

分类号: U463

密 级: 公开

学校代码: 10363

学 号: 2210120166



安徽工程大学

Anhui Polytechnic University

硕士学位论文

题 目 氮化铝精密研磨材料微观去
除机理及工艺研究

论 文 作 者 潘 飞

校 内 导 师 王建彬教授

校 外 导 师 赵长红高级工程师

专业学位类别 机械工程

研究方向(领域) 精密加工

论文提交日期: 2024 年 6 月 7 日

分类号：U463

单位代码：10363

密 级：公开

学 号：2210120166

氮化铝精密研磨材料微观去除机理及工艺研究

**Research on Microscopic Removal Mechanism and Process of Aluminum
Nitride Precision Grinding Materials**

学 生 姓 名

潘飞

指 导 教 师

王建彬教授

校 外 导 师

赵长红高级工程师

专 业

机械

研 究 方 向

超精密加工

论文答辩日期：2024 年 5 月 25 日

安徽工程大学学位论文原创性声明

本人郑重声明：我恪守学术道德，崇尚严谨学风。所呈交的学位论文，是本人在导师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已明确注明和引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品及成果的内容。论文为本人亲自撰写，我对所写的内容负责，并完全意识到本声明的法律后果由本人承担。

学位论文作者签名：潘飞

日期：2024年6月7日

安徽工程大学学位论文版权使用授权书

学位论文作者完全了解学校有关保留、使用学位论文的规定，同意学校保留并向国家有关部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅或借阅。本人授权安徽工程大学可以将本学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存和汇编本学位论文。

保密 ☐，在 年解密后适用本版权书。

本学位论文属于

不保密 ☒。

学位论文作者签名：潘飞

日期：2024年6月7日

指导教师签名：王连彬

日期：2024年6月7日

氮化铝精密研磨材料微观去除机理及工艺研究

摘要

氮化铝作为第三代半导体材料，具有高热导率、禁带宽度大、无毒性等优异性能，被视为新一代理想的封装材料，市场潜力巨大。高效获得优质氮化铝表面加工质量不仅关系到新型封装材料的应用推广，同时也是衡量器件性能、使用寿命及成本控制的关键指标。封装材料表面质量对器件的性能和寿命具有重要影响。然而氮化铝材料的理化特性，大大提高了其机械加工难度，属于典型的难加工材料，加工工艺路线长，难以高效获得优质加工表面。本文借助分子动力学对氮化铝精密研磨过程进行仿真分析，探索材料的微观去除机理，并通过实验对其进行工艺研究，以期获得最佳的精密加工工艺参数，为氮化铝的精密加工提供理论和实践依据。开展的主要工作包括：

（1）建立氮化铝分研磨的分子动力学模型，对单颗磨粒的微观切入过程进行仿真，分析磨粒切入不同深度和速度下，材料的热力学信息和微观表面形貌的变化规律。结果表明，随研磨深度增大，微观形貌变差，研磨速度增大研磨越不稳定，研磨深度影响大于研磨速度，当研磨深度 $10\text{\AA}$ 时，研磨速度 50m/s ，微观表面最平整。合适的研磨深度能够使材料去除方式为塑性，利于获得优质表面。

（2）采用纳米压痕试验，分析氮化铝受力材料微观变形机制，发现随载荷增大，氮化铝材料去除形式不同，当载荷超过 200mN 时，

卸载阶段容易发生回返现象，产生蠕变和亚表面损伤，材料去除形式主要为脆性去除，导致材料表面质量下降，因此选择合适临界载荷大小即压入深度能够使材料去除形式为塑性，提高加工质量。

(3) 采用正交试验，结合仿真最佳参数设计实验方案，分析金刚石磨粒工艺参数对表面质量影响。随粒径变细，表面质量并非逐渐变好，在粒径 W120 时，存在咬合现象，表面质量下降，研磨压力对表面质量影响最大，粒径 W50 工艺参数为研磨液流速 70 ml/min，研磨转速 50 r/min，研磨压力 7.6 kPa（即 $A_3B_1C_3$ ）时，表面质量最佳。选择合适研磨压力等因素能提高加工效率，获得优质加工表面。

(4) 采用正交试验，分析氧化铝磨粒工艺参数对表面质量影响。随氧化铝粒径变小，表面质量变好，研磨液流速对表面质量影响最大，粒径为 50nm 工艺参数为研磨液流速 50mL/min、研磨盘转速 40r/min、研磨压力 7.6kPa（即 $A_1B_2C_2$ ）时，表面光滑无划痕，与金刚石相比去除率变低但表面形貌更平整。

关键词：氮化铝、分子动力学、纳米压痕、游离磨料、表面质量

Research on Microscopic Removal Mechanism and Process of Aluminum Nitride Precision Grinding Materials

ABSTRACT

Aluminum nitride, as a third-generation semiconductor material, has excellent properties such as high thermal conductivity, wide bandgap, and non toxicity. It is considered an ideal packaging material for the new generation and has huge market potential. Efficiently obtaining high-quality surface processing quality of aluminum nitride is not only related to the application and promotion of new packaging materials, but also a key indicator for measuring device performance, service life, and cost control. The surface quality of packaging materials has a significant impact on the performance and lifespan of devices. However, the excellent physical and chemical properties of aluminum nitride material greatly reduce its mechanical machinability, making it a typical difficult to machine material with a long processing route, making it difficult to efficiently obtain high-quality machining surfaces. This article uses molecular dynamics to simulate and analyze the precision grinding process of aluminum nitride, explore the micro removal mechanism of materials, and conduct process research through experiments, in order to obtain the best precision machining process parameters and provide theoretical and practical basis for the precision machining of aluminum

nitride. The main work carried out includes:

(1) Establish a molecular dynamics model for aluminum nitride grinding, simulate the micro cutting process of a single abrasive particle, and analyze the thermodynamic information and micro surface morphology changes of the material under different depths and velocities of abrasive particle cutting. The results show that as the grinding depth increases, the microstructure deteriorates, and the grinding becomes more unstable as the grinding speed increases. The influence of grinding depth is greater than that of grinding speed. When the grinding depth is 10 Å, the grinding speed is 50 m/s, and the microstructure surface is the smoothest. The appropriate grinding depth can make the material removal method plastic, which is conducive to obtaining a high-quality surface.

(2) By using nanoindentation testing, the micro deformation mechanism of aluminum nitride under stress was analyzed. It was found that as the load increased, the removal form of aluminum nitride material was different. When the load exceeded 200mN, the unloading stage was prone to backflow phenomenon, resulting in creep and subsurface damage. The material removal form was mainly brittle removal, leading to a decrease in surface quality. Therefore, selecting an appropriate critical load size, i.e. the depth of indentation, can make the material removal form plastic and improve processing quality.

(3) Using orthogonal experiments and combining simulation with optimal parameters to design experimental plans, analyze the impact of diamond abrasive process parameters on surface quality. As the particle size becomes finer, the surface quality does not gradually improve. When the particle size is W120, there is a biting phenomenon, and the surface quality decreases. The grinding pressure has the greatest impact on the surface quality. When the process parameter for particle size W50 is $A_3B_1C_3$, the surface quality is the best. Choosing appropriate grinding pressure and other factors can improve machining efficiency and obtain high-quality machining surfaces.

(4) Using orthogonal experiments, analyze the influence of alumina grinding process parameters on surface quality. As the particle size of alumina decreases, the surface quality improves. The flow rate of the grinding fluid has the greatest impact on the surface quality. When the particle size is 50nm and the process parameter $A_1B_2C_1$ is used, the surface is smooth without scratches. Compared with diamond, the removal rate decreases but the surface morphology is smoother.

Pan Fei (Mechanical)

Supervised by Wang Jianbing

Keywords: aluminum nitride, molecular dynamics, nanoindentation, free abrasive, surface quality

目录

第 1 章 绪论	1
1.1 研究背景及意义	1
1.2 氮化铝的特点	1
1.3 国内外研究现状	3
1.4 研究内容	7
第 2 章 氮化铝分子动力学仿真方法	9
2.1 引言	9
2.2 分子动力学仿真方法	9
2.2.1 基本原理	9
2.2.2 分子动力学系综选择	10
2.2.3 边界条件	11
2.2.4 原子间相互作用势	12
2.3 仿真软件及后处理方法	14
2.3.1 仿真相关软件	14
2.3.2 仿真结果处理和分析方法	15
2.4 氮化铝分子动力学模型构建	15
2.4.1 氮化铝微观研磨分子动力学模型构建	15
2.5 本章小结	16
第 3 章 氮化铝微观研磨材料去除分析	17
3.1 引言	17
3.2 微观研磨过程分析	17
3.2.1 系统势能分析	17
3.2.2 工件温度分析	18
3.2.3 研磨过程微观形貌分析	19
3.3 研磨深度对氮化铝材料去除过程的影响	20
3.3.1 研磨表面形貌分析	20

3.3.2 应力和相变分析	22
3.3.3 磨削力、系统势能和平均温度分析	25
3.4 不同研磨速度对氮化铝材料去除过程的影响	28
3.4.1 研磨表面形貌分析	29
3.4.2 应力和相变分析	30
3.4.3 磨削力、系统势能和平均温度分析	32
3.5 本章小结	35
第 4 章 氮化铝纳米压痕试验研究	37
4.1 引言	37
4.2 试验原理和设备	37
4.3 纳米压痕参数设置	38
4.4 试验结果分析	39
4.4.1 载荷位移曲线分析	39
4.4.2 弹性回复率	40
4.4.3 蠕变位移分析	41
4.5 本章小结	42
第 5 章 氮化铝游离磨料工艺试验研究	43
5.1 引言	43
5.2 试验方法与测试	43
5.3 不同磨料研磨工艺时间实验确定	45
5.3.1 金刚石磨料粒径研磨时间	45
5.3.2 氧化铝磨料粒径研磨时间	47
5.4 金刚石磨粒研磨工艺研究	49
5.4.1 正交研磨实验设计	49
5.4.2 W180 粒径正交试验结果及分析	49
5.4.3 W120 粒径正交试验结果及分析	52
5.4.4 W50 粒径正交试验结果及分析	54
5.5 氧化铝磨粒研磨工艺研究	57
5.5.1 正交研磨实验设计	57

5.5.2 5 μm 粒径正交试验结果及分析	58
5.5.3 1 μm 粒径正交试验结果及分析	60
5.5.4 50nm 粒径正交试验结果及分析	63
5.6 综合优化分析	65
5.7 本章小结	67
第 6 章 结论与展望	69
6.1 结论	69
6.2 展望	70
参考文献	72
攻读硕士学位期间发表学术论文及参研项目	79
致谢	80

插图清单

图 1-1 氮化铝稳定晶体结构示意图	2
图 1-2 材料去除形式示意图	4
图 1-3 化学机械抛光工作原理图	5
图 2-1 分子动力学仿真原理图	10
图 2-2 周期性边界条件原理示意图	12
图 2-3 金刚石研磨氮化铝的分子动力学仿真三维模型图	15
图 3-1 研磨过程系统势能变化图	18
图 3-2 研磨过程工件温度变化情况图	19
图 3-3 仿真体系研磨微观形貌图	20
图 3-4 不同研磨深度下的氮化铝材料去除分布图	21
图 3-5 不同研磨深度形成的磨削原子图	22
图 3-6 不同研磨深度的应力曲线示意图	22
图 3-7 不同研磨深度下磨粒下方区域应力图	23
图 3-8 氮化铝纳米研磨前后 RDF 图	24
图 3-9 氮化铝不同研磨深度下的 IDS 结构变化图	25
图 3-10 不同研磨深度下的磨削力变化曲线图	26
图 3-11 不同研磨深度下势能和平均温度的变化曲线图	28
图 3-12 不同研磨深度下的氮化铝材料去除分布图	29
图 3-13 不同研磨速度形成的磨削原子图应力和相变分析	30
图 3-14 不同研磨速度的应力曲线示意图	31
图 3-15 不同研磨速度磨粒下方区域应力图	31
图 3-16 氮化铝不同研磨深度下的 IDS 结构变化图	32
图 3-17 不同研磨深度下的磨削力变化曲线图	33
图 3-18 研磨速度下势能和平均温度的变化曲线	35
图 4-1 纳米压痕过程示意图和典型载荷位移曲线	38
图 4-2 Nano Indenter G200 设备图	38
图 4-3 不同最大载荷下的载荷位移曲线	39
图 4-4 弹性回复率随压入深度的关系图	41

图 4- 5 氮化铝蠕变位移与时间的变化图	42
图 5- 1 试验装置与氮化铝陶瓷基片图.....	43
图 5- 2 试验设备图	45
图 5- 3 不同金刚石粒径研磨材料去除率和表面粗糙度变化曲线	47
图 5- 4 不同氧化铝粒径研磨材料去除率和表面粗糙度变化曲线	48
图 5- 5 游离磨料研磨前后氮化铝表面对比图	50
图 5- 6 材料去除率最优组合前后对比图	51
图 5- 7 氮化铝研磨后表面三维形貌图	51
图 5- 8 $A_1B_2C_3$ 研磨参数加工后氮化铝表面二维形貌	53
图 5- 9 $A_3B_2C_1$ 研磨条件下氮化铝表面二维形貌	53
图 5- 10 W120 最优工艺组合氮化铝表面三维轮廓图	54
图 5- 11 W50 金刚石磨粒示意图	55
图 5- 12 $A_1B_3C_3$ 研磨条件下氮化铝表面二维形貌	56
图 5- 13 $A_3B_1C_3$ 研磨条件下研磨表面二维形貌	57
图 5- 14 研磨后三维表面轮廓图	57
图 5- 15 $A_2B_3C_1D_1$ 条件研磨后氮化铝表面二维形貌图	59
图 5- 16 $A_3B_2C_3D_1$ 研磨条件下氮化铝表面二维形貌图	59
图 5- 17 $A_3B_2C_3D_1$ 研磨后表面三维轮廓图	60
图 5- 18 $A_2B_1C_2$ 研磨条件下氮化铝表面二维形貌	61
图 5- 19 $A_2B_2C_3$ 条件下氮化铝表面二维形貌	62
图 5- 20 研磨后氮化铝氮化铝表面三维轮廓图	63
图 5- 21 $A_1B_2C_2$ 研磨条件下氮化铝表面二维形貌	64
图 5- 22 $A_2B_3C_1$ 研磨条件下表面二维形貌	65
图 5- 23 研磨后表面三维轮廓图	65
图 5- 24 金刚石最优工艺组合研磨后表面形貌	66
图 5- 25 氧化铝最优工艺组合研磨后表面形貌	66

插表清单

表 1- 1 常温下氮化铝基片的机械性质参数	3
表 2- 1 Vashishta 势函数参数表	14
表 2- 2 分子动力学三维仿真基本参数表	16
表 2- 3 压痕试验参数表	39
表 3- 1 不同研磨深度对应的仿真体系参数表	20
表 3- 2 不同研磨深下的平均研磨力	27
表 3- 3 不同研磨速度下的仿真体系参数	29
表 3- 4 不同研磨速度下的平均磨削力	34
表 4- 1 压痕试验参数表	39
表 4- 2 AlN 陶瓷材料的纳米压痕力学性能数据表	40
表 5- 1 试验所需仪器设备表	44
表 5- 2 研磨参数设置表	45
表 5- 3 金刚石磨料研磨后参数水平表	49
表 5- 4 W180 金刚石粒径研磨正交实验结果	49
表 5- 5 W180 金刚石粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析	50
表 5- 6 W180 金刚石粒径研磨后氮化铝材料去除率结果分析	51
表 5- 7 W120 金刚石粒径研磨后氮化铝正交实验结果	52
表 5- 8 W120 金刚石粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析	52
表 5- 9 W120 金刚石粒径研磨后氮化铝材料去除率结果分析	53
表 5- 10 W50 金刚石粒径研磨后氮化铝正交实验结果	54
表 5- 11 W50 金刚石粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析	55
表 5- 12 W50 金刚石粒径研磨后氮化铝材料去除率结果分析	56
表 5- 13 氧化铝磨料研磨工艺正交试验的因素水平表	58
表 5- 14 5 μ m 粒径氧化铝研磨后正交实验结果	58
表 5- 15 5 μ m 粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析	58
表 5- 16 5 μ m 粒径研磨后氮化铝材料去除率结果分析	59
表 5- 17 1 μ m 氧化铝研磨后氮化铝正交实验结果	60
表 5- 18 1 μ m 粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析	61

表 5- 19	1 μm 粒径研磨后氮化铝材料去除率结果分析	62
表 5- 20	50nm 粒径氧化铝研磨后正交试验结果	63
表 5- 21	50nm 粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析	64
表 5- 22	50nm 粒径游离研磨材料去除率结果分析	64

第 1 章 绪论

1.1 研究背景及意义

随着大功率第三代半导体芯片的发展，封装材料迎来挑战^[1~2]。现有的陶瓷基板和其他材料无法满足半导体器件的新需求^[3~4]。氮化铝（AlN）作为第三代半导体材料，具有热导率高、超宽禁带宽度、性能稳定、无毒性以及与硅相匹配的热膨胀系数等优异性能^[5~6]，能够解决半导体器件的新需求市场，被广泛应用于各领域中：在电子封装领域，氮化铝陶瓷与目前其他封装材料相比具有更大更高击穿电场、更短吸收截止边和更好散热性等特性，成为新一代理想的封装材料^[7~10]；在功率模块领域，氮化铝陶瓷的高热导率、高绝缘性、高抗电强度、低介电损耗等特性，目前已被大规模集成电路芯片载体、光电子集成电路功能模块、IGBT 模块诸多场合^[11~12]；在射频/微波通讯领域，氮化铝陶瓷的高电阻率、直接带隙的等特性，氮化铝陶瓷材料制备的器件已经在通信基站、微波衰减、高功率无线通讯等多种场合投入使用^[13~15]；AlN 薄膜材料具有优异热稳定性和压电性能，能在高温恶劣环境下工作，在 MEMS、传感器、微模块等方面得到应用^[16]。

氮化铝属于典型的硬脆材料，在氮化铝的各领域应用中，除了需要优异的成型技术，还对氮化铝表面质量提出了要求，需要进行超精密加工，使表面达到亚纳米级别光滑程度。硬脆材料由于其机械性能，加工时表面容易出现缺陷，常见表面缺陷有：脆性裂纹、残余应力、塑性变形区等。在电子封装领域中，氮化铝陶瓷基板主要面对热力学环境的工作条件，上述缺陷会极大地影响器件性能，降低器件的使用稳定性和寿命。因此，氮化铝材料表面超精密加工是十分具有研究意义。

1.2 氮化铝的特点

氮化铝(AlN)属于III-V族中的强共价化合物，是与硫化锌、纤维锌矿同形的六方晶系，它以铝原子为中心原子与相邻的四个氮原子形成 $[AlN_4]$ 四面体作为基本结构单元，类似于金刚石的结构，按照氮铝原子在晶体中堆垛顺序的不同可以分为六方纤锌矿（ α 相）和立方闪锌矿（ β 相）结构，其中，六方纤锌矿结

构是 AlN 晶体的稳定结构，晶体结构如图 1-1 所示，图 1-1(a)中蓝色为铝原子，黄色为氮原子，沿 c 轴方向的 Al-N 键长为 0.1917 nm，其他方向的 Al-N 键长为 0.1885 nm。AlN 的空间群为 P6₃mc；(b)图中晶格常数 $a=0.3110$ nm、 $c=0.4981$ nm，键角分别为 90° 和 120° [17]。

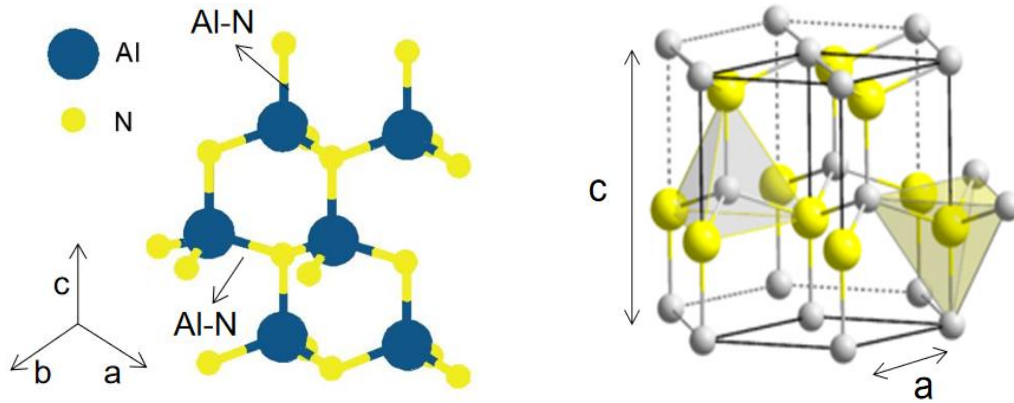


图 1-1 氮化铝稳定晶体结构示意图

氮化铝材料具有优异的热学性能、化学性能、机械性能等，并且有取代毒性氧化铍陶瓷和热氧化铝陶瓷的强劲趋势。氮化铝性能具体参数和说明如下。

热学性能：AlN 的理论热导率为 $320 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ [18]，仅比铜的热导率 $390 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 略低。实际上，人工制备的多晶 AlN 热导率一般为 $10 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \sim 260 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ ，在室温下热导率为氧化铝材料的 10~15 倍，接近于 BeO 陶瓷的 $350 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ 。目前，热压烧结的氮化铝陶瓷的热导率最高。当温度高于 200°C 时，导热性能又优于氧化铍；在 $25^\circ\text{C} \sim 400^\circ\text{C}$ 的范围内，纯 AlN 的热膨胀系数为 $4.4 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ ，与硅的热膨胀系数 $3.4 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ 相近。优异的热学性能让氮化铝从众多超宽禁带材料中脱颖而出成为最理想射频器件。

机械性能：材料在实际应用中必然要考虑机械性能，氮化铝陶瓷的性能与制备工艺有关，氮化铝陶瓷在室温下的主要性能如表 1 所示。氮化铝的维氏硬度为 12 GPa，机械弯曲强度约为 350~400 MPa，弹性模量为 310 GPa，具有优异的综合性能。

化学性能：氮化铝陶瓷具有良好的高温抗腐蚀能力，不被铝、铜、银、铅、铌等多种金属浸润；AlN 具有强烈的吸湿性，极易与空气中的水蒸气反应；在空气中，氮化铝陶瓷的初始氧化温度为 $700^\circ\text{C} \sim 800^\circ\text{C}$ ；常压下，AlN 不会融化，而是在 $2260^\circ\text{C} \sim 2500^\circ\text{C}$ 时发生热分解。在碱性环境下易于生成软质层产

生溶解现象，便于后续的超高精密加工的材料去除。

其他性能：氮化铝陶瓷相比于氮化镓 GaN、金刚石、氧化铝 Al₂O₃ 等封装材料相比，还具有低介电损耗、超宽禁带宽度、击穿场强高等性能。

表 1- 1 常温下氮化铝基片的机械性质参数

性能	数值	单位
密度	3.26	$\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$
显微硬度	12	GPa
弹性常数 ^[19]	C_{11} 410±10	
	C_{33} 389±10	
	C_{44} 125±5	
体积模量 ^[20]	B_s 210	GPa
杨氏模量 ^[21]	Y_o 308	GPa
弹性模量 ^[21]	C_L 334	GPa
	C_s 131	
剪切模量	8.25×10^{11}	dyn/cm^2
泊松与不同	{0001} 0.287	
晶体取向 ^[22]	{11 $\bar{2}$ 0} 0.216	

氮化铝优异性能使其具有广阔的应用前景，各应用场合都对表面质量提出要求，氮化铝的机械性能使加工存在困难，成本过高，目前氮化铝微观去除机理尚不明确，加工工艺尚不成熟，需要进一步深入研究。

1.3 国内外研究现状

1.3.1氮化铝的去除机理研究现状

材料的塑性指在材料受到外力作用下，内部应力大小超过材料本身的的弹性极限发生不可逆变形，脆性指材料受到外力作用时，材料的变形方式以裂纹的形式实现断裂破坏的现象^[23~24]。研磨加工材料的去除形式主要为磨料与工件间的微研磨和滚轧作用，使材料脱离表面。加工硬脆材料时，材料去除形式可分为塑性域去除和脆性去除，两种去除方式示意图如图 1-2 所示，塑性域去除方式以塑性流动和微研磨为主，脆性去除材料是材料发生脆性断裂，以裂纹扩

展方式实现去除^[25]。

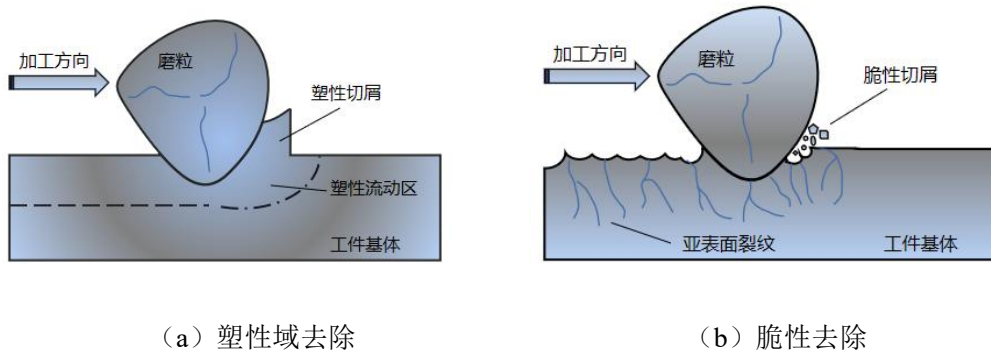


图 1-2 材料去除形式示意图

氮化铝材料在宏观尺度下，材料去除经弹性变形达到一定后会发脆性断裂，在微观尺度下，发生断裂前会经历塑性域^[26]，单纯机械去除过程中主要以脆性断裂方式为主，获得表面加工质量较差，难以达到氮化铝电子封装领域应用场合的要求。因此研究氮化铝材料微观尺度下的塑性变形机理和临界条件，能够降低表面损伤的产生，提高加工效率。

