

基于分子动力学的硅晶圆均匀减薄磨削研究*

黄绍服^①, 吴义城^①, 赵茂俞^②

(^①安徽理工大学机电工程学院, 安徽 淮南 232001;

^②合肥大学基础实验与实训中心, 安徽 合肥 230601)

摘要: 超精密减薄磨削加工是半导体硅晶圆制造的关键工艺环节之一。然而, 亚表面裂纹、残余应力和微结构的晶格畸变是减薄磨削产生的主要损伤缺陷。通过硅晶圆的减薄磨削, 研究等效应变和残余应力的分布, 评价磨削损伤。首先, 分别建立球形和三棱锥单颗粒金刚石磨削硅晶圆的分子动力学模拟模型, 应用 LAMMPS 模拟软件, 设计硅晶圆转速、砂轮转速、磨削量为工艺参数, 模拟硅晶圆减薄磨削。其次, 获得硅晶圆表面的应变、等效应变分布数据。将磨削时硅晶格上原子发生形变相对位移值作为损伤评价目标, 计算损伤值。在此基础上, 在 $\phi 300$ mm 硅晶圆磨削后样品上的 7 个位置上, 分别进行 $10\text{ mm}\times 10\text{ mm}\times 0.3\text{ mm}$ 的取样, 应用 Roman 光谱仪, 测试、获得每个取样点处的平均残余应力。进一步, 通过硅晶圆磨削的模拟和试验测试, 获得了不同位置各 X、Y、Z 方向应变、等效应变和残余应力的分布, 结果显示硅晶圆表面的等效应变相差 8.1%, 残余应力相差 9%。最终, 表明该磨削的等效应变、残余应力分布均匀, 工艺参数合理、可行, 可为硅晶圆的超精密、高效减薄磨削加工提供理论依据。

关键词: 硅晶圆; 分子动力学仿真; 磨削; 应变; 残余应力

中图分类号: TP391.9 文献标识码: A

DOI: [10.19287/j.mtmt.1005-2402.2025.01.018](https://doi.org/10.19287/j.mtmt.1005-2402.2025.01.018)



全文在线

Uniformly thinning grinding of silicon wafers based on molecular dynamics

HUANG Shaofu^①, WU Yicheng^①, ZHAO Maoyu^②

(^①School of Electromechanical Engineering, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001,

CHN; ^②Fundamental Experiment and Training Center, Hefei University, Hefei 230601, CHN)

Abstract: Ultra-precision thinning and grinding is one of the key processes in semiconductor silicon wafer manufacture. However, subsurface cracks, residual stresses and microstructural lattice distortions are the main damage defects generated by thinning grinding. Through the thinning grinding of silicon wafers, the distributions of effective strain and residual stress were studied to evaluate the grinding damage. Firstly, the molecular dynamics simulation models of grinding silicon wafers with spherical and trigonal single-grain diamonds were established respectively. The process parameters of the silicon wafer rotational speed, grinding wheel rotational speed, and removing volume were selected to simulate the grinding by the LAMMPS software. Secondly, the strain and equivalent strain distribution data on the surface of the silicon wafer were obtained. The value of relative displacement of atoms deformed on the silicon lattice during grinding was taken as the damage evaluation object, and the damage value was calculated. On this basis, the size of $10\text{ mm}\times 10\text{ mm}\times 0.3\text{ mm}$ samples were taken at seven positions on the $\phi 300$ mm silicon wafer after grinding, and Roman spectrometer was employed to test and obtain the average residual stress at the sample points. Further, the distribution of strain, equivalent strain and residual stress in X, Y and Z direction at different positions were attained by investigating of the simulation and experimental test of the grinding. The results demonstrate that the equivalent strain

* 合肥市自然科学基金项目 (2022025)

values on the surface of silicon wafer differed by 8.1%, and the residual stress values differed by 9%. Finally, it shows that the equivalent strain and residual stress of the grinding are uniformly distribution, and the process parameters are reasonable and feasible, which can provide theoretical basis for the ultra-precision and high-efficiency thinning grinding processing of silicon wafers.

Keywords: silicon wafer; molecular dynamics simulation; grinding; strain; residual stress

单晶硅晶圆作为一种具有优异性能的半导体材料，被广泛应用于各种芯片和电路中，是集成电路中运用最为广泛的基础材料。近年来为了增大芯片产量，同时降低生产成本，大尺寸硅晶圆成为了生产制造的主流趋势^[1-2]。随着硅晶圆直径的增大，对硅晶圆的超精密磨削加工技术的加工工艺的要求也越来越高，特别是硅晶圆经均匀减薄磨削后，其加工表面质量对硅晶圆的后续加工至关重要。

