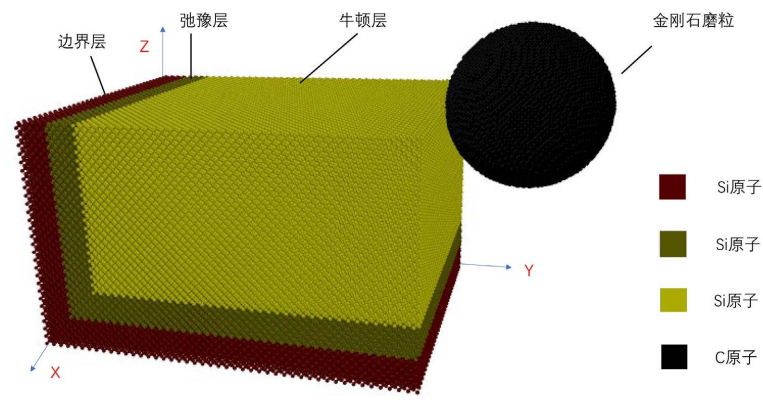


Figure 1. MD model of diamond grinding monocrystalline silicon
图 1. 金刚石研磨单晶硅 MD 模型

边界效应导致的模拟失真，因此将最外侧原子设置为边界层；为防止边界反射的应力波或热波动对系统内部产生影响，吸收从牛顿层传递过来的能量(如应力波、热波动等)，避免能量反射回系统内部，将中间原子设置为弛豫层；为模拟系统的真实动力学行为，原子的运动、变形、相互作用等，将内部原子设置为牛顿层。金刚石磨粒直径设置为 10 nm；由于金刚石硬度远大于硅，所以在模拟中将金刚石磨粒视为刚体[8]；磨粒与单晶硅之间的作用采用 Morse 势[9]来表达；样品 X、Z 方向设置为周期性边界条件，Y 方向为自由边界条件，以减小模型尺寸所造成的影响。

为验证研磨深度对单晶硅研磨的影响，分别以研磨深度(c)为 1 nm、3 nm 和 5 nm 三个条件实现金刚石磨粒研磨单晶硅的仿真过程，磨粒运动速度设置为 10 m/s。仿真过程参数见表 1。

Table 1. MD simulation conditions
表 1. MD 模拟条件

条件	参数
工件尺寸/nm	20 × 25 × 15
原子数量	472,028
研磨方向	(0~10)
磨粒研磨深度/nm	1、3、5
研磨速度/m·s ⁻¹	10
时间步长/fs	1.0
系统温度/K	273

3. 仿真结果与分析

3.1. MD 模型运动分析

本次运动学仿真模拟了金刚石磨粒在不同研磨深度条件下对单晶硅沿着加工路径进行距离为 20 nm 的划擦，图 2 显示了金刚石研磨单晶硅过程中的粒子堆积情况。

如图 2 所示，随着研磨距离的增大，切屑产生的数量也增多，并且由于工件原子之间的相互作用力和磨粒研磨单晶硅时通过切向力的传导使得研磨下来的原子和磨粒具有相同的运动趋势，随着研磨距离的增大，切屑的高度和宽度也在增加[10]。研磨过程中，研磨深度的增加可以增强磨料颗粒对工件表面的

