

双磨粒抛光单晶 Si 的分子动力学模拟

岳海霞, 戴厚富, 胡洋, 周玉琪

(贵州大学, 贵阳 550000)

摘要: **目的** 通过分子动力学 (MD) 模拟, 获得双金刚石磨粒抛光单晶 Si 的去除机理。**方法** 采用一种新的单晶硅三体磨粒抛光方法, 测试双磨粒的抛光深度和横向/纵向间距对三体磨粒抛光的影响, 从而获得相变、表面/亚表面损伤等情况, 并获得抛光过程中温度及势能的变化情况。**结果** 对比抛光深度为 1、3 nm 时配位数的情况, 发现抛光深度为 1 nm 时, 抛光完成时相变的原子数是 4319, 而抛光深度为 3 nm 时, 相变原子数为 12 516。随着磨粒在 Si 工件表面抛光深度的加深, 抛光和磨蚀引起的相变原子和损伤原子的数目增加。仿真结果还表明, 单晶 Si 相变原子的种类和数目随磨粒横向间距的增加而增加, 随着纵向间距的增加反而减少。系统的初始温度设为 298 K, 抛光深度为 1 nm 时, 抛光完成时的温度是 456 K, 而抛光深度为 3 nm 时, 温度是 733 K。抛光完成时, 纵向组和横向组的温度仅相差 30~40 K。在抛光深度、横向间距和纵向间距 3 个对照组中, 抛光深度对亚表面损伤的影响最大。抛光深度为 3 nm 时, 亚表面的损伤深度最大, 从而导致更多的材料从单晶 Si 工件表面去除。**结论** 双磨粒的抛光深度和间距不仅对硅的表面微观结构产生影响, 还对相变产生影响。模拟参数相同时, 较大的抛光深度和横向间距下会产生更多的相变原子, 因此相变受抛光深度的影响最大, 受纵向间距的影响最小。

关键词: 单晶 Si; 双磨粒; 三体磨粒抛光; 去除机理; 分子动力学

中图分类号: TG580 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-3660(2021)09-0370-09

DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2021.09.039

Molecular Dynamics Simulation of Double Abrasive Polished Single Crystal Si

YUE Hai-xia, DAI Hou-fu, HU Yang, ZHOU Yu-qi

(Guizhou University, Guiyang 550000, China)

ABSTRACT: Molecular dynamics (MD) simulation was used to obtain the removal mechanism of double diamond abrasive polished single-crystal Si. In this study, a new three-body abrasive polishing method for monocrystalline silicon was used to test

收稿日期: 2020-09-26; 修订日期: 2021-03-12

Received: 2020-09-26; Revised: 2021-03-12

基金项目: 贵州省研究生科研基金立项课题 (黔教合 YJSCXJH[2020]052); 贵州省科学技术基金一般项目 (JC[2020]1Y227); 教育部重点实验室开放基金 (KY[2019]042); 中国博士后科学基金 (2019M662765); 国家自然科学基金面上项目 (51675172)

Fund: The Guizhou Province Graduate Research Fund (YJSCXJH[2020]052); National Science and Technology Foundation of Guizhou Province (JC[2020]1Y227); Ministry of Education Key Laboratory Open Foundation (KY[2019]042); China Postdoctoral Science Foundation (2019M662765); National Natural Science Foundation of China (51675172)

作者简介: 岳海霞 (1994—), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为微纳加工。

Biography: YUE Hai-xia (1994—), Female, Master's student, Research focus: micro-nano processing.

通讯作者: 戴厚富 (1988—), 男, 博士, 副教授, 主要研究方向为精密加工。

Corresponding author: DAI Hou-fu (1988—), Male, Ph. D., Associate professor, Research focus: precision machining.

引文格式: 岳海霞, 戴厚富, 胡洋, 等. 双磨粒抛光单晶 Si 的分子动力学模拟[J]. 表面技术, 2021, 50(9): 370-378.

YUE Hai-xia, DAI Hou-fu, HU Yang, et al. Molecular dynamics simulation of double abrasive polished single crystal Si[J]. Surface technology, 2021, 50(9): 370-378.

the effects of polishing depth and lateral/ longitudinal spacing of double abrasive grains on the three-body abrasive polishing process, so as to obtain insights on phase transformation, surface/subsurface damage, surface morphology, material removal and temperature and potential energy in the polishing process. Through comparison of coordination numbers when the polishing depth is 1 nm and 3 nm respectively, it is found that the atomic number of phase transition is 4319 at the end of polishing when the polishing depth is 1 nm, but 12 516 when the polishing depth is 3 nm. The number of phase change atoms and damage atoms increases when the polishing depth of abrasive particles on the surface of Si workpiece increases. The simulation results also show that the type and number of phase transition atoms in single crystal Si increase with the increase of lateral spacing, but decrease with the increase of longitudinal spacing. The initial temperature of the system is set at 298 K. When the polishing depth is 1 nm, the polishing temperature is 456 K at the end, and when the polishing depth is 3 nm, the temperature is 733 K at the end. At the end of polishing, the temperature difference between the longitudinal group and the lateral group is only 30~40 K. Among the three control groups (polishing depth, lateral and longitudinal spacing), the polishing depth has the greatest influence on the subsurface damage. When the polishing depth is 3 nm, the subsurface damage depth is the largest, which leads to more material removal from the surface of single crystal Si workpiece. This study shows that the polishing depth and spacing of double abrasive particles not only affect the surface microstructure of silicon, but also affect the phase transformation. When the simulation parameters are the same, larger polishing depth and lateral spacing will produce more phase transition atoms, because the phase transition is most affected by polishing depth and least affected by longitudinal spacing.