硅晶圆经处理后的表面质量对于产品的使用寿命和性能有很大影响，但在硅晶圆的加工过程中，不可避免造成表面和基体的损伤^[3-4]。为了控制亚表层损伤厚度，国内外学者进行了大量试验和模拟。郭晓光等^[5-6]采用分子动力学模拟了单颗金刚石磨削单晶硅的过程，仿真结果显示，磨粒前下方的硅晶格在磨粒压应力作用下发生晶格变形，形成非晶层，而随着非晶层向前及深处扩展，形成单晶硅亚表面的损伤。LI J等^[7]采用了三维分子动力学模拟软件，揭示了单晶硅纳米级研磨过程中亚表面损伤和磨削面完整性受磨削速度影响的机制，得到合理的研磨速度能减少亚表面损伤，过高的速度加剧位错运动，影响材料性能的结论。郭永博等^[8]对切削后的原子模型进行分析，揭示了加工表面原子在切削过程中的相变现象。朱宝义等^[9]利用分子动力学仿真模拟了单颗金刚石切削单晶硅的过程，分析切削、相变和位错运动等因素，探究了磨削速度对亚表层损伤和磨削表面完整性的影响，结果显示，磨削速度小于 150 m/s 时，随着磨削速度的升高，磨粒下方的晶格重新排列的时间缩短，抑制了非晶结构的产生，从而使得亚表层厚度减小；但当磨削速度大于 150 m/s 时，磨削产生的高温因素导致亚表层损伤厚度增加。TANG F Z等^[10]研究了单晶硅纳米划擦的行为和亚表层的纳米裂纹。ZHANG Y X等^[11]通过拉曼光谱研究了硅晶圆表面磨削痕迹和磨削层深度的残余应力分布，结果表明，硅晶圆表面主要存在压应力，且产生残余应力的主要原因是相变和弹塑性变形。YAN J W等^[12]通过透射电子显

微镜和激光显微拉曼光谱仪检测了金刚石刀具加工单晶硅后的亚表层结构，结果表明，非晶层与刀具角度、切削厚度和切削方向有关。LI P H等^[13]通过分子动力学仿真模拟单晶硅在不同磨削速度下的损伤机理，表明磨削过程中单晶硅由立方金刚石结构转变为非金刚石结构和少量的六方金刚石结构，发现残余应力主要分布于亚表面损伤层。ZHAO P Y等^[14]运用分子动力学仿真方法研究了纳米磨削过程中的表面生成、力响应、相变和残余应力，揭示了单晶硅表面的生成机理。ZHANG L X^[15]等通过模型预测自旋转磨削过程中导致硅晶圆的亚表面损伤深度，研究了亚表面损伤深度与磨削参数、磨粒尺寸和径向距离之间的关系。

但是，以上研究没有考虑应变和残余应力在磨削表面的分布情况，以及对磨削产生损伤缺陷的影响。本文研究 X、Y、Z 方向减薄磨削后的硅晶圆表面应变、等效应变和残余应力分布，评价硅晶圆表面损伤情况。

1 分子动力学仿真

1.1 仿真数学模型

分子动力学 (molecular dynamics, MD) 仿真是研究微观现象的一种模拟仿真方法，原理为建立一个粒子系统，通过量子力学确定各粒子间的相互作用。当粒子系统遵循经典牛顿力学定律时，可通过建立粒子的运动学方程组得出粒子的运动规律和轨迹，然后根据统计物理方法得出该系统宏观物理特性，精确分析原子晶格模型变形和断裂的过程。在分子动力学模型中，牛顿层和恒温层原子遵循经典的牛顿运动定律，因此采用经典牛顿方程来描述和确定仿真过程中的原子位置、速度及相互作用力，其数学模型如式 (1) 和式 (2) 所示。

$$\frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = \frac{1}{m_i} \sum_{i < j} F_i(r_{ij}) \quad (1)$$

$$\frac{dr_{ij}(t)}{dt} = v_i(t) \quad (2)$$

式中： r_i 为原子 i 的位移； t 为时间； m_i 为原子 i 的

质量； F_i 为作用在原子 i 上的总原子力； r_{ij} 为原子 i 、 j 的间距； v_i 为速度。

牛顿运动方程是一个二阶微分方程，描述了粒子的运动轨迹，该方程的解可以通过对时间积分获得。分子动力学模拟常用的算法有 Leap-Frog 算法、Verlet 算法、Gear 算法和 Beeman 算法等，本文采用 Verlet 算法的速度变型形式，即为 Velocity Verlet 法求解。这种算法可以使数值计算的稳定性得到加强，并且可以在计算中得到同一时间步长上的空间位置和速度。

在本文中单晶硅分子动力学仿真涉及 3 种不同原子间作用，即加工件的硅原子（Si-Si）之间作用、磨粒中金刚石原子间作用（C-C）以及磨粒与加工件之间作用（Si-C）。由于仿真过程中，金刚石磨粒原子被视为刚体，可忽略 C-C 原子间作用。单晶硅和金刚石磨粒均是共价晶体，故仿真采用多原子系统的 Tersoff 势函数，应用于 Si-Si 和 Si-C 之间的计算，Tersoff 势函数^[16]如式（3）所示。

$$\mu_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (3)$$

式中： μ_{ij} 为原子 i 、 j 之间势函数； $f_c(r_{ij})$ 为原子间相互作用的截断函数； $f_R(r_{ij})$ 为排斥项对偶势； b_{ij} 为低价函数； $f_A(r_{ij})$ 为吸引项对偶势。