切削作用[11], 从而提高切削去除率。

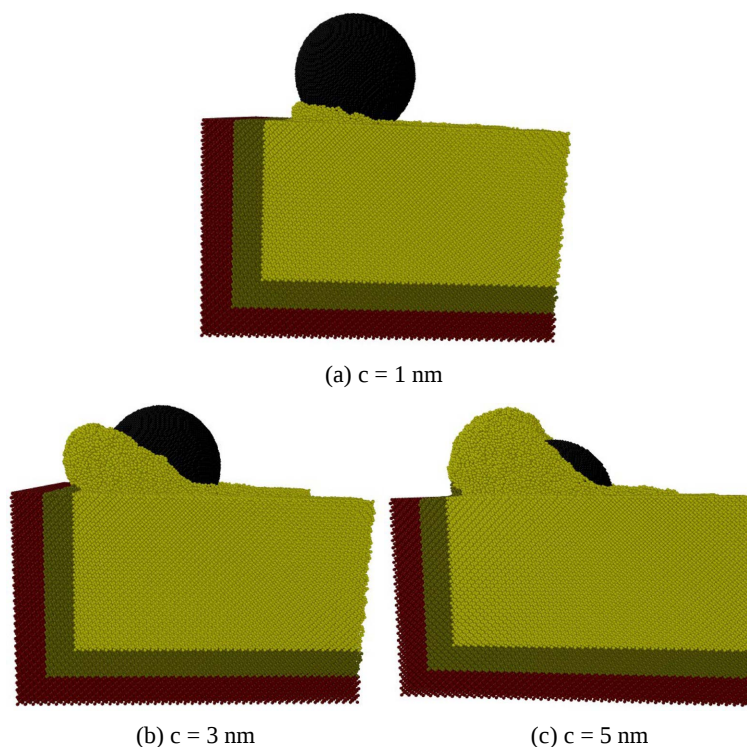


Figure 2. Diamond grinding monocrystalline silicon particle accumulation
图 2. 金刚石研磨单晶硅粒子堆积

在 MD 仿真过程中, 切削力是由于刀具原子和工件原子之间的相互作用力形成的[12]。图 3 显示了在研磨深度分别为 1、3、5 nm 时磨粒切向力与研磨距离的关系, 图 4 显示了在研磨深度分别为 1、3、5 nm 时磨粒法向力与研磨距离的关系, 该图对金刚石磨粒的切削力进行动态统计, 分别记录了在研磨过程中磨粒受到的法向力和切向力。切向力和法向力分别定义为金刚石磨粒原子受单晶硅工件原子的作用力在 X 和 Z 方向的矢量和。

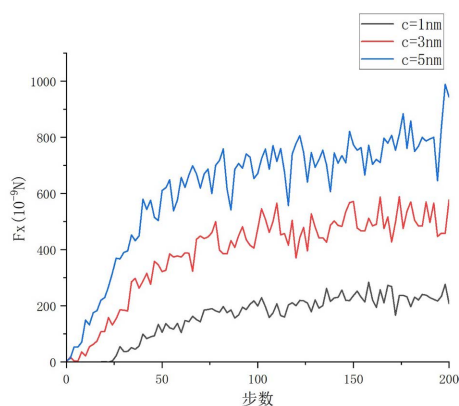


Figure 3. The relationship between the tangential force of the abrasive grain and the grinding distance
图 3. 磨粒切向力与研磨距离关系

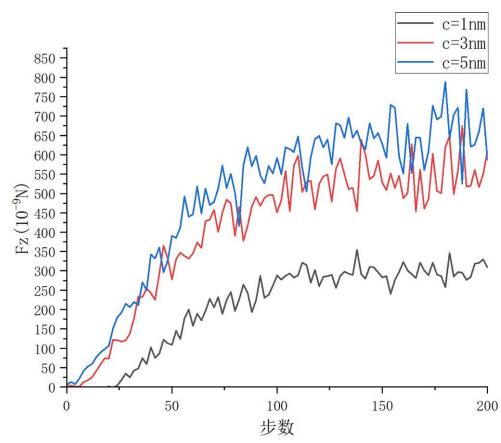
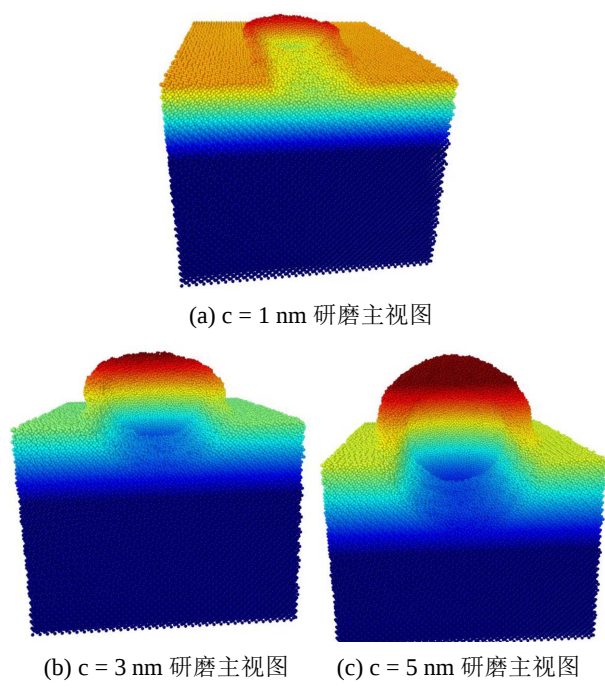