目前，对于氮化铝的微观材料变形机理，国内外已进行相应的探索。纳米压痕划痕技术能够应用于纳米级别下材料变形机理以及力学性能，分子动力学仿真(MD)已被证实是能够研究原子尺度材料变形行为，揭示材料在纳米或亚纳米尺度上的变形和去除机理。Lin^[27]等人通过纳米划痕试验研究氮化铝陶瓷在超精密磨削过程中的变形断裂机理，结合载荷位移曲线（p-h 曲线）和表面形貌揭示划痕过程中脆性到韧性的转变。Paulo S^[28-29]等人利用 MD 模拟研究了高强度氮化铝陶瓷大规模平面冲击模拟过程，结果发现，在无缺陷系统中，氮化铝材料冲击损伤非常复杂，晶体方向的相变结构有很强的各向异性。Xiang^[30]等人采用 MD 方法对纤锌矿氮化铝(AIN)进行了纳米压痕研究，探索 AIN（0001）薄膜的纳米结构和 B4-B1 相变路径行为、非晶化和位错滑移，结合压痕 P-h 曲线，分析相应变形机理。Cui^[31]等人利用 MD 在纳米压痕下研究了闪锌矿结构氮化铝(Zb-AlN)的力学响应和纳米结构演变，发现在(110)和(111)晶面压痕，同时发生 Burgers 矢量 $b=1/2\langle 110 \rangle$ 的完全位错和 $b=1/6\langle 112 \rangle$ 的 Shockley 部分位错，P-h 曲线在弹性阶段与赫兹理论确定的曲线相比表现出很大的柔顺性。Li^[32]等人进行

了单晶 AlN 纳米压痕变形取向依赖性的 MD 模拟，结果发现相变主要在以[0001]和[1010]的初始取向变形。Bao^[33]等人研究了氮化铝纳米刻蚀过程中晶体各向异性对变形行为的影响，结果表明在(0001)表面平均摩擦力最小，便于材料的去除。Guo^[34]等人通过 MD 模拟和纳米磨损实验，进行原子水平上单晶氮化铝在金刚石刀具作用下的材料去除行为和机理研究，结果在铝封端的氮化铝(0001)表面可实现单层最小去除厚度，亚表面损伤由位错和层错构成，并与划痕深度呈正相关。Yan^[35]等人研究了金刚石磨料在滚动振动下单晶氮化衬底微观去除机理，发现振动运动造成的损伤比滚动严重，原子分离和堆积数量多。

1.3.2 氮化铝研磨加工的研究现状

AlN 材料表面加工质量往往直接与器件性能和使用寿命有关，目前 AlN 材料超精密加工方法有：ELID 磨削、化学机械抛光、磁流变抛光、激光加工、离子辅助抛光等。其中化学机械抛光(CMP)是目前半导体行业中唯一能够实现全局平坦化的技术^[36]，工作原理图如图 1-3 所示。工艺装置主要由抛光盘、试件装夹器及抛光液输送装置三部分构成。抛光盘上粘贴有抛光垫能够自旋转，加工时通过对夹具给工件施加压力，使得晶片与抛光垫两者之间有法向载荷，从而有相对运动。根据磨料的状态一般分为游离磨料抛光和固结磨料抛光。

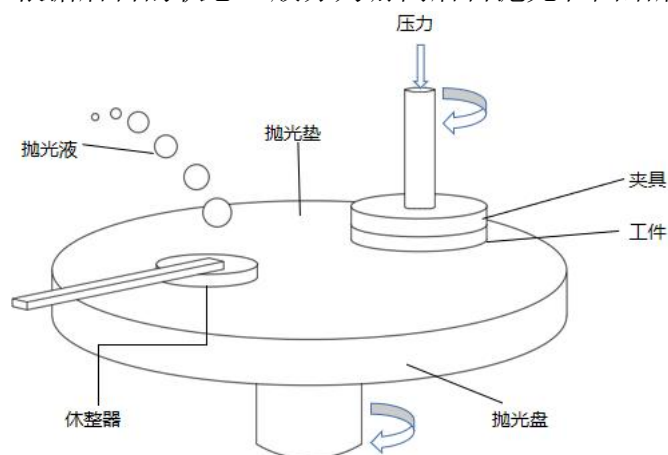


图 1-3 化学机械抛光工作原理图

化学机械抛光目前已经成熟应用于碳化硅、氮化镓等半导体材料，通过 CMP 以及其他复合抛光方法，加工后的碳化硅材料表面质量可达到超光滑程度。碳化硅加工研究国内外研究学者已经取得了一些列成果，李娟等^[78]研究表明通

过游离磨料工艺对SiC材料进行处理,可获得平整度为 $\pm 3 \mu\text{m}$,表面粗糙度 $R_a < 5 \text{ nm}$ 的晶片表面。陈勇臻^[79]对游离磨料工艺对SiC材料进行处理,使得SiC材料表面粗糙度均方根 RMS 达到 4 nm 。程伟^[80]等通过游离磨料工艺对SiC材料进行处理,可获得高质量SiC薄片,厚度为 $(30 \pm 2) \mu\text{m}$,表面粗糙度均方根 RMS 为 0.69 nm 。Tsai等^[81]等研究表明通过嵌入纳米金刚石磨料的抛光垫对SiC进行处理,可获得亚纳米级光滑表面,其工件的表面粗糙度 $R_a < 0.5 \text{ nm}$,抛光速率为 $1.3 \mu\text{m/h}$ 。张银霞等^[82]研究表明通过在抛光压力为 13.79 kPa ,固结磨料(金刚石)粒径为 $14 \mu\text{m}$ 时, SiC晶片的亚表面损伤层深度约为 $2.6 \mu\text{m}$ 。

与碳化硅精密加工技术相比,氮化铝陶瓷加工现状并不够成熟,但国内外研究人员也有进展。Takahashi等^[36]使用 Al_2O_3 和 Cr_2O_3 作为磨料对AlN多晶进行了湿式抛光,加工后AlN材料表面粗糙度呢能够达到 $R_a 100 \text{ nm}$,抛光速率为 $10 \mu\text{m} \cdot \text{ks}^{-1}$,通过TEM抛光后的工件表面形貌,发现存在严重的表层损伤,损伤层厚度为 $0.5 \mu\text{m}$ 。Filatov等^[37]使用金刚石作为磨料进行了氮化铝陶瓷的湿式机械抛光,研究了运动学参数对于去除率的影响,选取了低抛光压力,最终平均去除率仅为 $3.1 \mu\text{m} \cdot \text{h}^{-1}$ 。Zhou等^[38]采用游离磨料加工的方法,对氮化铝陶瓷进行了研磨、抛光,先用不同磨粒大小的 Al_2O_3 进行研磨,再用 SiO_2 溶液(粒径为 50 nm)作为抛光液进行抛光,最终得到了表面粗糙度 R_a 为 6 nm 的光滑表面,同时发现由于热压烧结陶瓷内部留下的孔隙不利于表面粗糙度的降低。尹青等^[39]针对CMP抛光氮化铝陶瓷平坦性问题,进行工艺参数和 pH 值等因素对抛光质量的影响,自行配置了抛光液,稀释后,在压力 1.8 MPa 、转速 $60 \text{ r} \cdot \text{min}^{-1}$ 、流速 $340 \text{ mL} \cdot \text{min}^{-1}$ 条件下,得到表面粗糙度 R_a 为 28 nm ,且无划痕。Jung等^[40]针对PVT法制成单晶氮化铝进行抛光研究。先利用不同颗粒大小的金刚石磨粒进行DMP,使用超声波清洗机将晶片表面残留的金刚石杂质清理后,采用 SiO_2 研磨液和SUBA 600抛光垫进行CMP抛光,并利用光学显微镜和AFM进行形貌观察,最终得到良好的加工表面。

1.3.3 存在的问题与不足

目前氮化铝材料纳米尺度下的去除机理研究多针对于材料的断裂行为和力

学性能变化，试验和研究结果表明在加工过程中氮化铝材料弹塑性转变机理行为，在合适的临界加工条件下进行，能实现塑性域加工的可能，从而减少裂纹和亚表面损伤，国内外研究人员已经取得了一系列成果，目前氮化铝难以高效获得优质加工表面，由于材料去除机理尚不明确，通过分析材料微观去除机理才能提高加工效率，优化现有加工工艺。

在化学机械抛光中，材料的去除是通过化学和机械综合作用，加工后的氮化铝表面容易出现微裂纹，产生亚表面损伤。在抛光工艺中，氮化铝的研磨液、磨料种类，工艺参数远不如碳化硅成熟，目前氮化铝材料游离磨料研磨抛光研究较少，需要进行大量试验进行加工工艺参数优化，使其在低成本下获得最优加工表面质量。

本课题通过分子动力学仿真方法并结合氮化铝纳米压痕试验，探索不同研磨深度和不同研磨速度下单晶氮化铝的去除机理研究，并进行氮化铝材料的游离磨料试验，探索不同加工磨料种类以及粒径大小对加工质量的研究，并进行工艺参数优化。

1.4 研究内容

本文围绕如何实现高效获得优质氮化铝加工表面进行展开，其深层次原因是材料去除机理尚不明确，故通过分析材料微观切削过程，探索微观去除机理，进而指导宏观工艺优化分析，然后通过实验验证以达到研究目的。通过使用分子动力学仿真软件模拟单颗金刚石研磨单晶氮化铝的过程，得到微观研磨过程中氮化铝的热力学信息和研磨后微观形貌，进行分析氮化铝微观去除机理的研究，后再进行不同研磨深度和研磨速度对于氮化铝微观加工表面的影响，来探索加工工艺参数对于微观研磨质量以及去除机理的影响，针对于氮化铝发生弹塑性转变机制，结合纳米压痕试验来佐证仿真实验中得到的变形趋势。本文后为探究游离磨料研磨氮化铝的最佳工艺参数优化，主要采用正交试验法进一步研究游离磨料研磨工艺参数对研磨效果的影响，探索不同磨料种类和粒径大小对于氮化铝研磨效果的影响，以提高生产效率保证表面质量为实验目标导向，表面粗糙度达到电子封装要求为目标，通过试验得到最佳材料去除率的工艺参

数。

本论文主要工作内容从下面几个部分开展：

第1章，介绍氮化铝材料在智能时代的研究背景和应用领域以及氮化铝材料特点，氮化铝材料的去除机理研究进展、氮化铝材料主要加工方法研究进展及目前研究存在的问题和不足，叙述文章的主要研究内容。

第2章：介绍分子动力学仿真方法和后处理方法，并建立单颗金刚石磨料研磨氮化铝的仿真模型，设置仿真中的边界条件、原子间势函数等参数。

第3章：单颗金刚石磨料研磨氮化铝材料仿真分析。先从研磨过程中工件变化形貌、材料结构相变、温度变化、体系势能变化来分析金刚石研磨氮化铝材料的去除机理，后再分析在不同研磨深度和研磨速度下，对氮化铝研磨去除机理的影响，得到氮化铝变形趋势，通过不同载荷纳米压痕试验来佐证变形趋势可靠性，从而得出研磨参数对于氮化铝研磨的影响。

第4章：通过氮化铝纳米压痕试验，通过载荷位移曲线和蠕变位移和弹性回复率等角度研究氮化铝材料的变形机理过程，对氮化铝材料超精密加工提供理论依据。

第5章：基于游离研磨工艺参数实验结果分析，在进行试验前先进行单一试验，确定不同磨料种类的不同粒径的研磨时长。再通过正交试验法，进行游离磨料研磨工艺参数试验，分别探索研磨液流速、研磨盘转速、研磨压力三个因素进行试验数据分析，通过极差分析工艺参数对氮化铝表面质量的影响，探索不同磨料不同粒径下氮化铝最佳表面质量研磨工艺参数路线。

第6章：对本论文进行工作总结分析，提出了氮化铝材料未来加工研究方向。

第 2 章 氮化铝分子动力学仿真方法

2.1 引言

氮化铝材料是典型的脆硬材料，存在加工效率低，表面损伤多等问题有待解决，宏观上看，在研磨过程中，材料的去除方式主要是通过载荷使磨料压入基体然后通过相对运动形成刮擦和耕犁，最终使材料脱离基体表面。从微观层面上来看，材料去除可以被认为是分子或原子层受到挤压剪切作用超过键能大小从而发生断裂形成剥落^[41~42]，所以有必要从微观上进行研究。分子动力学已被证实能够揭示材料在纳米或亚纳米尺度上的变形和去除机理，通过模拟磨粒在不同加工参数下研磨氮化铝过程，通过分析能够探索氮化铝材料受力时材料微变形机制，为后续超精密加工工艺优化方案提供理论支撑。

2.2 分子动力学仿真方法

2.2.1 基本原理

分子动力学（Molecular dynamics）方法是一种物质在微观领域的重要模拟方法^[43~44]，其核心是利用材料粒子间的相互作用势，结合量子力学、统计物理学、通过牛顿运动方程将原子间的势函数和相对位置联系起来，选择合适的系综及温度控制方法进行迭代计算，从而得到原子的热力学信息。如图 2-1 所示整个模拟的过程主要有仿真模型体系的构建、势函数的选取、系综设置、边界条件和后处理分析等，整个系统遵循牛顿运动方程，随时间变化计算系统中每个原子的坐标信息。在获得力后根据牛顿运动方程计算从而输出热力学信息，在后处理软件上进一步分析。

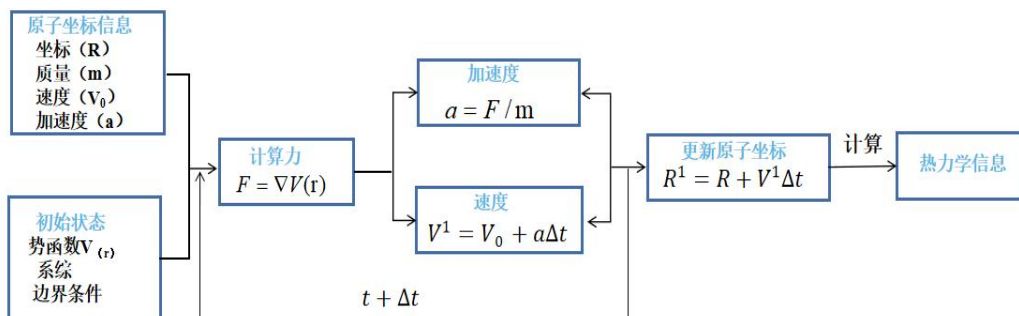


图 2-1 分子动力学仿真原理图

通过牛顿运动方程求解来确定原子的运动轨迹，如公式（2.1）和公式（2.2）所示：

$$a_i = \frac{F_i}{m_i} = \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (2.1)$$

$$F_i = -\frac{dV}{dr_i} \quad (2.2)$$

上述公式中，系统中由 N 个原子组成，其中某个原子为 i ， a_i 是加速度， m_i 是指原子的质量，而 F_i 则表示是体系中其他原子对原子 i 的合力，该合力是通过相互作用势一节求导得到的，具有统计学意义。

2.2.2 分子动力学系综选择

在 MD 中，需要根据仿真对象的实际情况选择合适的系综。系综是指在具体宏观条件下，结合实际对体系的温度、压强等变量环境进行设定，是对实际环境模拟的设置^[47]，又被称为统计系综。目前系综主要有以下分类：

（1）正则系综（NVT）

正则系综(canonical ensemble),简称为 NVT，在系统内具有确定的粒子数 N 、体积 V 以及温度 T ，体系与外界存在热量转换，但没有物质交换，这样的平衡体系称为封闭系统，多个封闭系统集合则是正则系综^[48-49]，该系综下体系总能量是不变的。

（2）微正则系综（NVE）

微正则系综(micro-canonical ensemble)，简称 NVE，体系里有确定粒子总数 N 、总体积 V 以及总能量 E ，系统在仿真过程中与外界既不发生能量交换，

也不存在粒子交换^[50]。体系的总能量不变，但是体系内部原子的动能和势能可相互转换，这样独立系统称为微正则系综。

（3）等温等压系综（NPT）

等温等压系综（constant-pressure, constant-temperature），简称 NPT，系统具有恒定粒子数 N 、压强 P 以及温度 T 。该系综下，系统与外部环境可以进行热量交换。该系综下的系统压力是通过压缩系统体积变化来维持平衡，通过压缩体积 V 来达到控制压力 P ，在仿真体系中可以设定原子速度或施加约束条件实现温度控制。

系综的选择是根据实际情况建立的仿真体系有关，仿真目的不同选择的系综也不同，如果体系不需要考虑与外界交换能量、控温，选择 NVE 系综即可，需要考虑控温、变形的体系，一般采用混合系综使用。

2.2.3 边界条件

在仿真中，仿真体系大小远远达不到实际尺寸大小，但所构建的仿真体系中的原子数目也非常大，对现有计算的计算能力要求过高，为了保证仿真接近实际情况，就必须保证体系里有足够多的原子参与计算，同时要解决计算机运算能力不足导致的问题，所以可以通过设置模拟的具体要求设置合理边界条件^[52]。边界条件又分为周期性边界条件和非周期性边界条件。

（1）周期性边界条件

周期性边界条件是根据材料本身晶体结构有周期性规律重复，将原始盒子单元在周期性方向上进行复制，来实现体系在边界上的扩大。在周期性条件下，体系的原始模拟盒子会按照周期性方向不断复制扩展，直到达到设置的边界条件为止，最终形成需要的晶格体系大小，其原理示意图如图 2-2 所示，通过计算原始盒子里的粒子的物理量，便可以得到整个体系的物理量，能够极大的减少计算量，节省时间成本。

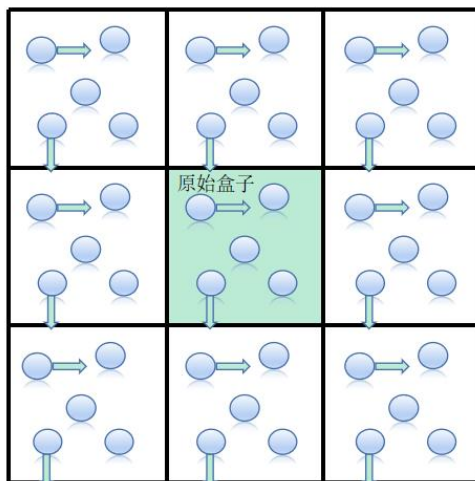


图 2-2 周期性边界条件原理示意图

(2) 非周期性边界条件

有些仿真体系材料本身具有独特的界面，这种情况下周期性边界条件不适用于该体系，针对于这种情况一般采用非周期性边界条件，非周期性边界又分为非周期性的固定边界条件和自由边界条件，其中非周期性固定边界条件，在模拟过程中会存在粒子穿越边界会从体系中丢失现象。非周期性自由边界条件会根据模拟中原子的实时位置来不断调整边界位置，使得原子始终处于模拟盒子中，不会出现体系丢失原子的现象。具体仿真体系的边界条件设置需要根据仿真对象的实际情况来设置，也可以采用组合边界条件。

2.2.4 原子间相互作用势

原子间相互作用势决定 MD 中原子之间的相互作用关系，是影响仿真结果准确性最重要的关键因素。目前应用于氮化铝（AlN）的几种原子间势函数主要有：SW 势^[53]、 Tersoff 势^[54]、Vashishta^[55]反应势函数、和 COMB₃ 势^[56]。由于 Vashishta 势函数能够很好的描述 AlN 的断裂拉伸滑移特性^[57]，所以本文选取 Vashishta 势函数来表达氮化铝原子间的相互作用，该势函数是由 Vashishta 等人提出，目前已经成功应用于半导体和陶瓷材料，基于 SW 势，该势结合排斥、屏蔽电荷偶极、屏蔽库仑，表达式如（2.3）和（2.4）所示，

$$V = \sum_{i < j} V_{ij}^{(2)}(r_{ij}) + \sum_{i, j < k} V_{jik}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}) \quad (2.3)$$

$$V_{ij}^{(2)}(r) = \frac{H_{ij}}{r^{\eta_{ij}}} + \frac{Z_i Z_j}{r} e^{-r/\lambda} - \frac{D_{ij}}{r^4} e^{-r/\xi} - \frac{W_{ij}}{r^6} \quad (2.4)$$

上述公式中包括两体项和三体项，在等式（2）中， H_{ij} 和 η_{ij} 是空间斥力的强度和位阻斥力， W_{ij} 和 D_{ij} 分别表示范德华引力和电荷偶极子的强度， Z_i 表示以电荷 $|e|$ 为单位的有效电荷。 ξ 和 λ 分别表示电荷偶极和库仑相互作用的屏蔽长度， $r=r_{ij}$ 表示原子 i 和 j 之间的距离。描述 N、Al 之间原子间的相互作用各详细参数如表 2-1 Vashishta 势函数参数表所示。

在氮化铝研磨仿真中，除 Al-N 两种原子间作用力要考虑，还要考虑磨粒与体系原之间的作用，磨粒为金刚石，金刚石磨粒和氮化铝工件之间的 C-Al、C-N 相互作用选取 Lenard-Jones(L-J)势函数来描述，其表达式如（2.5）所示：

$$E(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], r < r_c \quad (2.5)$$

等式（2.6）中 r 表示两个原子之间的距离， σ 是平衡距离， ε 是内聚能。截止半径 r_c 设置为 $10\text{\AA}$ 。C-Al、C-N 的 L-J 势函数参数具体通过参考文献^[58-59]获得。虽将金刚石刀具设置为刚体，但 LAMMPS 要求所有原子之间的相互作用都要描述，对于金刚石的 C-C 原子间的势函数设置为 SiC 的 Tersoff 势函数中的 C-C 相互作用力，其表达式为：

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V_{ij} \quad (2.6)$$

$$V_{ij} = f_C(r_{ij} + \delta) \left[f_R(r_{ij} + \delta) + b_{ij} f_A(r_{ij} + \delta) \right] \quad (2.7)$$

等式（2.6）、（2.7）中 V_{ij} 表示键能，指数 i 和 j 表示系统中的原子 i 和 j ， r_{ij} 是它们之间的距离； f_c 表示平滑截止函数，限制电位的范围； f_R 和 f_A 分别表示排斥势和吸引势； r_{ij} 包括限制位置范围的指标； b_{ij} 是衡量键序的指标。

表 2- 1 Vashishta 势函数参数表

		Z_i (e)	A (Å)	ζ (Å)	r_c (Å)	e (C)
Two-body	Al	1.0708	5.0	3.75	7.60	1.602×10^{-19}
	N	-1.0708				
		η_{ij}	H_{ij} (eV Å ⁿ)	D_{ij} (eV Å ⁴)	W_{ij} (eV Å ⁶)	
Two-body	Al-Al	7	507.668	0	0	
	Al-N	9	367.055	24.7978	34.58365	
	N-N	7	1038.16	49.595	0	
		B_{jik} (eV)	θ_{jik} (deg)	C_{jik}	γ (Å)	r_0 (Å)
Three-body	Al-N-Al	2.1536	109.47	20	1.0	2.60
	N-Al-N	2.1536	109.47	20	1.0	2.60

2.3 仿真软件及后处理方法

2.3.1 仿真相关软件

分子动力学仿真的一般流程主要有：建模、设置参数、结果处理分析。本文中运用到的软件主要有 LAMMPS 和 OVITO

(1) LAMMPS

LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) 是一款经典的开源分子动力学仿真软件^[60]，可通过修改源代码类控制仿真的运行过程。LAMMPS 能够模拟百万级原子仿真体系，支持多种势函数，既可以在单核串联运行，也可以同时调用多核处理器并行计算，从而减少模拟时间。本文中仿真模块所采用的分子动力学仿真均采用 LAMMPS 软件运行。

(2) OVITO

OVITO (Open Visualization Tool) 是一款能够将分子动力学仿真结果可视化处理的软件^[61]，能够直观分析了解物质的现象和加工过程。本文仿真结果后续相关分析采用该软件进行果后处理分析。

2.3.2 仿真结果处理和分析方法

由于 LAMMPS 整个运行过程不是可视化，所以输出的结果需要进行后处理，使之可视化，尤其是晶体结构的变化。目前能够识别晶体结构的方法有：中心对称性参数（Centro Symmetry Parameter, CSP）、径向分布函数（Radial Distribution Function, RDF）、识别金刚石结构（Identify diamond structure, IDS）等。在本文中主要采用 RDF 和 IDS 来识别晶体结构的变化。