1.2 数值模拟单晶硅的磨削

1.2.1 建立仿真动力学模拟模型

采用大规模原子/分子并行模拟器（large-scale atomic/molecular massively parallel simulator, LAMMPS）数值模拟磨削过程，并以 OVITO 软件作为仿真后的数据分析和可视化模型^[17-18]。单晶硅磨削的分子动力学仿真模型由一个立方体金刚石结构的单晶硅工件和一个刚性的金刚石磨粒组成。磨粒为金刚石原子，由于金刚石的硬度为 78.96 GPa，比硬度为 9.3 GPa 的单晶硅高^[19]。工件的尺寸为 10 nm×10 nm×15 nm，由单晶硅原子组成，分为牛顿层、恒温层和边界层，单晶硅磨削分子动力学仿真模型如图 1 所示。

1.2.2 设定模拟参数

设定模拟加工的初始温度为 20 ℃，采用速度重新调节法将恒温层原子稳定在 20 ℃。为了减小仿真过程中尺寸效应，在单晶硅工件 y 方向施加周期性边界条件^[20]。应用 Lammmps 软件仿真，可获得磨削仿真后原子位置、原子间作用力和原子状态。分子动力学

仿真整个过程分为 2 个步骤，即系统的弛豫和磨削。首先，进行 60 ps 系统的弛豫，将初始温度调整到 20 ℃。在仿真设置中，砂轮顺时针转速被设置为 3 000 r/min，硅晶圆逆时针转速为 300 r/min，磨削距离为 8 nm，磨削深度为 1 nm。硅原子间距为 0.235 nm，相当于厚度方向一次磨削去除了 4 个硅原子。在硅晶圆上取样点如图 2 所示，取样点的速度为砂轮与硅晶圆转速的矢量合成，计算可知试样 1~7 处单颗粒磨削单晶硅时的瞬时速度依次为 47.124、47.074、46.925、46.669、46.317、45.863、45.293 m/s。在 (001) 平面上 [-100] 方向进行磨削，具体的仿真性能参数见表 1。在以上仿真条件下，分别模拟单个半径为 2 nm 的球形磨粒和边长为 6 nm 的三棱锥磨粒磨削硅晶圆，分析硅晶圆表面的应变分布和亚表层损伤情况，比较 2 种磨粒的磨削结果。

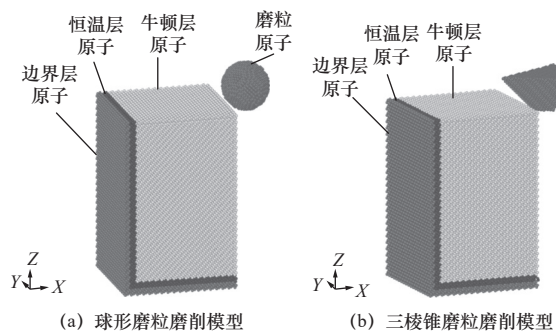


图 1 单晶硅磨削分子动力学仿真模型

Fig. 1 Molecular dynamics simulation modeling of monocrystalline silicon grinding

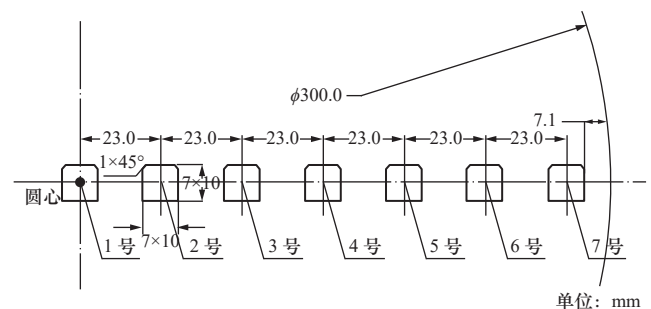


图 2 硅晶圆取样点位置

Fig. 2 Silicon wafer sampling point locations

2 仿真结果分析

2.1 去除材料堆积分布

磨粒分别为球形磨粒和三棱锥磨粒，由于相邻取样点速度值较为接近，因此选定了试样点 1、3、5、7 处作为观测点。由仿真结果可知，工件的截面和表面面貌发生了变化，球形磨粒和三棱锥磨粒

在磨削距离为 8 nm 时不同速度下工件截面形貌和表面形貌分别如图 3 和图 4 所示。在单晶硅磨削过程中，球形磨粒通过挤压导致单晶硅发生弹塑性变形，当形变达到单晶硅的抗拉强度时，单晶硅材料将发生失稳、断裂，最终形成切屑。这种磨削方式导致磨粒前端产生较大材料堆积，而两侧轮廓边的材料堆积较小。相比之下，三棱锥磨粒存在锋利的切削刃边，具有前刀面和侧前角，使前端切屑堆积较小，并使切屑向两侧流出^[21-22]。通过对比可知，球形磨粒材料堆积主要集中在磨粒的前方，而三棱锥磨粒的材料堆积主要分布在磨粒的两侧，且在相同磨削深度下三棱锥造成的材料堆积较小。

