文章编号:1674-2974(2025)06-0097-09 DOI:10.16339/j.cnki.hdxbzkb.2025180

考虑晶格缺陷的单晶4H-碳化硅纳米划擦过程分子动力学仿真研究

黄向明[1†],蔡云辉[1],任莹晖[1],何洪[1],陈永福[2]
(1. 湖南大学 机械与运载工程学院,湖南 长沙 410082;
2. 宇环数控机床股份有限公司,湖南 浏阳 410323)

摘 要:关于具有晶格缺陷的单晶碳化硅(SiC)纳米磨削机理尚未完全明晰,通过分子动力学仿真模拟系统,对含晶格缺陷的单晶碳化硅进行了纳米划擦机理的研究.建立了包括金刚石磨粒和具有不同晶格缺陷的4H-SiC仿真模型,通过分子动力学仿真揭示了不同缺陷类型对原子间势能、温度、应力和加工性能等关键参数的影响.研究发现,空位缺陷会造成工件原子间势能的不稳定,进而导致划擦后工件温度升高至671 K,而位错缺陷则显示出相对的稳定性.在纳米划擦过程中,含有位错缺陷的晶体展现了最高的平均范式等效应力,达到5.29 GPa.相比之下,存在空位缺陷的晶体表现出较低的应力,为5.07 GPa.这一结果揭示了空位缺陷能够降低材料的屈服强度,从而促进原子移除过程;而位错缺陷则提升了屈服强度,对原子的去除构成了阻碍.此外,空位缺陷抑制了位错成核并减小了损伤层厚度,而位错缺陷导致了明显的位错形成和更深的损伤层.

关键词:碳化硅;晶格缺陷;分子动力学;纳米划擦;损伤层厚度
中图分类号:TG580 **文献标志码**:A

Molecular Dynamics Simulation Study on Scratching Process of 4H-single Crystal Silicon Carbide Nanoparticles Considering Lattice Defects

HUANG Xiangming[1†],CAI Yunhui[1],REN Yinghui[1],HE Hong[1],CHEN Yongfu[2]
(1. College of Mechanical and Vehicle Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China;
2. Yuhuan CNC Machine Tools Co., Ltd., Liuyang 410323, China)

Abstract: The mechanism of nano-grinding of single crystal silicon carbide (SiC) with lattice defects remains unclear. A molecular dynamics simulation system is used to study the nano-scratching mechanism of single crystal SiC with lattice defects. The simulation model including diamond abrasive grains and 4H-SiC workpieces with different lattice defects is built. The molecular dynamics simulation results reveal the effects of different defect types on key parameters such as interatomic potential energy, temperature, stress and machining performance. It is found that vacancy defects lead to instability in the interatomic potential energy of the workpiece, which in turn results in increasing the temperature of the workpiece up to 671 K after scribing, while dislocation defects show relative

* **收稿日期**:2024-02-23
基金项目:国家自然科学基金资助项目(52375423), National Natural Science Foundation of China(52375423)湖南省科技计划项目(2024GK1070), Hunan Provincial Science and Technology Plan(2024GK1070)
作者简介:黄向明(1971—),男,湖南宁乡人,湖南大学教授,博士
† 通信联系人,E-mail: h_xiangming@aliyun.com

stability. During nano-scratching, crystals with dislocation defects exhibit the highest average paradigm equivalent stress of 5.29 GPa, while crystals with vacancy defects exhibit the lowest stress of 5.07 GPa, which suggests that vacancy defects reduce the yield strength and favour the removal of atoms, whereas dislocation defects increase the yield strength and impede the removal of atoms. Furthermore, vacancy defects inhibited dislocation nucleation and reduced the thickness of the damage layer, whereas dislocation defects led to significant dislocation formation and a deeper damage layer.

Key words: silicon carbide; lattice defects; molecular dynamics; nano-scratching; surface damage

碳化硅(SiC)以其优异的物理和化学性能代替了传统半导体材料，成为在高温、高压、大功率和耐辐射等特殊环境下工作的半导体器件的理想选择. SiC有多种晶型，其中4H-SiC在光电器件、高温电子器件等方面有着广泛的应用. 然而，4H-SiC具有超高的断裂韧性和硬度，属于难加工的硬脆性材料. 而且在单晶4H-SiC的外延生长过程中，可能引入不同类型的晶格缺陷，这些晶格缺陷可能会影响加工，最终影响器件的性能[1]. 为了探讨具有晶格缺陷的单晶碳化硅的超精密加工性能，对单晶碳化硅材料去除机制进行深入的分子级理解至关重要.

分子动力学(molecular dynamics，MD)是一种有效地模拟原子运动及原子之间相互作用的方法. MD模拟在研究超精密抛光和切割机理方面发挥了重要作用，该方法基于原子水平模拟单个磨粒的纳米划痕，直观、准确地获得材料在塑性变形过程中原子尺度结构演化行为[2-7]. 目前，许多学者已经应用分子动力学模拟方法来研究单晶碳化硅在精密加工过程中的力学性能和去除机理. Schuh等[8]研究了4H-SiC的压痕，并提出了在基于成核的统计框架内分析初期塑性的方法，该方法能够预测在压痕过程中最可能出现的机制事件. Tian等[9]在4H-SiC和6H-SiC材料的C面和Si面进行的一系列划擦试验，研究了材料的去除和相关的亚表面缺陷. Meng等[10]通过MD模拟研究了应变速率和磨损热对单晶3C-SiC去除行为的影响，发现磨损温度导致SiC表面热软化，从而降低屈服应力和划痕硬度.