KEY WORDS: single crystal Si; double abrasive; three-body abrasive polishing; removal mechanism; molecular dynamics

单晶硅具有硬度高、强度高、耐高温、抗磨损等独特的性能。随着科技的发展和半导体产业的增长,单晶硅被广泛地应用于不同领域的集成方面^[1-2]。然而,这些出色的机械性能和化学性能对于材料加工来说是一把双刃剑。单晶硅在室温下是一种具有高脆性、低塑性、微裂纹的脆硬材料,脆硬性材料加工机理的研究较困难^[3]。在化学机械抛光过程中,晶圆表面的材料去除是在纳米级/亚纳米级^[4-6],通过当前的实验条件和方法很难阐明化学机械抛光的去除机理。分子动力学(MD)模拟作为原子尺度的模拟,可以满足要求。Zhang 等^[7]采用 MD 模拟和实验相结合的方法,研究了单晶硅在超精密抛光过程中的原子结构变化,发现分子动力学模拟结果和实验结果几乎一致。Shi 等人^[8]也发现 MD 模拟是克服这一挑战的强大工具。国际上很多学者通过 MD 模拟研究了金刚石刀具的超精密抛光过程^[9],但大部分学者把刀具看成没有自转速度的刚体,这与实际抛光过程中的刀具运动不符。Dai 等人^[10]采用 MD 模拟研究在石墨烯的润滑下对单晶硅进行三体磨粒抛光。结果表明,抛光深度对硅配位数的变化有着至关重要的影响。Shi 等人^[11]研究了磨粒形状对单晶硅三体磨粒行为的影响,该研究旨在建立一个更精确的模型来理解晶体材料在三体加工过程中的磨损机理。Zhao 等人^[12]使用三维 MD 模拟研究了以金刚石为刀具对单晶硅进行机械抛光的材料去除机理。结果表明,磨粒的旋转速度和方向会影响工件的表面形貌和质量,以及工件表面下缺陷的分布和演变。然而,这些学者虽然将刀具看成有自转速度的刚体,但对单晶硅的研究都采用单磨粒加工,这与实际的加工工艺不同,事实上,双磨粒和多磨粒正在纳米级加工上发挥作用。Meng 等^[13]使用

MD 方法研究了耦合效应对纳米尺度 SiC 材料去除过程的影响机理。该研究对于理解磨削过程中碳化硅的去除机理有重要意义。Zhou 等人^[14]通过 MD 模拟在微米/纳米尺度上进行双金刚石磨粒切割,研究了在固定的研磨垫上对单晶 SiC 晶片进行精密抛光。然而,很少有研究者对双磨粒抛光单晶 Si 材料的去除机理进行深入研究^[15]。单晶硅作为一种重要的半导体材料,研究其抛光过程中的演化机理和材料去除机理是有必要的。

为了模拟和实现真实的多磨粒抛光环境,本文通过 MD 模拟双金刚石磨粒超精密抛光单晶硅,研究了不同的抛光深度和两磨粒之间的横向/纵向间距,对硅原子工件的配位数、表面形貌、亚表面层损伤程度的影响。

1 分子动力学模型

在三体抛光模型中,选择晶格常数 $a=0.543$ nm 的单晶硅晶片作为工件,晶格常数 $a=0.357$ nm 的单晶金刚石作为磨粒颗粒。工件在 x 、 y 、 z 方向上的尺寸为 $50a \times 15a \times 35a$,包含 214 585 个硅原子。在 MD 模型中,两个金刚石磨粒的半径均为 5 nm,一共有 184 132 个碳原子。为了使观测数据更准确直观,在磨粒划擦经过处,设立 $4 \text{ nm} \times 3 \text{ nm} \times 19.005 \text{ nm}$ 的测量区域。模型如图 1 所示。由于金刚石的硬度远大于单晶硅,所以把金刚石磨粒设置为刚体,不考虑其在抛光过程中的磨损和变形^[16]。与传统的 MD 模拟纳米抛光相似,工件基体分为 3 个区域:边界层、恒温层和牛顿层(加工区)。其中,边界原子在模拟过程中不参与运动,在空间中保持固定,以减少边界效应。

恒温层用来确保合理的向外热传导^[17]。牛顿原子和恒温原子的运动符合牛顿第二定律^[18]。

MD 模拟结果的精确性取决于相互作用势能,因此选择合适的势函数至关重要^[19]。根据以往的工作经验和实验数据, Tersoff 势函数是二体势函数^[20],适用于描述工件中硅原子 (Si-Si) 之间的相互作用。Morse 势函数的计算成本比 Tersoff 势函数低,计算速度更快^[21],故用它来描述工件和磨粒原子 (C-Si) 之间的相互作用。在进行 80 000 个时间步长的弛豫之后,得到一个稳定的工件结构。将具有平移速度和自转速度的金刚石磨粒抛光定义为三体磨粒抛光,后文简称三体抛光。双磨粒以 200 m/s 的平移速度和 100 m/s 的自旋速度沿着工件 (010) 面的[100]方向进行抛光,这远大于真实的抛光速度。郭晓光等^[22]研究发现,在磨削深度和磨粒半径相同的情况下,在

20~200 m/s 范围内,磨削速度对单晶硅亚表面损伤的影响很小,说明分子动力学仿真对磨削速度的变化不敏感,因此可以适当提高仿真速度,从而缩短仿真时间和扩大仿真规模。整个系统在微正则系综 (nve) 下进行,初始温度设置为 298 K。在 MD 模型中,将金刚石磨粒抛光垫设计为双磨粒系统。双磨粒系统中的磨粒设置如图 2 所示。模型其余细节见表 1。

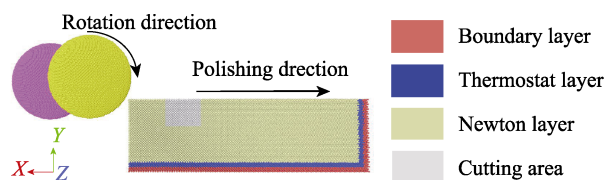


图 1 分子动力学模型图

Fig.1 Molecular dynamics model

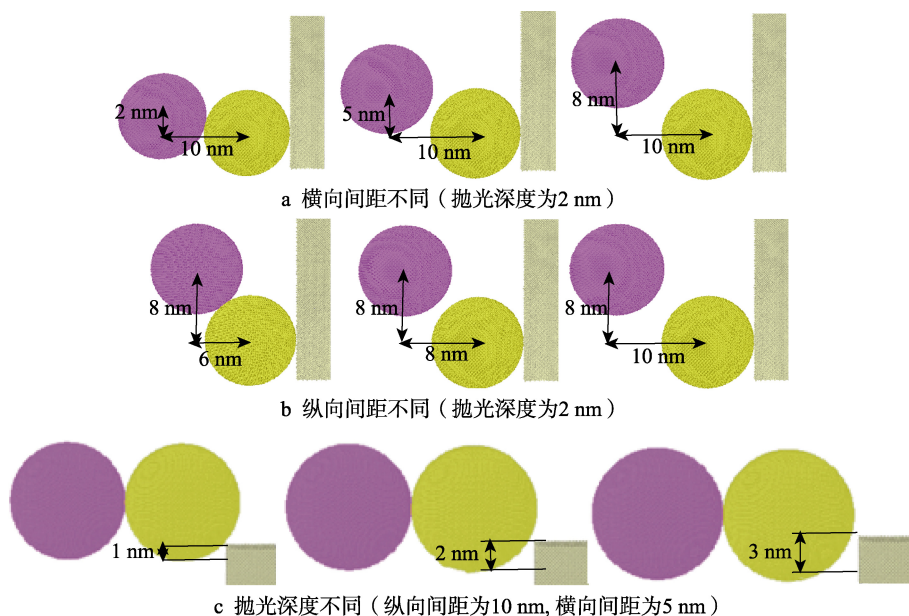


图 2 磨粒示意图

Fig.2 Schematic diagram of abrasive particles: (a) different lateral spacing (polishing depth is 2 nm), (b) the longitudinal spacing is different (the polishing depth is 2 nm), (c) different polishing depth (longitudinal spacing is 10 nm, horizontal spacing is 5 nm)