Figure 4. The relationship between the normal force of abrasive particles and the grinding distance
图 4. 磨粒法向力与研磨距离关系

从图 3 和图 4 中可以看出切削力和法向力都随着切削距离在持续波动上升, 切削开始时, 原子间受到挤压开始发生晶格畸变, 当晶格畸变达到一定程度以后, 随着刀具的进给运动, 刀具前方的工件原子逐渐增多, 切削力逐渐增大。在切削距离为 10 nm 之前增长幅度都比较大, 主要是因为在此之前磨粒的作用面没有完全接触单晶硅表面, 随着磨粒完全进入工件, 切削过程开始变得稳定, 被切削的单晶硅粒子堆积导致磨粒的切削力的增长保持在一定范围内。

3.2. 不同研磨深度下单晶硅表面形貌的形成

在材料去除过程中, 单晶硅受到磨粒的冲击和挤压力, 导致晶格原子释放能量。这些能量破坏了工件原间的共价键, 使其发生断裂, 从而形成切屑。图 5 为不同研磨深度下金刚石磨粒研磨后单晶硅的表面形貌。



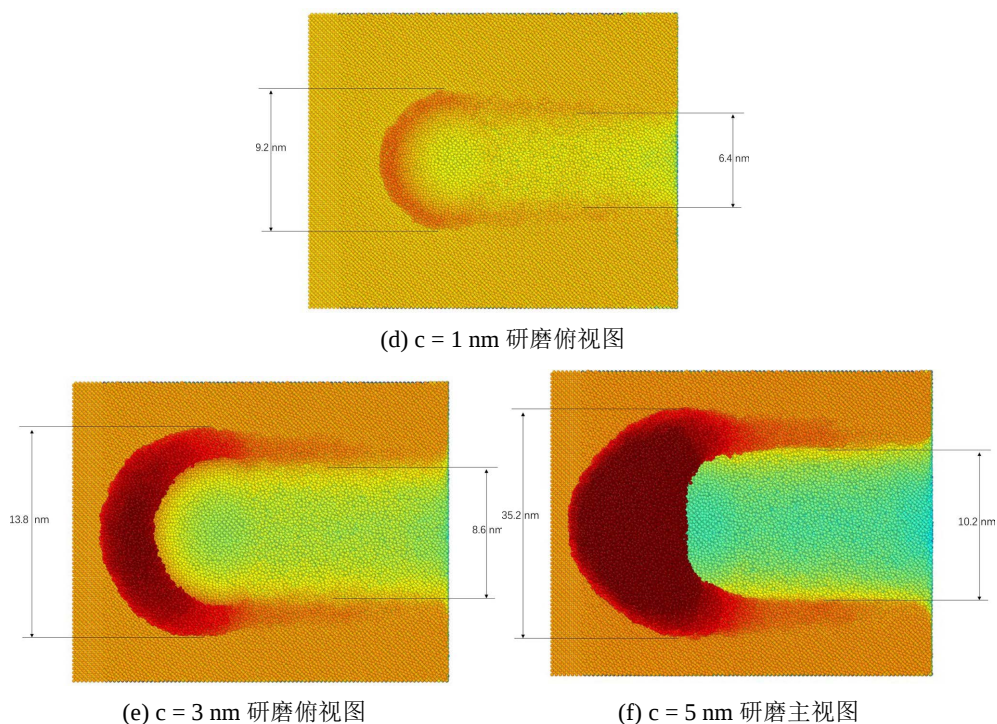


Figure 5. Surface morphology of single crystal silicon with different grinding depth
图 5. 不同研磨深度单晶硅表面形貌