虽然分子动力学在研究4H-SiC的表面和亚表面损伤方面起到了关键作用，但目前的研究往往限于理想情况下的晶格模型，并未充分考虑实际情况中存在的晶格缺陷情况，仅有部分学者对空位缺陷进行了研究[11-12]. 实际加工的材料存在一些空位、间隙原子以及位错等缺陷，并且材料的性能在很大程度上取决于其内部的缺陷，因此材料内部缺陷对加工过程的影响不容忽视[13]. 另外，材料内部缺陷在精密/超精密加工过程中受切削力、切削热等的影响会逐渐发展变化，如微裂纹和微孔洞的形核、扩展和会合，从而导致材料的微观结构发生不可逆的热力学耗散过程，造成材料表面、亚表面的损伤[14]. 因此，对考虑晶格缺陷的单晶材料超精密加工过程进行分子动力学仿真更具有实际应用意义.

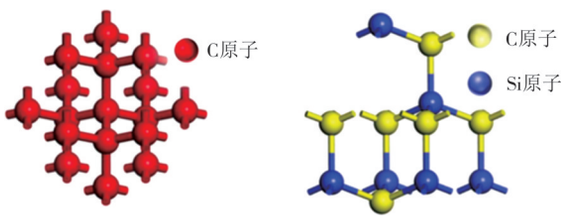
纳米划擦实验是研究材料纳米力学性能的常用方法，可以观察和分析相应的材料变形和损伤行为，以及弹性、塑性和断裂之间的过渡条件. 本文采用MD模拟方法，研究了含不同晶格缺陷情况下的4H-SiC在纳米划擦过程中的去除机理，包括无缺陷、空位缺陷、位错缺陷和混合缺陷情况. 通过建立划擦模型，仿真分析了不同晶格缺陷类型情况下的4H-SiC对温度、应力、表面形貌和亚表面损伤的影响规律，揭示了4H-SiC的表面创成机制. 因此，本研究的目的是通过分子动力学模拟方法深入探讨不同晶格缺陷条件下的4H-SiC衬底在纳米划擦过程中的材料去除机理，为超精密加工过程提供理论依据.

1 纳米划擦过程仿真模拟

1.1 模型建立

利用atomsk软件建立单晶4H-SiC考虑晶格缺陷的纳米划擦过程仿真模型晶型如图1所示. 该模型包含磨粒和工件两个部分，磨粒选择了单晶金刚石磨粒，其本征体的晶格常数为a=0.357 nm，晶型如

图1(a)所示;工件4H-SiC属于六方晶系,其本征体的晶格常数为 $a=b=0.307$ nm, $c=1.005$ nm,晶型如图1(b)所示.为了提高计算效率和仿真精度,将金刚石磨粒简化为球体,半径为3.5 nm,整个颗粒含有10 209个原子;4H-SiC工件简化为长方体,尺寸为30.8 nm×17 nm×8 nm($x\times y\times z$),含有384 000个原子.



(a)金刚石磨粒晶型　　(b)4H-SiC晶型

图1　金刚石与4H-SiC晶型图

Fig.1　Crystal structures of diamond and 4H-SiC

整个工件分为三层:牛顿原子层(NVE系综)、恒温原子层(NVT系综)和边界原子层.牛顿原子层是工件的主要部分,遵循牛顿运动定律,用于研究在划痕模拟过程中发生的现象[15-16].边界原子层能够阻止整个工件在划擦过程中发生刚性位移.恒温原子层能够利用Berendsen恒温器调节原子速度,从而将温度维持在预设的范围内.在划擦过程中,恒温层内的恒温原子吸收了牛顿原子产生的热量.金刚石磨粒位于工件右侧,距离为1 nm,以确保金刚石磨粒不与初始状态的工件原子相互作用.工件及磨粒仿真模型如图2所示.

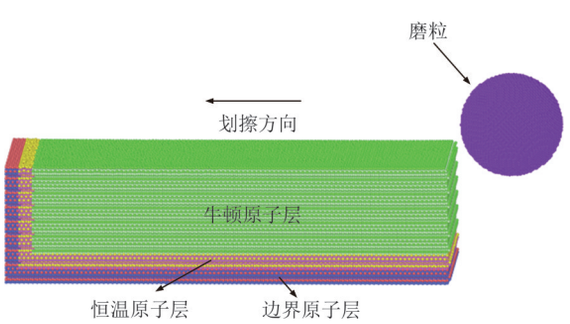


图2　工件及磨粒仿真模型

Fig.2　Simulation model of the workpiece and abrasive grain

为了研究空位缺陷对精密加工过程的影响,随机剔除原子以创建含空位缺陷的单晶4H-SiC模型.根据第一性原理[17],当空位缺陷数量不多时,可以近似认为晶体的结构保持不变,因此可以采用随机剔除原子的方法构建含空位缺陷的模型.在实际情况中,硅原子空位的缺陷浓度为 2.3×10^{21} cm^{-3},碳原子空位的缺陷浓度为 2.4×10^{21} cm^{-3}[18],需在无缺陷的模型中剔除约9 108个硅原子和9 504个碳原子,得到含空位缺陷的单晶4H-SiC晶体模型,如图3所示.