表 1 分子动力学模拟参数

Tab.1 Molecular dynamics simulation parameters

Configuration	Scratching
Wafer	Monocrystalline Silicon
Abrasive particle	Diamond particle
Wafer dimensions	50a×15a×35a (a=0.543 nm)
Work-piece surface	[100] on (010) surface
Polishing depth	1, 2, 3 nm
Lateral spacing	2, 5, 8 nm
Longitudinal spacing	6, 8, 10 nm
Polishing velocity	Moving velocity=200 m/s Self-rotation velocity=100 m/s
Time step	0.001 ps
Initial temperature	298 K
Polished area	4 nm×3 nm×19.005 nm

本文采用开源软件 LAMMPS 进行 MD 仿真^[23]。使用 OVITO 软件^[24]对分子动力学结果进行可视化。

2 结果和讨论

2.1 相变

随着抛光距离的增加,工件中出现了 Si-II、Si-XI、Si-V 等其他相。图 3a 表示第一个磨粒在不同抛光深度（横向间距为 5 nm, 纵向间距为 10 nm）时工件部分横截面视图,图 3b 表示第二个磨粒的横截面视图。结果表明,抛光过程中,磨粒的抛光深度越大,亚表面损伤层的深度越大,磨粒的抛光深度对亚表面损伤层的深度起着决定性作用。为了识别工件原子形成的不同相,选取截断半径为 0.26 nm,大于周围环境中

的最大键长。而后,如图 3c—f 所示,改变抛光深度,分别计算随着抛光距离的变化,配位数 $CN=3$ 、Bct5-Si ($CN=5$)、Si-II ($CN=6$) 和 $CN>4$ 的原子数,以此研究双磨粒抛光系统中切削深度和磨粒间距对相变的影响。计算配位数大于 4 的原子数,分析切削深度和磨粒间距对相变的影响。这里定义配位数大于 4 的原子为相变原子。

$CN=3$ 、Bct5-Si ($CN=5$)、Si-II ($CN=6$)、 $CN>4$ 的原子数随着抛光深度的增大而增加,而 $CN=3$ 、Bct5-Si ($CN=5$) 的增加速度明显比 Si-II 的快,因为当压力小于 4 GPa 时, Si-II 的化学性质不稳定,易转化成非晶态的硅和其他相^[25],导致出现如图 3e 所示的 Si-II ($CN=6$) 数量的波动现象。如图 3 所示,在不同的抛光深度都出现了轻微的波动,当抛光深度为

1、2 nm 时,波动较小。在抛光过程中,双磨粒系统对相变的影响分为两个步骤:一个是仅第一个磨粒在工件上抛光;另一个是抛光距离超出了两个磨粒之间的间距,两个磨粒都在工件上抛光。如图 3f 所示,在双磨粒抛光系统中,与相变有关的原子数随着磨粒抛光深度的增加而逐渐增加。最有趣的是,在两个抛光步骤中,相变原子数与切削磨粒的抛光距离成比例增加,表明新的相变原子和旧的相变原子的数量都在增加,并且相互叠加。

图 4a 表示在不同的横向间距(纵向间距为 10 nm,抛光深度为 2 nm)时第一个磨粒的横截面视图,图 4b 表示第二个磨粒的横截面视图。结果表明,抛光过程中,磨粒的横向间距越大,双磨粒抛光产生的相变原子数越多,而横向间距对亚表面损伤深度的影响

