

单晶硅微纳构件加工表面性能的时效研究*

胡兴雷¹⁾²⁾ 孙雅洲^{1)†} 梁迎春¹⁾ 陈家轩¹⁾

1) (哈尔滨工业大学机电工程学院, 哈尔滨 150001)

2) (北京自动化控制设备研究所, 北京 100074)

(2013年6月20日收到; 2013年8月27日收到修改稿)

采用蒙特卡罗方法和分子动力学方法相结合, 模拟单晶硅微纳构件加工表面的时效过程, 研究其对加工表面质量和构件力学性能的影响. 模拟结果表明: 在时效过程中, 单晶硅微纳构件加工变质层的有序度显著提高, 残余应力大幅降低, 表面粗糙度略有增加, 此外还发现加工变质层中非晶硅原子在时效过程中大幅减少, 部分非晶硅出现了再结晶现象, 其中部分 BCT5-Si 以及金属相 (Si-II) 结构原子转化为金刚石结构 (Si-I). 时效作用对加工后单晶硅微纳构件表面性能具有重要的影响, 同时可以提高微纳构件的拉伸力学性能.

关键词: 蒙特卡罗方法, 纳米加工, 表面性能, 时效性

PACS: 07.10.Cm, 71.15.Pd, 81.40.Cd

DOI: 10.7498/aps.62.220704

1 引言

单晶硅是制造半导体硅器件的重要材料. 随着微机电系统 (MEMS) 和纳机电系统 (NEMS) 的发展, 微纳构件的尺寸要求越来越小, 甚至要求达到纳米量级, 此时微纳构件的比表面积大. 加工表面质量包括表面微观形貌和加工变质层, 对器件性能的影响也越来越大, 甚至成为影响器件使用性能的决定性因素. 微纳构件加工表面形成后, 工件从高能状态向低能量的稳定状态演变, 时效作用对构件的表面质量具有重要影响, 进而对材料性质和器件使用性能产生重要的影响. 因此研究单晶硅微纳构件加工变质层在时效过程中性能的时效性具有重要的意义.

在微纳构件加工过程中, 工件受到切削力作用发生变形, 引起点阵畸变, 形成大量结构缺陷, 因此工件内部尤其是加工表面具有较高的机械储存能, 包括残余弹性应变能和结构缺陷能. 机械储存能是形变材料再结晶驱动力, 工件原子通过自行调整其位置来降低工件能量, 使工件向能量最低的稳定状态演变, 同时工件的表面形貌、内部的应力状态和

缺陷结构等会发生显著变化, 这一过程我们称之为表面能量时效过程, 简称时效过程. 本文研究时效过程对单晶硅微纳构件加工表面性能演变规律的影响.

目前主要通过分子动力学 (MD) 方法模拟微纳构件加工表面的弛豫过程, 进而研究其性能的演变规律. Ye 等^[1] 采用 MD 方法模拟了弛豫作用对单晶铜微纳构件加工表面的影响, 结果表明, 弛豫作用可以影响加工表面质量, 同时切削速度对工件加工缺陷的弛豫作用具有重要影响. 但是采用弛豫的方式, 可以预测已加工表面在极小时间尺度上的演变, 时间尺度往往是皮秒, 达到纳秒的时间尺度都非常困难, 这与真实的时间尺度有很大的差距.

蒙特卡罗 (MC) 方法是一种随机性模拟方法, 广泛应用于材料学和微纳加工领域. 王浩等^[2-4] 采用 MC 方法模拟了三维晶粒长大的过程, 仿真验证了三种现存的三维个体晶粒长大速率拓扑依赖性方程, 同时研究了晶粒棱长、尺寸与拓扑学特征之间的统计关系. 郑小平等^[5,6] 采用 MC 方法模拟了薄膜生长的随机过程, 模拟了薄膜的早期成核情况以及表面粗糙度和相对密度, 同时研究薄膜生长的三维立体成像, 结果表明在低温和高温时薄膜的

* 国家杰出青年基金 (批准号: 50925521) 和国家自然科学基金 (批准号: 51075092) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: sunyzzh@hit.edu.cn

早期成核和表面形貌完全不同, 并且早期成核对薄膜后续的生长有重要的影响. Wang 等 [7] 采用三维 MC 模拟方法分析了衬底偏置效应以及 Si/SiO₂ 界面附近表面粗糙度对鳍式场效应晶体管 (FinFET) 性能的影响. Komanduri 等 [8,9] 采用 MC 方法首次对单晶材料在传统切削速度下的切削进行模拟, 同时对常见面心立方体结构金属的纳米拉伸过程进行仿真, 通过与相同条件下的 MD 模拟直接比较来评估其效果. 为了减少计算时间, Narulkar 等 [10] 对纳米切削的 MC 方法进行了改进, 新的 MC 模拟结合了最速下降法和 MC 程序, 大幅减少计算时间.

本文基于随机性算法, 采用 MC 方法和 MD 方法相结合, 建立了单晶硅微纳构件加工后时效过程的 MC 分析模型, 并搭建 GPU 高性能并行计算平台, 在宏观时间尺度上研究单晶硅微纳构件加工表面性能的时变性, 以及时效作用对单晶硅微纳构件力学性能的影响.