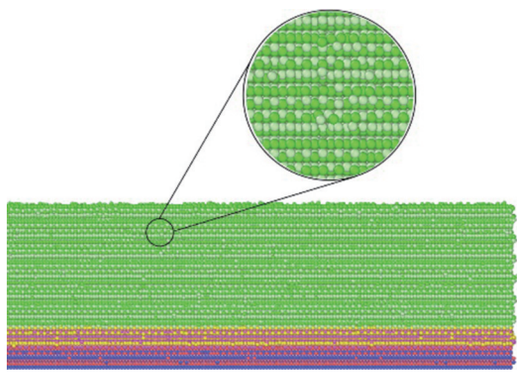


图3　含空位缺陷的4H-SiC晶体模型

Fig.3　4H-SiC crystal model with vacancy defects

4H-SiC晶体中的位错主要包括螺位错(threading screw dislocation, TSD)、基平面位错(basal plane dislocation,BPD)等,如图4所示,其中BPD对加工及器件特性影响最为显著[19].由于BPD浓度为0.1 cm^{-3},本文建立的模型较小,计算得到总体积不足一条BPD,因此,本文利用atomsk软件建立了含一条BPD的模型,以此进行模拟和分析,图5为含基平面位错(BPD)的4H-SiC晶体模型垂直于 y 轴的截面图.

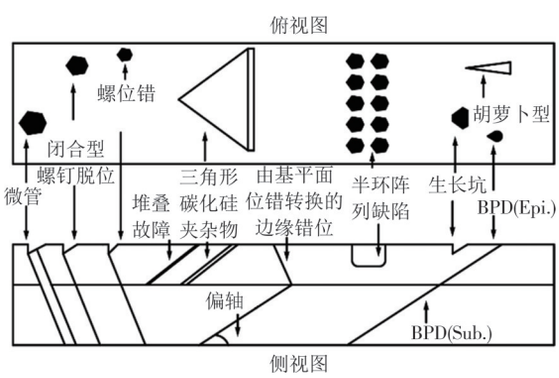


图4　SiC外延材料中主要的缺陷示意图

Fig.4　Schematic diagram of major defects in SiC epitaxial materials

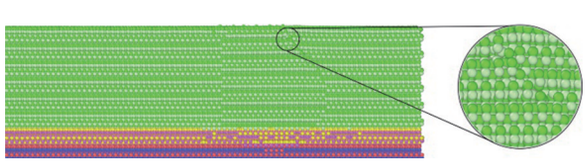


图5　含基平面位错的4H-SiC晶体模型

Fig.5　Model of 4H-SiC crystal with BPD

在具有空位缺陷的4H-SiC晶体的基础上添加基平面位错，创建了混合缺陷模型，图6为4H-SiC晶体含混合缺陷的模型垂直于y轴的截面图.

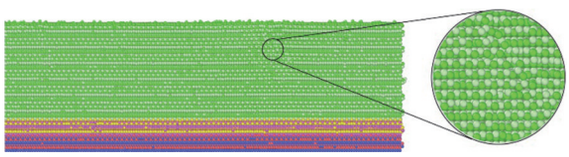


图6 4H-SiC晶体含混合缺陷的模型

Fig.6 Model of 4H-SiC crystal with mixed defects

1.2 仿真实验

针对4H-SiC材料的超精密加工过程，采用了分子动力学仿真技术，以增强仿真结果的精确度和可信度. 仿真过程细致地划分为两个阶段：弛豫步骤和划擦步骤. 弛豫步骤旨在消除体系内其他因素对划擦过程中4H-SiC变形的干扰作用，使系统处于接近模拟设定值的平衡状态. 本次仿真中在NVT系综下进行了弛豫，在NVE系综下进行了划擦.

首先对整体结构进行能量最小化处理，以消除不合理的结构，设置仿真系统在经过30 000个时间步后达到平衡状态. 随后，沿着方向[1-210]在(0 0 0 1)基面上(垂直于z轴)对无缺陷模型、含空位缺陷的模型、含基平面位错的位错缺陷模型及含混合缺陷的模型，以划擦速度为100 m/s、划擦深度为1.5 nm进行划擦模拟，划擦长度为11 nm，模拟时间步长为1 fs，具体参数见表1.

表1 4H-SiC划擦仿真参数

Tab.1 Parameters for 4H-SiC scratching simulation

参数	数值
尺寸	30.8 nm×17 nm×8 nm
磨粒半径	3.5 nm
缺陷类型	无缺陷、空位缺陷、位错缺陷、混合缺陷
划擦速度	100 m/s
划擦深度	1.5 nm
划擦长度	11 nm
步长	1 fs
初始温度	300 K
势函数	Tersoff
系综	NVE

Tersoff势函数通常用来描述共价体系中的原子间势，这种电势也可以适当用于描述SiC的性质[20]. 模拟所使用的分子动力学软件为LAMMPS，由于LAMMPS没有可视化功能，因此需要使用后处理软件OVITO对其模拟结果进行可视化处理，采用位错提取算法(dislocation extraction algorithm，DXA)对划擦过程中产生的原子结构变化情况进行识别，分析SiC晶体亚表面产生的位错和缺陷[21].

2 结果和讨论

2.1 原子间势能分析

原子间势能指的是原子之间相互作用所产生的能量，它源于原子间的相互作用力. 原子间势能是描述原子之间相互作用的关键因素，直接影响材料的性质. 本研究采用弛豫过程中的原子间势能变化曲线来分析不同缺陷类型对4H-SiC工件的影响.

图7为在弛豫过程中包含各类缺陷的单晶4H-SiC原子间势能的变化曲线. 各类缺陷工件的原子间势能变化曲线呈现出不同的趋势. 无缺陷和含位错缺陷的工件在弛豫过程中能量迅速降低并趋于稳定，而含空位缺陷和混合缺陷工件的原子间势能变化曲线则显示出不稳定性. 不稳定性的产生源于空位缺陷初始模型在结构上的空位点具有较多空位能量，空位附近能量的不平衡导致系统的不稳定，这种不稳定结构会导致系统中原子的振动. 随着系统的自我调整，部分原子重新排列，最终达到稳定状态.