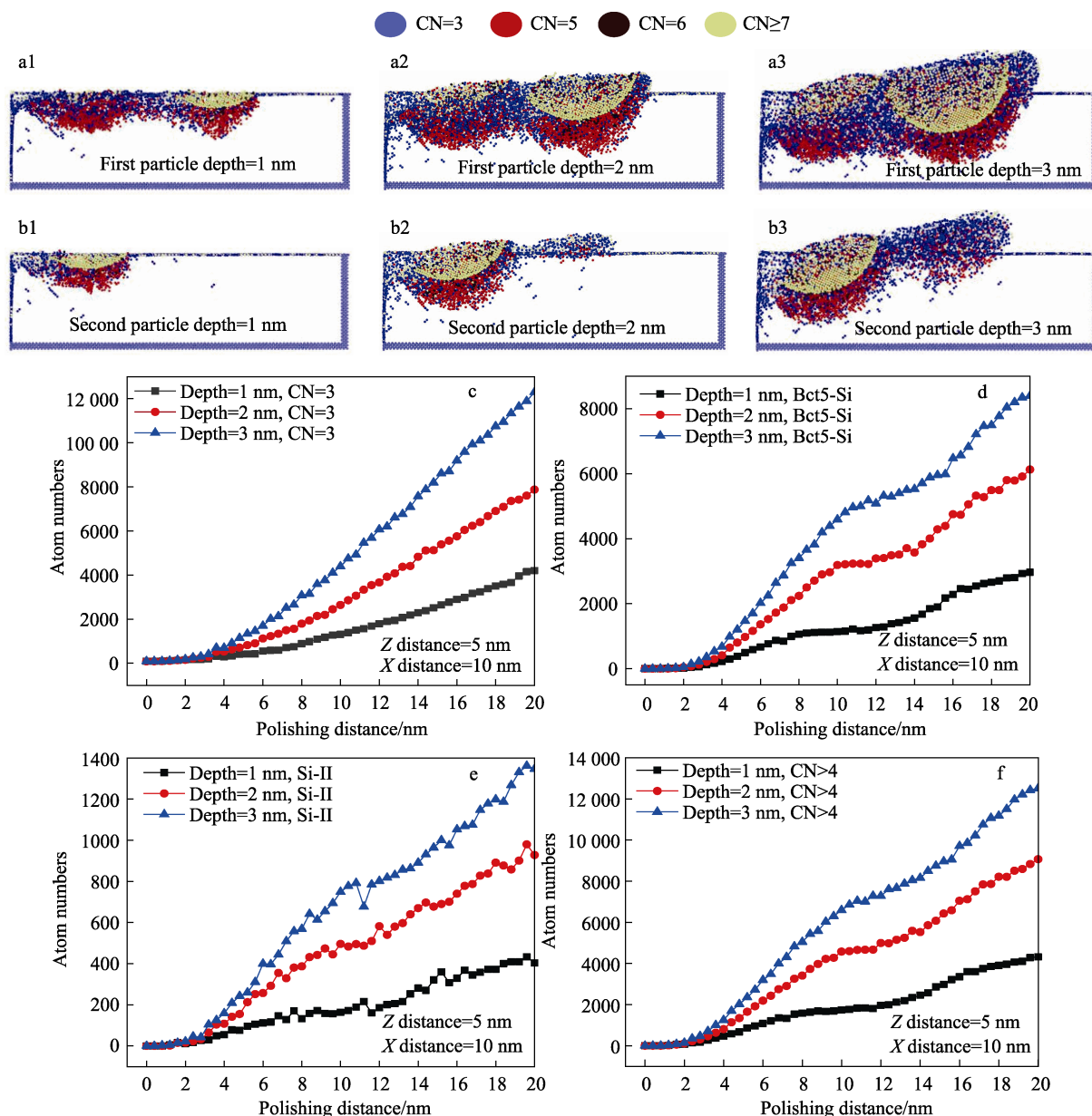


图 3 抛光深度分别为 1、2、3 nm 时相变的剖视图和曲线图

Fig.3 Section and graph of phase transition when polishing depth is 1 nm, 2 nm, 3 nm, respectively

很小,因为损伤层深度主要受双磨粒抛光深度的影响。如图4c—f所示,随着双重磨粒之间横向间距的增加,产生的相变原子数增加。这可能是因为随着与第一个磨粒之间的横向距离的增加,第二个磨粒从单晶Si工件上去除的原子数量增加了。随着双磨粒颗粒之间的横向间距增加,第二个磨粒的抛光面积增大,因此产生了更多的相变原子。第二个磨粒在第一个磨粒之后10 nm才开始与工件接触。这解释了出现图4c—f现象的原因,当第二个磨粒与第一个磨粒同时在工件上抛光时,CN=3、Bct5-Si(CN=5)、Si-II(CN=6)的原子数随横向间距的增大而增加。然而,如图5a和图5b所示,第二个磨粒的损伤层深度随着纵向间距的增大而减小,但纵向间距对第一个磨粒的影响很小。再次证明亚表面的损伤深度主要受双磨粒

抛光深度的影响。如图5c—f所示,CN=3、Bct5-Si(CN=5)、Si-II(CN=6)和CN>4的原子数反而随着纵向间距的增大而减少。随着双磨粒纵向距离的增加,相变原子的数目变化并不大。然而,当两个磨粒均作用于工件时,相变原子数的变化再次趋于一致。

2.2 表面形貌分析

为了研究双磨粒不同的抛光深度和横向/纵向间距对抛光后工件表面形貌的影响,本文绘制了图6所示的工件形貌。图6a表示在横向间距为5 nm、纵向间距为10 nm时,不同抛光深度下双磨粒抛光的工件表面形貌。观察到,随着抛光深度的加深,工件表面的突起和原子堆积明显增大,材料的去除率也增大。这表明第一个磨粒的抛光深度对材料去除具有决定