2 MC 方法基本原理与仿真模型

2.1 MC 方法基本原理

假设系统有 N 个原子组成, 其初始状态量 H_0 . 在 MC 模型中, 通过随机从 N 个原子中选择 m 个, 并且改变它们的位置, 可以得到系统新的状态. 对于第 i 个原子, 新的位置由 (1) 式确定:

$$H_i^{\text{new}} = H_i^{\text{old}} + \xi_i \Delta d, \quad (1)$$

其中, H_i^{new} 和 H_i^{old} 分别是第 i 个原子的新、旧坐标, Δd 为原子移动最大步长, ξ_i 为均匀分布 [0, 1] 之间的随机数. 对于正则系统, 这个新的位置是否被接受, 取决于玻尔兹曼概率. 如果 (2) 式满足, 新的位置被接受.

$$\exp\left(-\frac{\Delta V(H_0)}{KT}\right) \geq \xi_k, \quad (2)$$

其中, ξ_k 是在第 k 步原子移动中产生的位于 [0, 1] 之间的随机数, ΔV 是原子移动前后系统势能的变化. 如果原子移动导致系统势能减小, 那么新的位置将直接被接受; 如果原子移动导致系统势能增加, 那么新的位置被接受的概率随着 ΔV 的增加而减少; 如果原子移动被拒绝, 那么移动原子的原有位置将被保留, 这个过程就叫一个 Markov 运动. Markov 运动将不停地循环直到系统势能达到最低点.

本文在微纳构件加工表面时效过程的 MC 模拟中, 每次从工件中随机选择 1 个原子, 并对这个原子进行 Markov 运动, 在三个坐标方向上最大步长都设为 0.1 Å. 如果新的位置使系统的势能减小, 那么该运动被接受, 这个原子的位置将发生改变. 通常最大步长越小, 每次势能改变越小, Markov 运动越容易被接受.

2.2 仿真模型

首先采用 MD 方法模拟金刚石刀具对单晶硅微纳构件的纳米切削过程. 如图 1 所示, 切削模型中刀具前角、后角和钝圆半径分别为 -7° , 6° 和 1 nm. 为了简化模型, 在纳米切削过程中刀具视为绝对刚体. 单晶硅工件含有 50653 个原子, 尺寸为 $36a_0 \times 18a_0 \times 10a_0$, 其中 a_0 为晶格参数, $a_0 = 0.543$ nm. 在 MD 模拟中, 采用 Tersoff 势描述单晶硅工件原子之间的相互作用, 而采用 Morse 势描述刀具和工件原子间的相互作用, 切削速度为 200 m/s, 切削深度为 1 nm. 在切削过程中, 切削深度与刀具钝圆半径比值为 1, 切屑以一种脆性拉伸切屑的方式形成. 随着切削的进行, 刀具前方剪切区、切屑以及加工表面的原子在高应力作用下, 单晶硅微纳构件内部材料组织结构会出现相变, 加工后的工件中仍有非晶硅结构 [11].

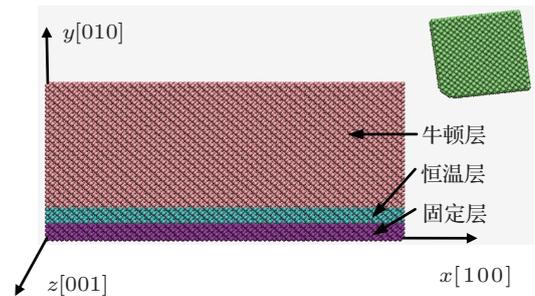


图 1 单晶硅纳米切削的 MD 模型

单晶硅微纳构件切削后的模型如图 2(a) 所示, 固定层原子在切削过程中一直保持理想晶格, 为了减少 MC 方法的计算量, 可以去除工件的固定层而不影响计算结果. 因此将加工后的微纳构件提取出来并去除固定层, 作为 MC 模拟加工工件时效过程的分析模型, 去除固定层后工件还有 40841 个原子, 所有原子设为一个原子类型. MC 方法模拟时效后的单晶硅加工工件如图 2(b) 所示.

采用 MD 方法再分别模拟时效前后微纳构件的拉伸过程, 以研究时效作用对微纳构件力学性能

的影响. 理想单晶硅工件在纳米切削中, 工件约被切去 1 nm 的厚度, 去除加工中产生的毛刺, 并重新设定边界, 形成单晶硅工件时效前的拉伸模型 (如图 2(c) 所示); 加工过程中, 工件内部会产生大量的非晶结构, 工件处于高能量不稳定状态, 在时效过程中, 工件内部结构达到稳态, 重新设定边界作为

单晶硅微纳构件时效后的拉伸模型 (如图 2(d) 所示). 两组拉伸过程的仿真采用相同的模拟参数, x, y, z 轴分别取晶向 $[100], [010]$ 和 $[001]$, 并统一固定工件左边界, 从右边界沿 x 轴进行拉伸, 拉伸速度都为 10 m/s.