2.4 氮化铝分子动力学模型构建

2.4.1 氮化铝微观研磨分子动力学模型构建

由于难以构建与实际情况相同的仿真体系模型大小，仿真结果与实际情况会存在一定的偏差。根据金刚石和氮化铝的实际晶格情况，本文建立如图 2-3 所示的金刚石磨粒研磨氮化铝的分子动力学仿真模型。AlN(0001)工件尺寸为 $250 \times 60 \times 150 \text{ \AA}$ （晶格常数分别为 $a=0.3110 \text{ nm}$, $c=0.4981 \text{ nm}$ ），x、y 和 z 轴分别沿[1-210]和[0001]晶体方向^[27]。工件分为边界层、恒温层以及牛顿层三个区域，其中边界层作用是研磨过程固定以及支撑整个体系稳定，防止体系刚性移动；恒温层作用是保证刀具研磨过程产生的摩擦热量能及时消散，模拟温度设置为 293K，通过 temp/rescale 速度标定法控制恒温层温度；牛顿层是研磨过程中材料去除和发生相变的区域。假设金刚石刀具为球状颗粒，刀具半径大小 $r=20 \text{ \AA}$ ，由于金刚石的硬度大于单晶氮化铝的硬度，刀具的磨损可忽略不计，为了便于计算加快模拟速度将刀具设置为刚体。

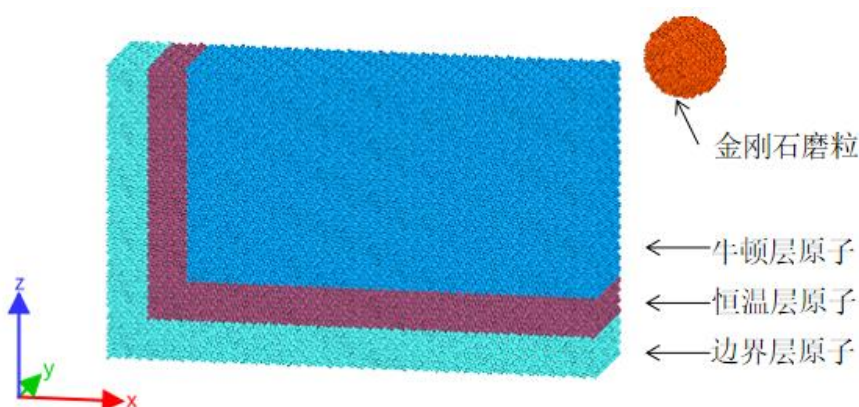


图 2-3 金刚石研磨氮化铝的分子动力学仿真三维模型图

提高仿真结果的可信度，应尽量保证模型的尺寸接近实际工件尺寸，但由于 MD 实际仿真的计算能力，仿真模型与实际尺寸有较大差距，为减小体系尺寸边界效应对仿真结果的影响，选择将 x 和 z 方向的边界条件设置为自由边界（s）条件，y 轴方向采用周期性边界(p)来减小模型尺寸对仿真结果的影响，仿真时间步长根据相关研究参考文献设置为 1fs^[62]。金刚石刀具沿[1-210]方向移动，刀具的移动速度设定为 100m/s，研磨前先进行充分弛豫，消除初始模型不合理、原子间距过近、体系能量过高等问题，使体系达到稳定状态。对于恒温层和牛顿层在正则（NVT）系综中弛豫 30ps 后，使模型中的原子间势能能达到稳定状态，运动层达到所设置的温度，后续驱使金刚石磨粒以恒定速度 100m/s 沿[1-210]方向滑动，研磨至边界层模拟结束，刀具研磨过程中，使用微正则（NVE）系统和 NVT 系综混合控温来完成仿真，分子动力学三维仿真基本参数如表 2-2 所示。

表 2-2 分子动力学三维仿真基本参数表

仿真参数	工件	刀具
模型尺寸	250×60×150Å	R=20Å
原子数目	182400	5887
磨粒研磨速度	100m/s	
体系温度	300K	
时间步长	1fs	
势函数	Vashishta	Tersoff

2.5 本章小结

本章主要介绍氮化铝分子动力学仿真的原理和仿真参数设置。首先介绍了分子动力学的基本原理，说明了分子动力学仿真的过程中需要设置的仿真参数：统计系综、边界条件、原子间相互作用势，并对本文所采用的分子动力学参数进行交代，由于分子动力学不具有可视化过程，需要进行后处理，介绍了仿真软件和后处理方法，并且对仿真参数进行了设计。

第3章 氮化铝微观研磨材料去除分析

3.1 引言

氮化铝材料具有优良的性能被视为新一代最理想的电子封装材料，以氮化铝材料作为电子封装材料已经在航空、船舶及特殊车辆诸多领域得到应用，目前其成本一直高居不下，由于加工机理尚不够明确，临界加工深度不够清楚以及目前生产工艺不够完善等因素导致。为探索氮化铝的微观去除机理，从微观角度分析不同工艺参数下材料表面质量的影响。本章采用分子动力学仿真方法，模拟单颗金刚石磨粒研磨氮化铝材料的过程，借助后处理软件分析研究氮化铝材料在去除过程中的变化机理和表面形貌，通过分析不同工艺参数下应力和相变分析磨削力、系统势能和平均温度分析变化判断加工结果的好坏，再结合纳米压痕试验验证氮化铝受力变形机理。

3.2 微观研磨过程分析

3.2.1 系统势能分析

图 3-1 是金刚石磨粒研磨氮化铝工件的系统势能随时间的变化过程，整体趋势为先快速上升，后会保持一个上下波动状态。体系再经过充分弛豫和能量最小化过程后，整个仿真体系达到平衡状态，此时的系统势能为-825341eV，后随着仿真步数的进行，金刚石磨粒从刚接触氮化铝原子，到彻底压入的过程，由于氮化铝原子受到金刚石磨料的挤压作用，原子晶格发生形变，产生位错，直至原子间的共价键断裂，原子破坏产生的能量会以晶格变形能的形式存在晶格中，所以约在六万步前，系统势能快速上升。在后续金刚石研磨过程中，由于氮化铝原子的晶格变形重组和弹性恢复，会导致体系能量存在上下波动，处于动态平衡作用，系统势能主要在-812963eV 附近波动，除了晶格变形重组的原因，研磨后脱离工件体系的氮化铝原子也会导致能量的波动。随金刚石研磨过程的进行系统势能主要先经历快速上升阶段后由于晶格变形重组、非晶态原子的相变以及晶格回弹等因素，使系统势能处于动态平衡状态。

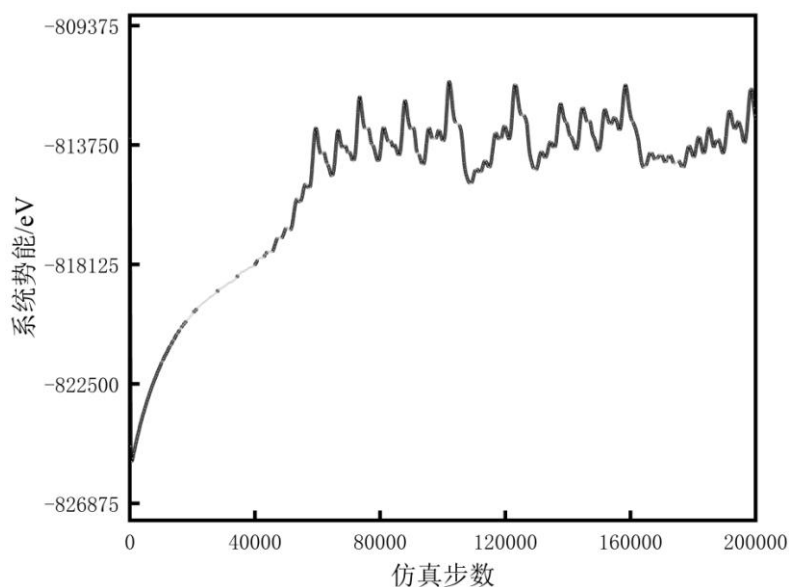


图 3-1 研磨过程系统势能变化图

3.2.2 工件温度分析

体系温度变化也是研磨过程中的重要现象，在实际加工中，刀具和工件之间摩擦挤压会导致局部温度过高，工件表面容易产生表面烧伤，影响表面质量。研磨温度是指在研磨过程中牛顿层中的体系平均温度，研磨过程中温度的变化不仅直接影响加工过程和工件的使用寿命，以及加工后的表面质量和精度。因此研磨过程中的温度变化是研究加工材料表面微观去除机理的重要方面^[66]。如图 3-2 所示为研磨过程中工件平均温度随研磨过程的变化情况，随着磨粒不断接近工件原子，温度曲线整体趋势为先逐渐增大，随着刀具完全接触后，趋势开始平稳，温度趋势逐渐稳定。由于磨粒对工件原子的挤压和剪切作用，产生的能量，有一部分会转化为动能，随着研磨的进行，工件原子动能不断增加，表现出体系温度的不断升高。研磨过程中，刀具的摩擦也会释放出一部分能量，转化为热能，导致温度升高。其主要变化趋势与系统势能一致，在后期金刚石磨粒完全压入后，温度的上下波动程度要大于系统势能，是由于研磨过程中，磨屑原子会带走大量的热量，导致波动剧烈。

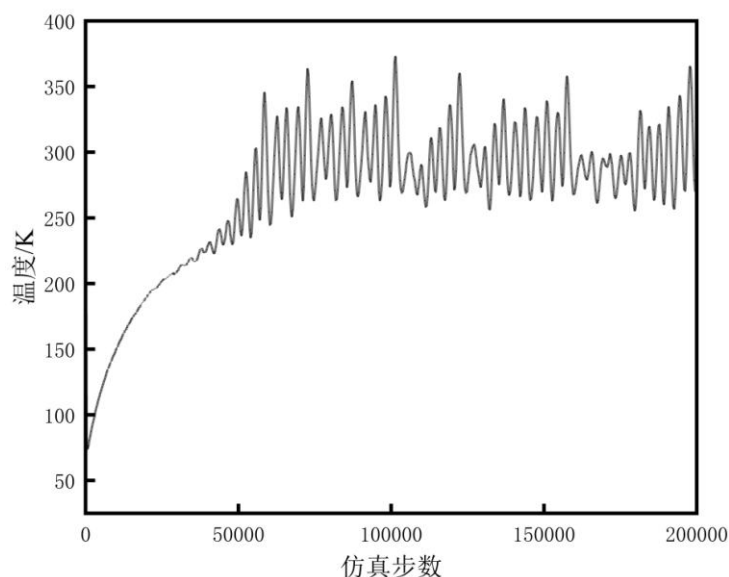
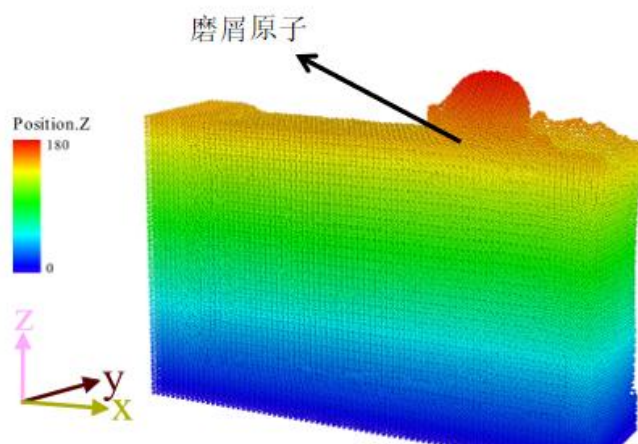


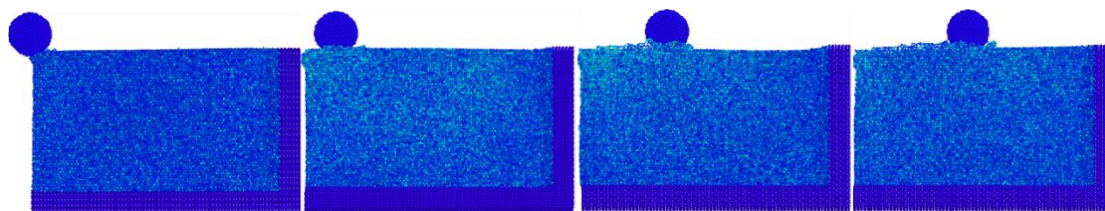
图 3-2 研磨过程工件温度变化情况图

3.2.3 研磨过程微观形貌分析

氮化铝工件表面材料的去除过程中，由于金刚石磨粒的进给运动，容易导致磨粒前端产生较大体积的去除材料堆积，形成磨屑。图 3-3（a）为金刚石磨粒研磨氮化铝微观形貌图，其中褐色区域是氮化铝工件材料去除区以及研磨过后产生的碎屑和沟槽两侧的脊。图 3-3（b）为不同仿真步数下研磨过程图，仿真时间步数分别为 40000、60000、80000、120000，可以发现随研磨的进行，产生的碎屑和脊增多，磨粒前方塑性变形区域体积也在变大，磨屑原子的堆积，工件体积受到的机械挤压作用增加使体系发生一定程度的膨胀变形，说明加工表面塑性变形损伤变多，表面加工质量受到影响。



(a) 金刚石研磨氮化铝微观示意图



(b) 氮化铝材料去除分布图

图 3-3 仿真体系研磨微观形貌图

3.3 研磨深度对氮化铝材料去除过程的影响

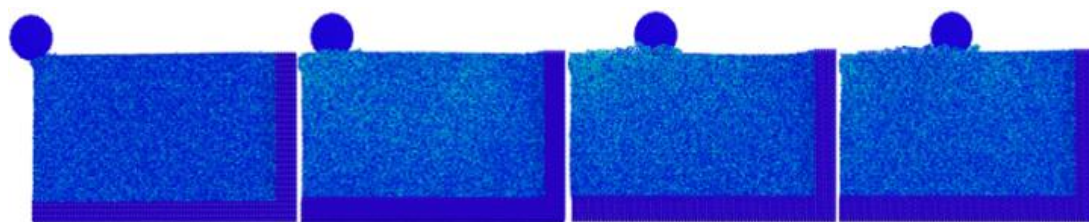
研磨深度是指磨粒压入工件时，已被加工表面与未被加工表面之间的垂直距离，主要通过改变仿真体系中金刚石磨粒的位置坐标来实现不同研磨深度下的仿真。磨粒的研磨深度直接决定与工件材料的接触量，是决定加工后表面质量的主要因素之一，故进行不同研磨深度条件下，磨粒研磨氮化铝材料仿真试验，探索在不同研磨深度下氮化铝材料去除时的微观变形机理，从微观研磨形貌、应力、结构相变以及磨削力等角度进行详细分析。表 3-1 是不同研磨深度下主要仿真参数表。

表 3-1 不同研磨深度对应的仿真体系参数表

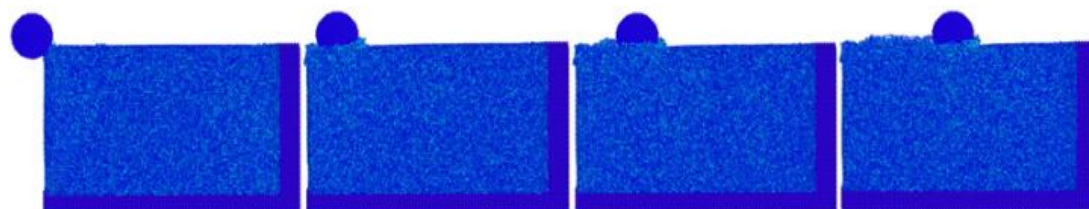
	工件	磨粒
模型尺寸	250×60×150Å	R=20Å
原子数目	182400	5887
研磨速度	100 m/s	
研磨深度	5Å ; 10Å; 15Å	
体系温度	300K	
时间步长	1fs	

3.3.1 研磨表面形貌分析

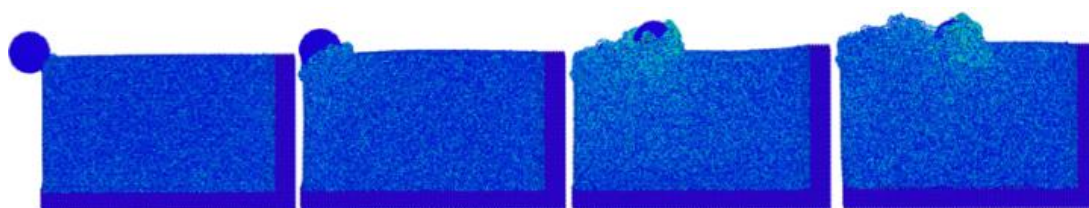
图 3-4 为不同研磨深度仿真过程图，研磨时间步数分别为 40000、60000、80000、120000，可以发现随研磨深度的增加，产生的碎屑和脊增多，刀具前方塑性变形区域体积也在变大。刀具与工件加工表面接触面积的增大会使材料去除面积增多，工件体积受到的机械挤压作用增加使体系发生一定程度的膨胀变形，说明加工表面塑性变形损伤变多，表面加工质量受到影响。



(a) 研磨深度 5Å时的不同步数的材料去除图



(b) 研磨深度 10Å时的不同步数的材料去除图



(c) 研磨深度 15Å时的不同步数的材料去除图

图 3-4 不同研磨深度下的氮化铝材料去除分布图

图 3-5 为不同研磨深度的氮化铝磨削原子位置示意图。为便于观察示意图由主视角和俯视角组成，可以发现，随研磨深度增加，刀具与工件的接触面积增大。氮化铝原子受到金刚石刀具挤压，发生剪切形变，随着刀具运动受到剪切力作用发生变形的原子随着刀具流动，在刀具两侧堆积形成沟槽。如图 3-5 (a) 所示研磨深度较小时，发现部分氮化铝表面原子未能够去除，去除原子数为 1267，工件表面材料去除率低。图 3-5 (b) 所示，磨削原子分布较平整，能够保证研磨过程平稳进行，去除原子数为 2608，加工后表面更为平整。如果研磨深度过大，如图 3-5 (c) 所示，磨削原子堆积过多，去除原子数为 3899，去除率高但刀具受到的摩擦阻力急剧增大，产生过多热量，刀具和加工表面容易受到损伤，加工表面的平整度也受影响。在超精密加工中，选择合适的研磨深度对于加工表面质量影响非常重要。

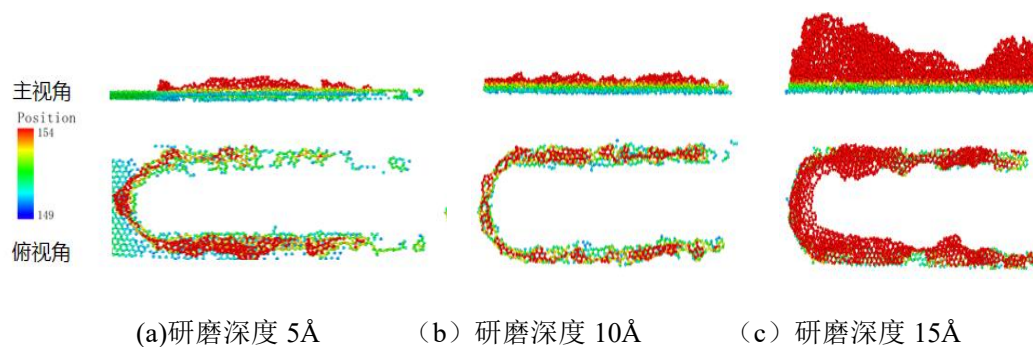


图 3-5 不同研磨深度形成的磨削原子图

3.3.2 应力和相变分析

应力变化是影响材料去除方式重要因素，LAMMPS 定义了一种计算方法，用于计算组中每一个原子单元做应力张量，按照六个分量 (p_{xx} p_{yy} p_{zz} p_{xy} p_{xz} p_{yz}) 进行存储计算得到应力值，这种应力计算方法是根据量子力学中的 Virial 定理^[67]，计算得到的应力结果与宏观应力是一致的。研磨方向上的工件应力为分量 p_{xx} 的变化趋势。如图 3-6 所示，最初体系的应力大小在 59684Pa 上下波动，随时间步进行，刀具以恒定速度接近氮化铝工件，在 6 万步前，整个体系应力急剧增大，随着研磨过程的进行，后在 76256Pa 上下波动，红色曲线代表研磨深度为 5Å，黑色代表研磨深度 10Å，蓝色为研磨深度 15Å。由于磨削原子堆积和表面材料去除量大小的原因，研磨深度为 5Å 和 15Å 体系在研磨方向上的应力变化更剧烈，合适的研磨深度能够保证研磨过程中体系应力变化稳定，利于工件表面研磨均匀，获得良好的加工表面。

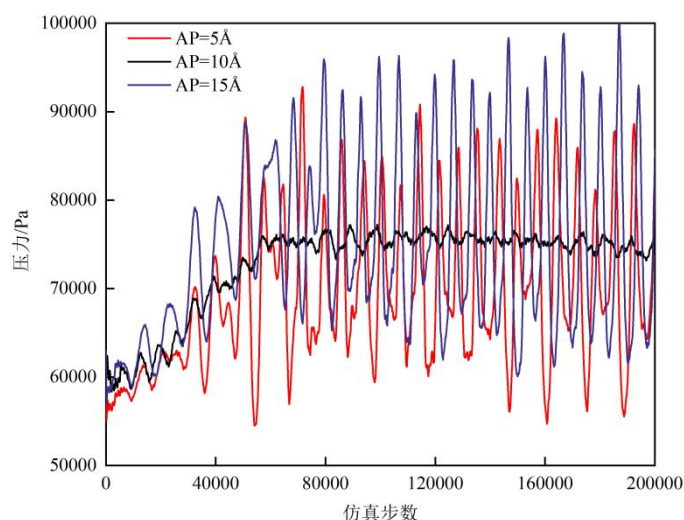


图 3-6 不同研磨深度的应力曲线示意图

研磨过程中工件体系应力变化大，会导致体系模拟过程中发生一定程度的变形膨胀。体系中原子受到挤压作用，不同区域压力大小不同，图 3-7 为工件研磨过程的应力分布图。原子按照应力大小进行着色处理，其中正值代表压应力，负值代表拉应力。可以发现在刀具前下方，由于刀具的推挤形成了高压应力区，此处磨削原子堆积成为压力最大区域，氮化铝晶格被压应力彻底破坏。拉应力是由刀具的后端面与工件摩擦造成，主要集中在刀具划过的工件表面。研磨深度的增加，会导致拉压应力区域增大，氮化铝原子受到的垂直挤压比例增多。表面拉应力的增大，容易使表面加工质量变差，控制好研磨深度，减少拉压应力的分布会利于提高材料的去除率和表面质量。

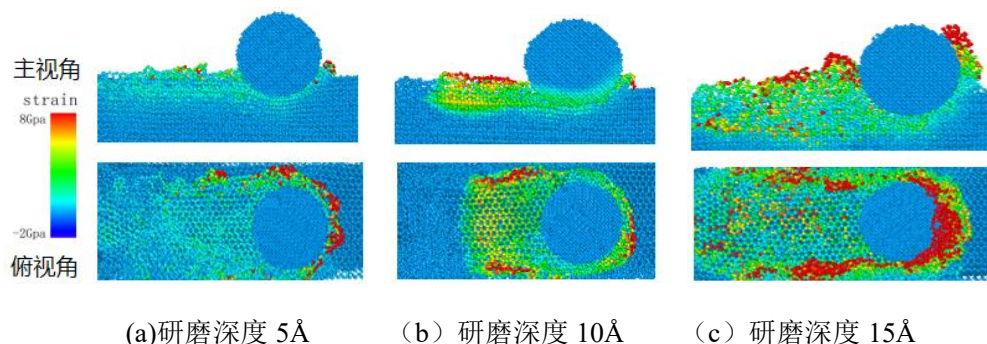


图 3-7 不同研磨深度下磨粒下方区域应力图

相变主要通过 OVITO 软件的共近邻原子分析和识别金刚石结构 (Identify diamond structure, IDS) 功能分析氮化铝的晶格变化情况。在纳米磨损研究中径向分布函数 (RDF) 被用于测量结构相变是否发生^[68]，如图 3-8 所示，选取时间步 20 万步研磨完成后的工件体系，对比氮化铝工件研磨前后的 RDF，红色曲线为初始状态下，黑色曲线为研磨结束后，研磨后的 AlN 工件中的 Al-N 原子的最近邻距离减小，说明研磨后从平衡稳定晶格变化为非晶态不稳定结构，目前研究人员通过实验已经观察到 AlN 的 B4-B1 相变和非晶化^[30]，但具体转变机制尚不明晰。

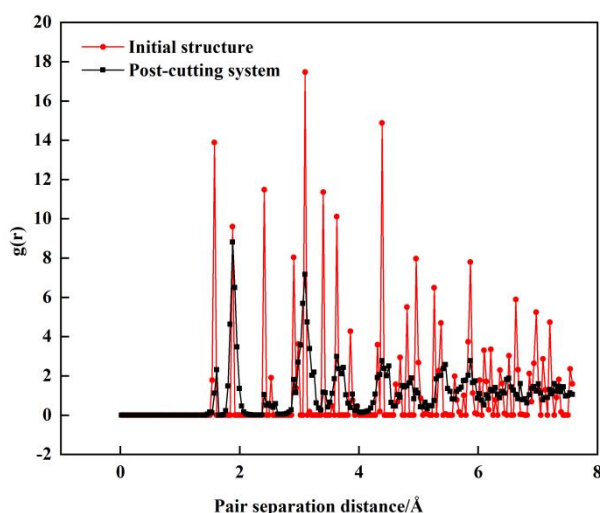
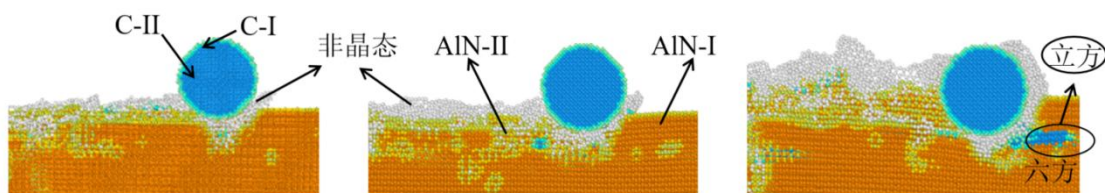