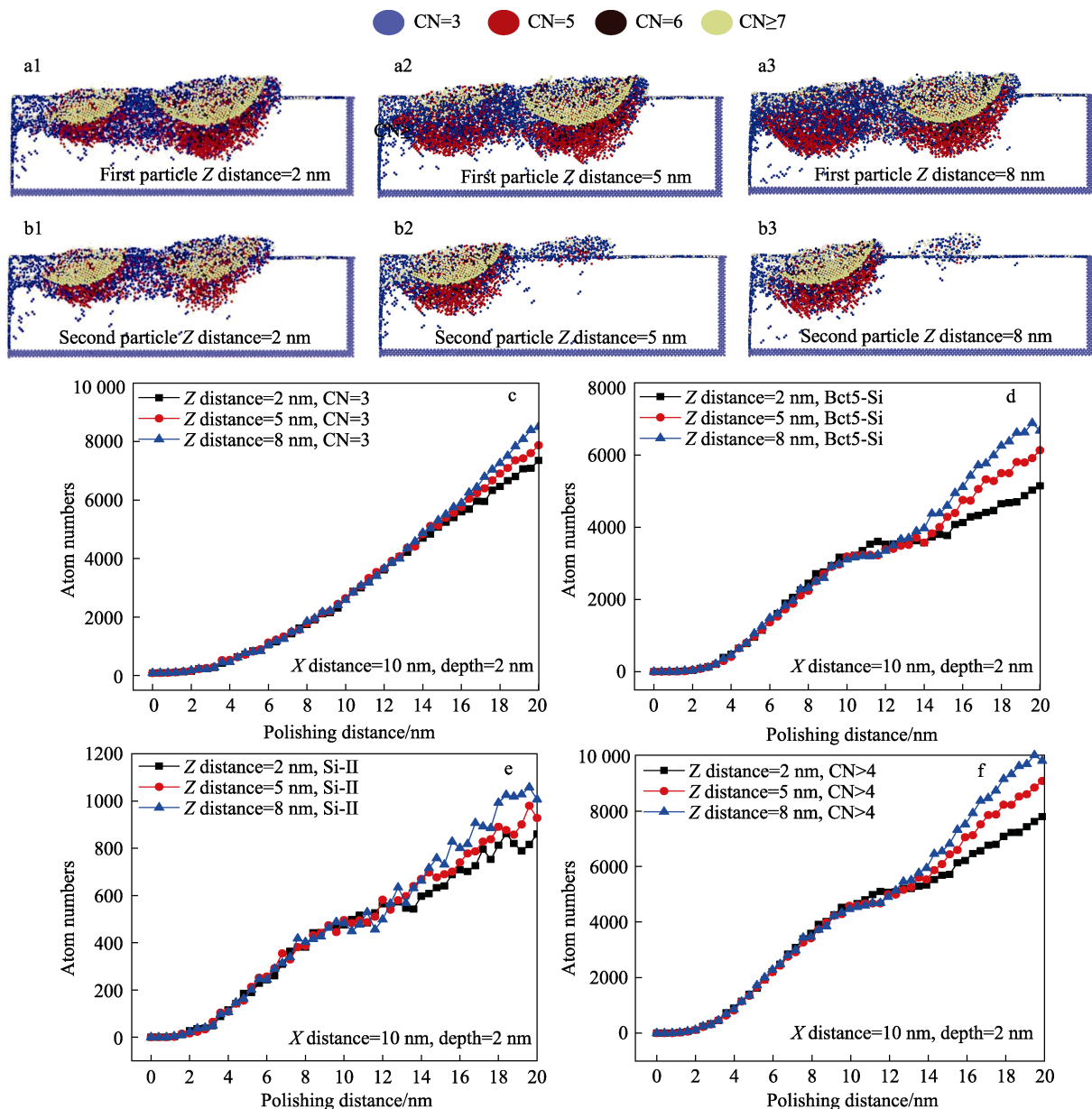


图4 横向间距分别为2、5、8 nm时相变的剖视图和曲线图。

Fig.4 Section and of phase transition when transverse spacing is 2 nm, 5 nm, 8 nm respectively

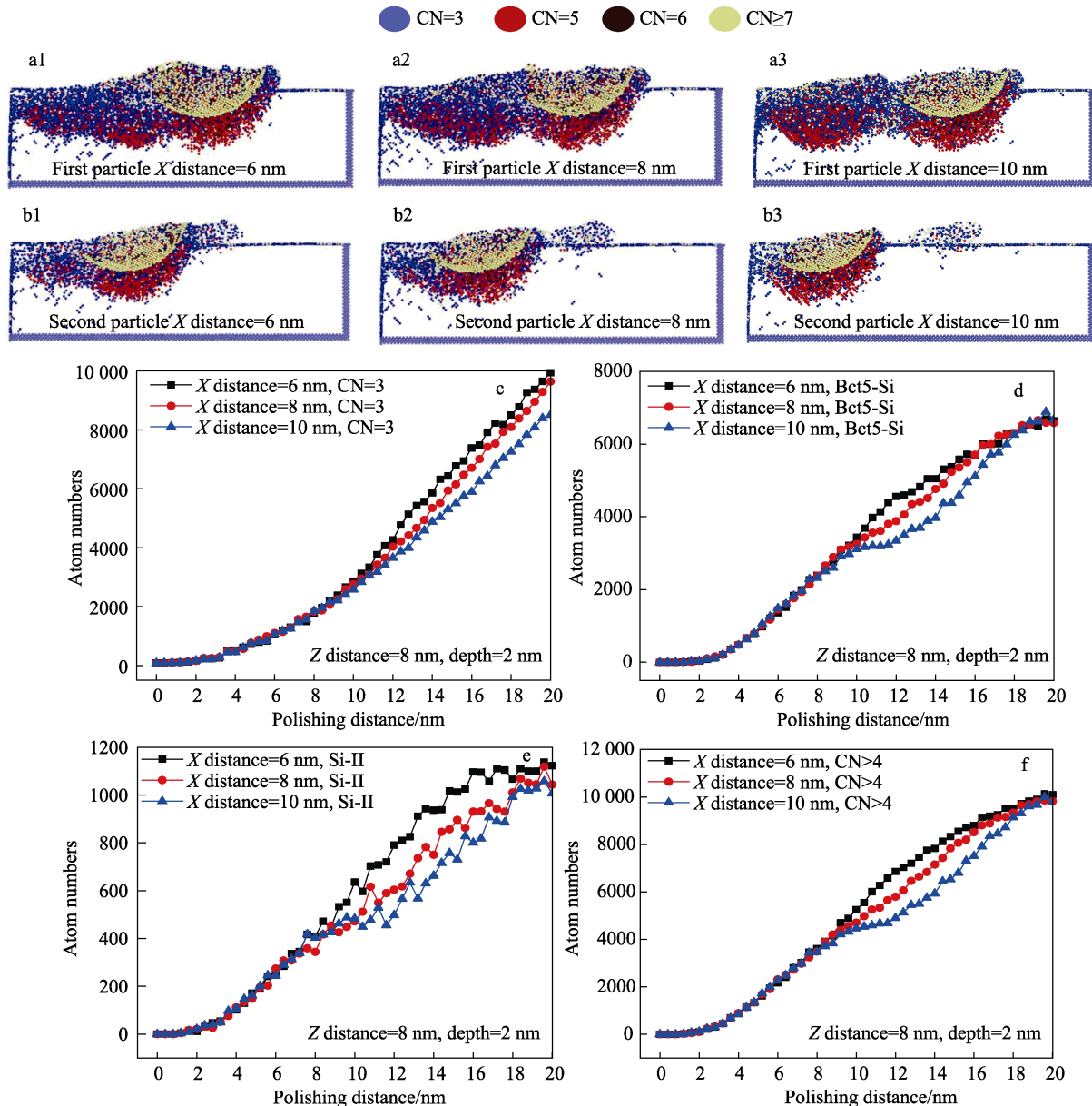


图 5 纵向间距分别为 6、8、10 nm 时相变的剖视图和曲线图。

Fig.5 Section and curve of phase transition when longitudinal spacing is 6 nm, 8 nm, 10 nm respectively

性作用。仅从材料去除角度考虑, 加大抛光深度能实现较高的材料去除效率。图 6b 表示双磨粒横向间距不同时的表面形貌。可以观察到, 随着双磨粒横向间距的增加, 缺陷原子沿着抛光轨迹在第二个磨粒周围不断堆积, 第二个磨粒导致的缺陷原子的数量随着横向间距的增大而增大。这可以解释为, 随着横向间距的增大, 第二个磨粒有更大的抛光面积。图 6c 是纵向间距不同时的表面形貌。可观察到, 缺陷原子的数量并没有随着纵向尺寸的增加而增加, 缺陷原子的数量反而随着纵向间距的增大而减少。这说明随着双磨粒纵向间距变小, 第二个磨粒对第一个磨粒抛光形成的缺陷原子进行二次抛光的面积增大, 第一个磨粒和第二个磨粒去除的原子数都有小幅度的增加。在抛光深度均为 2 nm 时, 第二个磨粒的相对位置对相变原子、缺陷原子的形成有重要影响。双磨粒系统中, 横