对含有各类缺陷的单晶碳化硅在弛豫过程的初始和稳定阶段的原子间势能的观察表明，在初始阶段，含缺陷工件的原子间势能都高于无缺陷工件. 其中，含空位缺陷工件的原子间势能远高于无缺陷工件和含位错缺陷工件. 而在达到稳定阶段后，含混合缺陷工件的原子间势能最高，其次是含空位缺陷的工件，含位错缺陷工件的原子间势能略高于无缺陷工件. 分析结果表明，不同缺陷类型引起了工件内部的能量变化. 缺陷导致晶格畸变，存储了大量能量[22]. 特别是含空位缺陷工件，其内部能量储存更高，从而在划擦过程中抵抗变形的能量增加，进而导致系统产生更高的热量.

2.2 温度分析

在划擦过程中，由于变形和摩擦不可避免地产生热量，导致划擦区域的局部温度升高. 在超精密加工过程中，材料的温度波动对加工性能具有决定性的影响，工件的材料去除率在很大程度上也受到温度的制约. 因此，本文对不同类型缺陷的工件在划擦过程中的温度进行了详细分析.

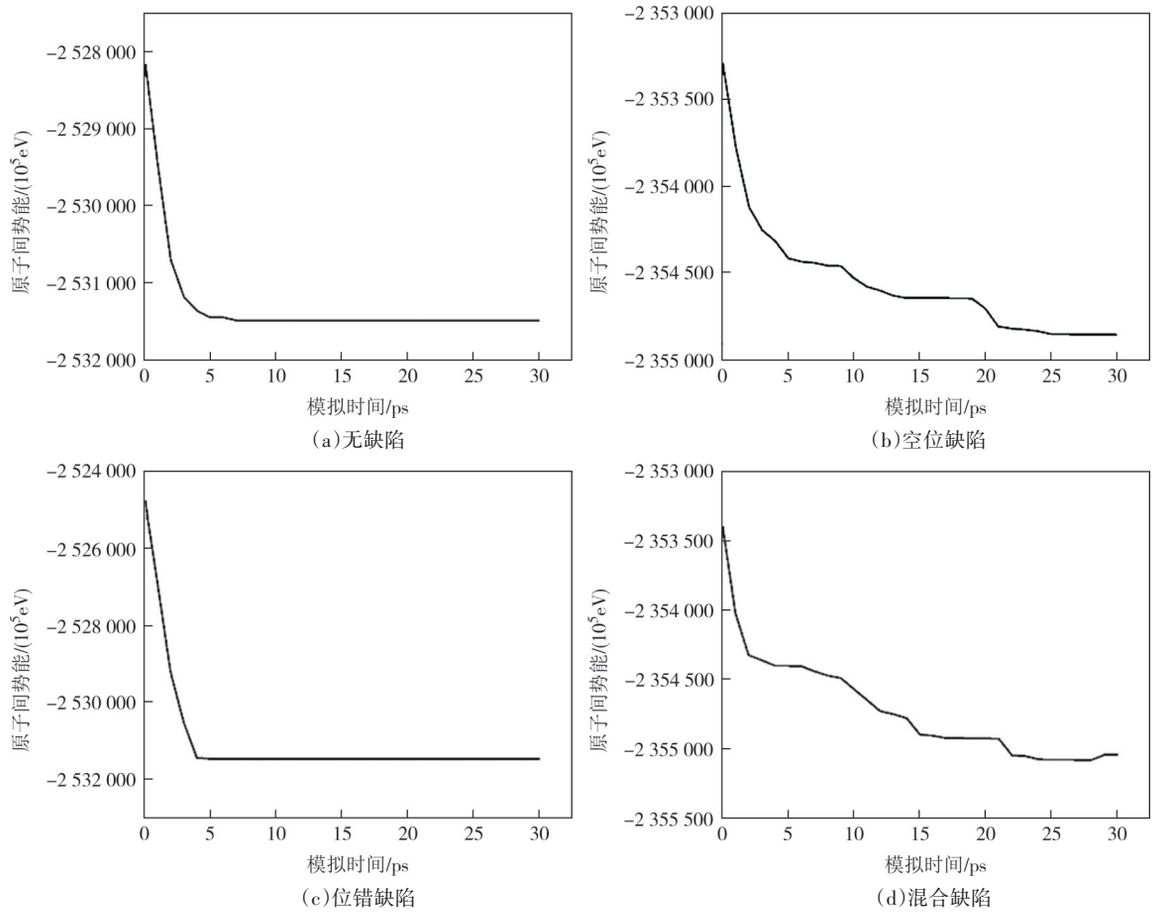


图 7　弛豫过程各缺陷的4H-SiC原子间势能变化曲线

Fig.7　Change in interatomic potential during the relaxation process for 4H-SiC with different defects

分子动力学模拟中的温度方程可以表示为[23]:

$$\frac{1}{2}\sum_i m_i v_i = \frac{3}{2}Nk_bT \tag{1}$$

$$K_e = 2mv^2 \tag{2}$$

式中:N为设置区域内的原子数;m_i为第i个原子的质量;v_i为第i个原子的速度;K_e为原子的动能;k_b为玻尔兹曼常数,其值为1.380 650 3×10^{23} J/K;T为原子的温度.

图 8 为在纳米划痕过程中工件的温度变化曲线.可以看出,含不同类型缺陷的工件温度变化趋势大体相似.在磨粒未接触工件阶段,工件温度都为设置的300 K.在磨粒切入工件的过程中,系统温度急剧上升.当磨粒完全切入工件后,切削过程趋于稳定,温度变化逐渐减小.比较不同工件的稳定阶段的温度,无缺陷工件的温度最低,为629 K,位错缺陷工件温度为642 K,空位缺陷与混合缺陷工件温度为671 K,空位缺陷工件与混合缺陷工件的温度相较于无缺陷工件与位错缺陷工件的温度更高,比无缺陷工件的温度高42 K,位错缺陷工件相较于无缺陷工件的温度略有升高,混合缺陷工件相较于空位缺陷工件的温度略有升高.这表明位错缺陷在划擦过程中对于温度的改变不是很明显,而空位缺陷却能显著提高工件的温度.