从图 5 可以看出单晶硅原子在受到不同研磨深度的磨粒的加工后, 单晶硅的切屑堆积主要分布在金刚石磨粒的运动前方, 随着研磨深度的增加, 磨粒前方的切屑高度逐步增加, 堆积成高密度的弧状; 磨粒两侧的表面没有明显产生大量的切屑, 但呈现出不同程度的不规则挤压和晶格表面的变形。

不同研磨深度下单晶硅表面形貌的形成是一个复杂的过程, 受到多种因素的影响。在研磨深度较小时(图 5(a)、图 5(d)), 磨粒与单晶硅表面的相互作用主要以弹性变形为主, 材料去除主要是单晶硅表面的微切削和塑性流动[13], 磨粒与单晶硅表面的接触较为均匀, 去除的材料量较少, 主要产生的是微小的划痕和凸起, 整体表面较为平整光滑, 单晶硅表面的粗糙度相对较低; 随着研磨深度的增加(图 5(b)、图 5(e)), 磨粒与单晶硅表面的相互作用逐渐从弹性变形转变为塑性变形, 材料去除主要是塑性流动和脆性断裂, 磨粒对单晶硅的切削作用增强, 形成的划痕和凹坑尺寸变大, 表面起伏更加明显, 单晶硅表面粗糙度增加; 当研磨深度过深时(图 5(c)、图 5(f)), 磨粒与单晶硅表面的相互作用以脆性断裂为主, 材料去除方式主要是裂纹的扩展和材料的剥落, 过大的研磨力会使硅材料内部的应力集中超过其承受极限, 单晶硅加工表面出现大量的裂纹、破碎和剥落现象, 导致材料的破坏和去除不均匀, 表面粗糙度急剧增加。

3.3. 不同研磨深度对单晶硅材料去除的影响

单晶硅研磨过程中的材料去除是由于金刚石磨粒强烈的机械作用力, 导致单晶硅表面原有的长程有序结构被破坏, 转变为无长程有序的非晶态结构[14], 表面原子与单晶硅基体由于结合力较低, 被磨粒挤出单晶硅表面基体的过程。图 6 展示了不同研磨深度作用下单晶硅材料去除(非晶化)模型。

在研磨过程中, 当研磨深度达到一定程度时, 会在单晶硅表面产生非晶态层。非晶态层的厚度和分布与研磨深度密切相关。较深的研磨深度会导致更厚的非晶态层形成, 使表面形貌更加复杂。磨粒对单晶硅表面施加高强度的机械应力, 晶体内部的形成位错运动、裂纹形成以及原子结构的变形。切屑力使