向间距和纵向间距的设置对理解多磨粒抛光机理提供了有益信息。

2.3 势能及温度的分析

在本仿真中, 每隔 2000 步输出一次势能和温度信息, 获得如图 7 所示的势能变化曲线图和温度变化曲线图。势能表示一个系统的能量, 是粒子或原子位置排列的结果, 标志着系统的稳定性^[26]。从图 7a—c 发现, 势能随着双磨粒抛光距离的增大而增大。值得注意的是, 势能在第一个磨粒完全进入工件前缓慢增长, 在抛光距离为 5~10 nm 时, 势能急剧增长。这是因为工件原子被挤压, 原子脱离晶格所在位置, 导致原子间距变小, 原子间的排斥力变大, 故势能大幅度增加。在第一个磨粒已经完全进入工件而第二个磨粒正在进入工件时, 势能短暂下降后又迅速升高。出现

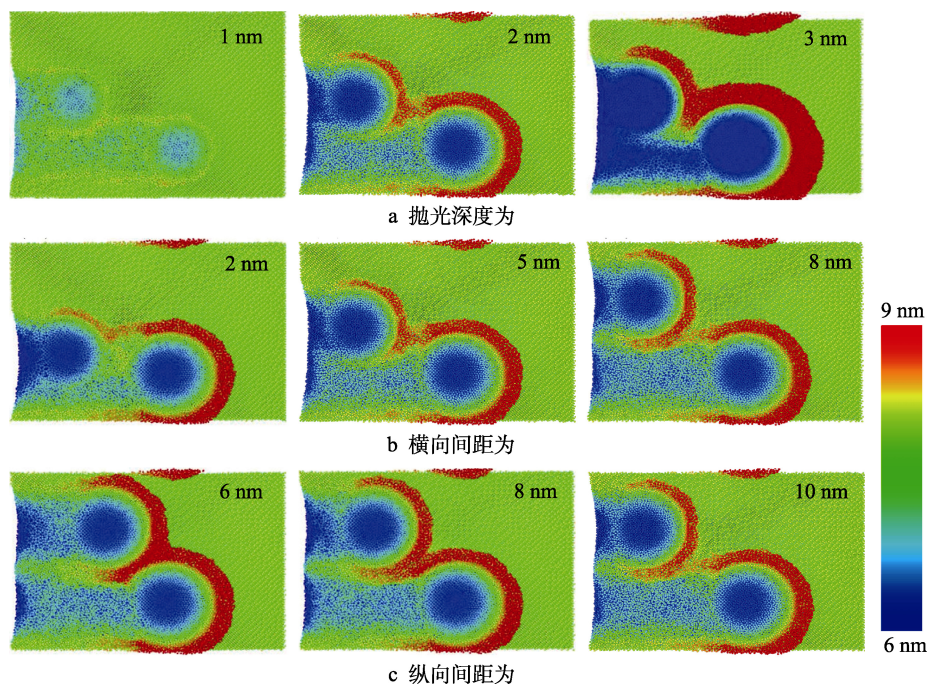


图6 调整单一变量后工件表面形貌图

Fig.6 Surface topography of the workpiece after adjusting a single variable: (a) polishing depth is 1 nm, 2 nm, 3 nm; (b) lateral spacing is 2 nm, 5 nm, 8 nm; (c) the longitudinal spacing is 6 nm, 8 nm, 10 nm

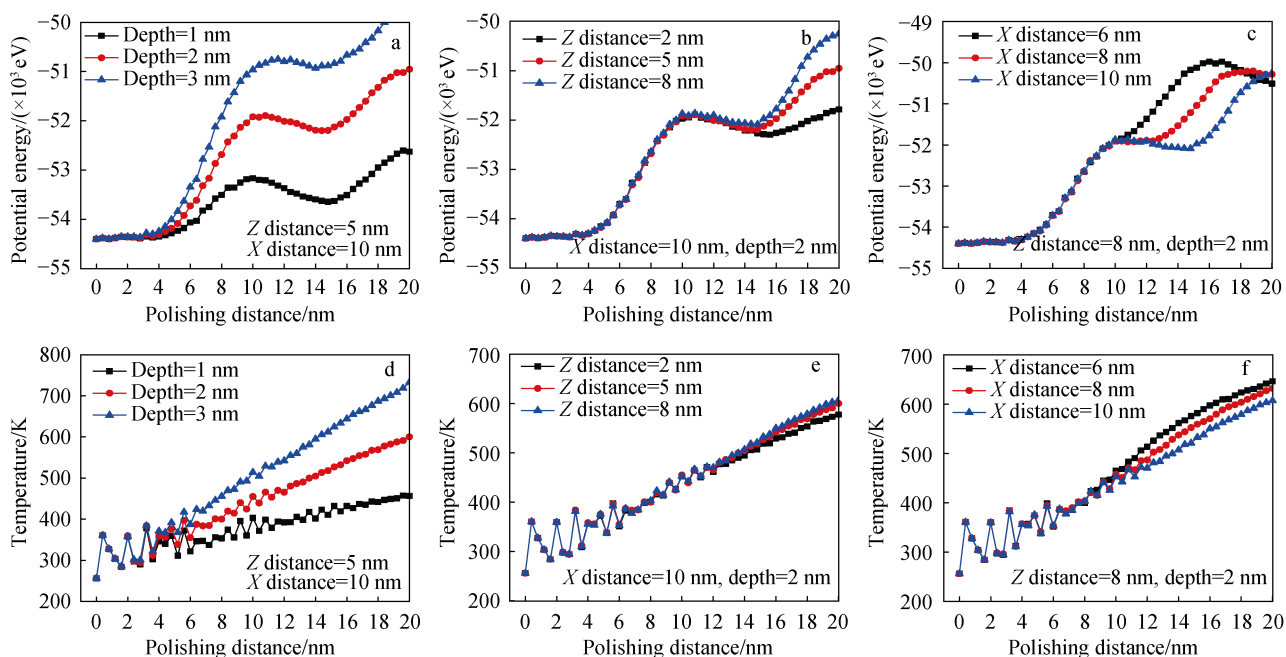


图7 调整单一变量后双磨粒抛光的势能和温度的分布

Fig.7 Potential energy and temperature distribution of double abrasive polishing after adjusting single variable