空位缺陷在划擦过程中显著提升了工件温度,该结果与原子间势能分析一致,揭示了空位缺陷引起的晶格畸变,储存了大量能量,从而在划擦过程中

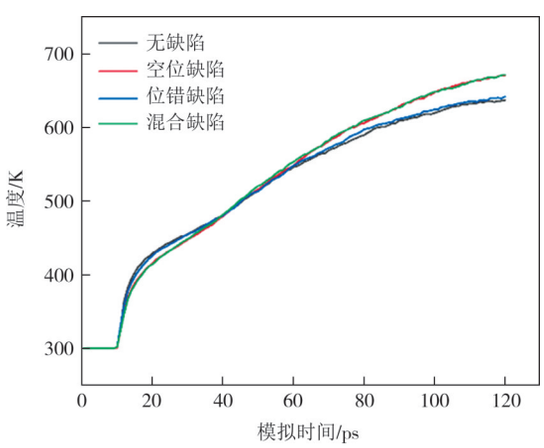


图 8　工件温度变化曲线

Fig.8　Workpiece temperature change curve

导致了显著的温度升高[24]. 而位错缺陷的晶体畸变较小，其储存的能量较少，对温度的提升相对较小.

2.3 应力分析

屈服应力对工件基体的结构转变产生重要影响. 维里应力法是一种用于研究主应力中最大绝对值的等效应力的方法. 本文采用维里应力法来计算原子的各向应力状态，维里应力的表达式如下[25]：

$$\sigma_{\alpha\beta}(i)=\frac{1}{N_S}\sum_i\left[\frac{m_i\boldsymbol{v}_i^{\alpha}\boldsymbol{v}_i^{\beta}}{V_i}+\frac{1}{2V_i}\sum_j F_{ij}\frac{\boldsymbol{x}_{ij}^{\alpha}\boldsymbol{x}_{ij}^{\beta}}{r_{ij}}\right] \tag{3}$$

式中：N_S是S区域内原子的数量；m_i是第i个原子的质量；$\boldsymbol{v}_i^{\alpha}$是第$i$个原子在$\boldsymbol{\alpha}$方向矢量上的速度；$\boldsymbol{v}_i^{\beta}$是第$i$个原子在$\boldsymbol{\beta}$方向矢量上的速度；$V_i$是第$i$个原子的体积；$r_{ij}$是第$i$个和第$j$个原子之间的距离；$\boldsymbol{x}_{ij}^{\alpha}$是在第$i$个和第$j$个原子之间的$\boldsymbol{\alpha}$方向矢量；$\boldsymbol{x}_{ij}^{\beta}$是在第$i$个和第$j$个原子之间的$\boldsymbol{\beta}$方向矢量；$F_{ij}$是第$i$个和第$j$个原子之间的力.

根据维里应力的结果，可以计算范式等效应力如下[23]：

$$\sigma_s=\frac{1}{\sqrt{2}}\times\sqrt{(\sigma_x-\sigma_y)^2+(\sigma_y-\sigma_z)^2+(\sigma_z-\sigma_x)^2+6(\tau_{xy}^2+\tau_{yz}^2+\tau_{zx}^2)} \tag{4}$$

式中：σ_s为范式等效应力；σ_x、σ_y、σ_z分别为x、y、z方向上的正应力；τ_{xy}、τ_{yz}、τ_{zx}分别为xy平面、yz平面、zx平面上的剪应力.

使用MATLAB计算，得到不同类型缺陷工件的划擦区域内部分的平均范式等效应力，结果如图9所示.

从图9中可以看出，在划擦过程中，含有位错缺陷的晶体表现出最大的平均范式等效应力，为5.29 GPa，而含有空位缺陷的晶体则表现出最小的平均范式等效应力，为5.07 GPa. 混合缺陷晶体的平均范式等效应力略高于空位缺陷晶体，但略低于无缺陷晶体.

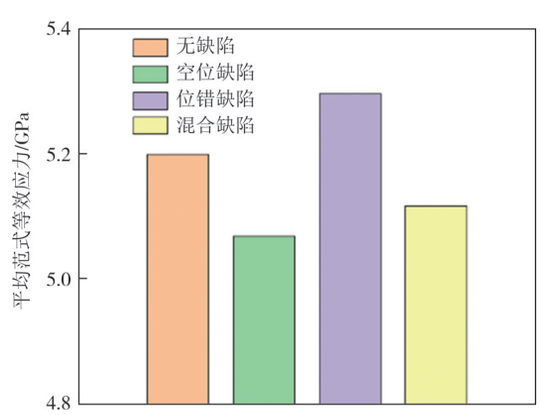


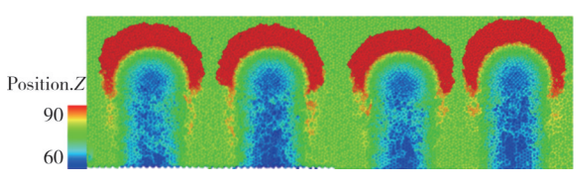
图9 不同类型缺陷工件平均范式等效应力图

Fig.9 Average norm equivalent stress for different defect-containing workpieces

这一研究结果揭示了缺陷类型对屈服强度的显著影响. 空位缺陷降低了屈服强度，而位错缺陷却相反，提高了屈服强度. 位错缺陷在变形过程中相互钉扎缠结，阻碍了位错的滑移，从而导致屈服强度的升高[26]. 相反，空位缺陷减缓了位错的形核，降低了材料的屈服强度. 此外，工件温度的升高降低了屈服应力，特别是在空位缺陷和混合缺陷晶体中，其平均范式等效应力显著降低.