表 1 分子动力学模拟磨削的参数

Tab. 1 Parameters for molecular dynamics simulation of grinding

参数	数值
原子几何尺寸/(nm×nm×nm)	10×10×15
原子数	82 131
时间步长/fs	1
系统模拟温度/K	293
磨削速度/(m/s)	47.124、47.074、46.925、46.669、 46.317、45.863、45.293
进给速率/(μm/s)	0.3
磨削深度/nm	1
磨削距离/nm	8

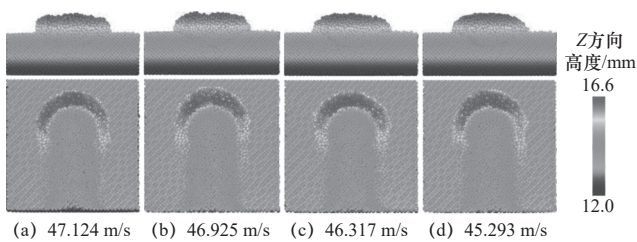


图 3 球形磨粒在磨削距离为 8 nm 时不同速度下工件截面形貌和表面形貌

Fig. 3 Cross-sectional and surface morphology of workpieces with spherical abrasive grains at different speeds in a grinding distance of 8 nm

2.2 等效应变分析

当磨削速度为 47.124 m/s、磨削距离为 8 nm、磨削深度为 1 nm 时，应用球形磨粒、三棱锥磨粒分别磨削单晶硅，磨削工件产生的等效应变分布如图 5 所示，球型磨粒引起的等效应变的最大值为 21.5，而三棱锥磨粒在相同条件下引起的等效应变的最大值仅为 13.76，对比可知，三棱锥磨粒磨削

单晶硅引起的应变较小。等效应变 η_i^{Mises} 如式(4)所示。

$$\eta_i^{Mises} = \sqrt{\eta_{xy}^2 + \eta_{yz}^2 + \eta_{xz}^2 + \frac{1}{6}[(\eta_{xx} - \eta_{yy})^2 + (\eta_{xx} - \eta_{zz})^2 + (\eta_{yy} - \eta_{zz})^2]} \quad (4)$$

式中： η_{xx} 、 η_{yy} 、 η_{zz} 、 η_{xy} 、 η_{yz} 、 η_{xz} 分别为原子 xx 、 yy 、 zz 、 xy 、 yz 、 xz 方向上的应变分量。

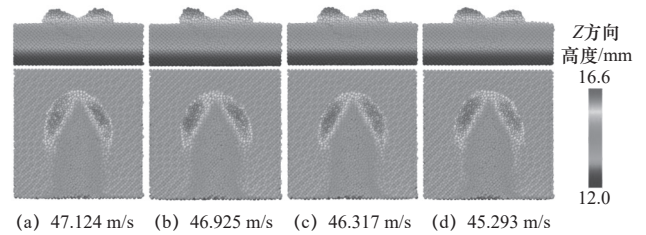


图 4 三棱锥磨粒在磨削距离为 8 nm 时不同速度下工件截面形貌和表面形貌

Fig. 4 Cross-sectional and surface morphology of the workpiece at different speeds for a grinding distance of 8 nm with trigonal abrasive grains

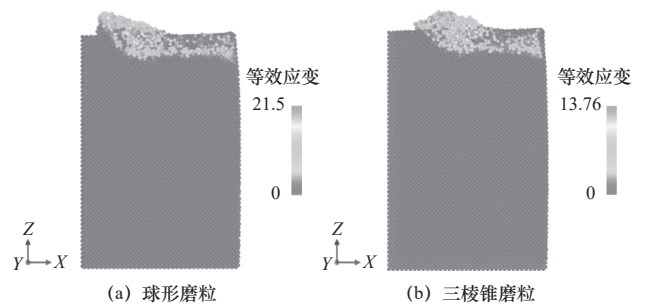


图 5 磨削速度为 47.124 m/s，磨削距离为 8 nm 时等效应变云图

Fig. 5 Equivalent strain cloud at a grinding speed of 47.124 m/s and a grinding distance of 8 nm

球形磨粒磨削时，试样点 1~7 的等效应变以及 X 、 Y 、 Z 方向最大应变值见表 2，可见自圆心至外缘处的等效应变最大值为 23.79，最小值为 21.50，两者相差 2.29。另外，不同磨削位置的 X 、 Y 、 Z 方向的应变分别相差 8.40、1.05 和 3.00，但是 Z 方向的应变最大， X 方向次之，而 Y 方向最小。因此， Z 方向应变是影响加工表面应变的主要因素。