这个现象的原因是：磨粒抛光过程中出现原子的弹性恢复，第一个磨粒导致晶格变形积蓄的能量被释放出去，当第二个磨粒进入工件区域后，势能又迅速增加。很明显，磨粒抛光的深度不同，势能的大小相差很大。第二个磨粒对抛光过程中势能的变化影响很大。而与抛光深度相比，横向间距和纵向间距对势能的影响较小。此外还发现，势能随着纵向间距的增大而减小。

抛光温度的变化规律是研究工件材料去除机理

的重要因素。根据 Goel 等人^[18]的研究，温度通过与动能之间的关系得出：

$$\frac{1}{2} \sum_i m_i v_i^2 = \frac{3}{2} N k_b T \quad (1)$$

式中： N 表示原子数； v_i 表示第 i 个原子的速度； k_b 是 Boltzmann 常数 ($1.3806503 \times 10^{-23}$ J/K)； T 代表原子温度。为了更清晰直观地研究单晶硅工件的温升情况，测量了三体抛光过程中牛顿层的温度。如图 7d

—f 所示, 抛光距离为 0~6 nm 时, 不同变量下的温度都产生了波动现象, 随后趋于协同, 且不同变量对温度有不同的影响。从图 7d 发现, 在抛光深度为 1 nm 和 3 nm 两种情况下, 抛光完成后, 两种情况的温度相差 277 K。相比而言, 改变两个磨粒之间的横向和纵向间距, 温度仅相差 30~40 K。可见, 双磨粒抛光的深度对温升起决定性作用。抛光深度越深, 温度越高且升高的速度越快; 随着纵向间距的增加, 温度反而降低。这是因为随着双磨粒纵向间距的增加, 没有新的抛光区域暴露出来, 所以更大的纵向间距并不会导致更高的温度。总的来说, 双磨粒的横向间距和纵向间距对温度的影响较小, 而抛光深度的增加对温度的升高影响非常大。

3 结论

1) 通过加深双磨粒三体抛光的深度, 结果发现 CN=3、Bct5-Si (CN=5)、Si-II (CN=6) 的原子数量随着抛光距离的增大而增大, 从而实现了更高的材料去除效率。表面形貌主要受双磨粒抛光深度的影响。抛光深度越深, 产生的缺陷原子数量越大; 温度和势能均随着磨粒抛光深度的增加而增加, 势能的变化趋势受第二个磨粒的影响。

2) 设置不同的横向间距, 由于双磨粒的干扰作用, 第二个磨粒对相变原子和缺陷原子的产生有重要影响。由于第二个磨粒作用于第一个磨粒, 随着横向间距的增大, 材料去除率增大。势能随着横向间距的增大而增大, 但由于抛光深度相同, 所以温度并没有明显的变化。

3) 增大双磨粒系统中两个磨粒间的纵向间距, CN=3、Bct5-Si (CN=5)、Si-II (CN=6) 的原子数量反而降低。较大的纵向间距对于获得更高的表面质量有重要作用。随着纵向间距的增大, 在抛光距离增加到 10 nm 后, 温度和势能反而降低。纵向间距的不同对双磨粒抛光系统的影响, 远小于抛光深度和横向间距的影响。

参考文献:

- [1] SAGA T. Advances in crystalline silicon solar cell technology for industrial mass production[J]. NPG Asia materials, 2010, 2(3): 96-102.
- [2] GE Meng-ran, ZHU Hong-tao, HUANG Chuan-zhen, et al. Investigation on critical crack-free cutting depth for single crystal silicon slicing with fixed abrasive wire saw based on the scratching machining experiments[J]. Materials science in semiconductor processing, 2018, 74: 261-266.
- [3] 丁月, 卢建树. 铜离子催化作用下单晶硅表面微纳结构的制备[J]. 表面技术, 2014, 43(2): 100-104, 149.
- [4] HUANG J Y, E J C, HUANG J W, et al. Dynamic deformation and fracture of single crystal silicon: Fracture modes, damage laws, and anisotropy[J]. Acta materialia, 2016, 114: 136-145.
- [5] GOEL S, LUO Xi-chun, REUBEN R L. Wear mechanism of diamond tools against single crystal silicon in single point diamond turning process[J]. Tribology international, 2013, 57: 272-281.
- [6] 王光灵, 刘卫丽, 刘宇翔, 等. 化学机械抛光工艺参数对氧化锆陶瓷抛光速率的影响[J]. 表面技术, 2018, 47(9): 266-271.
- [7] WANG Guang-ling, LIU Wei-li, LIU Yu-xiang, et al. Effects of chemical-mechanical polishing parameters on material removal rate of zirconia ceramic[J]. Surface technology, 2018, 47(9): 266-271.
- [8] ZHANG Lin, ZHAO Hong-wei, MA Zhi-chao, et al. A study on phase transformation of monocrystalline silicon due to ultra-precision polishing by molecular dynamics simulation[J]. AIP advances, 2012, 2(4): 042116.
- [9] SHI Xiao-lei, PAN Guo-shun, ZHOU Yan, et al. A study of chemical products formed on sapphire (0001) during chemical-mechanical polishing[J]. Surface and coatings technology, 2015, 270: 206-220.
- [10] 余青, 刘德福, 陈涛. 单晶蓝宝石衬底晶片的化学机械抛光工艺研究[J]. 表面技术, 2017, 46(3): 253-261.
- [11] YU Qing, LIU De-fu, CHEN Tao. Chemico-mechanical polishing technique of monocrystal sapphire substrate wafer[J]. Surface technology, 2017, 46(3): 253-261.
- [12] DAI Hou-fu, ZHANG Fa, ZHOU Yu-qi. Numerical study of three-body diamond abrasive polishing single crystal Si under graphene lubrication by molecular dynamics simulation[J]. Computational materials science, 2020, 171: 109214.
- [13] SHI Jun-qin, WEI Xin-qi, CHEN Juan, et al. Influence of abrasive shape on the abrasion and phase transformation of monocrystalline silicon[J]. Crystals, 2018, 8(1): 32.
- [14] YANG Yi-han, ZHAO Hong-wei, ZHANG Lin, et al. Molecular dynamics simulation of self-rotation effects on ultra-precision polishing of single-crystal copper[J]. AIP advances, 2013, 3(10): 102106.
- [15] MENG Bin-bin, YUAN Dan-dan, XU Shao-lin. Coupling effect on the removal mechanism and surface/subsurface characteristics of SiC during grinding process at the nanoscale[J]. Ceramics international, 2019, 45(2): 2483-2491.
- [16] ZHOU Piao, SHI Xun-da, LI Jun, et al. Molecular dynamics simulation of SiC removal mechanism in a fixed abrasive polishing process[J]. Ceramics international, 2019, 45(12): 14614-14624.
- [17] WANG Jin-shi, FANG Feng-zhou, ZHANG Xiao-dong. Nanometric cutting of silicon with an amorphous-crystalline layered structure: A molecular dynamics study[J].