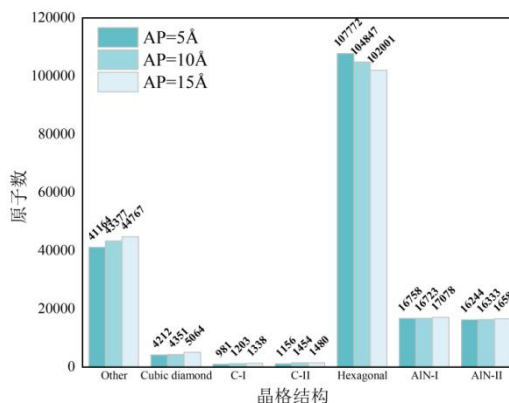
图 3-8 氮化铝纳米研磨前后 RDF 图

IDS 功能常用来识别立方金刚石和六方晶格中排列的原子，本文考虑第二近邻区分六方和立方晶体结构，来区分识别层错和位错^[69]。为了清楚的显示局部缺陷区域，体系晶格结构用颜色区分，相变后的各晶格原子分数，如图 3-9 所示，（a）图中采用模拟进行 17 万步时的体系情况，白色代表磨削原子和边界层，刀具为立方金刚石结构用蓝色表示，两种不同程度的蓝色为立方金刚石晶格结构第一近邻（C-I）和第二近邻（C-II），橙色为六方晶格结构，六方结构晶格第一近邻（AlN-I）用黄色表示，六方结构晶格第二近邻（AlN-II）用淡黄色表示。（b）图中分别展示了不同研磨深度下的相变后各晶格数目，发现非晶态的数目随研磨深度增多，刚体刀具数目几乎保持不变，氮化铝六方晶格数目随研磨深度增加减少，AlN-I 相和 AlN-II 相数也增加但较少，研磨深度越深转变为非晶态数目越多，其中氮化铝六方晶格原子研磨去除后多数成为非晶态，少数基体区域发生相变。在高压相变区域也有少数 AlN-II 相会变为立方金刚石结构，加工区域周边的原子由于受到较大作用力，导致原子从本来的氮化铝六方结构变为金刚石结构和金属相结构，最终会形成磨削原子非晶态结构。从图中发现随着研磨深度的增大，亚表面损失厚度加深，氮化铝初始结构转变为其他结构增多。在研磨过程中，刚开始时材料变形机制主要为弹性变形，刀具下方的高压相变区和和位错成核并没有形成，仿真工件体积基本未变化，随着研磨时长的增加，进入到塑性变形阶段，氮化铝晶体结构发生相变，非晶态的原子数目增加。通过研究相变可以研究在加工过程中弹塑性转变阶段

发生情况，分析出加工材料的去除演变过程。



(a) 不同研磨深度下的 IDS 晶格结构图

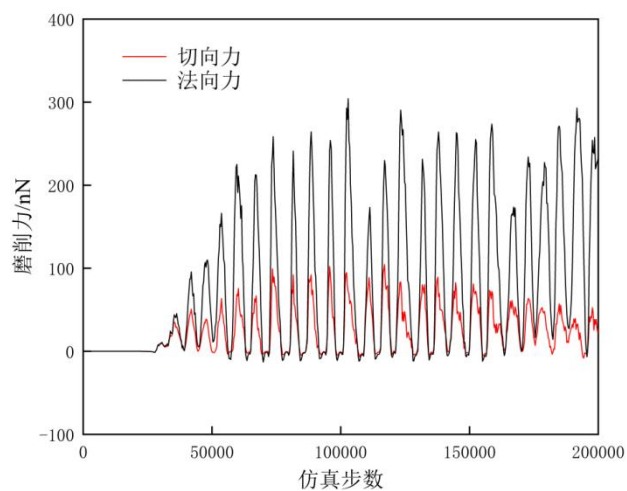


(b) 相变后不同晶格原子数目

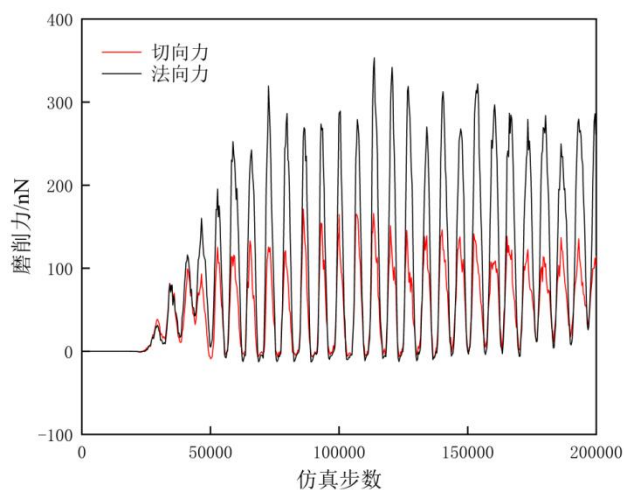
图 3-9 氮化铝不同研磨深度下的 IDS 结构变化图

3.3.3 磨削力、系统势能和平均温度分析

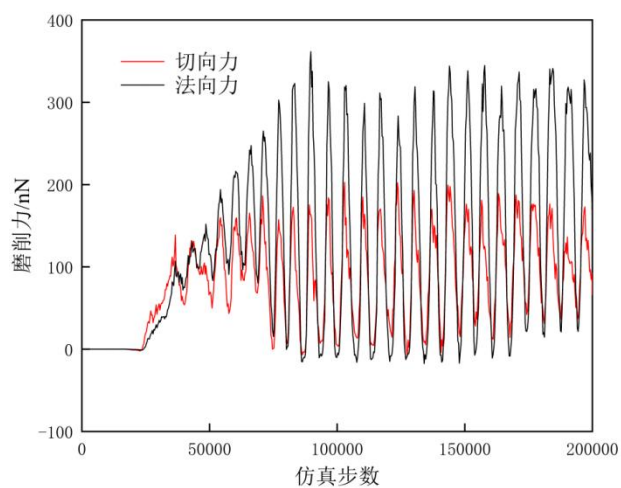
在单晶氮化铝研磨过程中，由于材料原子与磨粒原子之间的相互作用，会产生磨削力。在模拟过程中，通过输出不同时刻原子的位置信息，再进行每一时刻的位移标定，输出刀具原子与工件原子间的作用力，从而得到单晶氮化铝研磨过程中不同研磨深度下的切向力和法向力随研磨过程的变化曲线。如图 3-10 所示，模拟初始阶段，刀具与工件原子并未接触，切向力和法向力初始值为 0，随着刀具与工件原子接触后，切向力和法向力逐渐增大，刀具与工件原子完全接触后，磨削力大小约在某一值上下波动。力的波动与晶格的变形、重组以及非晶相变密切相关，当磨削力超过氮化铝原子之间作用力临界值时，原子间共价键被破坏，氮铝原子成为非晶态，会导致磨削力减小。随着刀具前进，新的工件原子重新被破坏，磨削力增大，这种变化会在磨削运动过程中不断重复，所以磨削力呈现出波动状态。此外，刀具前端材料挤压会沿运动方向形成滑移剪切，研磨脱离工件表面，这方向的力与磨削力方向相反从而抵消部分磨削力，也会造成磨削力的上下波动。



(a) 研磨深度为 5Å 时的切向力和法向力变化



(b) 研磨深度为 10Å 时的切向力和法向力变化



(c) 研磨深度为 15Å 时的切向力和法向力变化

图 3- 10 不同研磨深度下的磨削力变化曲线图

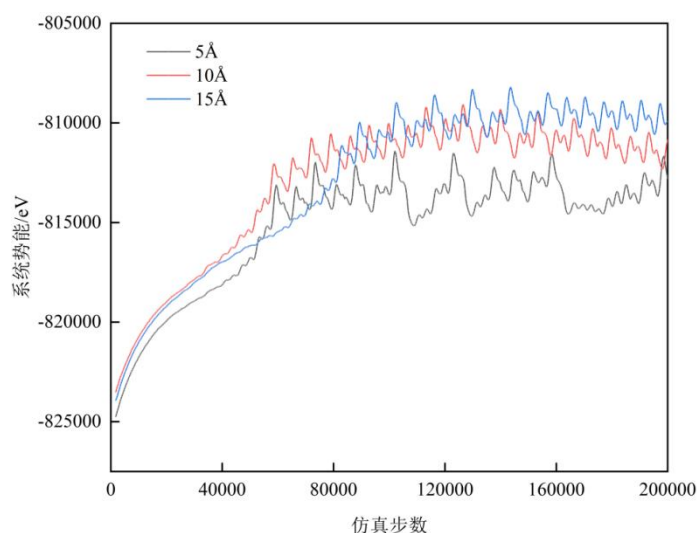
在纳米研磨过程中，不同研磨深度对于研磨后表面形貌和工件加工缺陷有

显著影响，平均研磨力的计算选取研磨过程 8 万步到 15 万步之间研磨力平均值，研磨速度为 100m/s 时，研磨深度为 5Å、10Å、15Å 对应的平均研磨力如表 3-2 所示，研磨深度增加，刀具与工件原子的接触面积增大，晶格破碎变形也增多，研磨力越大。

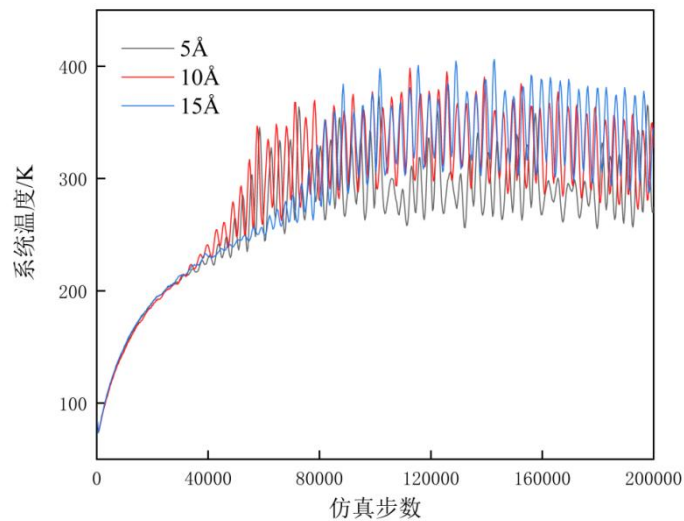
表 3-2 不同研磨深下的平均研磨力

研磨深度(Å)	5	10	15
平均切向力(nN)	104.42	171.18	202.59
平均法向力(nN)	304.11	368.32	376.2

金刚石刀具研磨氮化铝过程，存在体系能量变化符合实际情况不同研磨深度（5Å、10Å、15Å）系统势能随研磨过程的变化情况如图 10（a）所示。随研磨进行，系统势能变化趋势为先随之增大，后约在-810837eV 附近波动。研磨过程中，刀具的剪切和挤压作用产生的能量以及晶格应变能会贮存在单晶氮化铝的晶格中。随研磨过程变化，氮化铝原子间的势能会不断增加。材料原子晶格变形重组、转换为非晶态和非静态扩展是导致原子间势能的波动的主要原因，研磨后期波动相对较小，说明研磨过程处于平稳状态



（a）系统势能变化图



(b) 系统温度变化图

图 3-11 不同研磨深度下势能和平均温度的变化曲线图

系统温度是整个体系包括边界层的整体温度，因仿真开始时未对边界层进行温度设置，整体温度并不是以 293K 为起点，系统变化趋势如图 10（b）所示。随着刀具不断接近工件原子，温度曲线整体趋势为先逐渐增大，随着刀具完全接触后，趋势开始平稳，温度趋势逐渐稳定。由于刀具对工件原子的挤压和剪切作用，产生的能量，有一部分会转化为动能，随着研磨的进行，工件原子动能不断增加，表现出体系温度的不断升高。研磨过程中，刀具的摩擦也会释放出一部分能量，转化为热能，导致温度升高。在运行至 16 万步后，体系温度有降低趋势后处于上下波动，是由于后期产生的磨屑原子会带走部分热量。随着研磨深度增加，可以发现刀具接触的面积增多。材料的去除方式由弹性加工往塑性、脆性转变，晶格变形和非晶态数量也会增加，产生更多的能量变化。研磨过程中，已加工的工件表面会发生部分区域弹性恢复和晶格重组，能降低体系能量的转换，减小势能和温度的增加速率。

3.4 不同研磨速度对氮化铝材料去除过程的影响

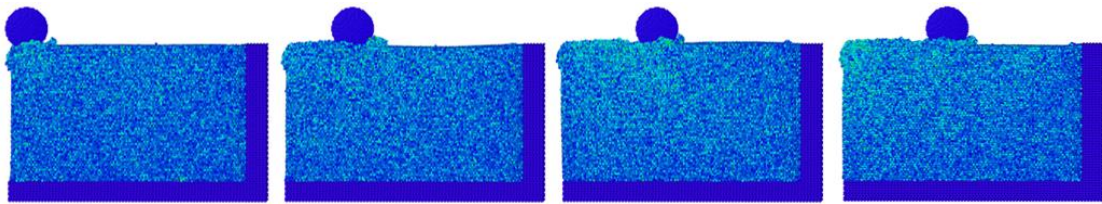
研磨速度是指磨粒在工件材料表面的进给速度，与研究研磨深度类似。根据实际加工速度，将磨粒的研磨速度区间设置为：50m/s、100m/s、150m/s，通过分析三种情况下的结果，来研究研磨速度对氮化铝材料去除的影响。表 3-3 为主要不同研磨速度下的仿真体系参数。

表 3- 3 不同研磨速度下的仿真体系参数

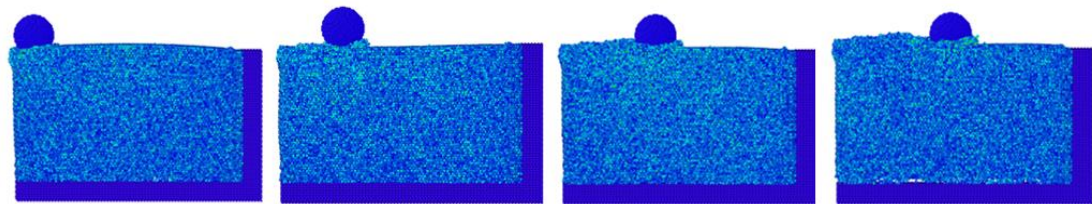
	工件	磨粒
模型尺寸	250×60×150Å	R=20Å
原子数目	182400	5887
研磨深度	10Å	
研磨速度	50m/s、100m/s、150m/s	
体系温度	300K	
时间步长	1fs	

3.4.1 研磨表面形貌分析

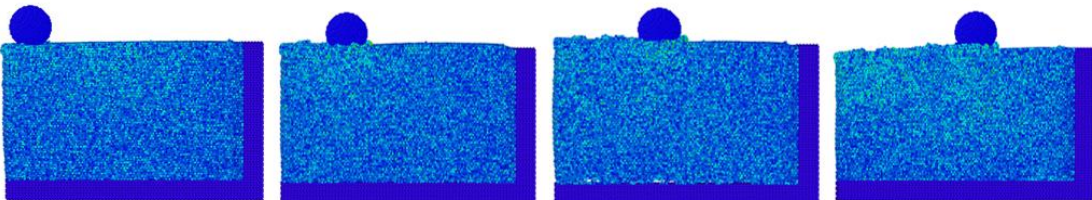
通过图 3-12 可以发现工件原子在被加工过程中原子变形情况，随磨粒研磨速度增加，工件体系变形膨胀程度也不同，速度越高体系原子间的应力变化越大，明显可以发现研磨速度为 150m/s 时，体系研磨过程中变形最显著，磨粒前方的碎屑和两侧的脊增多，说明塑性变形区域增加，材料表面容易产生损伤。



(a) 研磨速度为 50m/s 时的不同步数的材料去除图



(b) 研磨速度为 100m/s 时的不同步数的材料去除图



(c) 研磨速度为 150m/s 时的不同步数的材料去除图

图 3- 12 不同研磨深度下的氮化铝材料去除分布图

由于研磨速度不同，相同仿真步数情况下磨粒进给的位移不同，如图 3-13 所示，不同速度下形成的磨削原子情况，研磨速度为 50m/s、100m/s、150m/s 对应的去除原子数量分别为 3575、3599、3609。可知氮化铝材料的去除受研磨速度影响不大，但进给速度增大会导致体系变形情况严重，加工后的平整度会受影响，尤其在高速变形更严重，且对刀具损伤大。

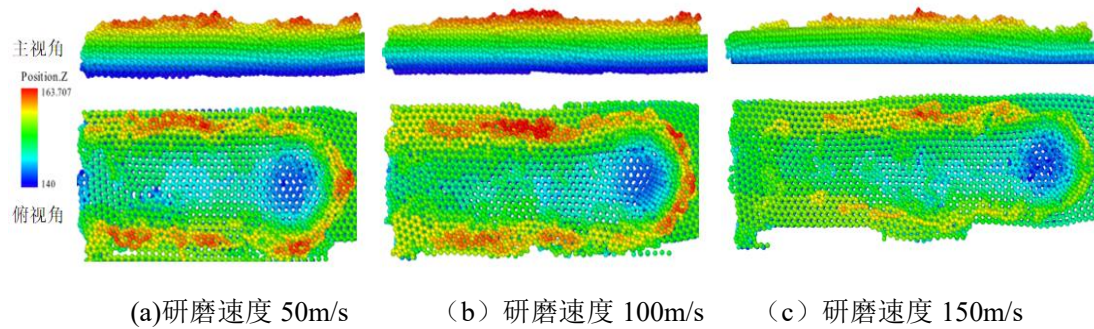


图 3-13 不同研磨速度形成的磨削原子图

3.4.2 应力和相变分析

分析方法与研磨深度仿真一致，由图 3-14 可以发现与研磨深度情况不同，由于加工时间不同，压力变化情况整体呈现上线波动情况，但一直在正负区间上下波动，最大应力为 22335Pa、最小应力为-19063Pa。由于磨粒切入材料的深度一样即与加工材料的接触量一直，被破坏的晶格数量接近，整体变化趋势一致。结合图 3-15 磨粒研磨过程中的应力云图，在不同的研磨速度下拉压应力相变区域分布与研磨深度下不同，在磨粒划擦过后，工件表面会形成槽，根据图可以发现磨粒行进后方为拉应力集中区域，此区域容易形成亚表面损伤，随速度的增加，磨粒后方拉压应力区域增大，在实际加工中容易在此区域形成损伤，影响表面加工质量，研磨速度为 50m/s 时，拉压面积区域最小。

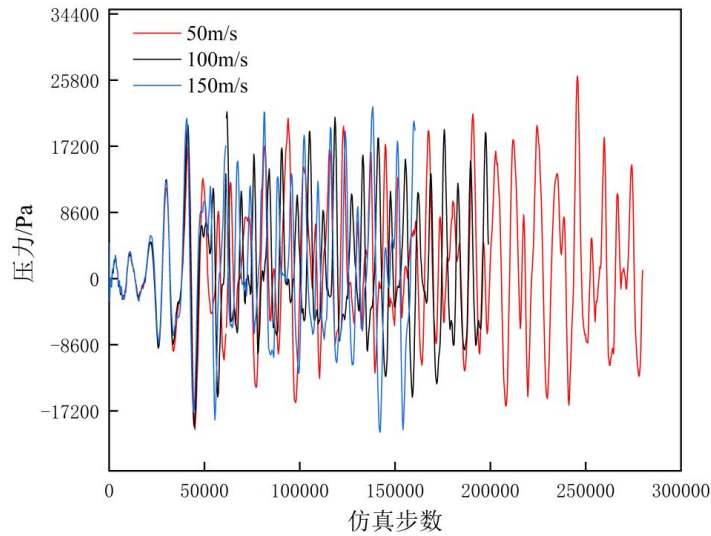


图 3- 14 不同研磨速度的应力曲线示意图

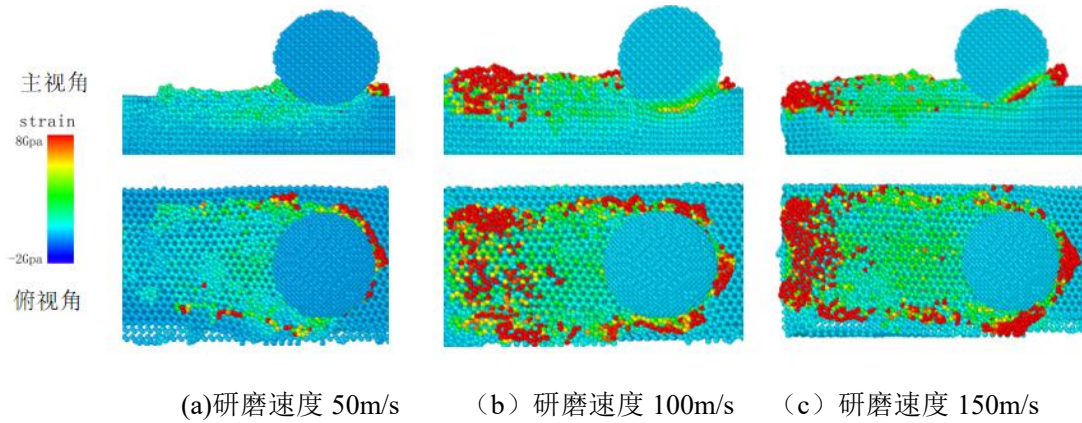
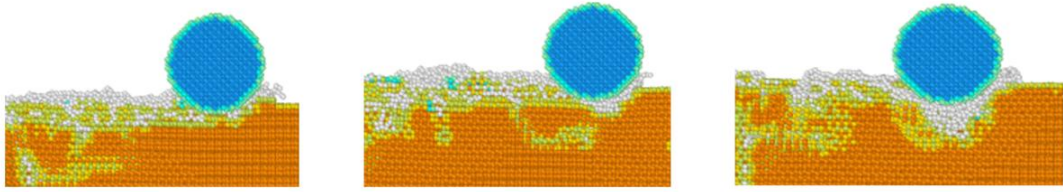
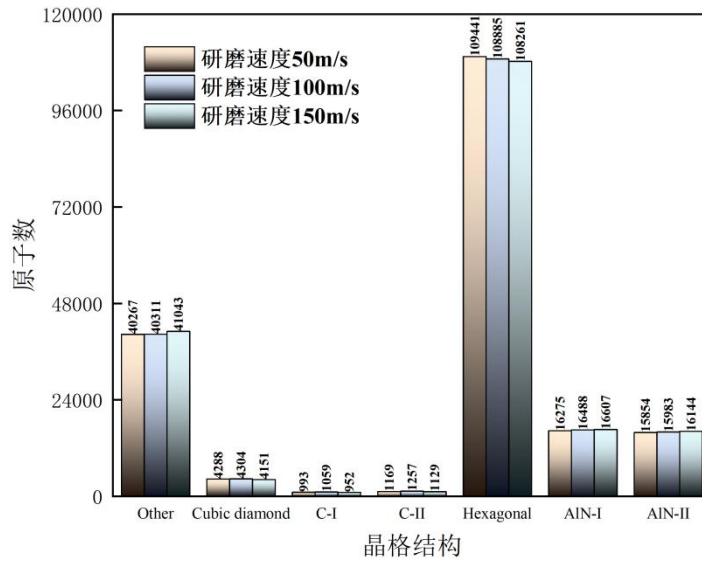


图 3- 15 不同研磨速度磨粒下方区域应力图

体系晶格结构颜色区分研磨深度分析中详细解释过，如图 3-16 (a) 所示采取仿真步数为 15 万步数时体系情况，其中白色原子主要为非晶态原子，是体系发生相变后产生。(b) 图中展示了不同研磨速度相变后各晶格数目，发现非晶态的数目随研磨增多，与研磨深度相比，发生相变原子数少。随速度增加磨粒正下方的非晶态原子数增多，工件体系在加工中存在少数六方原子受挤压作用，晶格发生变形重组，使氮化铝六方结构转变为金刚石结构和金属相结构，磨粒正下方的受力最大，最终形成非晶态原子。从表面损伤厚度来看，研磨速度的影响不大，损伤厚度未随速度增加增厚，说明影响损伤层厚度主要因素为研磨深度。