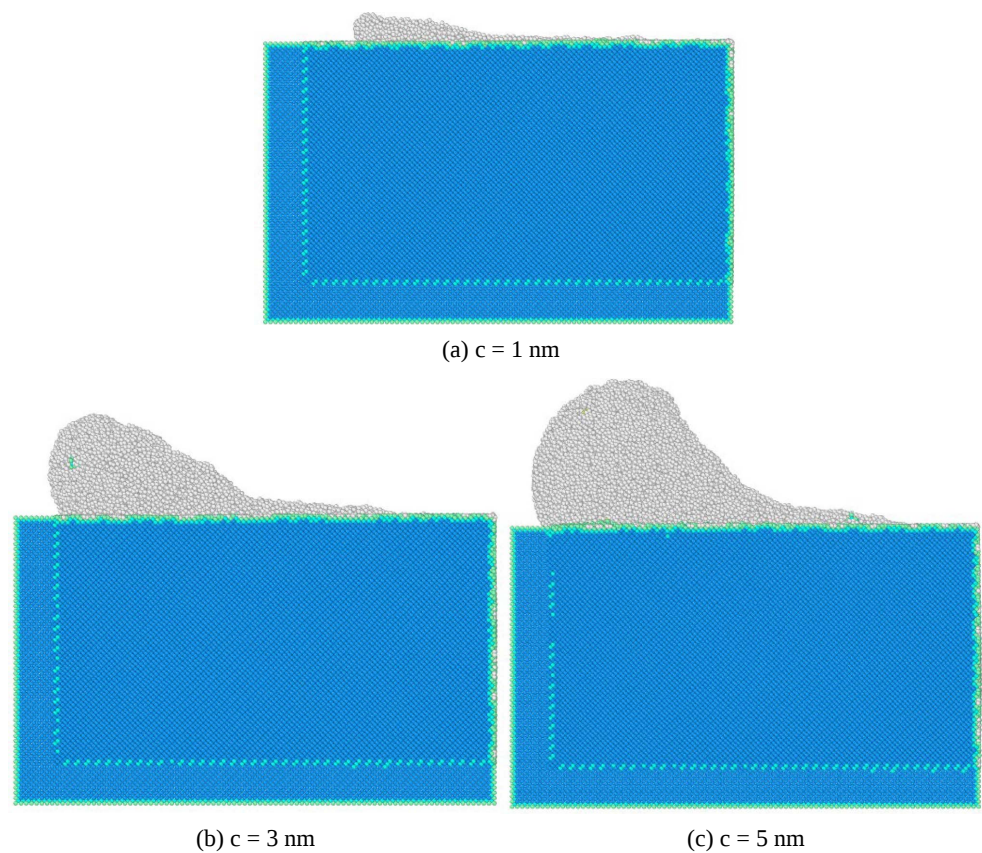


Figure 6. Monocrystalline silicon material removal model with different grinding depth
图 6. 不同研磨深度单晶硅材料去除模型

晶体内部的位错线运动，位错的增殖和相互作用进一步破坏了晶体的有序结构；当晶体结构的破坏达到一定程度时，材料将不再具有长程有序性，形成非晶态；当外力足够大时，非晶化的原子就会因较小的外力因素被去除。在磨粒对单晶硅的研磨作用下的单晶硅的材料去除如图 7 所示。

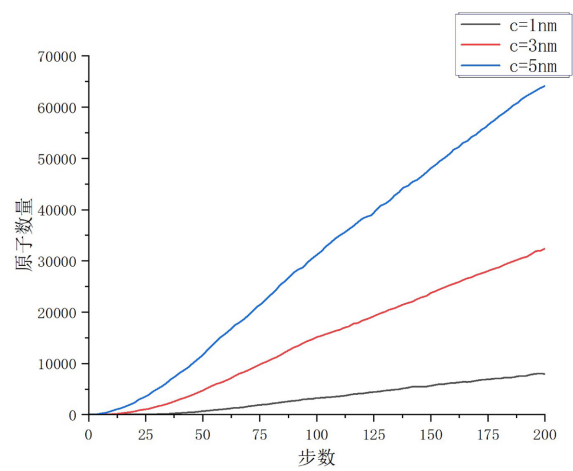


Figure 7. The removal amount of single crystal silicon material with different grinding depth
图 7. 不同研磨深度单晶硅材料去除数量

由图 7 所示可知，研磨深度较浅时，磨料与材料的接触面积相对较小，单晶硅所受的应力和应变相对较小，产生的损伤程度较低，导致每次研磨能够去除的材料量有限，切屑堆积较少，材料去除率相对较低。随着研磨深度的增加，材料内部的应力集中加剧，使得对单晶硅容易产生微裂纹、晶格畸变等损伤，从而更容易的进行表面的材料去除。随着金刚石磨粒研磨距离与研磨深度的增加，磨料与材料的接触面积增大，材料去除率会逐渐提高。随着研磨距离的增加，更多的材料能够被磨料有效地切削或磨损掉，这种增加趋势更为明显。

3.4. 不同研磨深度对单晶硅亚表面损伤的影响

在研磨过程中，由于磨粒与单晶硅之间相互作用的影响，导致材料内部产生极高的局部压力，当局部压力超过单晶硅金刚石立方体晶体的稳定压力范围时，诱导材料发生相变，单晶硅会出现不同程度上的亚表面损伤。图 8 显示了研磨过程中的单晶硅的亚表面损伤示意图。