三棱锥磨粒磨削时，试样点 1~7 的等效应变和 X 、 Y 、 Z 方向最大应变值见表 3，可见自圆心至外缘处的等效应变最大值为 14.68，最小值为 13.01，两者相差 1.67。另外，不同磨削位置的 X 、 Y 、 Z 方向的应变分别相差 1.88、1.21 和 1.95，但是 Z 方向的应变最大， X 方向次之， Y 方向最小。因此， Z 方向应变是影响加工表面应变的主要因素。

表2 球形磨粒磨削时不同位置的等效应变及X、Y、Z方向的应变值

Tab. 2 Equivalent strain at different positions and strain values in X, Y and Z directions during grinding of spherical abrasive grains

试样序号	磨削速度/(m/s)	等效应变	X方向应变	Y方向应变	Z方向应变
1	47.124	21.50	15.32	11.09	28.55
2	47.074	22.17	18.22	10.41	30.91
3	46.925	23.27	23.18	10.19	30.34
4	46.669	23.79	21.45	10.04	31.55
5	46.317	23.53	14.78	10.06	29.56
6	45.863	23.27	19.53	10.49	30.30
7	45.293	22.41	18.66	10.13	29.65

表3 三棱锥磨粒磨削时不同位置下等效应变及X、Y、Z方向的应变值

Tab. 3 Equivalent strain at different positions and strain values in X, Y and Z directions during grinding of a triangular pyramid abrasive grains

试样序号	磨削速度/(m/s)	等效应变	X方向应变	Y方向应变	Z方向应变
1	47.124	13.76	11.53	7.01	15.83
2	47.074	14.51	13.41	7.67	15.16
3	46.925	14.36	12.36	7.80	15.40
4	46.669	14.56	12.96	7.98	15.30
5	46.317	13.01	11.59	6.77	15.90
6	45.863	14.65	12.84	7.46	16.33
7	45.293	14.68	12.99	6.83	17.11

对比三棱锥磨粒与球形磨粒磨削,在X、Y、Z方向的应变,三棱锥磨粒明显要小于球形磨粒作用,原因是三棱锥磨粒有着锋利的前刀面和侧前刃,降低了磨削力,在磨粒前方不会产生材料的堆积,导致磨削时硅晶圆产生的应变减小。

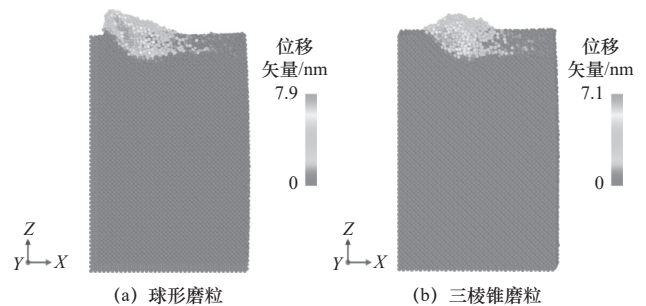
2.3 位移矢量和亚表层损伤分析

磨削距离为8 nm时,单晶硅最大位移矢量和亚表层损伤厚度见表4。球形磨粒引起的单晶硅最大位移矢量差值为0.40 nm,亚表层损伤厚度最大差值为0.13 nm。同等条件下,三棱锥磨粒引起的单晶硅最大位移矢量差值为0.30 nm。仿真表明,硅晶圆表面由磨削引起的位移矢量和亚表层损伤深度相近,因此选择磨削速度为47.124 m/s作为观测点,得出球形磨粒磨削引起的原子位移在磨削区域内原子沿磨削方向发生的位移最大,并且亚表面层附近的原子也发生了明显的移动,如图6a所示。

由于三棱锥磨粒具有明显的切削刃,在磨粒下方的原子位移量较小,如图6b所示。

表4 磨削距离为8 nm时,最大位移矢量及亚表层损伤厚度
Tab. 4 Maximum displacement vector and subsurface damage thickness at a grinding distance of 8 nm

试样序号	球形磨粒		三棱锥磨粒	
	最大位移矢量	亚表层损伤厚度	最大位移矢量	亚表层损伤厚度
1	7.9	2.33	7.1	2.09
2	8.0	2.25	7.3	1.80
3	7.8	2.20	7.3	2.07
4	7.9	2.30	7.3	2.10
5	7.7	2.25	7.3	2.00
6	7.8	2.30	7.4	2.10
7	8.1	2.26	7.3	2.10

图6 磨削速度为47.124 m/s,磨削距离为8 nm时位移矢量截面图
Fig. 6 Displacement vector cross-section at a grinding speed of 47.124 m/s and a grinding distance of 8 nm

将磨削硅晶格原子发生形变位置值作为评价目标,磨削后损伤值 D 为

$$D = \frac{\beta}{\gamma} \quad (5)$$

式中: β 为硅原子磨削后的最大位移, nm; γ 为硅原子间距,为0.235 nm。

球形磨粒在磨削距离为8 nm时,单晶硅磨削区域硅原子的最大位移为7.9 nm,由式(5)计算可得损伤值为33.62;同理可得三棱锥磨粒磨削造成硅原子的最大位移为7.1 nm,损伤值为30.21。