(a)不同研磨速度下的 IDS 晶格结构图

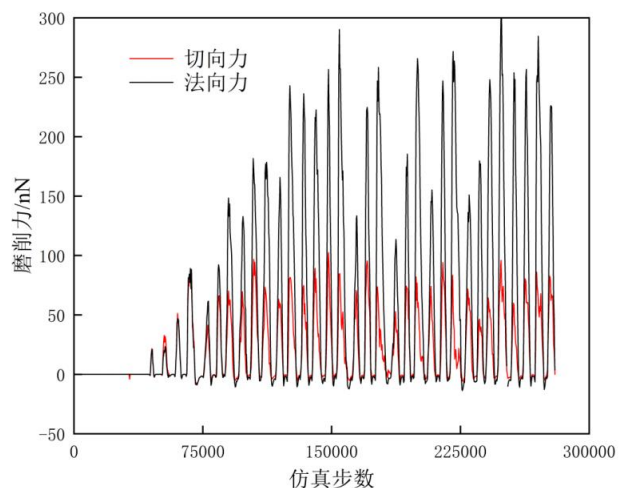


(b)相变后不同晶格原子数目

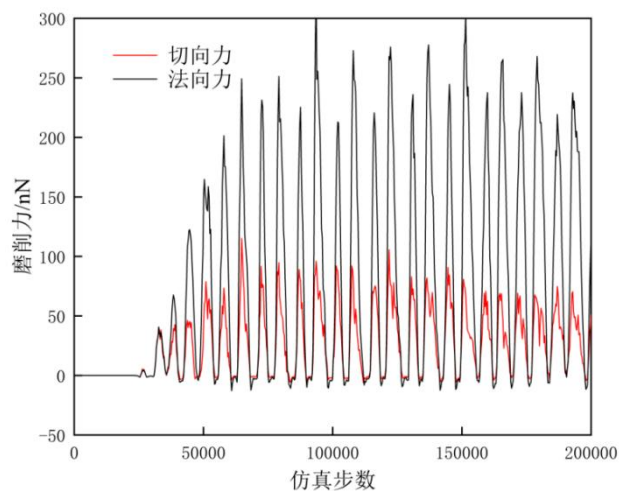
图 3-16 氮化铝不同研磨深度下的 IDS 结构变化图

3.4.3 磨削力、系统势能和平均温度分析

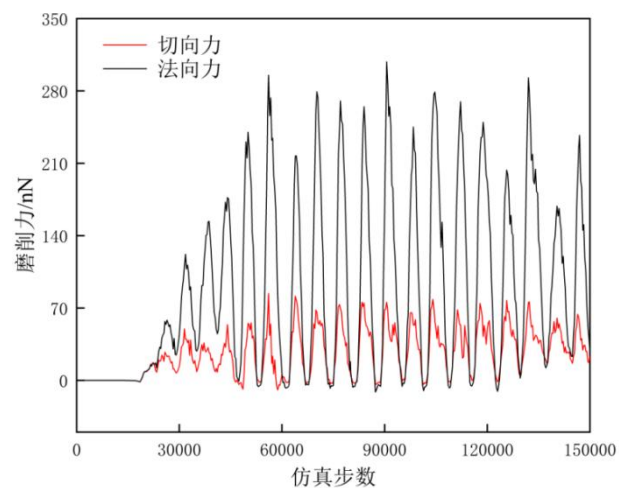
图 3-17 为不同研磨速度下磨削力的变化情况，速度不同完成仿真所需要的时间步数不同，整个研磨过程中，随磨粒进给，磨削力先增大后呈现波动状态，是由于工件体系中共价键断裂和位错滑移导致^[30]。速度越大波动程度更剧烈，因研磨速度的增大，工件材料原子与刀具相互作用时间变少，在单位时间内，受到刀具作用的工件原子增多，原子间共价键断裂更多^[31-32]。



(a) 研磨速度为 50m/s 时的切向力和法向力变化



(b) 研磨速度为 100m/s 时的切向力和法向力变化



(c) 研磨速度为 150m/s 时的切向力和法向力变化

图 3- 17 不同研磨深度下的磨削力变化曲线图

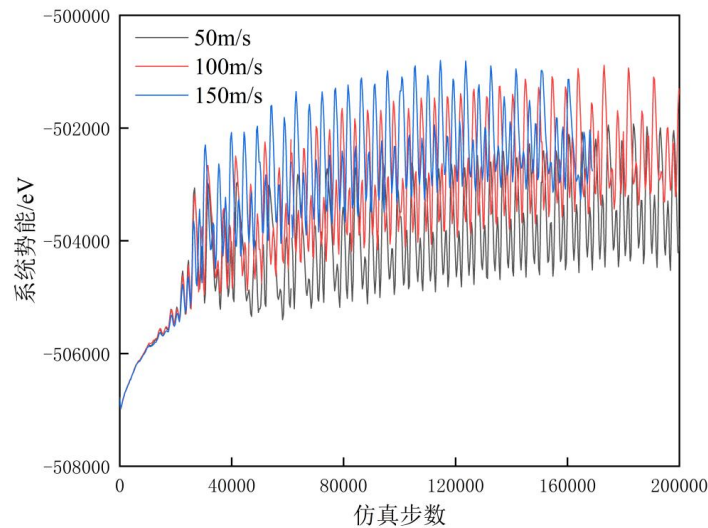
为使有更直观对比，选取仿真步数 8 万到 15 万步过程，计算其平均磨削力。

当仿真研磨深度为 $10\text{\AA}$ 时，不同研磨速度（ 50m/s 、 100m/s 、 150m/s ）下，研磨过程中所对应的平均切削力如表 3-4 所示，随研磨速度增加，磨削力减小，单位时间内工件原子受磨粒作用少，工件原子接触面积虽然相同，但变形量减小，导致磨削力减小。

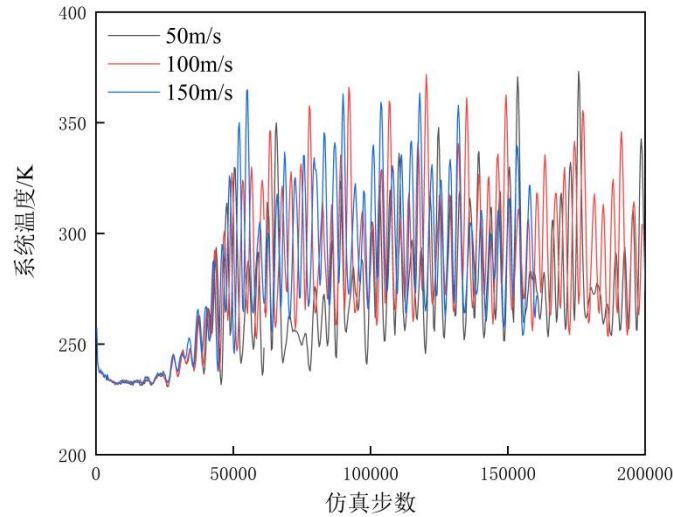
表 3-4 不同研磨速度下的平均磨削力

研磨速度(m/s)	50	100	150
平均切向力(nN)	82.34	75.23	66.27
平均法向力(nN)	216.81	186.52	176.29

图 3-18 是不同研磨速度下系统势能和体系温度变化情况。（a）图是系统势能变化，整体趋势为先迅速增大，待磨粒完整接触工件后，系统势能呈现水平波动，波动主要原因是工件体系原子发生相变和晶格变形重组导致。系统势能随速度的增大而在增加，在同一研磨深度情况下，原子间排斥力大小相同，研磨速度的不同导致体系中的动能不同，因此整个体系势能呈现随速度增大而增大。系统温度变化趋势整体与势能类似，速度越快达到相同位置的所需时间减少，工件内部产生晶格重构和弹性恢复现象的原子数目也就随之下降，这将导致原子会密集地堆积在一定的切削范围之内，从而造成范围内的原子密度升高，最终使原子之间也许会产生新的挤压和相互的摩擦，让体系温度逐渐升高。



(a)系统势能变化



(b)系统温度变化

图 3- 18 研磨速度下势能和平均温度的变化曲线

3.5 本章小结

本章通过分子动力方法仿真研究单颗金刚石磨粒研磨切削氮化铝工件的过程。从微观分析磨粒研磨切削压入的过程，并探索在不同研磨参数下，氮化铝材料微观去除机理变化情况，从微观研磨形貌、磨削力、体系压力，相变等方面进行详细分析，后结合纳米压痕试验来验证氮化铝材料是否发生弹塑性转变情况，从载荷位移曲线、弹性回复率、蠕变位移角度进行分析。得到如下结论：

(1) 单颗磨粒研磨体系中，系统平衡状态下的系统势能为-825341eV，磨粒完整研磨工件状态下，由于存在材料去除和氮化铝原子弹性恢复以及晶格变形重组等原因，导致体系势能在-812963eV 附近波动。研磨深度比研磨速度影响更直接。

(2) 研磨速度相同，不同研磨深度下，当研磨深度为 10Å时，体系变形程度最小，研磨微观形貌最为平整，研磨过程体系应力在 76256Pa 波动，磨粒在工件表面形成的拉压应力区域面积最小，相变原子数与 5Å接近。平均切向力为 171.18nN、平均法向力为 368.32nN，在研磨过程中体系势能稳定在-810837eV，研磨深度为 15Å体系温度变化剧烈，温度最高，研磨深度为 5Å、10Å整体趋势接近。综合多种微观因素，在研磨深度为 10Å时，微观研磨得到最佳表面质量。

(3) 在确定研磨深度后，进行不同研磨速度探索，随研磨速度的增加，体

系变形程度增加，但材料去除原子数几乎相同分别为 3575、3599、3609。最大应力为 22335Pa、最小应力为-19063Pa，拉压面积区域随速度增大而增加，在研磨速度为 50m/s 时，相变原子数最少，亚表面损伤少。在研磨速度为 50m/s 时平均切磨削力最大，平均切向力和法向力分别为 82.34 和 216.81nN。在该研磨速度下的系统势能和温度变化也是最小，因此在研磨速度为 50m/s 仿真效果最佳。

第 4 章 氮化铝纳米压痕试验研究

4.1 引言

通过分子动力学仿真模拟结果，发现氮化铝材料加工表面会产生位错和非晶化扩展，随着位错在滑移体系中扩展，会加剧氮化铝晶体的塑性变形。由于计算机算力有限，MD 只能完成体系尺寸较小下的模拟，得到微观上材料去除机理并不能够完全代表实际情况，纳米压痕与划痕试验能够在宏观上反应实际的材料研磨加工过程，对材料的弹塑性转变过程和切削特性有直观表现，能够对氮化铝材料超精密加工过程中微观变形机理提供理论依据。

本章考虑氮化铝陶瓷材料的机械特性，进行纳米压痕试验研究，对载荷位移曲线，硬度和蠕变位移在不同载荷下进行分析，探索氮化铝微观材料变形机理。

4.2 试验原理和设备

在超精密加工中材料本身的力学性能是决定材料加工质量的重要指标，尤其是弹性模量、弹塑性、屈服强度、硬度等参数是在微纳米尺度下对精密加工影响起到重要作用，对加工可行性有至关重要作用。纳米压痕划痕方法是测试材料微观力学性能的最常见检测方法之一^[63-64]。纳米压痕原理是通过压头施加载荷，压头在载荷作用下对材料表面进行压入，材料表面被压入过程中，通过设备传感器可以实时采集载荷大小变化和位移信息，将采集到的信息进行压痕修正后，便可以得到载荷位移曲线，通过相关理论方法计算可得到检测材料的微观力学性能。通过压痕断裂力学并结合微观组织形貌观察能研究材料在被压入过程中，材料去除形式的变化，进而得到材料临界加工深度，从而实现延性区域加工^[65]。

如图 4-1 所示，（a）图为金刚石压头压入材料表面后，压痕截面示意图， P 代表的是压头施加法相载荷， h_{max} 指压头压入表面后的最大深度， h_r 是残余深度， h_s 是接触深度， a 为压痕半径。（b）图为压痕后得到的载荷位移曲线，通过该曲线可以分析压痕过程中压头施加载荷与压入深度之间的变化关系，并且可以计算被压材料的纳米硬度和弹性模量。

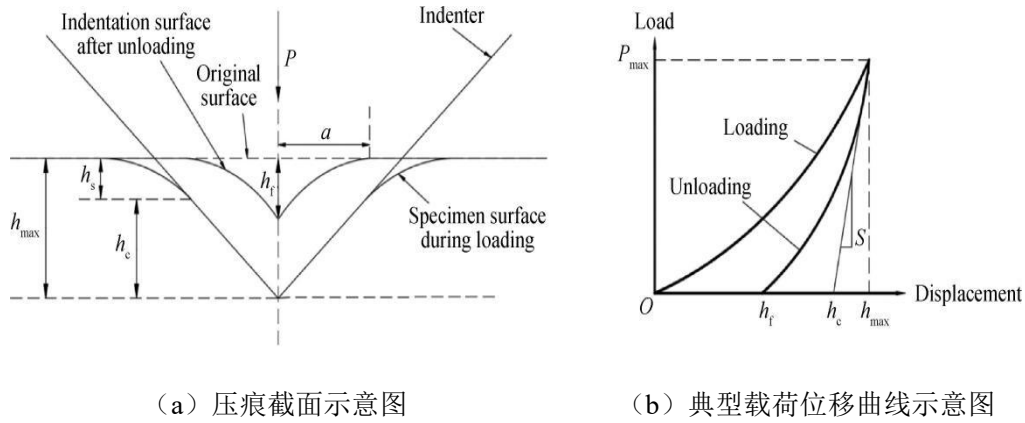


图 4-1 纳米压痕过程示意图和典型载荷位移曲线

本文采用的纳米压痕试验装置型号是 Nano Indenter G200，该装置组成主要是压件、显微镜、传感器以及运动台等部分，仪器装置如图 4-2 所示，该装置采用的金刚石压头为 Berkovich（玻氏）压头，Berkovich 压头三棱锥形状，压头中心线与压头的面、棱之间的夹角分别为 $\alpha=65.3^\circ$ 、 $\beta=77.05^\circ$ 。该装置具有测试连续刚度的功能，能计算加载过程中材料硬度以及弹性模量等基本力学性能，同时压痕最大载荷 P_{max} 、最大压入深度 h_{max} 、接触刚度 S 、残余深度 h_f 均会被记录下来。

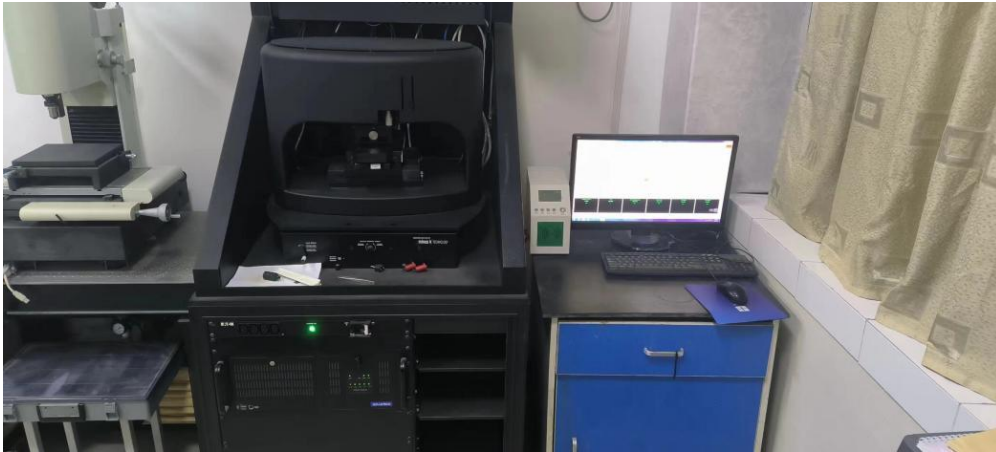


图 4-2 Nano Indenter G200 设备图

4.3 纳米压痕参数设置

试验参数如表 2-3 所示，压痕前先利用 SiO_2 磨料对工件表面进行抛光处理，使表面质量达到纳米压痕要求，超声清洗后将 AlN 陶瓷基片样品通过蜡固定在仪器的样品台上，试验进行前需要进行预压痕过程，目的是对压痕面积和仪器框架刚度进行校准，采用电磁驱动可实现高动态下力和位移测量来完成试验。

压入加载速度为 10nm/s，加载时长为 20s，保载时长为 15s，卸载时长为 20s。

表 4- 1 压痕试验参数表

参数	数值
加载速度	10nm • s ⁻¹
加载载荷大小	100 mN 200mN 300mN 400mN
加载时间	20s
保载时间	15s
卸载时间	20s
AlN 陶瓷基片规格	16.66×16.66×1mm
AlN 表面粗糙度	45nm

4.4 试验结果分析

4.4.1 载荷位移曲线分析

不同载荷下的载荷位移-曲线如图 4-3 为所示，图中的载荷位移曲线变化趋势与其他硬脆材料载荷位移曲线一致，在加载阶段，趋势为随载荷增加而增加，保载阶段载荷稳定不变，卸载阶段随载荷减小而减小。当载荷大小大于 300mN 以上卸载部分曲线发生回返现象，是因载荷过大导致表面粗糙度不够平整，出现了晶格回弹。不同载荷压痕试验后，卸载后的残余深度 h_f 均不为零，说明在压痕过程中，部分材料原子产生弹性变形释放晶格能量而产生回弹以及氮化铝原子发生塑性变形，材料原子永久变形不可逆原因。

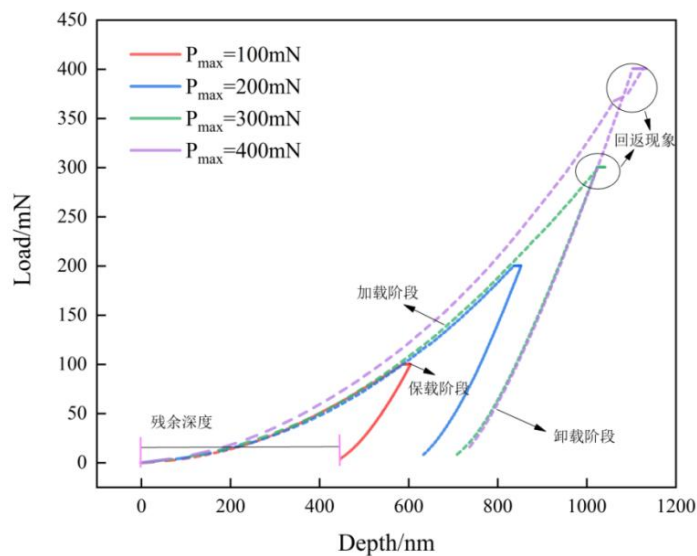


图 4- 3 不同最大载荷下的载荷位移曲线

表 4-2 为纳米压痕试验所测的氮化铝材料的实验数据，为保证准确性，对实验数据进行多次测量取其平均值，其中 $P_{\max}$ 为最大加载载荷， $h_{\max}$ 为最大压入深度， h_f 为残余深度， S 为卸载接触刚度， E 为弹性模量， H 为硬度。由于残余深度无法直接获得，可以通过相关学者 Sneddon^[70-71] 提出的 4-1 公式计算获得：

$$(h - h_f) = 2 \frac{P}{S} \quad (4-1)$$

表 4-2 AlN 陶瓷材料的纳米压痕力学性能数据表

P/mN	Pmax/mN	hmax/nm	hf/nm	S/N/m	E/GPa	H/GPa
100	99.12	631.874	314.214	624050	328.291	22.779
200	198.189	756.519	319.139	906289	310.561	22.107
300	297.195	985.226	371.966	969229	309.384	18.208
400	395.795	1153.676	418.613	1076895	301.777	17.611

随着法相载荷的增大，残余深度也随之增加，弹性模量和硬度是逐渐减小。结合载荷位移曲线载荷增大会出现加载突进现象，材料由塑性变形转变为脆性断裂。

4.4.2 弹性回复率

弹性回复率 η 是指材料变形回复的能力，弹性回复率越大，说明材料弹性性能越好，弹性回复的能力越强，反之则说明材料塑性大，弹性回复率主要通过通过公式（4-2）计算^[71]：

$$\eta = \frac{h_{\max} - h_f}{h_{\max}} \times 100\% \quad (4-2)$$

将试验得到的数据带入公式中可获得氮化铝材料的弹性回复率与压入深度的关系趋势，如图 4-4 所示，随压入深度的增加，弹性回复率也随之增大，且弹性回复率都高于 48%，说明氮化铝具有良好弹性性能，有强的变形回复能力，结合加载位移曲线，在加载初始阶段，加载小压入深度小，弹性回复率低，随压入深度增加，载荷位移曲线在保载阶段出现回返现象，与材料的弹性回复率变

大有一定关系。

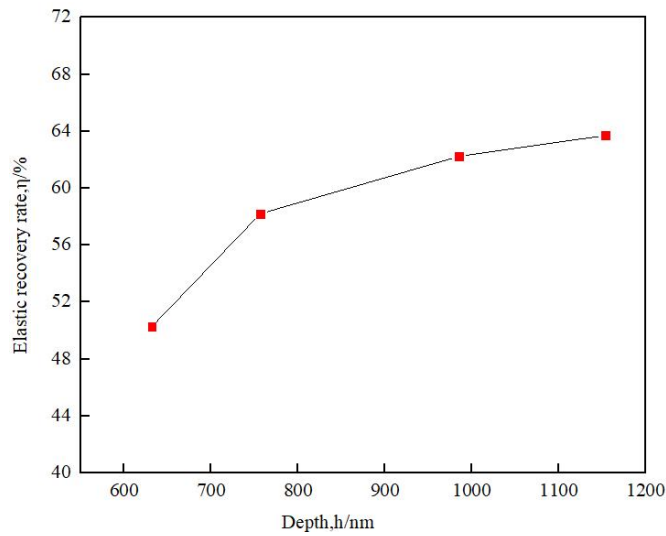


图 4-4 弹性回复率随压入深度的关系图

4.4.3 蠕变位移分析

在保载阶段会产生蠕变行为，通过研究保载阶段的载荷，深度和时间的关系，获得材料的蠕变特性^[71]，如蠕变位移、平均压痕应力、应变率和蠕变应力指数等。蠕变位移 d_c ，定义为保载阶段的压入深度，即保载阶段的最大压入深度与初始压入深度之差，一般可以通过公式 4-3 计算得到蠕变位移大小，式中 h_0 指的是保载阶段的初始压入深度：

$$d_c = h_{\max} - h_0 \quad (4-3)$$

。如图 4-5 所示为氮化铝材料不同载荷下蠕变位移与时间的关系，图中的蠕变位移随时间趋势分两个阶段，第一阶段先迅速增加达到最大蠕变位移，第二阶段，载荷为 200mN 时的曲线趋势逐渐稳定趋于平缓，载荷为 100mN、300mN、400mN 时曲线变化趋势为快速下降。通过蠕变曲线斜率比较，蠕变速率的变化是逐渐降低，较低的载荷下更容易达到稳态。材料变形后的位错运动是蠕变产生的主要因素，蠕变行为会导致材料亚表面损伤。

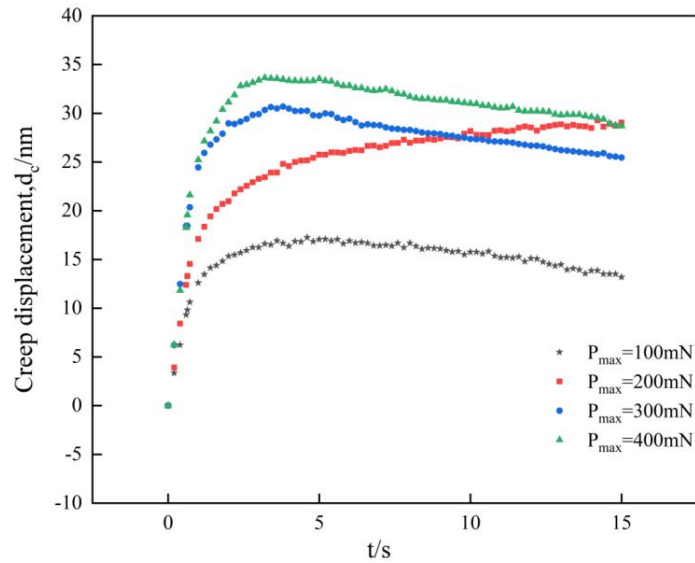


图 4-5 氮化铝蠕变位移与时间的变化图

4.5 本章小结

本章通过纳米压痕试验来研究氮化铝材料微观变形机理，验证氮化铝材料受力后是否发生弹塑性转变过程，从载荷位移曲线、弹性回复率、蠕变位移角度进行分析得到以下结论：

（1）氮化铝材料在较低载荷下，载荷位移曲线没有出现波动情况，当载荷较大时在卸载阶段会出现回返现象，由此推断氮化铝陶瓷材料的脆塑性临界载荷不高于 300mN 以上。

（2）随压入材料表面深度的增加，弹性回复率也会随之增大，并且不同载荷下的氮化铝材料的弹性回复率都高于 48%，说明氮化铝具有良好弹性性能，有较强的变形回复能力。

（3）随载荷增大，通过蠕变位移的曲线斜率发现蠕变速率是逐渐降低，在低载荷下容易达到稳态，不容易产生亚表面损伤。

第 5 章 氮化铝游离磨料工艺试验研究

5.1 引言

氮化铝材料具有优异的热力学性能被视为新一代最理想化的电子封装材料，目前应用领域有航空航天、新能源功率模块等诸多行业，但由于氮化铝属于典型的硬脆材料，又由于其本身独特的晶体结构导致加工困难，容易产生缺陷，使得加工成本一直高居不下。为降低加工成本，高效获得优质表面质量，探索不同粒径不同磨粒的工艺参数组合。本章通过正交工艺法研究氮化铝陶瓷基片研磨试验，进行不同粒径大小不同磨粒工艺研究，并探索研磨工艺参数对于加工质量的影响，选取出最优加工工艺参数。