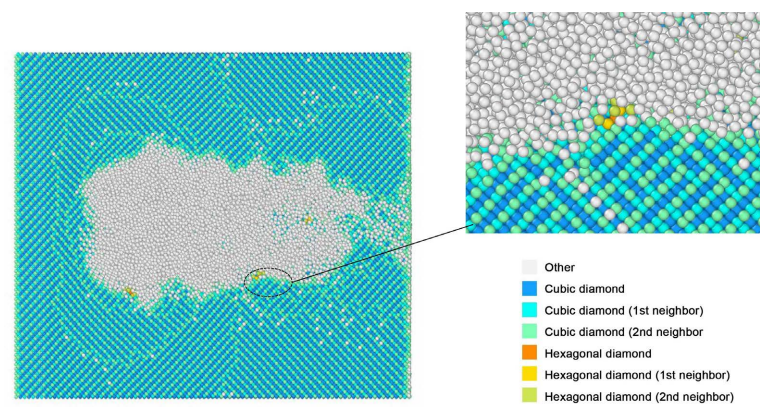


Figure 8. Subsurface damage of monocrystalline silicon
图 8. 单晶硅亚表面损伤

如图 8 所示，随着磨粒磨削距离的增加，亚表面损伤的宽度和长度都有较明显的变大，工件的亚表面损伤面积开始增加；单晶硅亚表面的蓝色立方金刚石晶体结构由于被挤压在磨粒的下方，在磨粒的剪切和挤压作用下，应力集中作用使得单晶硅晶体结构从立方金刚石晶体结构转变为六方金刚石晶体结构，在磨粒中心位置，由于磨粒的压力超过了晶体的结构所能承载的最大应力，破坏了晶体的结构，损伤层中间发生晶体的非晶化，从而实现了单晶硅的材料去除。

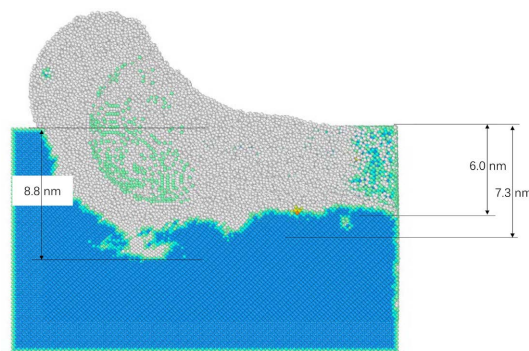


Figure 9. Depth of Subsurface damage
图 9. 亚表面损伤深度

在图 9 中, 由于已加工表面的内部应力的作用, 应力诱导结晶转变为晶态硅, 单晶硅的亚表面损伤深度稳定在 3.8 nm; 随着研磨距离的增加, 由于应力释放时间较短, 单晶硅的损伤深度较大, 亚表面损伤的宽度和长度都有较明显的变大, 由于应力的相互作用, 亚表面损伤深度增加, 达到 2.3 nm; 对于正在加工过程中, 在磨粒的正应力作用下, 在局部产生应力集中, 单晶硅亚表面损伤最为严重, 损伤深度最大, 达到了 3.8 nm。在非晶化的过程中, 材料的微观结构会发生显著变化, 如形成无规则的网络结构。这种结构通常具有较高的内能, 因此在一定条件下可能发生结构弛豫或重新结晶, 图 10 显示了随着研磨距离的增加单晶硅内部高压相变数量。

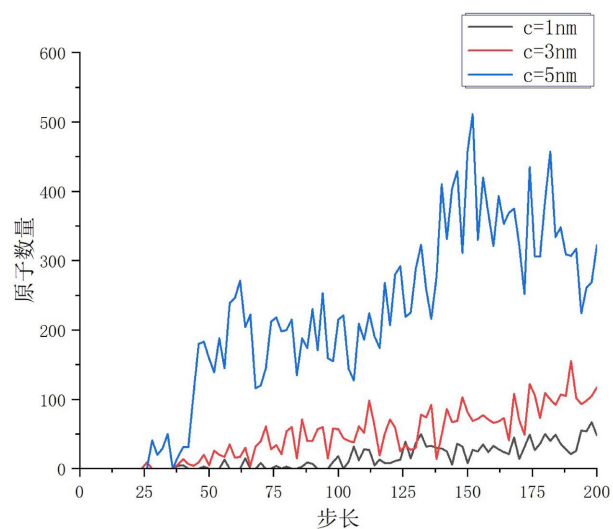


Figure 10. Number of high-pressure phase transitions of mono-crystalline silicon crystals
图 10. 单晶硅晶体高压相变数量