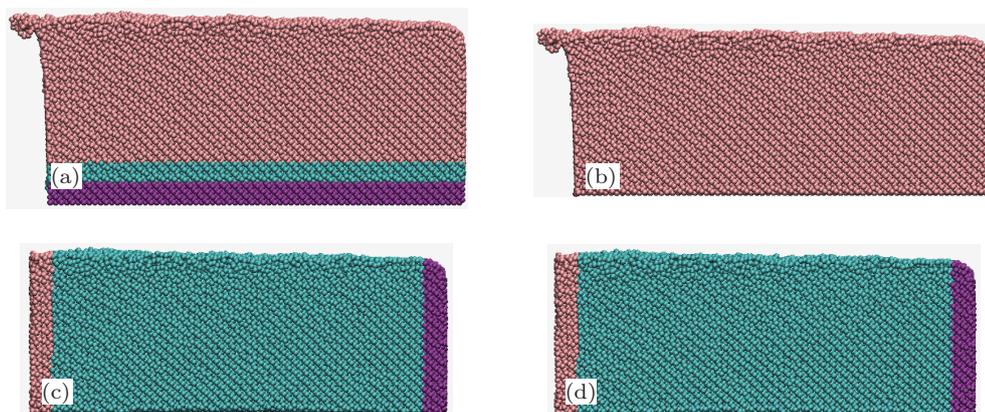


图 2 仿真模型 (a) MD 方法模拟加工后的工件模型; (b) MC 方法模拟时效后的工件模型; (c) 时效前的 MD 拉伸模型; (d) 时效后的 MD 拉伸模型

3 仿真结果与讨论

3.1 时效过程中微纳构件势能的演变

如图 3 所示, 在 MC 方法模拟时效过程中, 单晶硅工件中原子平均势能随时效时间逐渐降低, 直到微纳构件达到稳定状态. 时效前, 单晶硅微纳构件加工后平均原子势能为 -4.387 eV; 时效后, 原子平均原子势能为 -4.413 eV; 平均原子势能约减小 0.03 eV, 减小比例约为 0.6% . 在时效过程的初始阶段, 平均原子势能下降速度比较快. 这主要是由于纳米切削过程破坏了单晶硅工件的理想结构, 微纳构件表面出现大量的非晶结构, 微纳构件中尤其是加工表面具有较高的势能, 势能高的原子可以快速迁移到势能低的位置. 随着微纳构件加工表面中部分缺陷结构得以修复, 工件中原子势能逐渐下降, 同时工件中的应力状态以及能量状态都趋近均一, 工件已经处于相对稳定的状态, 原子向低能位置迁移比较困难, 因而平均原子势能下降速度降低, 最终趋于稳定.

采用原子势能法提取工件内部缺陷结构, 并且根据原子势能进行着色, 其中青色代表微纳构件中边界原子, 其势能值大于 -3.7 eV; 红色原子代表微纳构件中原子高能区, 势能值在 -4.43 eV— -3.7 eV 之间. 工件中原子对势能比较敏感, 大部分原子势能集中在 -4.5 eV— -4.63 eV 之间. 图 4 为

MC 方法模拟时效过程中单晶硅微纳构件高能原子

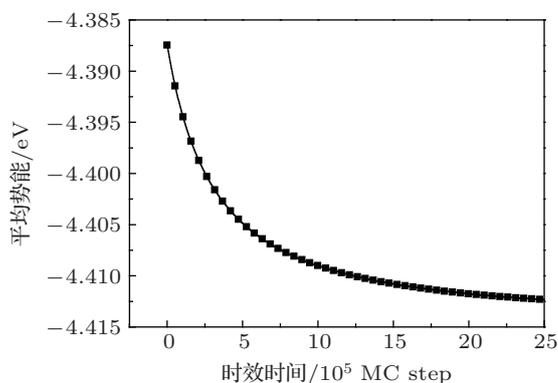


图 3 MC 方法模拟时效过程中单晶硅微纳构件中原子平均势能随着时效时间的变化曲线

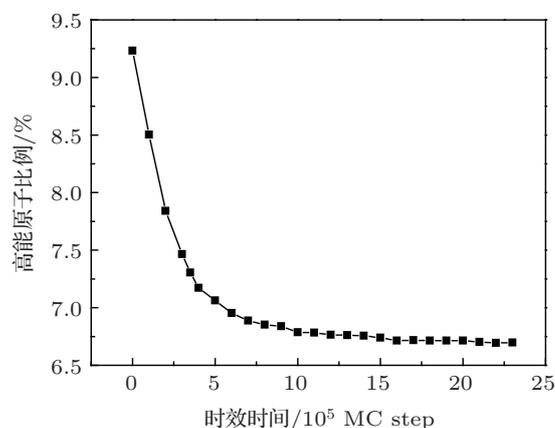


图 4 MC 方法模拟时效过程中单晶硅微纳构件中高能原子的变化数

比例的变化曲线. 在时效过程中, 微纳构件中势能高的缺陷结构原子通过自行调整位置, 迁移到低势能的位置, 直到微纳构件趋于稳定, 工件中很多高能原子又重新回到晶格点, 并出现再结晶现象. 因此在时效过程中高能原子数占总原子数的比例越来越小, 最后稳定在 6.7% 左右.