2.4 表面形貌及去除原子数分析

纳米划擦过程中，工件表面形貌和去除原子数是评估材料加工性能的重要指标. 通过对不同缺陷类型工件划擦后表面形貌和去除原子数的分析，可深入了解晶格缺陷对加工效果的影响. 为了更好地观察磨屑的成型过程，将磨粒原子隐藏，对不同高度的原子上色，如图10所示，为各类缺陷工件划擦后的表面形貌和切屑堆积分布. 可以看出，随着磨粒的划擦，正常原子被挤压并断裂成非晶态，它们与磨粒一起移动并积聚在沟槽的两侧和前部. 从图10可以明显看出，含有空位缺陷和混合缺陷的工件相较于无缺陷的工件，产生更深且更广的沟槽. 相反，含位错缺陷的工件产生的沟槽深度和面积最小. 这与原子间势能分析中观察到的结论一致，即缺陷类型直接影响工件的去除性能.



(a)无缺陷 (b)空位缺陷 (c)位错缺陷 (d)混合缺陷

图10 各类缺陷工件划擦后表面形貌和切屑堆积分布

Fig.10 Surface topography and chip accumulation distribution after scratching for different defects

这是因为纳米划擦过程中，含空位缺陷与含混合缺陷工件的平均范式等效应力比无缺陷更低，相同的磨粒以相同的参数划擦更容易对工件造成材料的去除，而含位错缺陷工件的平均范式等效应力比无缺陷更高，其材料更难以去除.

去除原子数的定量分析支持了表面形貌的观察结果. 采用DXA方法对挤压变形中的切屑进行识别、提取和计算，以得到去除的原子数，结果如图11

所示.含有空位缺陷和混合缺陷的工件表现出更高的原子去除数量,而含位错缺陷的工件的原子去除数最低.这意味着,空位缺陷和混合缺陷工件更容易在划擦过程中发生原子的去除,从而产生更为明显的表面形貌.

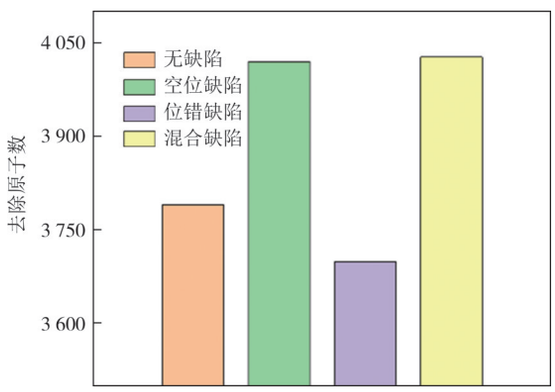


图 11　各类缺陷工件划擦后去除原子数

Fig.11　Number of removed atoms after scratching for different defects

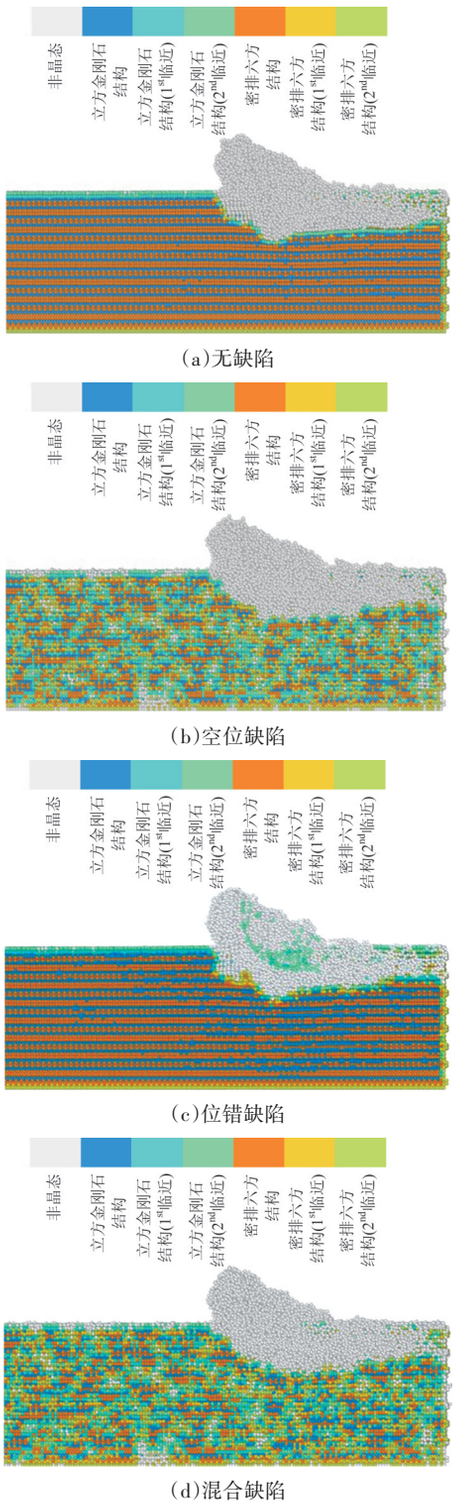
通过表面形貌和去除原子数的综合分析,可以看出缺陷类型对材料的去除性能有着显著的影响.空位缺陷和混合缺陷的存在促进了工件的原子去除,而位错缺陷则对去除性能产生抑制作用.这为制定合理的缺陷调控策略,优化材料的加工性能提供了有益的启示.