5.2 试验方法与测试

本试验研磨抛光机械均为 ZDHP-30B 型抛光机，设备如图 5-1 所示，该设备研磨时长可以设置分段进行，研磨过程稳定可控制，研磨转速最高可达到 650 r/min，铸铁盘直径为 280 mm。



图 5-1 试验装置与氮化铝陶瓷基片图

先将氮化铝陶瓷基片通过蜡固定在载物片上，主要通过智能恒温加热台融化蜡，固定好后进行超声清洗，再将载物片固定在装置中，通过改变配重块的数量来改变研磨压力大小，研磨垫材质为自制树脂垫，加工过程中，电机带动

铸铁盘做旋转运动，工件和研磨盘两者旋转方向相反，从而使摩擦力与研磨盘线速度沿径向分布不同于方向，可保证工件材料去除的均匀性，通过调节电机的转速来改变研磨速度的大小，研磨液流量的控制主要通过蠕动泵来调节，试验所需要的仪器设备主要如表 5-1 所示

表 5-1 试验所需仪器设备表

试验仪器	仪器型号
智能恒温加热台	STC803-II
电子天平	BSA224S
超声清洗机	KQ-500E
蠕动泵	YA1515X-A
电动搅拌器	JJ-1-200W
外径千分尺	G176360
表面粗糙度仪	SR200
光学 3D 表面轮廓仪	Super View W11

如图 5-2 所示，图（a）VHX-500 超景深显微镜，观察研磨前后的氮化铝陶瓷表面形貌；图（b），BSA224S 精密电子天平，用来称量加工前后的氮化铝陶瓷质量变化；图(c)，SR200 表面粗糙度仪，用于检测氮化铝表面粗糙度，图 5(d)，Super View W11 光学 3D 表面轮廓仪，用于检查加工前后氮化铝三维表面形貌。氮化铝陶瓷加工前的初始厚度 H 利用千分尺测量。

通过称量工件加工前后的质量，计算前后质量差，利用材料去除率公式(5-1)计算出材料去除率：

$$MRR = \frac{\Delta m \times H}{M \times t} \quad (5-1)$$

式中：MRR 为材料去除率，单位为 nm/min； Δm 是氮化铝陶瓷基片研磨加工前后的质量差，单位为 g；H 为氮化铝陶瓷片的初始厚度，单位 mm；M 为氮化铝陶瓷片的初始质量，单位 g；t 指研磨时间，单位为 min。

实验结束后，取下载物片，先进行超声清洗 10min 中，在进行吹干干燥处理，利用二维表面粗糙仪测量表面粗糙度，后利用加热台将蜡融化去除，清理干净，测量重量差，计算材料去除率和进行表面形貌测试。

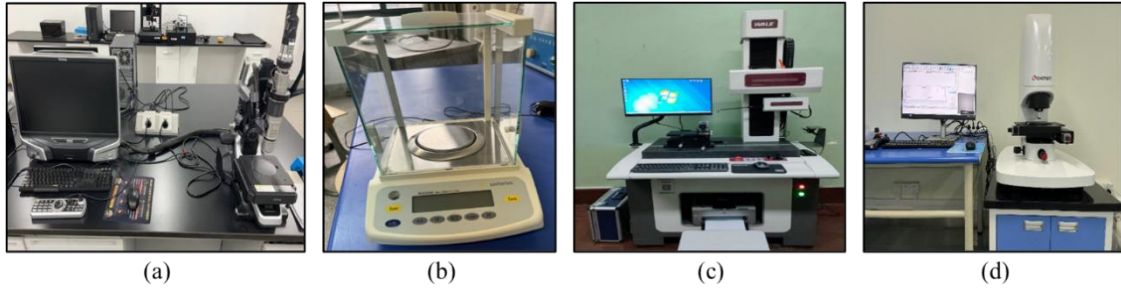


图 5-2 试验设备图

由于氮化铝材料的莫氏硬度高于 9，本文根据现有条件采用不同粒径大小金刚石和氧化铝磨料进行氮化铝陶瓷研磨阶段工艺性研究进行探索。本文采用氮化铝陶瓷片材料进行试验，初始材料表面粗糙度为 $0.514\sim 0.768\mu\text{m}$ 之间，未能达到氮化铝材料应用场合的表面质量要求。

5.3 不同磨料研磨工艺时间实验确定

5.3.1 金刚石磨料粒径研磨时间

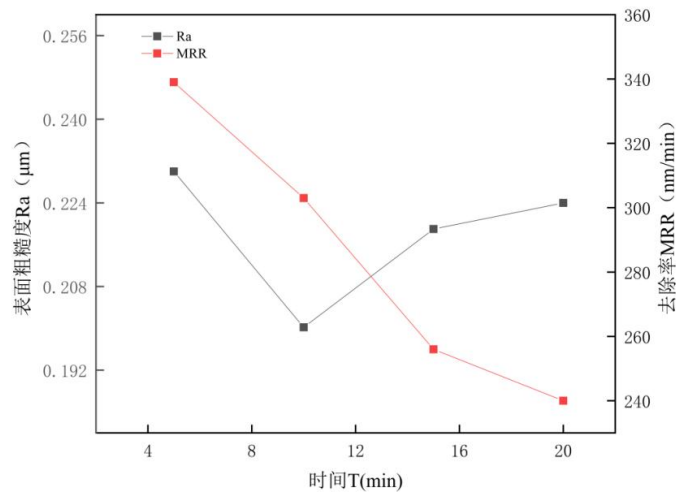
在游离磨料研磨试验中，磨料粒径大小对表面质量的影响最为直观^[72~73]。能够直接反应出影响趋势和最佳工艺参数组合，因此实验先进行不同粒径金刚石磨粒（W180、W120、W50）和不同粒径氧化铝磨料下（ $5\mu\text{m}$ 、 $1\mu\text{m}$ 、 50nm ）研磨氮化铝陶瓷，材料去除率和表面粗糙度随时间的变化规律，根据结果分析选择不同磨料粒径下最合适的研磨时长，参照其他硬脆材料^[74]加工参数，研磨参数设置如表 5-2 所示。

表 5-2 研磨参数设置表

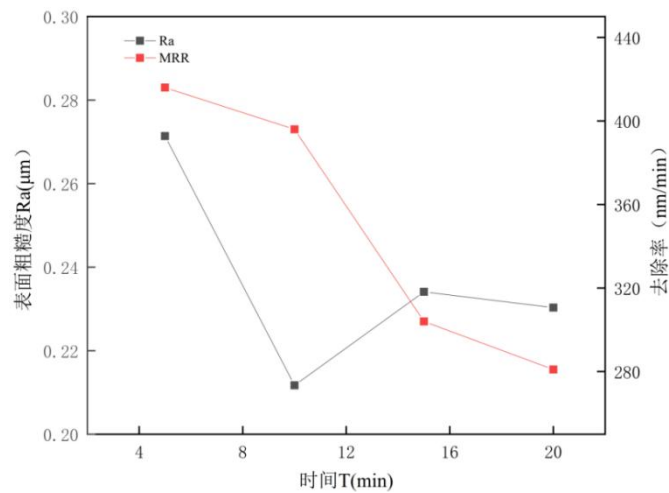
实验参数	参数值
研磨垫	树脂垫
研磨压力	5.1kPa
研磨速度	60r/min
研磨流速	60mL/min
研磨液	自来水+抛光膏悬浮粉+磨料
磨料浓度	0.5%wt

图 5-3 为金刚石不同粒径下游离磨料在相同加工工艺下，表面粗糙度和材料

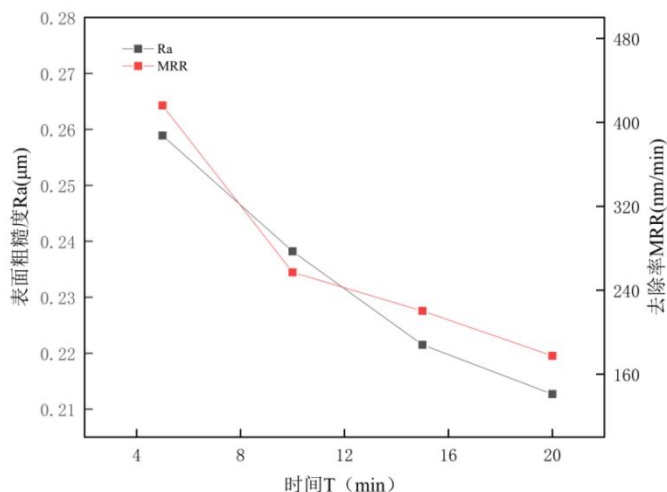
去除率随研磨时间的变化曲线，（a）图中材料去除率随时间的增加而减小，表面粗糙度先随时间降低后增大，在第 10min 粗糙度达到最低，去除率保持较高，故选取 10min 作为金刚石 W180 粒径研磨时间进行后续正交工艺探索。（b）图整体趋势与（a）类似，因此粒径 W120 研磨时间也选择为 10min。（c）图趋势为去除率和粗糙度都随时间增大而降低，一开始研磨五分钟去除率最大，但粗糙度达不到要求，10min 过后达到 15min 后去除率大于粗糙度，故金刚石 W50 研磨时间定为 15min。



(a)金刚石 W180 研磨材料 Ra 和 MRR 的变化



(b)金刚石 W120 研磨材料 Ra 和 MRR 的变化

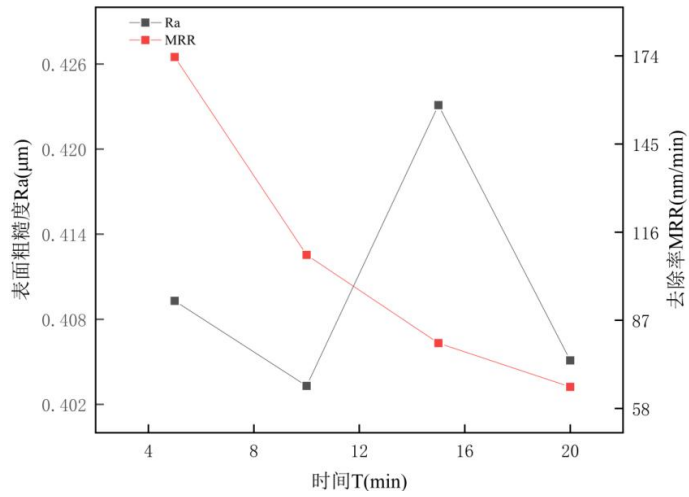


(c)金刚石 W50 研磨材料 Ra 和 MRR 的变化

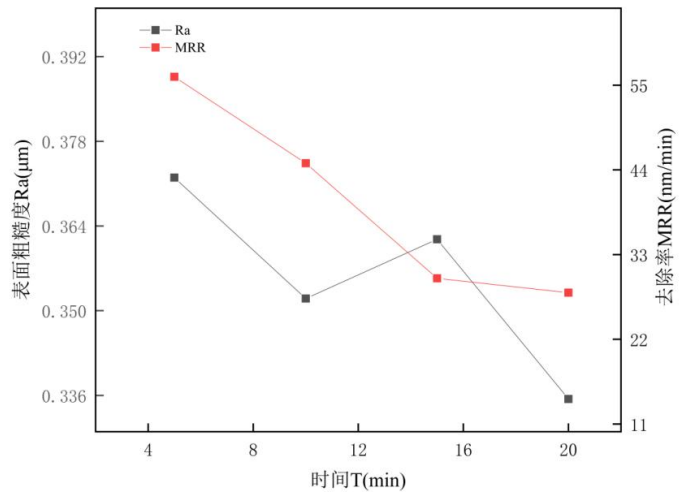
图 5-3 不同金刚石粒径研磨材料去除率和表面粗糙度变化曲线

5.3.2 氧化铝磨料粒径研磨时间

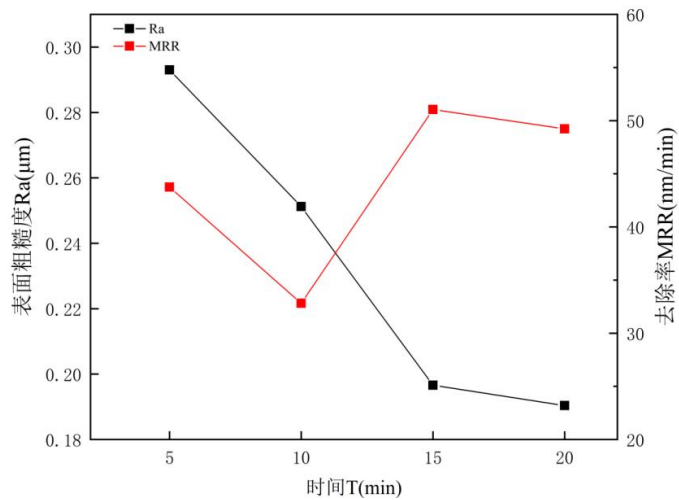
图 5-4 分别为不同粒径下氧化铝磨料研磨试验，氮化铝材料去除率和表面粗糙度随时间变化曲线，（a）图中材料去除率趋势为随时间的增加一直降低，表面粗糙度在研磨 10min 后达到最低工件表面较为平整，继续研磨使得平整的表面重新被氧化铝磨粒滚扎切削剥离导致表面粗糙度降低，故选取 10min 为该粒径下的研磨时长，保证表面加工质量最优。（b）图中趋势与（a）类似，在保证表面粗糙度的同时，应尽可能提高材料去除率，故 $1\mu\text{m}$ 氧化铝磨料的研磨时长定为 10min。（c）图中材料去除率先降低后增大，研磨时间较短时，去除率正常降低但小于粒径大的去除率，是由于存在尺寸咬合现象导致，研磨时长加长，磨粒与咬合后的表面随离心运动被剥离表面导致去除率升高，故综合考虑后该粒径下的研磨时长设为 15min，后续正交研磨实验在此基础上进行探索。



(a) 粒径 5μm 氧化铝磨料研磨材料 Ra 和 MRR 的变化



(b) 粒径 1μm 氧化铝磨料研磨材料 Ra 和 MRR 的变化



(c) 粒径 50nm 氧化铝磨料研磨材料 Ra 和 MRR 的变化

图 5-4 不同氧化铝粒径研磨材料去除率和表面粗糙度变化曲线

5.4 金刚石磨粒研磨工艺研究

在游离磨料研磨工艺中，主要加工参数除了磨粒粒径还有法向载荷、研磨液、研磨转速等。目前对于氮化铝材料的应用场合都对表面质量提出相关要求，为在保证质量的同时，寻求更高效研磨参数，是加工工艺重中之重，故本节针对游离磨料研磨工艺参数（研磨盘转速、研磨液流速、研磨压力）进行分析研究，高效获得优质加工表面，降低成本。

5.4.1 正交研磨实验设计

根据现有设备与实验条件下，设定三种不同参数范围，其中研磨液流速参数范围是流速 50 ml/min、60 ml/min、70 ml/min；研磨转速根据仿真结果在 50m/s 效果最佳，参数范围设置为 50r/min、60 r/min、70 r/min；研磨压力参照其他硬脆材料加工压力范围设计为 3.19 kPa、5.22 kPa、7.25 kPa。列出试验参数水平表 5-3.

表 5-3 金刚石磨料研磨后参数水平表

水平 \ 参数	研磨液流速(ml/min)	研磨转速(r/min)	研磨压力(kPa)
	A	B	C
1	50	50	2.6
2	60	60	5.1
3	70	70	7.6

5.4.2 W180 粒径正交试验结果及分析

根参数水平表设计的正交试验，试验共有九组试验，研磨后试验结果如表 5-4 所示。

表 5-4 W180 金刚石粒径研磨正交实验结果

试验号	因素			材料去除率 (nm/min)	表面粗糙度 Ra(μ m)
	A	B	C		
1	50	50	2.6	127	0.2374
2	50	60	5.1	397	0.2965
3	50	70	7.6	369	0.2099
4	60	50	5.1	760	0.3553
5	60	60	7.6	419	0.1763
6	60	70	2.6	532	0.3216
7	70	50	7.6	304	0.2151
8	70	60	2.6	216	0.2182
9	70	70	5.1	207	0.2193

本文通过采用极差分析法，分析正交试验中不同因素参数对表面粗糙度和

材料去除率影响程度顺序，游离研磨表面粗糙度试验结果分析如表 5-5 所示。

表 5-5 W180 金刚石粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析

工艺因素	研磨液流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C
T ₁	0.2692	0.2591	0.2175
T ₂	0.2303	0.2904	0.2844
T ₃	0.2502	0.2004	0.2479
$\overline{T_1}$	0.08974	0.08636	0.0725
$\overline{T_2}$	0.07676	0.0968	0.0948
$\overline{T_3}$	0.0834	0.0668	0.08264
R 极差	0.01298	0.03	0.0223
因素主次顺序		B>C>A	
优水平	A ₂	B ₃	C ₁
优组合		A ₂ B ₃ C ₁	

根据结果可得金刚石 W180 粒径下，对表面粗糙度的影响最大的因素是研磨液转速。最优工艺参数组合可取 A₂B₃C₁。在该参数条件下，研磨后工件的表面粗糙度达到 0.3216 μ m，材料去除率为 532nm/min。如图 5-5 所示，研磨前后氮化铝表面二维形貌情况分别是，研磨前整体形貌程斑驳状，表面模糊不平整，研磨后整体表面质量提高，表面实现平整化，能够清晰看到工件表面和划痕的存在。

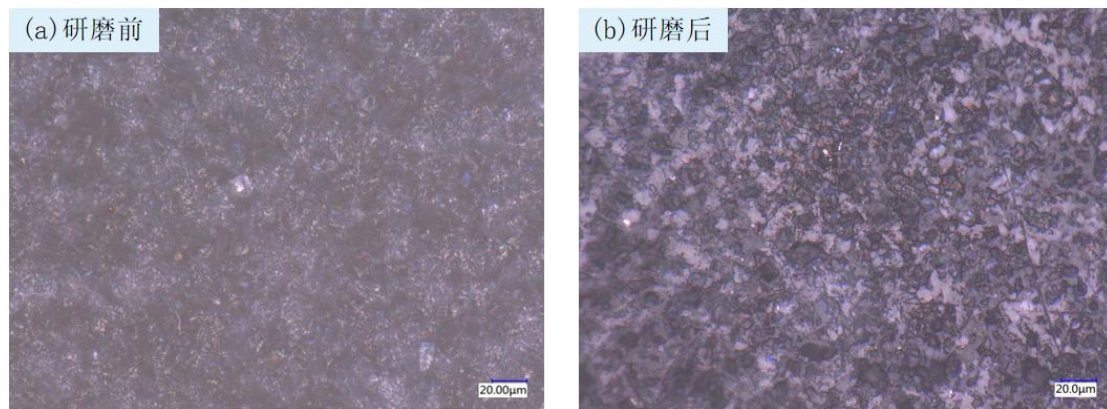


图 5-5 游离磨料研磨前后氮化铝表面对比图

由表 5-6 可以发现对于材料去除率的影响研磨压力最明显，研磨压力越大材料与磨粒接触的面积越大，材料的去除量则越多，其次影响分别为研磨转速、研磨流速。最优参数组合为 A₂B₂C₃。在该试验参数条件下，加工后的工件表面质量，表面粗糙度：0.1763 μ m，材料去除率：419nm/min，研磨前后形貌图如图 5-6 所示，由于研磨压力较大，导致研磨后的表面存在，氮化铝材料剥离后出现的凹坑，研磨后表面无明显划痕存在，结合图 5-7 研磨前后三维表面形貌，

加工后整体表面质量较好。

表 5- 6 W180 金刚石粒径研磨后氮化铝材料去除率结果分析

工艺因素	研磨液流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C
T ₁	397	292	298
T ₂	344	455	570
T ₃	369	364	242
$\overline{T_1}$	132.34	97.34	99.34
$\overline{T_2}$	114.66	151.66	190
$\overline{T_3}$	123	121.34	80.66
R 极差	17.68	54.32	109.34
因素主次顺序		C>B>A	
优水平	A ₂	B ₂	C ₃
优组合		A ₂ B ₂ C ₃	

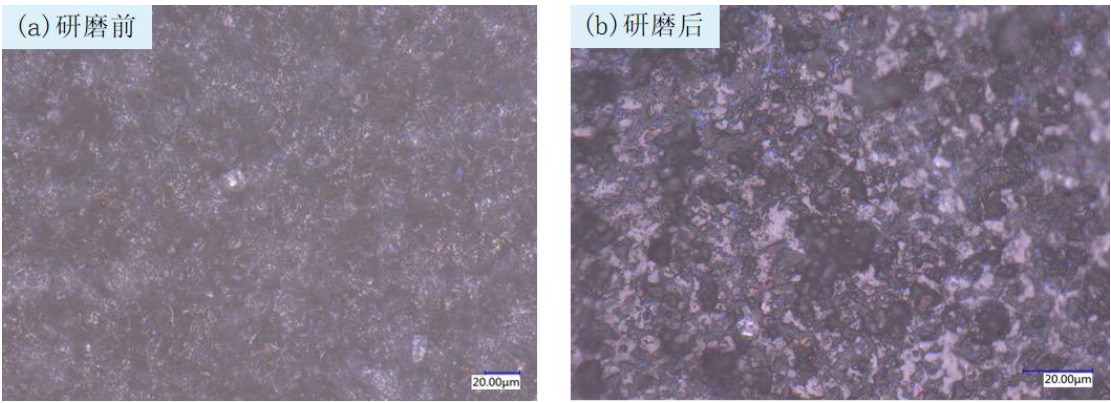


图 5- 6 材料去除率最优组合前后对比图

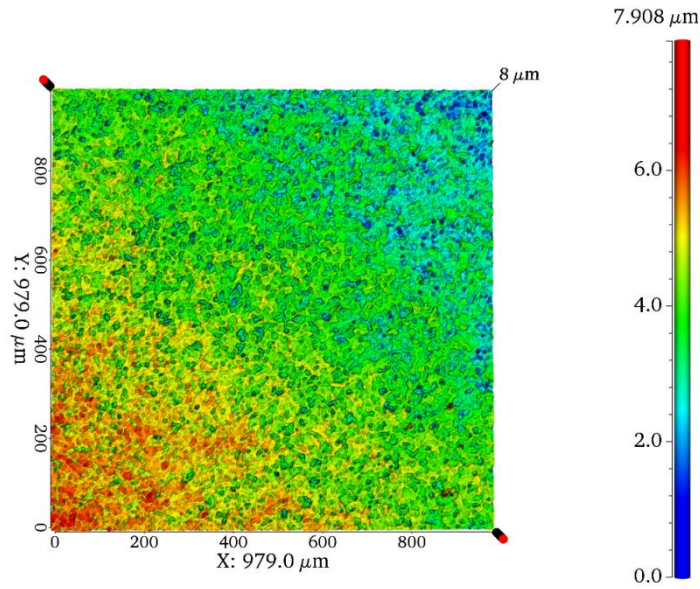


图 5- 7 氮化铝研磨后表面三维形貌图

在该粒径下同时考虑表面粗糙度和材料去除率的影响，最佳表面质量工艺

参数组合因选取 W180 金刚石粒径 $A_2B_2C_3$ ，即研磨液流速为 60 ml/min，研磨压力为 7.6 kPa，研磨转速为 60 r/min。

5.4.3 W120 粒径正交试验结果及分析

粒径 W120 的三因素三水平正交试验参数表同 W180 一致，W120 粒径正交结果如表 5-7 所示。

表 5- 7W120 金刚石粒径研磨后氮化铝正交实验结果

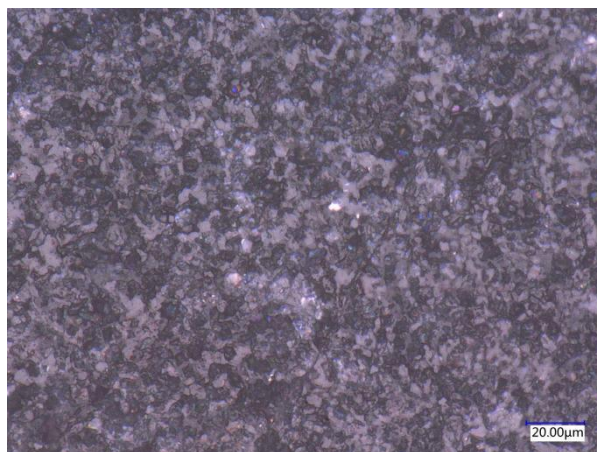
试验组号	工艺参数			材料去除率 (nm/min)	表面粗糙度 Ra(μm)
	A	B	C		
1	50	50	2.6	177	0.2278
2	50	60	5.1	303	0.2143
3	50	70	7.6	339	0.2007
4	60	50	5.1	141	0.2402
5	60	60	7.6	256	0.1972
6	60	70	2.6	132	0.2152
7	70	50	7.6	1020	0.2312
8	70	60	2.6	240	0.2110
9	70	70	5.1	287	0.2651

由表 5-8 可知，在该粒径下对氮化铝研磨影响最大的是研磨转速，其次是研磨压力和研磨流速。最优工艺参数组合为 $A_2B_2C_3$ ，在该工艺参数条件下加工后的氮化铝表面粗糙度为 0.1972 μm ，材料去除率为 256nm/min。