图 5 所示为 MC 方法模拟时效过程中单晶硅微纳构件中高能原子区域的演变过程. 时效前, 工件内部充满了无规则的高能量原子, 而在时效过程中工件内部的高能原子数逐渐减少, 并最终完全消

失; 高能原子最后主要集中于工件加工表面, 表明工件加工表面由于缺陷结构的存在, 原子具有较高的势能.

3.2 时效作用对微纳构件表面形貌的影响

单晶硅微纳构件加工表面在 MC 时效前后的形貌图如图 6 所示, 从蓝色到绿色、再到红色代表工件表面高度逐渐增高, 这样根据颜色来判断工件加工表面时效前后形貌的变化. 经过时效作用, 工

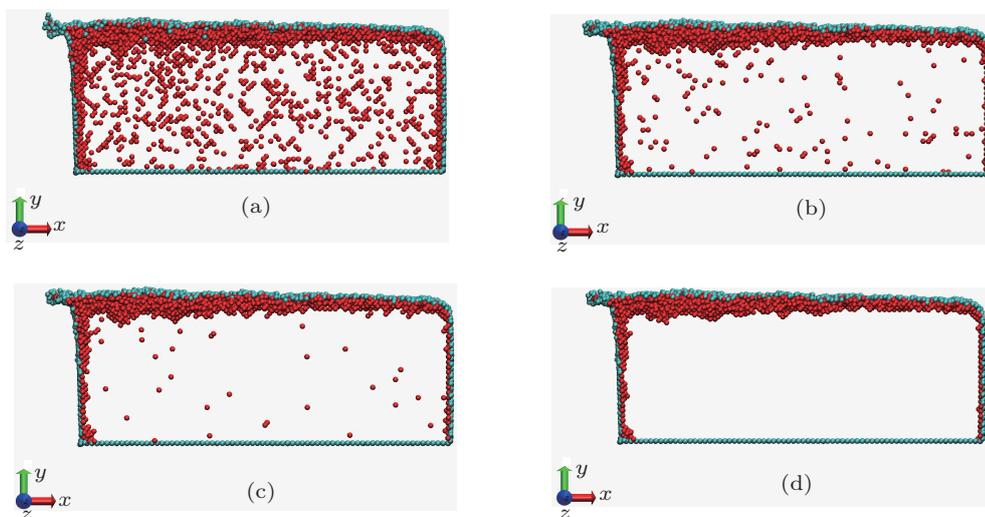


图 5 MC 方法模拟时效过程中单晶硅微纳构件中高能原子区域的演变过程 (a) 时效前; (b) 时效 5×10^5 步; (c) 时效 10^6 步; (d) 时效后

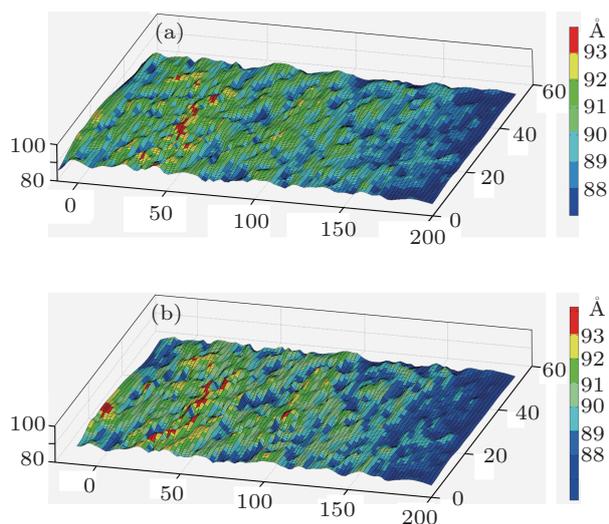


图 6 单晶硅微纳构件加工表面在 MC 时效前后形貌 (a) 时效前; (b) 时效后

件加工表面的高度普遍得到增加, 但是增加的幅度比较小. 在刀具切出阶段形成的加工表面的左侧不仅高度较高, 而且在时效过程中的变化也相对较大.

图 7 所示为单晶硅微纳构件 MC 时效过程中原子迁移距离分布图. 在时效过程中, 高能原子

通过向低能位置自发迁移, 使工件重新处于稳定状态. 图中红色原子代表迁移距离超过 0.5 nm 的原子, 橙色原子代表迁移距离在 0.1 nm 到 0.5 nm 之间的原子, 黄色原子代表迁移距离在 0.05 nm 到 0.1 nm 之间的原子, 青色原子代表迁移距离在 0.04 nm 到 0.05 nm 之间的原子. 在时效过程中迁移距离较大的原子主要集中在切削过程中形成的毛刺区域; 其次刀具切出端的表面原子以及工件内部缺陷结构原子迁移距离也比较大. 在时效过程中原子的最大迁移距离约为 1 nm, 该原子位于切削形成毛刺的尖端.