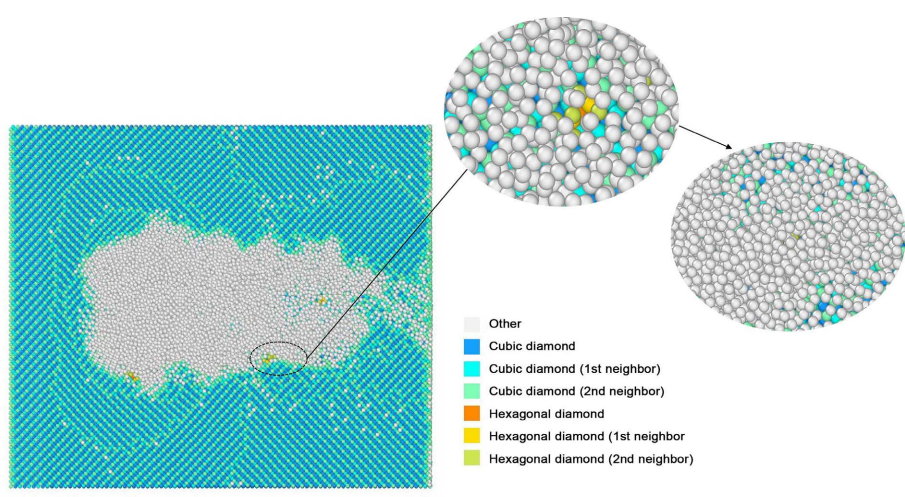


Figure 11. High pressure phase change of monocrystalline silicon
图 11. 单晶硅高压相变变化

由图 10 和图 11 可以看出, 研磨过程中单晶硅内部高压晶体的数量在波动。这是因为在一定范围内高压相变是可逆的, 在压力降低到一定程度后, 材料可以恢复到原始的晶体结构。相变通常伴随着能量

的变化, 在磨粒研磨的高压下, 单晶硅内部原子的自由能降低, 系统趋向于更稳定的状态, 当磨粒研磨过后, 压力的释放导致材料内部的应力状态发生改变, 晶体自发相变转变为晶格能量较低的晶体。另外, 单晶硅内部压力释放足够快, 材料内部的原子结构可能没有足够的时间来适应新的高压相, 从而倾向于回到原始晶体状态[15]。在图 10 中还可以看出, 研磨深度为 5 nm 时, 六方结构晶体数量呈现大幅增长, 这是由于单晶硅内部温度的升高和应变速率的增加, 导致相变速率加快。

4. 结论

本研究通过分子动力学仿真, 系统地研究了单晶硅在不同研磨深度下的加工过程, 得出以下主要结论:

- 1) 研磨深度显著影响单晶硅的表面形貌和材料去除机制。随着研磨深度的增加, 单晶硅表面由弹性形变向塑性形变转变、直至发生脆性断裂从而对单晶硅进行材料去除。
- 2) 随着研磨深度的增加, 单晶硅亚表面损伤程度显著加剧, 单晶硅亚表面经过高压相变和非晶化过程, 原子发生弛豫与再结晶形成稳定的亚表面损伤。
- 3) 研究结果为优化单晶硅研磨工艺提供了理论指导。对于要求高表面质量的加工, 应采用研磨深度较小的工况; 对于高效率加工, 可选择研磨深度较大的工况; 而如果要求快速减薄的粗加工工艺, 选用研磨深度较大的工况可以更好地提高加工效率。

本研究深入揭示了单晶硅在不同研磨深度下的加工机理, 为优化加工工艺、提高加工质量提供了理论依据。未来研究可进一步考虑温度、磨粒形状、研磨液等因素的影响, 以更全面地模拟实际加工条件。