表 5- 8 W120 金刚石粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析

工艺因素	研磨液流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C
T_1	0.2142	0.2231	0.218
T_2	0.2175	0.2075	0.2398
T_3	0.2357	0.227	0.2097
$\overline{T_1}$	0.0714	0.074367	0.072667
$\overline{T_2}$	0.0725	0.069167	0.079937
$\overline{T_3}$	0.07857	0.075667	0.0699
R 极差	0.00717	0.006503	0.00947
因素主次顺序		B>C>A	
优水平	A_2	B_2	C_3
优组合		$A_2B_2C_3$	

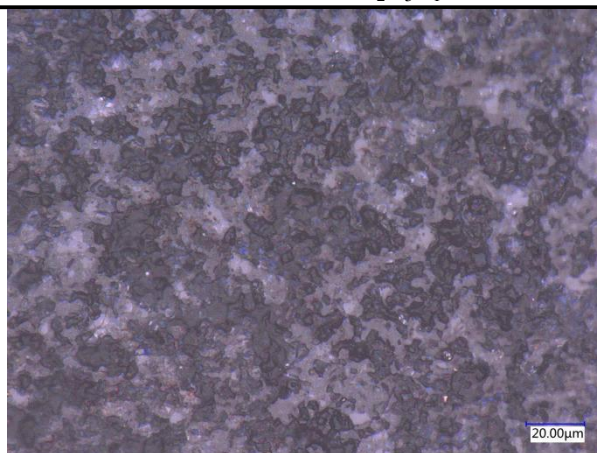
该参数条件下研磨后表面如 5-8 所示，由于转速较大，研磨后划痕较多，图中蓝色物质可能为烧结时添加的氧化钇，其作用是致密化，促进氮化铝颗粒第二相长大，氮化铝基体表面经加工后表面材料被去除，使得残留的氧化钇裸露出。

图 5-8 $A_1B_2C_3$ 研磨参数加工后氮化铝表面二维形貌

由表 5-9 可知，优选考虑材料去除率的影响下，最优工艺参数组合应选取为 $A_2B_3C_1$ （即研磨液流速为 60 ml/min，研磨转速为 70 r/min，研磨压力为 2.1 kPa）加工后测得的表面粗糙度为 $0.2152\mu\text{m}$ ，材料去除率为 132nm/min，该参数下的研磨后二维表面形貌如图 5-9 所示，表面更为平整，呈现大面积块状平整区域。

表 5-9 W120 金刚石粒径研磨后氮化铝材料去除率结果分析

工艺因素	研磨流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C
T_1	273	446	183
T_2	176	266	244
T_3	515	252	538
$\overline{T_1}$	91	148.667	61
$\overline{T_2}$	58.667	88.667	81.334
$\overline{T_3}$	171.667	84	179.334
R 极差	113	64.667	118.334
因素主次顺序		$C > A > B$	
优水平	A_2	B_3	C_1
优组合		$A_2B_3C_1$	

图 5-9 $A_3B_2C_1$ 研磨条件下氮化铝表面二维形貌

通过比较表面粗糙度和材料去除率的最佳工艺参数组合，选择该粒径下最佳参数路线。金刚石粒径 W120 下，选用工艺参数组合为 A₂B₂C₃（即研磨液流速为 60 ml/min，研磨转速为 60 r/min，研磨压力为 7.6 kPa），该工艺路线下，研磨后氮化铝陶瓷表面三维形貌如图 5-10 所示。

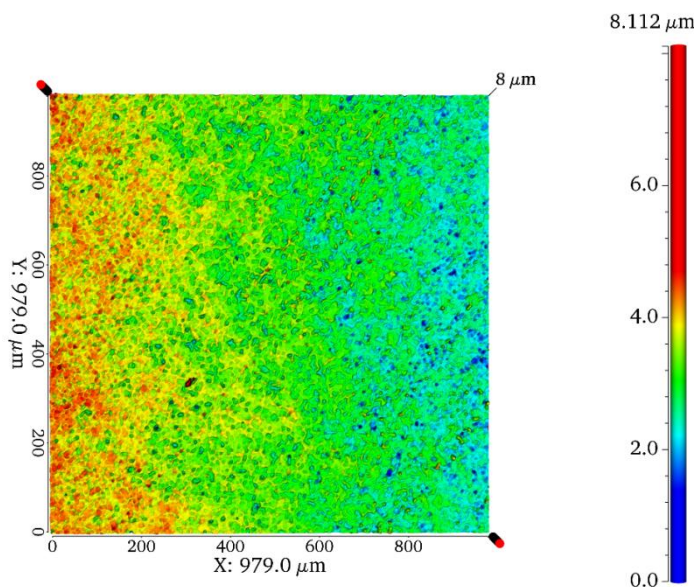


图 5- 10 W120 最优工艺组合氮化铝表面三维轮廓图

5.4.4 W50 粒径正交试验结果及分析

由表 5-10 数据结果可以发现材料去除率远比 W180 粒径小，不符合常规现象，通过分析观察氮化铝陶瓷表面结构发现，由于其晶体结构决定，材料表面呈现织网状，构成许多凹凸不平表面，由于金刚石本身是不规则形状，如图 5-11 所示，存在尖端恰好与氮化铝材料凹坑尺寸匹配，导致咬合，使得金刚石磨料压入氮化铝表面，最终导致材料去除率降低，表面质量变差。

表 5- 10 W50 金刚石粒径研磨后氮化铝正交实验结果

试验组 数	工艺因素			材料去除率 (nm/min)	表面粗糙度 Ra(μm)
	A	B	C		
1	50	50	2.6	66	0.2916
2	50	60	5.1	94	0.2229
3	50	70	7.6	64	0.2413
4	60	50	5.1	73	0.3685
5	60	60	7.6	82	0.3089
6	60	70	2.6	116	0.3370
7	70	50	7.6	127	0.2205
8	70	60	2.6	154	0.4403
9	70	70	5.1	87	0.2803

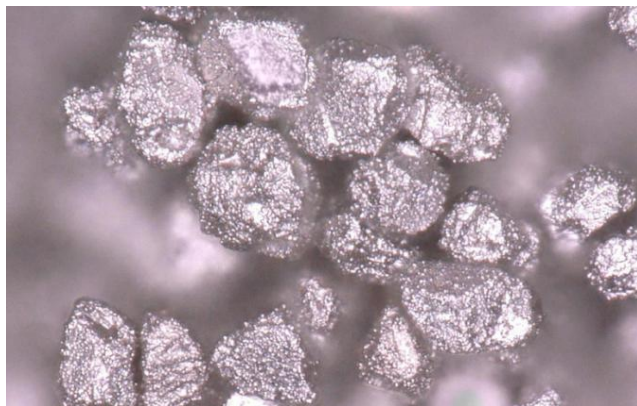


图 5-11 W50 金刚石磨粒示意图

表 5-11 W50 金刚石粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析

工艺因素	研磨液流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C
T_1	0.2519	0.2935	0.3563
T_2	0.3381	0.324	0.2905
T_3	0.3137	0.2862	0.2569
$\overline{T_1}$	0.08397	0.09783	0.11877
$\overline{T_2}$	0.1127	0.108	0.09683
$\overline{T_3}$	0.1045	0.0954	0.08563
R 极差	0.02873	0.0126	0.03314
因素主次顺序		$C > A > B$	
优水平	A_1	B_3	C_3
优组合		$A_1B_3C_3$	

由表 5-11 可知，粒径 W50 情况下对于加工后表面粗糙度影响大小顺序分别是：研磨压力、研磨转速、研磨流速。在该粒径下，金刚石磨粒不规则的尖端与氮化铝基体表面凹坑可能会存在咬合现状，导致表面粗糙度下降，研磨压力大小决定了磨粒与表面接触面积大小，因此影响最大。最优参数组合为 $A_1B_3C_3$ ，在加工参数测得工件表面粗糙度为 $0.2431\mu\text{m}$ ，材料去除率可达到 $64\text{nm}/\text{min}$ ，在该工艺参数组合下研磨后的二维表面形貌如图 5-12 所示，表面粗糙度大小接近其它粒径加工后效果，但表面形貌更为平整，无大面积凹凸不平区域。

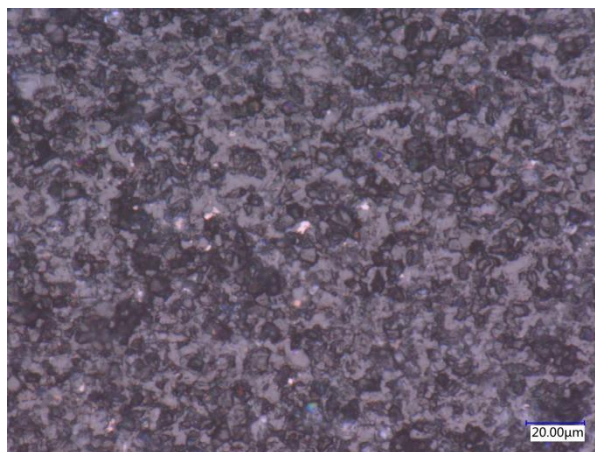


图 5- 12 A1B3C3 研磨条件下氮化铝表面二维形貌

由表 5-12W50 金刚石粒径游离研磨材料去除率结果分析可知，对材料去除率影响顺序大小分别是：研磨压力、研磨转速、研磨流速，与表面粗糙度因素结果一致，最优参数组合为 $A_3B_1C_3$ ，在该加工参数下氮化铝工件表面粗糙度为 $0.2205\mu\text{m}$ ，材料去除率为 $127\text{nm}/\text{min}$ ，该参数下的研磨后二维表面形貌如图 5-13 所示，表面粗糙度更低，比粗糙度最佳工艺下的表面形貌更好，凹凸不平区域减少。

表 5- 12 W50 金刚石粒径研磨后氮化铝材料去除率结果分析

工艺因素	研磨液流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C
T_1	75	87	202
T_2	180	110	85
T_3	123	179	91
$\overline{T_1}$	25	29	67.334
$\overline{T_2}$	60	36.6667	28.334
$\overline{T_3}$	41	59.6667	30.334
R 极差	35	30.667	39
因素主次顺序		$C > B > A$	
优水平	A_3	B_1	C_3
优组合		$A_3B_1C_3$	

因此在粒径 W50 条件下选用，选用因素 $A_3B_1C_3$ （即研磨液流速为 $70\text{ml}/\text{min}$ ，研磨转速为 $50\text{r}/\text{min}$ ，研磨压力为 7.6kPa ），研磨后氮化铝陶瓷三维表面轮廓如图 5-14 所示。

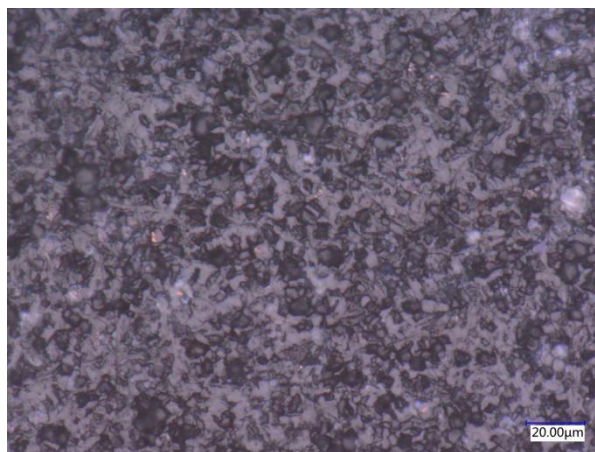
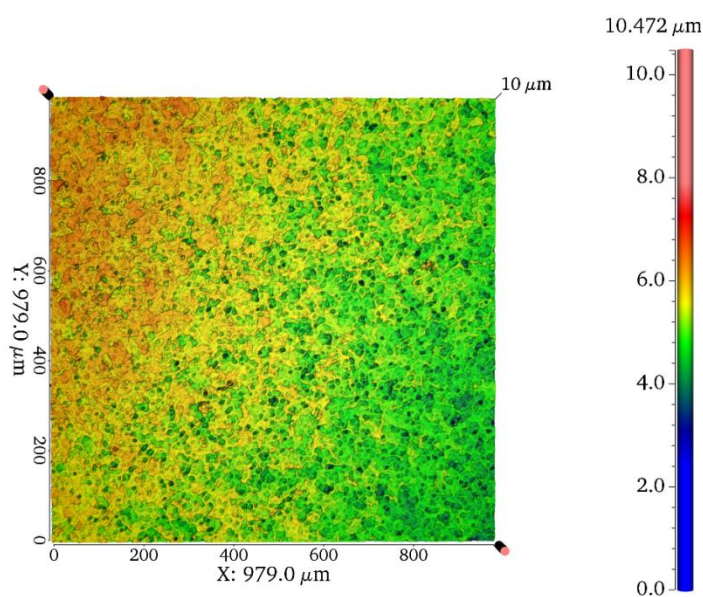
图 5- 13 $A_3B_1C_3$ 研磨条件下研磨表面二维形貌

图 5- 14 研磨后三维表面轮廓图

5.5 氧化铝磨粒研磨工艺研究

目前用于研磨阶段的磨粒除金刚石，最常用的为氧化铝磨料，对于氧化铝研磨加工氮化铝材料的报道较少，采用正交试验来探索氧化铝磨料游离研磨氮化铝不同粒径下的加工工艺，具有重要现实意义。

5.5.1 正交研磨实验设计

参考文献 38-39，进行氧化铝磨粒不同研磨参数设计，研磨液流速范围设定为：50 ml/min、60 ml/min、70 ml/min；研磨转速范围初步设定为：30r/min、40 r/min、50 r/min；研磨压力初步选取 5.1 kPa、7.6 kPa、10.1kPa。列出试验参

数水平表 5-13.

表 5- 13 氧化铝磨料研磨工艺正交试验的因素水平表

工艺参数 水平	研磨液流 (ml/min) A	研磨转速 (r/min) B	研磨压力(kPa) C	研磨液浓度 (wt%) D
1	50	40	3.19	0.5
2	60	60	5.22	1
3	70	80	7.25	0.5

5.5.2 5μm 粒径正交试验结果及分析

表 5-14 为 5μm 正交实验结果，该粒径下得到的表面粗糙度和材料去除率如下。后续分析也是采用极差方法进行分析。

表 5- 14 5μm 粒径氧化铝研磨后正交实验结果

试验 组数	工艺因素				材料去除率 (nm/min)	表面粗糙度 Ra(μm)
	A	B	C	D		
1	50	30	5.1	0.5	108	0.4032
2	50	40	7.6	1	122	0.4273
3	50	50	10.1	0.5	121	0.3471
4	60	30	7.6	0.5	171	0.3486
5	60	40	10.1	0.5	33	0.4324
6	60	50	5.1	1	199	0.3705
7	70	30	10.1	1	86	0.4568
8	70	40	5.1	0.5	22	0.4059
9	70	50	7.6	0.5	35	0.436

表 5- 15 5μm 粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析

因素	研磨液流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C	研磨液浓度 D
T ₁	0.3925	0.4028	0.3932	0.3955
T ₂	0.3838	0.4218	0.4039	0.4182
T ₃	0.4329	0.3827	0.4103	
$\overline{T_1}$	0.1308	0.1343	0.13117	0.1318
$\overline{T_2}$	0.1279	0.1406	0.1346	0.1394
$\overline{T_3}$	0.1443	0.1276	0.1367	
R 极差	0.00164	0.013	0.00553	0.0076
因素主次顺序 B>C>A>D				
优水平	A ₂	B ₃	C ₁	D ₁
优组合	A ₂ B ₃ C ₁ D ₁			

由表 5-15 结果可知，在该粒径下对表面粗糙度影响顺序为：研磨转速、研磨压力、研磨流速、研磨液流速，最优组合为 A₂B₃C₁D₁，在该工艺参数下加工后的表面粗糙度和材料去除率分别为 0.3705μm、199nm/min。其二维表面形貌如图 5-15 所示，加工后表面为明显划痕，能清晰观察由氮化铝独特织网结构形

成的表面。

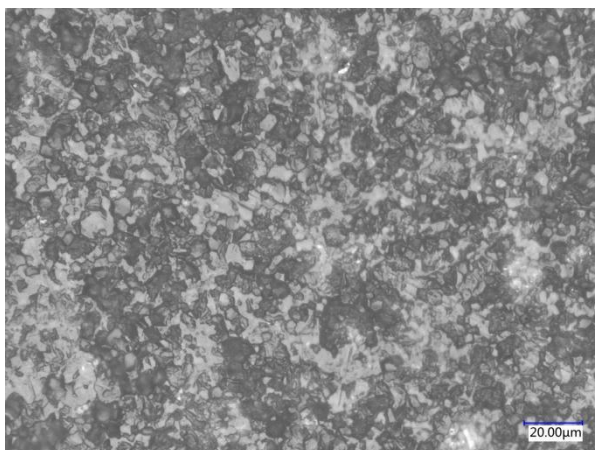


图 5- 15 $A_2B_3C_1D_1$ 条件研磨后氮化铝表面二维形貌图

由表 5-16 可知，材料去除率影响工艺因素顺序为：研磨流速、研磨转速、研磨液浓度，研磨压力，最优参数组合为 $A_3B_2C_3D_1$ ，在该加工参数测得工件表面粗糙度为 $0.436\mu\text{m}$ ，材料去除率为 $35\text{nm}/\text{min}$ 。

表 5- 16 $5\mu\text{m}$ 粒径研磨后氮化铝材料去除率结果分析

工艺因素	研磨液流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C	研磨液浓度 D
T_1	117	122	110	81
T_2	134	59	109	136
T_3	48	118	80	
$\overline{T_1}$	39	40.667	36.667	27
$\overline{T_2}$	44.667	19.667	36.333	45.333
$\overline{T_3}$	16	39.333	26.667	0
R 极差	28.667	21	10	18.333
因素主次顺序	$A > B > D > C$			
优水平	A_3	B_2	C_3	D_1
优组合	$A_3B_2C_3D_1$			

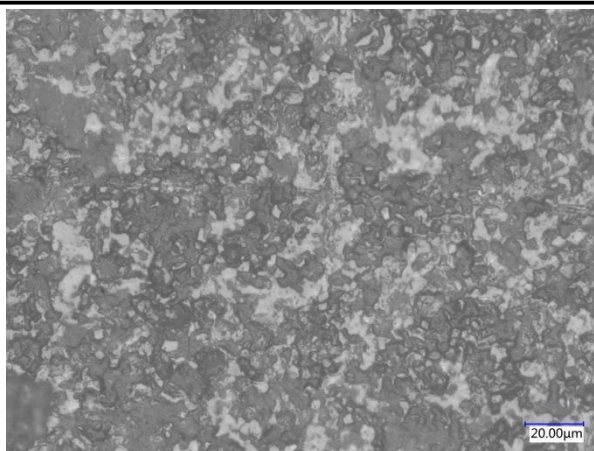


图 5- 16 $A_3B_2C_3D_1$ 研磨条件下氮化铝表面二维形貌图

该参数下的研磨后二维表面形貌如图 5-16 所示，与表面粗糙度最优组合相比较，表面呈现糊状，不够清晰，加工后白色区域面积明显少，不够平整，表面质量不如表面粗糙度组合。通过极差分析数据发现研磨液浓度在 0.5%wt 时，加工后的氮化铝表面质量优于 1%wt，因此后续正交实验在 0.5%wt 浓度下进行，并且能够节约加工成本。在粒径为 5 μm 氧化铝游离磨料研磨，结合表面粗糙度和材料去除，得到的最优工艺组合为 A₂B₃C₁D₁，即工艺参数组合为研磨流速 60mL/min、研磨转速 40r/min、研磨压力 5.1kPa、研磨液浓度 0.5%wt 时，其研磨后表面三维轮廓如图 5-17 所示，可以观察到划痕存在。

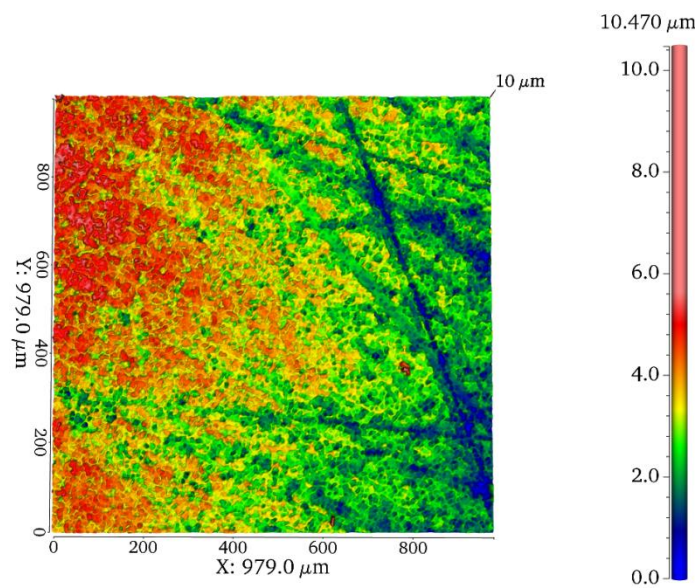


图 5- 17 A₃B₂C₃D₁ 研磨后表面三维轮廓图

5.5.3 1 μm 粒径正交试验结果及分析

在粒径 1 μm 磨粒研磨试验后，试验结果如表 5-17 所示。该粒径下研磨后氮化铝最佳表面质量为表面粗糙度 179nm，材料去除率 89nm/min。

表 5- 17 1 μm 氧化铝研磨后氮化铝正交实验结果

试验组 数	工艺因素			材料去除率 (nm/min)	表面粗糙度 Ra(μm)
	A	B	C		
1	50	30	5.1	43	0.5027
2	50	40	7.6	45	0.352
3	50	50	10.1	44	0.3925
4	60	30	7.6	23	0.3494
5	60	40	10.1	89	0.1792
6	60	50	5.1	93	0.3387
7	70	30	10.1	71	0.3818

8	70	40	5.1	35	0.3871
9	70	50	7.6	34	0.3971

由表 5-18 结果可得，对表面粗糙度的影响顺序大小是：研磨液流速、研磨盘转速、研磨压力，最佳工艺参数组合为 $A_2B_1C_2$ ，在该粒径下，研磨液流速为最重要影响因素，研磨后的表面形貌如图 5-18 所示，加工后表面仍有大面积不平整区域存在，材料去除率较低。

表 5- 18 $1\mu\text{m}$ 粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析

工艺因素	研磨液流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C
T_1	0.4157	0.4113	0.4095
T_2	0.2891	0.3061	0.3661
T_3	0.3886	0.3761	0.3178
$\overline{T_1}$	0.13857	0.1371	0.1365
$\overline{T_2}$	0.09637	0.10203	0.12203
$\overline{T_3}$	0.12953	0.12537	0.10593
R 极差	0.0422	0.03507	0.03057
因素主次顺序		$A>B>C$	
优水平	A_2	B_1	C_2
优组合		$A_2B_1C_2$	

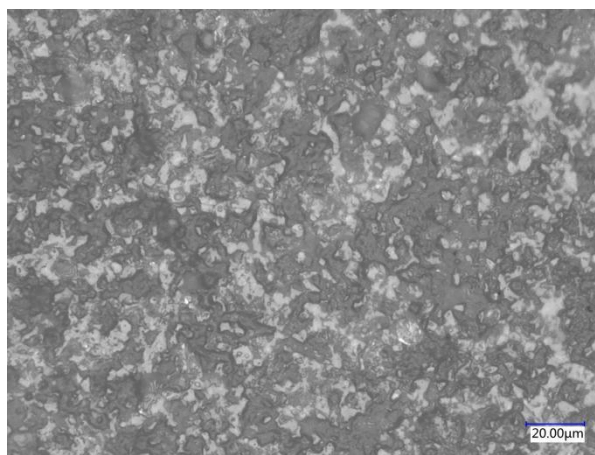


图 5- 18 $A_2B_1C_2$ 研磨条件下氮化铝表面二维形貌

通过表 5- 19 可以发现，在正交结果表中，对材料去除率的影响因素代大小与粗糙度不同，分别为研磨压力>研磨盘转速>研磨液流速，获得较优材料去除率的参数组合为 $A_2B_2C_3$ ，在工艺参数分别是研磨液流速为 60 ml/min，研磨转速为 40 r/min，研磨压力为 10.1kPa 条件下，加工后的表面加工质量明显优于表面粗糙度下的研磨参数组合，其研磨后二维表面形貌如图 5- 19 所示，从二维形貌图可以发现工件加工后表面无明显划痕，表面质量较好，白色区域面积明显

多余不平整面积，表面加工质量优于表面粗糙度条件下

表 5- 19 1 μm 粒径研磨后氮化铝材料去除率结果分析

因素	研磨液流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C
T ₁	68	56	57
T ₂	44	46	68
T ₃	47	57	34
$\overline{T_1}$	22.667	18.667	19
$\overline{T_2}$	14.667	15.333	12.667
$\overline{T_3}$	15.667	19	11.333
R 极差	8.0	3.667	11.334
因素主次顺序		C>A>B	
优水平	A ₂	B ₂	C ₃
优组合		A ₂ B ₂ C ₃	