表 1 所示为单晶硅微纳构件加工表面时效前后的表面粗糙度, 加工表面原子平均高度增加 0.06 \AA , 约增加 0.1%, 说明在时效过程中微纳构件加工表面的高度普遍增加, 同时粗糙度也增加. 轮廓算术平均偏差 (R_a) 和轮廓均方根偏差 (R_q) 分别增加了 4.3% 和 3.5%, 而轮廓最大高度 (R_y) 减少了 3.0%, 其中 R_a 变化比例最大. R_a 和 R_q 的增加主要是因为非晶硅再结晶引起; R_y 的减少主要是因为加工过程中产生的毛刺在时效过程中收缩引起.

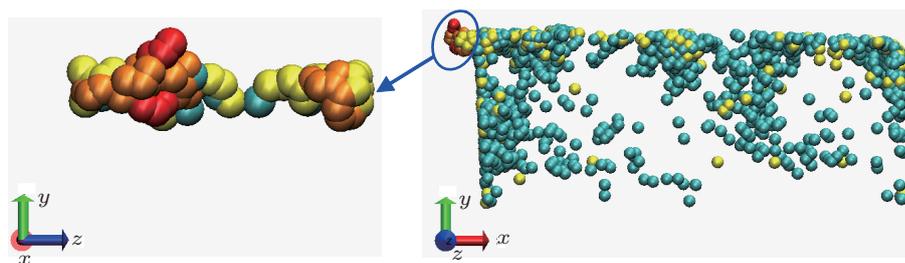


图7 单晶硅微纳构件 MC 时效前后原子迁移距离分布

表1 单晶硅微纳构件 MC 时效前后加工表面的粗糙度

	$\bar{y}/\text{\AA}$	$R_a/\text{\AA}$	$R_q/\text{\AA}$	$R_z/\text{\AA}$
时效前	89.98	1.17	1.43	6.98
时效后	90.04	1.22	1.48	6.77
变化值	0.06	0.05	0.05	-0.21
变化比例	0.1%	4.3%	3.5%	-3.0%

3.3 时效作用对微纳构件加工变质层残余应力的影响

单晶硅微纳构件 MC 时效前后原子残余应力分布如图 8 所示, 其中红色原子代表其应力大于 1.5 GPa, 蓝色原子代表其应力小于 -1.5 GPa, 青色为边界原子. 在纳米切削后, 微纳构件内部产生大量的残余应力, 应力比较高且应力分布没有规律性, 而时效后微纳构件内部应力大幅减小, 残余应力主要集中在加工表面的缺陷结构处. 时效作用大大减小了单晶硅工件内部的残余应力, 从而有利于提高微纳构件的使用性能.

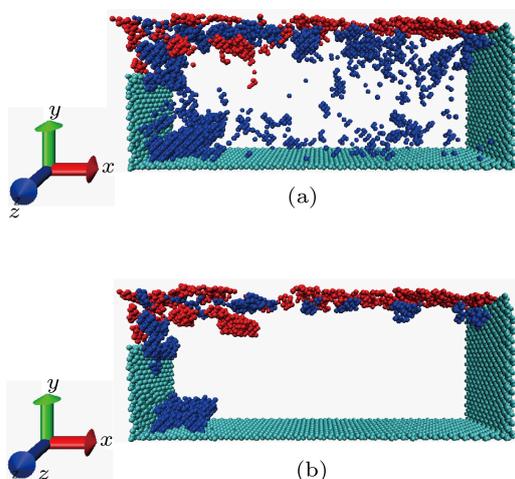


图8 单晶硅微纳构件 MC 时效前后原子残余应力分布 (a) 时效前; (b) 时效后

单晶硅加工工件 MC 时效前后原子平均应力

列于表 2 中, 表层原子指工件表面高度大于 85 Å 的原子, 亚表层原子指工件表层下方 1 nm 厚度的变质层. 从表中数据可见, 加工工件的残余应力在时效过程中普遍降低, 包括工件整体、表层原子和亚表层原子的应力都下降, 其中工件原子平均应力减小约 0.18 GPa, 减少比例为 19%; 表层和亚表层原子平均应力减少基本相等, 减少 0.15 GPa, 应力减少比例分别约为 10% 和 15%. 单晶硅纳米切削中产生的非晶结构主要集中于微纳构件表层, 亚表层的残余应力明显小于表层的残余应力, 但两者在时效中残余应力减小基本相等, 因而亚表层平均应力减少比例稍大于表层平均应力的减少比例.