运用可视化OVITO软件,在磨削距离为8 nm的条件下,分别分析球形和三棱锥磨粒磨削加工工件变形区域的硅原子晶格结构的变化。结果如图7所示,深色(蓝色)代表立方金刚石晶体结构原子,浅色(白色)代表其他晶体结构原子,这是因为在磨削区域的原子受机械力作用,造成单晶硅原子由原来的立方金刚石结构(Si-I相)转变为金属相

(Si-II相)结构,最终形成非晶态结构^[23-24]。结果显示球形在磨削速度为47.124 m/s、磨削深度为1 nm时,造成的单晶硅亚表面损伤层厚度为2.33 nm。在相同条件下,三棱锥磨粒造成的单晶硅损伤层厚度为2.09 nm,如图7b所示。由分析仿真结果可知,在相同的磨削条件下,三棱锥磨粒磨削造成的单晶硅亚表层损伤层厚度小于球形磨粒。

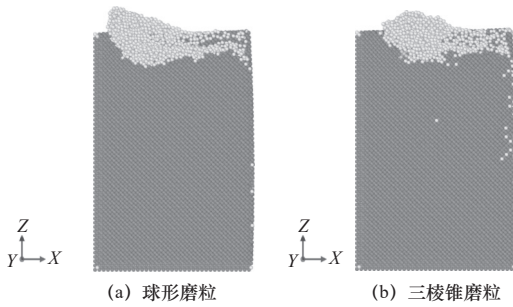


图7 磨削速度为47.124 m/s,磨削距离为8 nm时亚表层损伤截面图

Fig. 7 Cross-section of subsurface damage at a grinding speed of 47.124 m/s and a grinding distance of 8 nm

3 硅晶圆超精密磨削试验

3.1 磨削试验

设计超精密磨削硅晶圆的验证试验,磨削的硅晶圆直径为300 mm、厚度为750 μm,应用三棱锥与球形磨粒混合组成的砂轮磨削,分别采用砂轮粒度为23 μm(600目)、6.5 μm(2 000目)和2.6 μm(4 800目)的砂轮,在GM300设备上依次磨削硅晶圆,硅晶圆与砂轮相反旋转,使用GF06-SD4800-VV6A-50砂轮磨削,具体参数见表5。

表5 磨削试验参数
Tab. 5 Grinding test parameters

参数	数值
砂轮粒度	2.6 μm(4 800目)
砂轮转速 n_s / (r/min)	3 000
硅片转速 n_w / (r/min)	300
砂轮轴向进给速度 v / (μm/s)	0.3
硅片去除厚度 d / μm	35
冷却液流量 q_c / (L/min)	4

通过使砂轮粒度为23、6.5和2.6 μm的砂轮依次对硅晶圆进行磨削加工,将硅晶圆厚度从750 μm依次减薄至375、335和300 μm。加工完成后,最终的硅晶圆表面加工质量如图8所示。

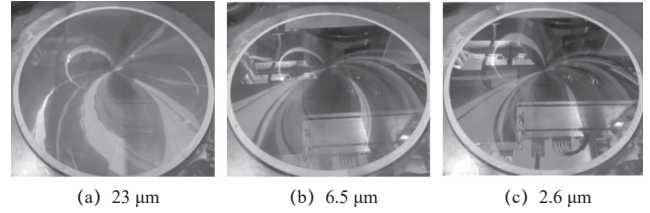


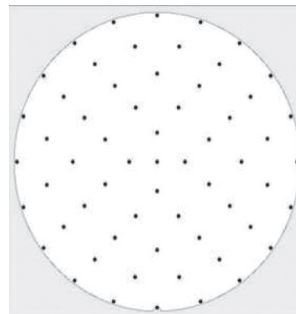
图8 经粒度为23、6.5和2.6 μm砂轮减薄后硅晶圆表面加工质量

Fig. 8 Surface finish quality of silicon wafers after thinning by grinding wheels with grain sizes of 23, 6.5 and 2.6 μm

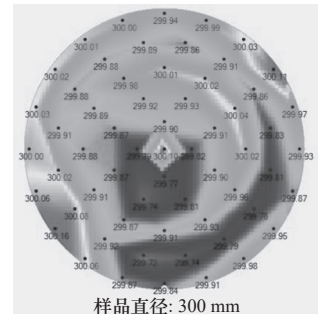
为了确保硅晶圆的最终加工表面满足质量标准,对其总厚度变化TTV和表面粗糙度Ra进行精确测量。TTV测量设备和取样点位如图9a和图9b所示,其最终测量结果如图9c所示,经测量硅晶圆的TTV为0.44 μm。图10所示为硅晶圆表面粗糙度测量位置,测量结果如图11所示,在硅晶圆边缘、中间和中心的粗糙度值分别为18.7、13.6和13.8 nm,表明硅晶圆表面粗糙度小于19.0 nm。