参考文献

- [1] Ma, G., Li, S., Liu, F., Zhang, C., Jia, Z. and Yin, X. (2022) A Review on Precision Polishing Technology of Single-Crystal Sic. *Crystals*, **12**, Article No. 101. <https://doi.org/10.3390/cryst12010101>
- [2] Zhou, Y., Pan, G., Shi, X., Gong, H., Luo, G. and Gu, Z. (2014) Chemical Mechanical Planarization (CMP) of On-Axis Si-Face Sic Wafer Using Catalyst Nanoparticles in Slurry. *Surface and Coatings Technology*, **251**, 48-55. <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2014.03.044>
- [3] Jiapeng, S., Cheng, L., Han, J., Ma, A. and Fang, L. (2017) Nanoindentation Induced Deformation and Pop-In Events in a Silicon Crystal: Molecular Dynamics Simulation and Experiment. *Scientific Reports*, **7**, Article No. 10282. <https://doi.org/10.1038/s41598-017-11130-2>
- [4] Liu, Y., Li, B. and Kong, L. (2018) A Molecular Dynamics Investigation into Nanoscale Scratching Mechanism of Polycrystalline Silicon Carbide. *Computational Materials Science*, **148**, 76-86. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.02.038>
- [5] Guo, X., Wang, X., Jin, Z. and Kang, R. (2018) Atomistic Mechanisms of Cu CMP in Aqueous H₂O₂: Molecular Dynamics Simulations Using Reaxff Reactive Force Field. *Computational Materials Science*, **155**, 476-482. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.09.022>
- [6] Aktulga, H.M., Fogarty, J.C., Pandit, S.A. and Grama, A.Y. (2012) Parallel Reactive Molecular Dynamics: Numerical Methods and Algorithmic Techniques. *Parallel Computing*, **38**, 245-259. <https://doi.org/10.1016/j.parco.2011.08.005>
- [7] Dai, H., Wu, W., Fan, W. and Du, H. (2022) Investigation on Mechanism of Ultraprecision Three-Body Polishing of Single-Crystal Silicon Carbide with Voids by Molecular Dynamics Simulation. *Applied Physics A*, **128**, Article No. 815. <https://doi.org/10.1007/s00339-022-05950-x>
- [8] Mylvaganam, K. and Zhang, L.C. (2011) Nanotwinning in Monocrystalline Silicon upon Nanoscratching. *Scripta Materialia*, **65**, 214-216. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2011.04.012>
- [9] Cheong, W.C.D. and Zhang, L.C. (2000) Molecular Dynamics Simulation of Phase Transformations in Silicon Monocrystals Due to Nano-Indentation. *Nanotechnology*, **11**, 173-180. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/11/3/307>
- [10] Zhu, B.Y., Lyu, M., Liang, G.X., et al. (2017) Molecular Dynamics Simulation of Subsurface Damage Mechanism in High Speed Grinding of Monocrystalline Silicon. *Tribology*, **37**, 845.
- [11] Liang, S., Wang, C. and Fang, T. (2016) Rolling Resistance and Mechanical Properties of Grinded Copper Surfaces Using Molecular Dynamics Simulation. *Nanoscale Research Letters*, **11**, Article No. 62.

<https://doi.org/10.1186/s11671-016-1616-1>

- [12] Feng, B.F. and Cai, G.Q. (2002) Some Research on Friction in Grinding, *Diamond and Abrasive Tools Engineering*.
- [13] 耿瑞文, 杨晓京, 谢启明, 等. 基于纳米划刻实验的单晶锗切削机理[J]. *稀有金属材料与工程*, 2019, 48(8): 2544.
- [14] Zhang, Y., Wang, D.X., Guo, F., *et al.* (2023) Molecular Dynamics Study of Tribological Mechanism of Spherical Nanoparticles in the Grinding Interface of Nickel-Based Alloys with Microfluidic Micro-Lubrication. *China Mechanical Engineering*, **10**, 1.
- [15] 朱宝义, 吕明, 梁国星, 等. 单晶硅高速磨削亚表层损伤机制的分子动力学仿真研究[J]. *摩擦学学报*, 2017, 37(6): 845.