表2 单晶硅加工工件时效前后原子平均应力变化

	工件原子 平均应力/GPa	表层原子 平均应力/GPa	亚表层原子 平均应力/GPa
时效前	0.92	1.32	0.99
时效后	0.74	1.17	0.85
变化值	-0.18	-0.15	-0.15
变化比例	-19%	-10%	-15%

3.4 时效作用对微纳构件加工变质层缺陷结构的影响

径向分布函数 (RDF) 可以表征微纳构件的有序度. 图 9 所示为单晶硅微纳构件经过纳米切削加工后, MC 时效前后工件有序度的变化图. 蓝色代表时效前的 RDF, 红色代表时效后的 RDF. 从图中可知时效后 RDF 的各个峰值都高于时效前的, 其中首个峰值在时效过程中大幅增加了 33%. 因此时效后, 微纳构件的有序度明显增加, 无论是短程有序度还是长程有序度都得到明显提高. 单晶硅加工表面有序度的提高主要是由于工件中处于高能量位置的原子迁移到低能量位置上, 大量非晶硅原子从非晶状态又恢复到晶体状态, 使缺陷结构原子减少. 在单晶硅材料中, 相变对材料的性质起着重

要作用. 单晶硅为一种多晶型材料, 其不同压力下存在稳态或者亚稳态的晶体结构有 12 种之多 [12,13]. 通过配位数来研究时效过程中单晶硅工件的相变. 表 3 统计了单晶硅工件时效前后不同配位数对应的原子数. 从表中可以看出, 在时效过程中配位数小于等于 4 的原子在增加, 说明工件的表面和工件中理想晶格原子增加; 而配位数大于等于 5 的原子数在减少, 说明在时效过程中单晶硅工件中非晶原子在逐渐减少. 配位数为 4 的原子数增加最多, 而配位数为 5 的原子减少最多, 这可说明工件中的非晶硅原子大部分将转化为理想晶体硅, 其次配位数为 3 和配位数为 6 的原子减少也比较多.

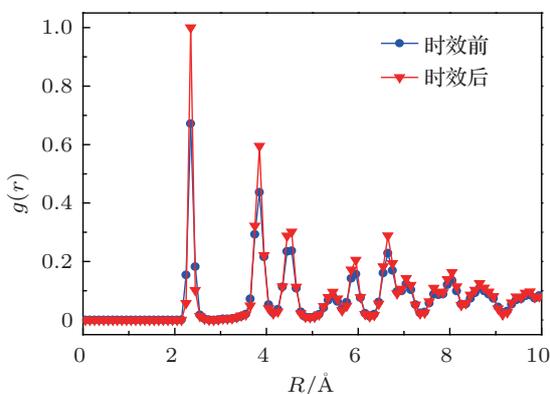


图 9 加工后单晶硅微纳构件 MC 时效前后的 RDF

表 3 单晶硅加工工件 MC 时效前后不同配位数对应的原子数

配位数	时效前原子数	时效后原子数	变化值
1	39	41	2
2	1987	2007	20
3	1645	1746	101
4	35804	36172	368
5	1072	795	-277
6	238	80	-158
7	44	0	-44
8	12	0	-12

在时效过程中, 配位数大于等于 7 的原子配位数转变为 4, 5 和 6; 配位数为 6 的原子有 118 个配位数转变为 5, 27 个转变为 4; 配位数为 5 的原子中有 202 个配位数转变为 4, 其余的大部分保持不变. 经过统计有 95 个原子配位数由 5 转变为 4 且键角为 109° , 说明在时效过程中这 95 个原子从 BCT5-Si 结构转变为金刚石结构 (Si-I), 体积增加 15%; 另外有 15 个原子配位数由 6 转变为 4 且键角为 109° ,

说明这 15 个原子从金属相 (Si-II) 转变为金刚石结构 (Si-I), 体积增加 23%. 图 10 为时效过程中相变示意图.

图 11 所示为单晶硅微纳构件 MC 时效前后工件中不同配位数原子的分布, 其中绿色原子代表配位数为 5 的原子, 紫色原子代表配位数为 6 的原子, 红色原子代表配位数大于等于 7 的原子, 配位数小于等于 4 的原子没有显示. 以往的研究表明: Si-I, Si-II 和 BCT5-Si 结构对应的配位数分别为 4, 6 和 5, 其中 Si-II 相中 4 个近邻原子间距为 2.43 \AA , 另外两个近邻原子为 2.58 \AA , 而 BCT5-Si 相中 4 个近邻原子间距为 2.44 \AA , 1 个近邻原子间距为 2.31 \AA . 在单晶硅纳米加工中, 加工表面非晶相包括 Si-I, Si-II 和 BCT5-Si 相, 其中配位数大于等于 7 的原子属于亚稳相.