(a) 测量设备



(b) 取样点位



(c) TTV 测量结果

图9 TTV的测量

Fig. 9 Measurement of TTV

3.2 硅晶圆表面残余应力测试

在直径300 mm的硅晶圆磨削完成后,从圆心至外缘等距选取7个取样点(图2),每个取样点的区域尺寸为10 mm×10 mm×0.3 mm。通过Roman光谱仪测试取样点区域的表面平均残余应力,计算7个取样点的平均残余应力。

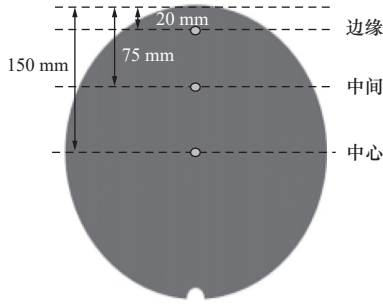


图 10 硅晶圆表面粗糙度测量位置

Fig. 10 Silicon wafer surface roughness measurement location

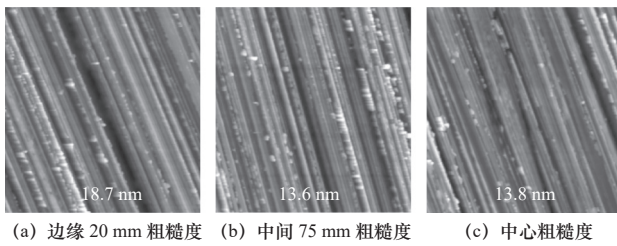


图 11 硅晶圆表面粗糙度测量结果

Fig. 11 Silicon wafer surface roughness measurement results

残余应力 σ 的计算公式^[25] 为

$$\sigma = -435\Delta\omega \quad (6)$$

式中： $\Delta\omega$ 为频移偏差。

零应力拉曼峰为 519.9248 cm^{-1} ，代入式 (6) 计算可得取样点 1~7 对应的平均残余应力，结果见表 6。可见残余应力最大相差值为 389.64 MPa，其相对差小于 9%，差异不明显，表明该超精密磨削硅晶圆试验所采取的工艺参数合理、可行。

表 6 硅晶圆取样点残余应力

Tab. 6 Residual stress at sampling points of silicon wafers

取样点	残余应力 拉曼峰值/ cm^{-1}	零应力 拉曼峰值/ cm^{-1}	残余应力/ MPa	频移差值/ cm^{-1}
1	513.363 21	519.924 8	2 854.29	-6.561 59
2	513.402 32	519.924 8	2 837.28	-6.522 48
3	513.819 19	519.924 8	2 655.94	-6.105 61
4	514.258 93	519.924 8	2 464.65	-5.665 87
5	513.766 36	519.924 8	2 678.92	-6.158 44
6	514.048 80	519.924 8	2 556.06	-5.876 00
7	513.883 64	519.924 8	2 627.90	-6.041 16

4 结语

通过 Tersoff 势函数的分子动力学模型，仿真硅晶圆的减薄磨削，并结合试验测试、计算表面残余应力，获得了以下结论：

(1) 在相同磨削条件下，三棱锥磨粒切削引

起的单晶硅表面材料堆积要比球形磨粒小，且磨削后三棱锥磨粒表面等效应变明显小于球形磨粒。

(2) 三棱锥磨粒磨削时，不同磨削位置的 X、Y、Z 方向的应变分别相差 1.88、1.21 和 1.95，但是 Z 方向应变是影响加工表面应变的主要因素。且在相同条件下，三棱锥磨粒磨削引起的单晶硅损伤层厚度小于球形磨粒。

(3) 应用三棱锥与球形磨粒混合组成的砂轮磨削，硅晶圆减薄后的表面平均残余应力最大相差值为 389.64 MPa，其相对差值小于 9%，符合硅晶圆减薄的产品质量要求。

参 考 文 献

[1] 康仁科, 郭东明, 霍风伟, 等. 大尺寸硅片背面磨削技术的应用与发展 [J]. *半导体技术*, 2003(9): 33-38.

[2] 张果虎, 肖清华, 马飞. 我国半导体硅片发展现状与展望 [J]. *中国工程科学*, 2023, 25(1): 68-78.

[3] GUO X G, LI Q, LIU T, et al. Molecular dynamics study on the thickness of damage layer in multiple grinding of monocrystalline silicon [J]. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2016, 51: 15-19.

[4] 田海兰, 韩涛, 闫少华, 等. 单晶硅纳米磨削亚表面损伤形成机制及其抑制研究 [J]. *制造技术与机床*, 2023(3): 24-30.

[5] 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(6): 46-50.

[6] 郭晓光, 郭东明, 康仁科, 等. 单晶硅纳米级磨削过程的理论研究 [J]. *中国机械工程*, 2008, 19(23): 2847-2851.

[7] LI J, FANG Q H, ZHANG L C, et al. Subsurface damage mechanism of high speed grinding process in single crystal silicon revealed by atomistic simulations [J]. *Applied Surface Science*, 2015, 324: 464-474.