2.5　损伤层厚度分析

损伤层厚度是指SiC加工表面到组织转变和位错线末端的距离,是衡量材料塑性变形和位错结构演化的关键参数.通过对不同类型缺陷工件的划擦后损伤层厚度进行分析,可了解缺陷对材料内部结构变化的影响.为了解释不同类型缺陷4H-SiC工件塑性变形的影响机理,研究不同类型缺陷对工件损伤层厚度的影响,利用OVITO软件中的DXA分析对模拟结果进行了可视化处理.

图12为各类缺陷工件划擦后经DXA分析后的截面图,无缺陷工件及含位错缺陷工件的主体部分为密排六方结构与立方金刚石结构交错排列,而含空位缺陷及混合缺陷工件由于空位缺陷分散各处,使得弛豫后工件晶格形状为混杂着的各类晶型.在划擦过程中,原子通过挤压和剪切作用转化为无定形原子,它们出现在沟槽两侧、磨粒前部以及划痕亚表面.

对于不同情况下的4H-SiC工件,亚表面的无定形原子深度不同,反映了损伤层厚度的不同.图13为



(a)无缺陷

(b)空位缺陷

(c)位错缺陷

(d)混合缺陷

图 12　各类缺陷工件划擦后DXA分析图

Fig.12　DXA analysis after scratching for different defects

各类缺陷工件划擦后的损伤层厚度,从图13可以看出,划擦后无缺陷工件的损伤层厚度仅为2.6 nm,空位缺陷工件的损伤层厚度为2.4 nm,而位错缺陷工件的损伤层厚度则为3.1 nm,混合缺陷工件的损伤层厚度为2.9 nm.这一结果说明,空位缺陷的存在阻

碍了位错的成核,促进了位错的湮灭,从而减小了损伤层厚度.相反,位错缺陷的存在导致位错形成更为显著,产生更深的损伤层.混合缺陷工件的损伤层厚度介于这两者之间,显示出混合缺陷对损伤层形成的综合影响.

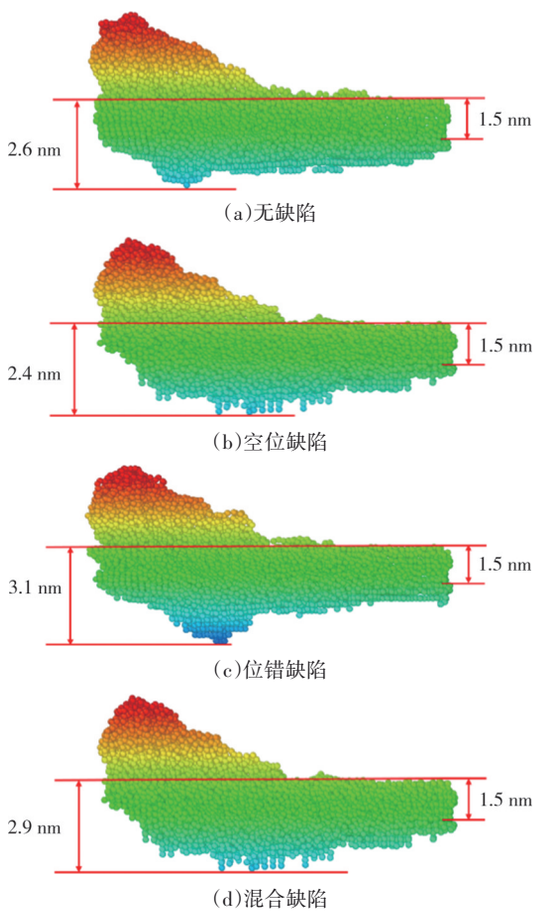


图 13 各类缺陷工件划擦后损伤层厚度

Fig.13 Damage layer thickness after scratching for different defects

3 结 论

本研究通过分子动力学模拟分析了纳米划擦过程中不同晶格缺陷对单晶 4H-SiC 的超精密加工性能的影响规律,主要结论如下:

1)不同缺陷类型对 4H-SiC 工件的原子间势能变化产生了显著影响,含有空位缺陷的工件在弛豫过程中表现出不稳定性,这源于初始模型的空位点导致系统的不稳定.在纳米划擦过程中,空位缺陷工件显著提升了工件温度,与原子间势能分析一致,表明空位缺陷通过引起晶格畸变、储存大量能量,导致了明显的温度升高.

2)空位缺陷降低了屈服强度,而位错缺陷则提高了屈服强度.因此,低屈服强度的空位缺陷工件更容易发生原子的去除,而位错缺陷因为屈服强度的提高,对去除性能产生抑制作用.

3)空位缺陷的存在阻碍了位错的成核,促进了位错的湮灭,从而减小了损伤层厚度.相反,位错缺陷的存在导致位错形成更为显著,产生更深的损伤层.

参考文献

[1] 綦正超,许庭翔,刘学超,等. 杂质和缺陷对SiC单晶导热性能的影响[J]. 人工晶体学报,2021,50(5):816-824.
QI Z C,XU T X,LIU X C,et al. Effect of impurities and defects on the thermal conductivity of single crystal SiC[J]. Journal of Synthetic Crystals,2021,50(5):816-824.(in Chinese)

[2] 余翠兰,张钰柱.三体抛光单晶硅表面原子的分子动力学仿真[J].组合机床与自动化加工技术,2022(3):43-46.
YU C L,ZHANG Y Z. Molecular dynamics simulation of three body polishing of single crystal silicon surface atoms[J],Modular Machine Tool & Automatic Manufacturing Technique,2022(3):43-46.(in Chinese)

[3] 田京京,梁国星,黄永贵,等. 单晶 Ni_3Al 切削过程的分子动力学仿真研究[J]. 机械设计与制造,2021(7):109-112.
TIAN J J,LIANG G X,HUANG Y G,et al. Molecular dynamics simulation of monocrystalline Ni_3Al cutting process[J]. Machinery Design & Manufacture,2021(7):109-112.(in Chinese)

[4] LUO L,YANG X J. Molecular dynamics simulation and experimental study of single crystalline germanium cutting process[J]. Rare Metal Materials and Engineering,2019,48(12):3863-3869.