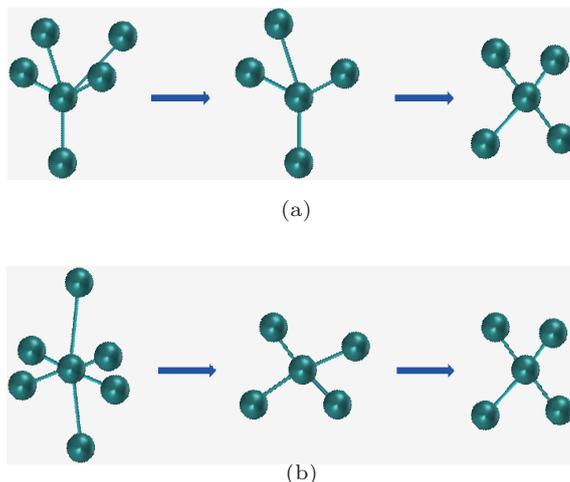


图 10 在 MC 时效过程中单晶硅不同相转变为金刚石结构示意图 (a) BCT5-Si; (b) Si-II

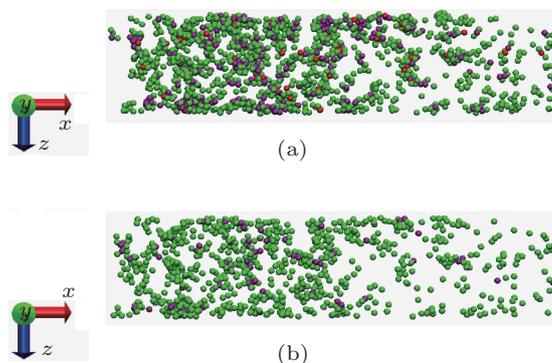


图 11 单晶硅工件 MC 时效前后工件配位数分布 (a) 时效前; (b) 时效后

在时效过程中, 配位数为 5 的绿色原子即 BCT5-Si 的结构原子大幅减少, 其中有 95 个转化为 Si-I 结构, 而大部分仍以非晶形式存在; 配位数为 6

的紫色原子即 Si-II 结构原子也减少很多, 其中有 15 个转化为金刚石结构 (Si-I); 而配位数大于等于 7 的红色原子在时效过程中消失. 时效作用对单晶硅工件的缺陷结构具有一定的影响, 但是由于共价键结合极为牢固, 影响比较小.

3.5 时效作用对微纳构件力学特性的影响

采用 MD 方法对单晶硅工件时效前以及时效后拉伸过程进行仿真, 以研究 MC 时效作用对微纳构件力学性能的影响. 如图 12 所示, 在加载的初始阶段, 应力 - 应变曲线基本成线性, 应力增加速度基本一致, 说明在这两种情况下单晶硅工件的弹性模量大小基本一样. 根据图中的应力 - 应变曲线, 可以计算出工件在加工后以及时效后获得的弹性模量分别为 77.82 GPa 和 77.76 GPa, 大小基本相等. 也就是说在相同的晶向设置条件下, 时效作用对单晶硅的弹性模量的影响都非常小, 这主要还是因为弹性模量是原子间结合能的一种表征, 而与工件的尺寸以及表面结构等没有直接关系.

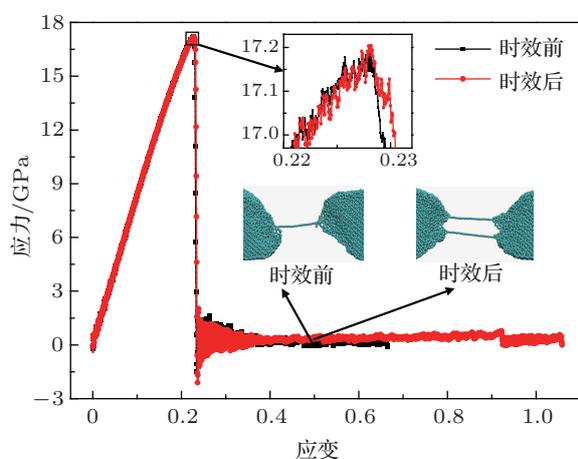


图 12 加工后单晶硅微纳构件时效前以及时效后的 MD 拉伸应力 - 应变曲线

对于加工后时效前的单晶硅微纳构件, 在单轴拉伸的初始阶段, 工件首先均匀地弹性变形, 当应变达到 0.22815 时, 单晶硅工件开始出现不可恢复的塑性变形, 在工件左侧迅速产生颈缩现象. 颈缩区域迅速变细, 当应变为 0.4 时, 非晶区域发展出一个单层硅原子链, 进一步拉伸, 单原子链不断地伸长, 当应变达到 0.66 时, 单原子链断裂, 工件彻底断裂.

时效后单晶硅微纳构件拉伸出现了两个单原

子链, 且长度也大大增加, 类似于理想单晶硅的拉伸过程. 由于只有工件内部的能量和应力相对均一才可能形成双原子链, 这也说明时效作用对工件加工后内部的缺陷结构、应力状况以及能量状况都有所修复, 尤其是对拉伸过程中非晶硅单原子链结构形成条件的修复最大.

时效前后单晶硅工件的应力 - 应变曲线在弹性阶段以及屈服的初始阶段基本一致, 但是从图 12 中应力 - 应变曲线局部放大图可以发现, 时效后的工件屈服的要晚一点, 同时拉伸强度也比时效前增加 0.1 GPa 增加 0.6%. 表 4 为单晶硅工件时效前后拉伸力学特性, 对于单晶硅, 加工作用使工件的拉伸强度和塑性都降低, 而时效作用使工件的拉伸强度和塑性又得到小范围的恢复. 时效作用对于单晶硅变形过程影响最显著的是工件屈服后内部产生的单原子链结构. 理想单晶硅在应变为 0.5 时, 产生双原子链结构, 时效前的工件则产生单原子链结构, 而时效后又变为双原子链结构. 主要原因是时效后工件残余应力下降, 内部应力得以均一化, 在外力作用下, 工件受力比较稳定, 易于产生稳定的双链结构.