- Nanoscale research letters, 2017, 12(1): 41.
- [16] LI Duo, WANG Feng-chao, YANG Zhen-yu, et al. How to identify dislocations in molecular dynamics simulations? [J]. Science China physics, mechanics & astronomy, 2014, 57(12): 2177-2187.
- [17] KOMANDURI R, VARGHESE S, CHANDRASEKARAN N. On the mechanism of material removal at the nanoscale by cutting[J]. Wear, 2010, 269(3-4): 224-228.
- [18] GOEL S, LUO Xi-chun, AGRAWAL A, et al. Diamond machining of silicon: A review of advances in molecular dynamics simulation[J]. International journal of machine tools and manufacture, 2015, 88: 131-164.
- [19] FANG Feng-zhou, XU Fei-fei, LAI Min. Size effect in material removal by cutting at nano scale[J]. The international journal of advanced manufacturing technology, 2015, 80(1-4): 591-598.
- [20] PLIMPTON S J, THOMPSON A P. Computational aspects of many-body potentials[J]. MRS bulletin, 2012, 37(5): 513-521.
- [21] DAI Hou-fu, LI Shao-bo, CHEN Gen-yu. Comparison of subsurface damages on mono-crystalline silicon between traditional nanoscale machining and laser-assisted nanoscale machining via molecular dynamics simulation[J]. Nuclear instruments and methods in physics research section B: Beam interactions with materials and atoms, 2018, 414: 61-67.
- [22] 郭晓光. 单晶硅纳米级磨削过程的分子动力学仿真研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2008.
- GUO Xiao-guang. Study on the monocrystal silicon nanometric grinding by molecular dynamics simulations[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2008.
- [23] HAMMOND K D. Parallel point defect identification in molecular dynamics simulations without post-processing: A compute and dump style for LAMMPS[J]. Computer physics communications, 2020, 247: 106862.
- [24] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO: The open visualization tool[J]. Modelling and simulation in materials science and engineering, 2010, 18(1): 015012.
- [25] MARAS E, TRUSHIN O, STUKOWSKI A, et al. Global transition path search for dislocation formation in Ge on Si(001)[J]. Computer physics communications, 2016, 205: 13-21.
- [26] ZHANG Lin, ZHAO Hong-wei, YANG Yi-han, et al. Evaluation of repeated single-point diamond turning on the deformation behavior of monocrystalline silicon via molecular dynamic simulations[J]. Applied physics A, 2014, 116(1): 141-150.

(上接第 332 页)

- [16] BARMAN A, DAS M. Toolpath generation and finishing of bio-titanium alloy using novel polishing tool in MFAF process[J]. The international journal of advanced manufacturing technology, 2019, 100(5-8): 1123-1135.
- [17] BARMAN A, DAS M. Magnetic field assisted finishing process for super-finished Ti alloy implant and its 3D surface characterization[J]. Journal of micromanufacturing, 2018, 1(2): 154-169.
- [18] FAN Zeng-hua, TIAN Ye-bing, LIU Zhi-qiang, et al. Investigation of a novel finishing tool in magnetic field assisted finishing for titanium alloy Ti-6Al-4V[J]. Journal of manufacturing processes, 2019, 43: 74-82.
- [19] 郭明亮, 阎秋生, 潘继生, 等. 动态磁场集群磁流变抛光加工机理及试验研究[J]. 金刚石与磨料磨具工程, 2018, 38(1): 89-93.
- GUO Ming-liang, YAN Qiu-sheng, PAN Ji-sheng, et al. Mechanism and experimental study of cluster magnetorheological polishing with dynamic magnetic[J]. Diamond & abrasives engineering, 2018, 38(1): 89-93.
- [20] 路家斌, 孙世孔, 阎秋生, 等. 磨料特性对 InP 晶片集群磁流变抛光效果的影响[J]. 半导体技术, 2019, 44(1): 32-37.
- LU Jia-bin, SUN Shi-kong, YAN Qiu-sheng, et al. Effects of abrasive characteristics on the cluster magnetorheological polishing of InP wafer[J]. Semiconductor technology, 2019, 44(1): 32-37.
- [21] NAGDEVE L, SIDPARA A, JAIN V K, et al. On the effect of relative size of magnetic particles and abrasive particles in MR fluid-based finishing process[J]. Machining science and technology, 2018, 22(3): 493-506.
- [22] 白振伟, 周旭光, 阎秋生. 磨料与工件对集群磁流变效应抛光垫磨粒“容没”效应的影响[J]. 组合机床与自动化加工技术, 2014(10): 23-26.
- BAI Zhen-wei, ZHOU Xu-guang, YAN Qiu-sheng. Influence of abrasives and workpieces on abrasive accommodate-sinking effect of cluster MR-effect pad[J]. Modular machine tool & automatic manufacturing technique, 2014(10): 23-26.
- [23] 潘文波, 路家斌, 阎秋生. 铝合金阳极氧化膜的集群磁流变平面抛光试验研究[J]. 润滑与密封, 2018, 43(10): 45-50.
- PAN Wen-bo, LU Jia-bin, YAN Qiu-sheng. Experimental study on cluster magnetorheological finishing for anodic oxide film of aluminum alloy[J]. Lubrication engineering, 2018, 43(10): 45-50.
- [24] PRESTON F W. The theory and design of plate glass polishing machine[J]. Journal of the Society of Glass Technology, 1927, 11: 214-56.
- [25] WU Zhan-cheng, YAN Qiu-sheng, BAI Zhen-wei, et al. Ultra smooth polishing research based on the cluster magnetorheological effect[J]. Key engineering materials, 2011, 487: 283-288.
- [26] 陈吉华, 杨大智, 刘敬肖, 等. 金属植入物的抗蚀性研究进展[J]. 材料科学与工程, 2000, 18(4): 130-134.
- CHEN Ji-hua, YANG Da-zhi, LIU Jing-xiao, et al. The research progress of corrosion resistance of metallic implants[J]. Materials science and engineering, 2000, 18(4): 130-134.