[5] MENG X S,YUE H X,WU W L,et al. Simulation of abrasive polishing process of single crystal silicon based on molecular dynamics [J]. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology,2022,121(11):7195-7211.

[6] 张逸飞,李珊,杨晓京,等. 含有空位缺陷的单晶锗纳米切削过程分子动力学仿真[J]. 电子科技,2019,32(12):53-57.
ZHANG Y F,LI S,YANG X J,et al. Molecular dynamics simulation of monocrystal germanium nanocutting with vacancy defects[J]. Electronic Science and Technology,2019,32(12):53-57.(in Chinese)

[7] ZHOU P,SHI X D,LI J,et al. Molecular dynamics simulation of SiC removal mechanism in a fixed abrasive polishing process[J]. Ceramics International,2019,45(12):14614-14624.

[8] SCHUH C A,LUND A C. Application of nucleation theory to the rate dependence of incipient plasticity during nanoindentation[J]. Journal of Materials Research,2004,19(7):2152-2158. .

[9] TIAN Z G,CHEN X,XU X P. Molecular dynamics simulation of the material removal in the scratching of 4H-SiC and 6H-SiC

substrates[J]. International Journal of Extreme Manufacturing, 2020, 2(4): 045104.

[10] MENG B B, YUAN D D, XU S L. Study on strain rate and heat effect on the removal mechanism of SiC during nano-scratching process by molecular dynamics simulation [J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2019, 151: 724-732.

[11] ZHOU P, SUN T, SHI X D, et al. Atomic-scale study of vacancy defects in SiC affecting on removal mechanisms during nano-abrasion process[J]. Tribology International, 2020, 145: 106136.

[12] 郭晓光,张亮, 金洙吉, 等. 考虑空位缺陷的单晶硅纳米级磨削过程的分子动力学仿真[J]. 中国机械工程, 2013, 24(10): 1284-1288.
GUO X G, ZHANG L, JIN Z J, et al. Molecular dynamics simulation in vacancy defect monocrystal silicon nanometric grinding[J]. China Mechanical Engineering, 2013, 24(10): 1284-1288.(in Chinese)

[13] SHIMADA S, TANAKA H, IKAWA N. Atomistic mechanism of surface generation in micromachining of monocrystalline silicon [J]. Annals of EUSPEN, 1999, 1: 230-233.

[14] ZHANG B, ZHENG X L, TOKURA H, et al. Grinding induced damage in ceramics [J]. Journal of Materials Processing Technology, 2003, 132(1-3): 353-364.

[15] GOEL S, LUO X C, REUBEN R L, et al. Atomistic aspects of ductile responses of cubic silicon carbide during nanometric cutting[J]. Nanoscale Research Letters, 2011, 6(1): 589.

[16] 秦彦军,张建强,杨慧雅, 等.单轴应变对本征和N掺杂4H-SiC电子结构的影响[J].原子与分子物理学报, 2025, 42(3): 179-185.
QIN Y J, ZHANG J Q, YANG H Y, et al. Effect of uniaxial strain on electronic structure of intrinsic and N-doped 4H-SiC [J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2025, 42(3): 179-185.(in Chinese)

[17] 苏晋阳,郭瑞贤,刘淑平. 点缺陷对4H-SiC的影响[J]. 太原科技大学学报,2021,42(4):335-340.
SU J Y, GUO R X, LIU S P. Effect of point defect on 4H-SiC[J]. Journal of Taiyuan University of Science and Technology, 2021, 42(4): 335-340.(in Chinese)

[18] KALLINGER B, POLSTER S, BERWIAN P, et al. Threading dislocations in n-and p-type 4H-SiC material analyzed by etching and synchrotron X-ray topography[J]. Journal of Crystal Growth, 2011, 314(1): 21-29.

[19] TERSOFF J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems[J]. Physical Review B, 1988, 37(12): 6991-7000.

[20] 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.

[21] DOLABELLA S, BORZÌ A, DOMMANN A, et al. Lattice strain and defects analysis in nanostructured semiconductor materials and devices by high-resolution X-ray diffraction: theoretical and practical aspects[J]. Small Methods, 2022, 6(2): 2100932.

[22] GOEL S, LUO X C, 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.

[23] MIYAZAKI N, UCHIDA H, MUNAKATA T, et al. Thermal stress analysis of silicon bulk single crystal during Czochralski growth [J]. Journal of Crystal Growth, 1992, 125(1-2): 102-111.

[24] MIYAZAKI N, SHIOZAKI Y. Calculation of mechanical properties of solids using molecular dynamics method[J]. JSME International Journal Ser A, Mechanics and Material Engineering, 1996, 39(4): 606-612.

[25] 杨光, 刘晓双, 李佳君, 等. 4H碳化硅单晶中的位错[J].人工晶体学报, 2022, 51(9): 1673-1690.
YANG G, LIU X S, LI J J, et al. Dislocations in 4H silicon carbide single crystals[J]. Journal of Synthetic Crystals, 2022, 51(9): 1673-1690.(in Chinese)

[26] WAN W, TANG C X, QIU A, et al. The size effects of point defect on the mechanical properties of monocrystalline silicon: a molecular dynamics study[J]. Materials, 2021, 14(11): 3011.