[8] 郭永博, 梁迎春. 晶体材料纳米切削加工机理的研究 [J]. *机械工程学报*, 2014, 50(5): 114.

[9] 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): 845-853.

[10] TANG F Z, ZHANG L C. Subsurface nanocracking in monocrystalline Si (001) induced by nanoscratching [J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2014, 124: 262-271.

[11] ZHANG Y X, WANG D, GAO W, et al. Residual stress analysis on silicon wafer surface layers induced by ultra-precision grinding [J]. *Rare Metals*, 2011, 30: 278-281.

[12] YAN J W, ASAMI T, HARADA H, et al. Crystallographic effect on subsurface damage formation in silicon microcutting [J]. *CIRP Annals*, 2012, 61(1): 131-134.

[13] LI P H, GUO X G, YUAN S, et al. Effects of grinding speeds on the subsurface damage of single crystal silicon based on molecular dynamics simulations [J]. *Applied Surface Science*, 2021, 554: 149668.

[14] ZHAO P Y, ZHAO B, PAN J S, et al. Nano-grinding process of single-crystal silicon using molecular dynamics simulation: nano-grinding parameters effect [J]. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2022, 143: 106531.

[15] ZHANG L X, CHEN P, AN T, et al. Analytical prediction for depth of

subsurface damage in silicon wafer due to self-rotating grinding process [J]. *Current Applied Physics*, 2019, 19(5): 570-581.

[16] TERSOFF J. Modeling solid-state chemistry: interatomic potentials for multicomponent systems [J]. *Physical Review B*, 1989, 39(8): 5566-5568.

[17] AKTULGA H M, FOGARTY J C, PANDIT S A, et al. Parallel reactive molecular dynamics: numerical methods and algorithmic techniques [J]. *Parallel Computing*, 2012, 38(4/5): 245-259.

[18] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19.

[19] MYLVAGANAM K, ZHANG L C. Nanotwinning in monocrystalline silicon upon nanoscratching [J]. *Scripta Materialia*, 2011, 65(3): 214-216.

[20] 吴珍珠, 乔书杰, 韩涛, 等. 单晶硅纳米磨削力热行为与亚表面损伤研究 [J]. *现代制造工程*, 2024(5): 80-85.

[21] 杨军, 李志鹏, 李伟, 等. 基于不同单颗磨粒模型的微细磨削力研究 [J]. *湖南大学学报(自然科学版)*, 2018, 45(8): 54-62.

[22] 杨晓京, 陈子辰, 樊瑜瑾, 等. 磨粒磨损中微观切削过程分子动力学模拟 [J]. *农业机械学报*, 2007(5): 161-164.

[23] 黄德明, 王立平, 薛群基. 单晶硅 AFM 加工过程的分子动力学模拟 [J]. *摩擦学学报*, 2011, 31(4): 328-334.

[24] GAO S, HUANG H, ZHU X L, et al. Surface integrity and removal mechanism of silicon wafers in chemo-mechanical grinding using a newly developed soft abrasive grinding wheel [J]. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2017, 63: 97-106.

[25] 兰天宝, 苏飞. 基于拉曼光谱的硅片残余应力测试方法 [C]//北京力学学会第 20 届学术年会论文集. 北京: 北京力学学会, 2014.

第一作者: 黄绍服, 男, 1974 年生, 博士, 教授, 研究方向为先进制造技术. E-mail: 8556126@qq.com

通信作者: 赵茂俞, 男, 1969 年生, 博士, 教授, 研究方向为塑性精密成形及精密制造. E-mail: chhmyzhao@126.com

(编辑 张亚然)
(收修改稿日期: 2024-08-05)

论文推荐

王浩杰, 曹自洋, 张洋精. 航空涡轮叶片扩散型气膜孔电火花铣削加工关键工艺研究[J]. *制造技术与机床*, 2022(9): 69-76.



航空涡轮叶片扩散型气膜孔电火花铣削加工关键工艺研究

王浩杰 曹自洋 张洋精

苏州科技大学机械工程学院

扫码获取全文

摘要 针对Inconel 718航空涡轮叶片扩散型气膜孔加工中复杂三维微细型腔的加工要求, 采用微细电火花端部放电分层铣削加工工艺, 针对铣削加工中分层厚度、运动轴90°转角伺服加减速控制等关键工艺对三维结构纵横截面轮廓度的影响进行研究。建立电火花铣削加工底面轮廓通用数学模型, 利用MATLAB仿真分析不同初始分层厚度对轮廓底面的影响, 通过试验获取0.005 mm初始加工深度并加工出表面轮廓度小于0.01 mm的三维扩散型气膜孔纵向截面。针对三维结构横向截面中存在的90°大转角, 采用混合S型伺服进给控制策略, 减小90°转角处因过大速降引起的内凹横向截面, 通过试验获得高精度扩散型气膜孔横向截面。

关键词 涡轮叶片; 电火花铣削; 扩散型气膜孔; 分层厚度; 伺服控制