表 4 单晶硅微纳构件 MC 时效前后拉伸力学特性

	拉伸强度/GPa	拉伸强度时应变	弹性模量/GPa	断裂应变
时效前	17.19	0.22815	77.82	0.66
时效后	17.20	0.2282	77.76	1.06
变化值	0.10	0.00005	-0.06	0.4
变化比例	0.6%	0.02%	-0.08%	60%

4 结论

采用 MC 方法和 MD 方法相结合, 模拟加工后单晶硅微纳构件的时效过程, 以研究时效作用对单晶硅工件加工表面质量及其力学性能的影响. 模拟结果表明, 在时效过程中, 单晶硅微纳构件的表面粗糙度 R_q 增加约 3.5%, 原子最大迁移距离约为 1 nm, 平均原子势能约降低 0.03 eV; 时效过程中, 加工工件的残余应力普遍降低, 同时变质层的有序度明显提高; 非晶硅原子出现了再结晶现象, 其中部分 BCT5-Si 相及金属相 (Si-II) 结构原子转化为金刚石结构 (Si-I); 时效作用对单晶硅工件加工表面质量具有一定的影响, 提高了加工工件的拉伸强度和工件的塑性.

- [1] Ye Y Y, Biswas R, Morris J R, Bastawros A, Chandra A 2003 *Nanotechnology* **14** 390
- [2] Wang H, Liu G Q, Qin X G 2008 *Acta Metall. Sin.* **44** 13 (in Chinese) [王浩, 刘国权, 秦湘阁 2008 金属学报 **44** 13]
- [3] Wang H, Liu G Q, Luan J H, Yue J C, Qin X G 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S132 (in Chinese) [王浩, 刘国权, 栾军华, 岳景朝, 秦湘阁 2009 物理学报 **58** S132]
- [4] Wang H, Liu G Q, Qin X G 2009 *Rare Metal Mat. Eng.* **38** 126 (in Chinese) [王浩, 刘国权, 秦湘阁 2009 稀有金属材料与工程 **38** 126]
- [5] Zheng X P, Zhang P F, Liu J, He D Y, Ma J T 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2687 (in Chinese) [郑小平, 张佩峰, 刘军, 贺德衍, 马健泰 2004 物理学报 **53** 2687]
- [6] Zheng X P, Zhang P F 2010 *Comp. Mater. Sci.* **50** 6
- [7] Wang J C, Du G, Wei K L, Zhang X, Liu X Y 2012 *Chin. Phys. B* **21** 117308
- [8] Komanduri R, Narulkar R, Raff L M 2004 *Philos. Mag.* **84** 1155
- [9] Komanduri R, Raff L M 2002 *Phil. Mag. Lett.* **82** 247
- [10] Narulkar R, Raff L M, Komanduri R 2005 *Proc. I. Mech. Eng. Part N: J. Nanoeng. Nanosyst.* **218** 7
- [11] Fang F Z, Wu H, Zhou W, Hu X T 2007 *J. Mater. Process. Technol.* **184** 407
- [12] Piltz R O, Maclean J R, Clark S J, Ackland G J, Hatton P D, Crain J 1995 *Phys. Rev. B* **52** 4072
- [13] Si L N, Guo D, Luo J B 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 168103 (in Chinese) [司丽娜, 郭旦, 雒建斌 2012 物理学报 **61** 168103]

Performance evolution process of machined surface of monocrystalline silicon micro/nanostructures*

Hu Xing-Lei¹⁾²⁾ Sun Ya-Zhou^{1)†} Liang Ying-Chun¹⁾ Chen Jia-Xuan¹⁾

1) (School of Mechatronics Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

2) (Beijing Institute of Automatic Control Equipment, Beijing 100074, China)

(Received 20 June 2013; revised manuscript received 27 August 2013)

Abstract

The machined workpiece has high mechanical storage energy because of the defect structures formed in nanocutting and their evolution from high energy state to the low energy state by adjusting atom positions automatically is called surface-energy aging. The effect of surface-energy aging on the surface properties of monocrystalline silicon workpiece is analyzed by Monte Carlo simulations of machined surface. It is shown that the surface-energy aging effect can increase the surface roughness and the degree of order of damaged layer, however reduce the residual stress and the average potential energy of workpiece. Amorphous silicon structure in metamorphic layer decreases and recrystallization phenomenon occurs in the surface-energy aging process. It is found that some β -Si phase structures and BCT5-si phase structures transform into the diamond cubic structure of Si in the surface-energy aging process. Surface-energy aging effect has a great influence on the surface properties of the machined surface of monocrystalline silicon workpiece, and can improve the mechanical properties of micro/nanostructures.

Keywords: Monte Carlo simulation, nanomachining, surface properties, performance evolution

PACS: 07.10.Cm, 71.15.Pd, 81.40.Cd

DOI: 10.7498/aps.62.220704

* Project supported by the National Science Fund for Distinguished Young Scholars of China (Grant No. 50925521) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51075092).

† Corresponding author. E-mail: sunyzh@hit.edu.cn