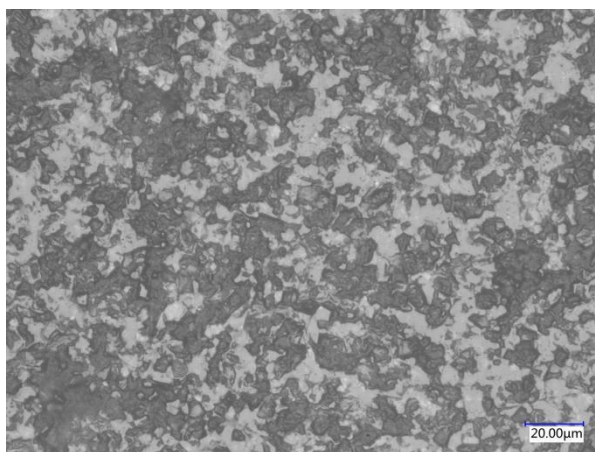


图 5- 19 A₂B₂C₃ 条件下氮化铝表面二维形貌

因此在粒径为 1 μm 氧化铝磨料时，研磨工艺参数组合选用因素 A₂B₂C₃（研磨液流速为 60 ml/min，研磨转速为 40 r/min，研磨压力为 10.1 kPa）。研磨后三维表面轮廓如图 5-20 所示，虽有划痕存在，但整体表面更光滑平整，高度差更小。

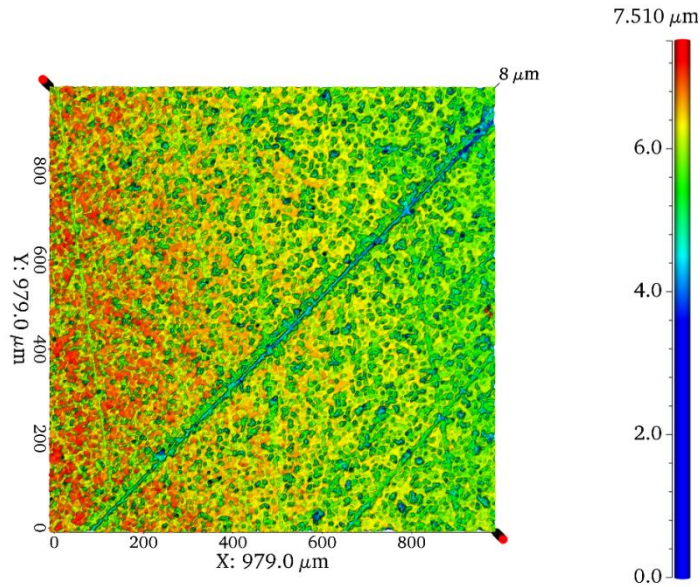


图 5-20 研磨后氮化铝氮化铝表面三维轮廓图

5.5.4 50nm 粒径正交试验结果及分析

正交研磨试验表面粗糙度和材料去除率结果如表 5-20 所示。

表 5-20 50nm 粒径氧化铝研磨后正交试验结果

试验组 数	工艺因素			材料去除率 (nm/min)	表面粗糙度 Ra(μm)
	A	B	C		
1	50	30	5.1	87.4	0.273
2	50	40	7.6	102.6	0.176
3	50	50	10.1	62.01	0.241
4	60	30	7.6	65.3	0.26
5	60	40	10.1	68.1	0.614
6	60	50	5.1	65.1	0.265
7	70	30	10.1	81.5	0.192
8	70	40	5.1	112.3	0.27
9	70	50	7.6	93.4	0.253

由表 5-21 结果可得，对表面粗糙度的影响顺序大小为：研磨液流速、研磨压力、研磨盘转速，最优工艺组合为 $A_1B_2C_2$ ，该条件下得到的表面粗糙度为 $0.176\mu\text{m}$ ，材料去除率为 102.6nm/min ，研磨后的二维表面形貌如图 5-21 所示，表面光滑明亮，无划痕，且不平整阴暗面积少，表面质量非常好。

表 5- 21 50nm 粒径研磨后氮化铝表面粗糙度结果分析

因素	研磨液流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C
T ₁	0.23	0.241	0.269
T ₂	0.379	0.353	0.229
T ₃	0.238	0.253	0.349
$\overline{T_1}$	0.07667	0.0803	0.0897
$\overline{T_2}$	0.1263	0.1177	0.07633
$\overline{T_3}$	0.0793	0.08433	0.11633
R 极差	0.04963	0.03337	0.04
因素主次顺序		A>C>B	
优水平	A ₁	B ₂	C ₂
优组合		A ₁ B ₂ C ₂	

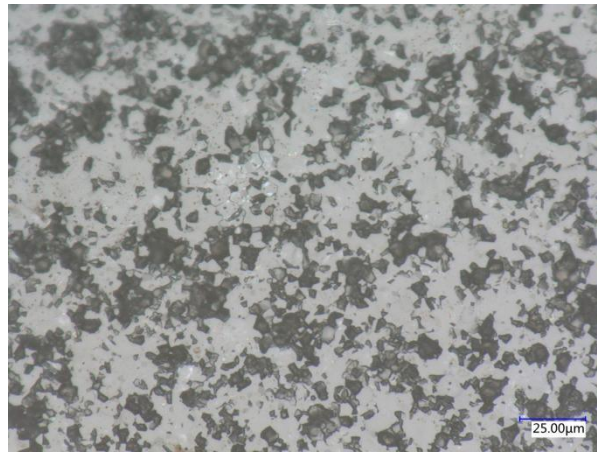
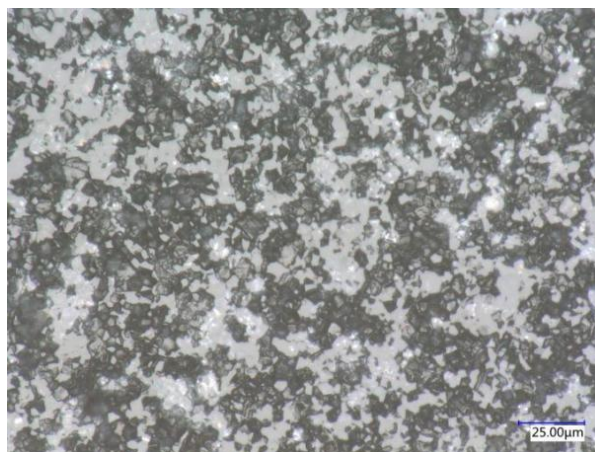


图 5- 21 A₁B₂C₂ 研磨条件下氮化铝表面二维形貌

由表 5-22 可知，通过上述正交试验结果发现，对材料去除率的影响因素代大小与粗糙度不同，分别为研磨液流速>研磨盘转速>研磨压力，最优参数组合取 A₂B₃C₁，二维表面形貌如图 5-22 所示，可以发现工件表面光滑无划痕，最优粗糙度条件下相比，白色平整区域面积减少，整体不如粗糙度条件下。

表 5- 22 50nm 粒径游离研磨材料去除率结果分析

工艺因素	研磨液流速 A	研磨转速 B	研磨压力 C
T ₁	84	78.06	88.26
T ₂	66.16	94.33	70.56
T ₃	95.73	73.5	70.53
$\overline{T_1}$	28	26.02	29.42
$\overline{T_2}$	22.053	31.443	23.52
$\overline{T_3}$	31.91	24.5	23.51
R 极差	9.857	5.423	5.91
Erfwa			
优水平	A ₂	B ₃	C ₁
优组合		A ₂ B ₃ C ₁	

图 5-22 $A_2B_3C_1$ 研磨条件下表面二维形貌

综合考虑表面粗糙度和材料去除率的影响，选取该粒径下最佳工艺路线，结果在粒径为 50nm 氧化铝磨料时，最佳工艺参数组合为 $A_1B_2C_2$ ，在该条件下研磨后氮化铝的三维表面形貌如图 5-23 所示，研磨后整体更光滑，高度差小，三维整体表面形貌整体平整一致。

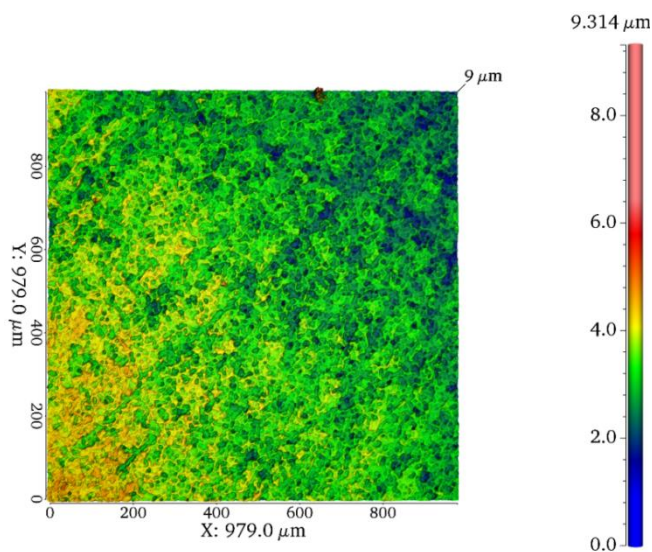


图 5-23 研磨后表面三维轮廓图

5.6 综合优化分析

通过上述正交试验结果极差分析后，可以发现在不同磨粒和不同粒径下的工艺参数组合不同，得到的结果截然不同，同时考虑材料去除率和表面粗糙度以及表面形貌等因素后，金刚石磨料和氧化铝磨料选择了不同的工艺参数组合并进行重复试验验证。由于粒径小的金刚石磨粒，容易存在尖端与氮化铝陶瓷表面的凹凸区域咬合现象，会使材料去除率降低，表面粗糙度变差，整体加

工质量下降，金刚石游离磨料研磨工艺选择的是粒径为 W180，研磨参数组合为 $A_2B_2C_3$ ，研磨时间为 10min，加工后的表面粗糙度为 $0.1763\mu\text{m}$ ，材料去除率为 $419\text{nm}/\text{min}$ ，优化后的二维表面形貌和三维轮廓图如图 5-24 所示。

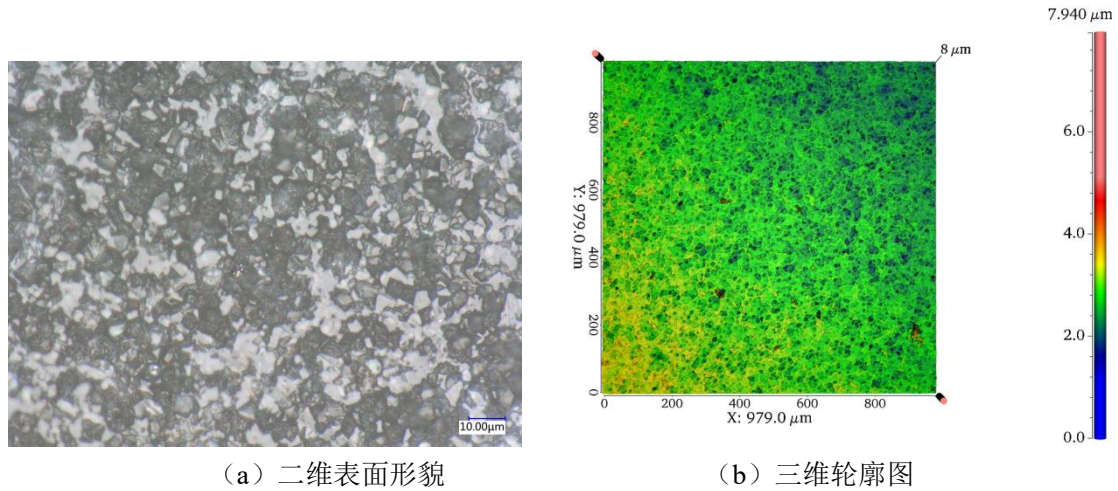


图 5-24 金刚石最优工艺组合研磨后表面形貌

氧化铝游离磨料研磨试验结果可知，在粒径为 50nm 条件下，最佳工艺参数组合选取为 $A_1B_2C_1$ ，研磨液流速为 $50\text{mL}/\text{min}$ 、研磨盘转速为 $40\text{r}/\text{min}$ 、研磨压力为 7.6kPa ，加工后的表面粗糙度为 $0.176\mu\text{m}$ ，材料去除率为 $102.6\text{nm}/\text{min}$ ，研磨时间为 15min，氧化铝磨粒的硬度低于金刚石，所以相同情况下，材料去除率低于金刚石磨料，加工后的表面二维形貌和三维轮廓图如图 5-25 所示，

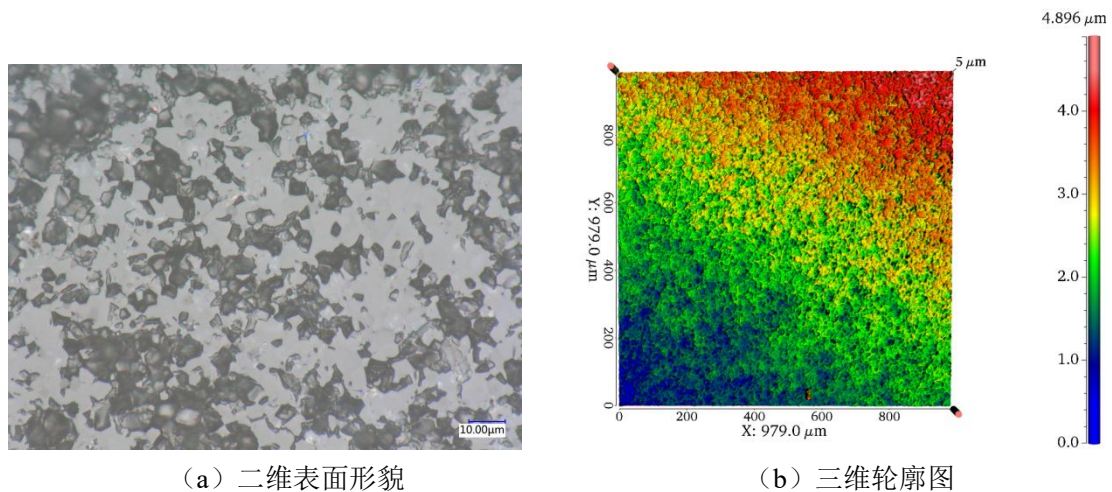


图 5-25 氧化铝最优工艺组合研磨后表面形貌

通过采用优化后的工艺路线加工氮化铝，得到后的表面质量光滑平整，无划痕，表面粗糙度为 170nm ，加工时长短，能够降低生产成本。

5.7 本章小结

本章研究了游离磨料研磨氮化铝材料研磨参数对于研磨质量的影响，通过研磨后表面质量和材料去除率以及表面形貌进行判定，进行了不同粒径下金刚石磨料和氧化铝磨粒游离磨料研磨氮化铝陶瓷工艺试验，先进行单因素试验确定各粒径下最佳研磨时间，后通过对研磨参数进行设计正交试验，对不同研磨参数对表面质量影响进行研究，利用极差方法分析，从而确定最优工作参数。

(1)由各粒径时间单一试验结果得到，金刚石磨粒不同粒径下的研磨时间分别为：W180 研磨时间为 10min、W120 研磨时间为 10min、W50 研磨时间为 15min。氧化铝磨粒不同粒径下的研磨时间分别为：5 μm 研磨时间为 10min、1 μm 研磨时间为 10min、50nm 研磨时间为 15min。

(2)根据金刚石游离磨料试验结果，极差分析发现，在粒径为 W180 时，工艺参数组合为研磨液流速 60 ml/min，研磨转速 60 r/min，研磨压力 7.6 kPa 条件下，获得最优表面质量，此时表面粗糙度为 0.1763 μm ，材料去除率达到 419nm/min，研磨压力对结果影响研磨最大。在粒径 W120 下选用组合因素为研磨液流速为 60 ml/min，研磨转速为 60 r/min，研磨压力为 7.6 kPa，工件表面粗糙度为 0.1972 μm ，材料去除率为 256nm/min，研磨盘转速影响最大。在粒径为 W50 选用组合因素为：研磨液流速 70 ml/min，研磨转速 50 r/min，研磨压力 7.6 kPa 时，表面粗糙度为 0.2205 μm ，材料去除率为 127nm/min，研磨压力影响最大。随粒径的减小，材料去除率减小不符合正常规律，后通过形貌分析，发现在 W120 粒径和 W50 粒径下，磨粒尖端会与氮化铝表面凹坑区域存在咬合现象，导致材料去除率下降，影响表面质量。

(3)根据氧化铝游离磨料正交试验的极差分析结果可知，在粒径为 5 μm 情况下，最优组合因素选用为研磨流速 60mL/min、研磨压力 5.1kPa、研磨转速 40r/min、研磨液浓度为 0.5%wt，得到表面粗糙度和材料去除率分别为 0.3705 μm 、199nm/min，由结果分析可得研磨液浓度为 1%wt 时，整体表面质量不如 0.5%wt 情况下，故后续研磨液浓度只采用 0.5%wt。在氧化铝磨料粒径为 1 μm 时，最优工艺路线是：A₂B₂C₃，表面粗糙度和材料去除率分别为 0.1792 μm 、

89nm/min，最大影响因素为研磨压力。磨料粒径 50nm 时，最优组合参数是：研磨液流速 50 ml/min，研磨转速 40 r/min，研磨压力 7.6kPa，研磨盘流速影响最大，得到表面粗糙度和材料去除率分别为 0.176 μ m、102.6nm/min。

(4) 对于研磨结果的侧重点不同，参数的选择也不同，达到相同表面质量要求下，侧重于材料去除率时，研磨工艺路线建议选为金刚石粒径 W180，研磨液流速为 60mL/min、研磨盘转速为 60r/min、研磨压力为 7.6kPa，研磨时间为 10min，加工后的表面粗糙度为 0.1763 μ m，材料去除率为 419nm/min，三维轮廓平面最大高低差为 7.940。若侧重于表面质量。研磨工艺路线建议选择氧化铝 50nm 粒径，研磨液流速 50mL/min、研磨盘转速为 40r/min、研磨压力为 7.6kPa，研磨时间为 15min 表面粗糙度为 0.176 μ m，三维轮廓最大高度差为 4.896，明显表面比金刚石磨粒更平整。

第 6 章 结论与展望

6.1 结论

本文针对如何高效获得氮化铝优异表面质量进行研究，通过分子动力学仿真方法构建金刚石研磨氮化铝材料的研磨过程，揭示在不同研磨参数下，氮化铝材料的微观去除机理，分析研磨深度和研磨速度对于表面质量的影响趋势。后通过纳米压痕验证氮化铝受力材料变形机制，不同载荷大小下氮化铝受力去除形式不同，间接验证仿真中深度对于表面质量的影响趋势。根据仿真最佳参数和微观变形趋势结合实际条件，设计氮化铝游离磨料正交试验，开展不同磨粒不同粒径下的研磨试验，在满足应用领域表面质量要求前提下，探索如何高效获得优质加工表面，通过优化工艺参数组合，提高加工效率。论文研究的主要工作和结论如下：

(1)通过构建单颗金刚石磨粒研磨氮化铝分子动力学仿真模型，根据氮化铝晶体结构设置原子间势函数和边界条件参数，仿真结果系统平衡状态下的系统势能为-825341eV，由于存在材料去除和氮化铝原子弹性恢复以及晶格变形重组等原因，会导致体系势能在-812963eV 附近波动。

(2)通过分子动力学仿真实验，研究不同研磨深度和速度对于表面加工质量的影响，结果可知，不同研磨深度下，当研磨深度为 10Å 时，体系变形程度最小，研磨微观形貌最为平整，研磨过程体系应力在 76256Pa 波动，磨粒在工件表面形成的拉压应力区域面积最小，相变原子数与 5Å 接近。平均切向力为 171.18nN、平均法向力为 368.32nN，研磨深度为 15Å 体系温度变化剧烈，温度最高。随研磨速度的增加，体系变形程度增加，材料去除原子数几乎分别为 3575、3599、3609，最大应力为 22335Pa、最小应力为-19063Pa，拉压面积区域随速度增大而增加，在研磨速度为 50m/s 时，相变原子数最少，亚表面损伤少。在研磨速度为 50m/s 时平均切磨削力最大，平均切向力和法向力分别为 82.34 和 216.81nN。在该研磨速度下的系统势能和温度变化也是最小，因此在研磨速度为 50m/s 仿真效果最佳。发现研磨深度越大，对工件加工表面质量的影响程度

越大，在保证加工效率前提下，应尽可能选择合适的切入深度，来减少工件晶格的破坏。研磨速度对于研磨表面的影响较小，主要是对于研磨时长的影响，加工过程中可以适当的增加研磨速度，从而降低加工周期，提高研磨效率。因此选择合适的研磨深度具有重要意义。

(3)通过纳米压痕试验结果分析，载荷位移曲线中的残余深度均不为零，证实氮化铝材料发生了弹塑性转变，氮化铝材料在较低载荷下，载荷位移曲线没有出现波动情况，当载荷较大时在卸载阶段会出现回返现象，由此推断氮化铝陶瓷材料的脆塑性临界载荷不高于 300mN 以上。随压入深度的增大，弹性回复率也随之增大，且弹性回复率都高于 48%，说明氮化铝具有良好弹性性能，有强的变形回复能力。通过蠕变位移的曲线斜率发现蠕变速率是逐渐降低，在低载荷下容易达到稳态，不容易产生亚表面损伤。合适载荷大小能够使材料去除形式为塑性。

(4)通过游离磨料研磨时长单因素试验结果可知，在考虑表面质量和材料去除率前提喜爱，不同磨粒不同粒径的研磨时间各不相同，各粒径合适的研时长结果分别是：金刚石磨粒粒径 W180: 10min、W120:10min、W50:15min；氧化铝磨料粒径 5 μ m: 10min、1 μ m: 10min、50nm:15min。

(5)通过正交试验结果极差分析，探索出不同磨粒不同粒径下最优工艺参数组合。对于研磨结果的侧重点不同，参数的选择也不同，在相同表面质量要求下，侧重于材料去除率时，研磨工艺路线建议选为金刚石粒径 W180，研磨盘转速为 60r/min、研磨液流速为 60mL/min、研磨压力为 7.6kPa，研磨时间为 10min，加工后的表面粗糙度为 0.1763 μ m，材料去除率为 419nm/min，三维轮廓平面最大高低差为 7.940。若侧重于表面质量。研磨工艺路线建议选择氧化铝 50nm 粒径，研磨液流速为 50mL/min、研磨盘转速为 40r/min、研磨压力为 7.6kPa，研磨时间为 15min 表面粗糙度为 0.176 μ m，三维轮廓最大高度差为 4.896，明显表面比金刚石磨粒更平整。

6.2 展望

本文研究了如何高效获得氮化铝加工表面，从微观去除机理和工艺参数角

度切入，利用分子动力学分析微观去除机理和纳米压痕试验，探索不同参数下的氮化铝的材料微观去除过程，后进行氮化铝陶瓷研磨工艺试验，通过对研磨工艺参数的探索试验，提出工艺优化参数组合，但是由于作者精力有限以及能力的限制，对于氮化铝材料微观去除过程和研磨工艺试验探索还不够深入。存在一下一些问题：

(1)仿真模型比较理想化，不够接近实际，实际加工中影响表面质量参数较多且是多因素共同耦合作用，本文仅针对研磨深度和速度进行研究，未对其他加工参数进行多因素探索。

(2)纳米压痕试验更侧重于材料压入过程，对于磨粒切削行进过程不能够准确反馈，在条件允许的情况下，可以进行纳米划痕试验，进行不同划痕速度和划刀大小试验研究，进一步探索氮化铝材料微观变形临界值。

(3)氮化铝工艺路线主要针对于游离磨料研磨的探索，固结磨粒研磨方法未进行探索研究。

参考文献

- [1]郝跃. 高效能半导体器件进展与展望[J]. 重庆邮电大学学报:自然科学版, 2021, 33(6):6.
- [2]Wu J , Li S , Yang W , et al. Study on heat sinks for high power LEDs[J]. Semiconductor Technology, 2010, 35(10):964-960.
- [3]杨宏宇,舒世立,刘林,等.半导体激光器模块散热特性影响因素分析[J].半导体光电,2016,37(06):770-775.
- [4]顾长志,金曾孙,吕宪义,邹广田,屠玉珍,方祖捷.使用金刚石膜热沉的半导体激光器特性研究[J].半导体学报,1997(11):840-843.
- [5]刘海华.热压烧结氮化铝陶瓷制备工艺的研究[D]. 2018.
- [6]Slack G A, Mcnelly T F. Growth of high purity AlN crystals[J]. Journal of Crystal Growth, 1976, 34(2):263-279.
- [7]蓝键, 马思琪, 李邑柯,等. 氮化铝粉末制备与应用研究进展[J]. 陶瓷学报, 2021,42(01):44-53.
- [8]吕帅帅, 周宇翔, 倪威,等. 高导热氮化铝陶瓷制备技术的研究现状及发展趋势[J]. 陶瓷学报, 2018, 39(6):672-675.
- [9]Wei Z , Xie W , Ge B, et al. Enhanced thermal conductivity of epoxy composites by constructing aluminum nitride honeycomb reinforcements[J]. Composites Science and Technology, 2020,199(2):304.
- [10]Zheng J J, He S J, Wang J, et al. Performance of dilicone rubber composites filled with aluminum nitride and alumina tri-hydrate[J]. Materials, 2020, 13(11):2489.
- [11]张永清, 阴生毅, 高向阳, 等. 新型高热导率氮化铝基微波衰减陶瓷研究[J]. 稀有金属材料与工程, 2020, 49(2):6.
- [12]步文博, 丘泰, 徐洁,等. AlN-C(石墨)复相材料微波衰减性能的研究[J]. 电子元件与材料, 2003(02):1-3.
- [13]Cristian C,Hui Y, Qian Z, et al. Aluminum nitride cross-sectional lamé mode resonators [J]Journal of Microelectro mechanical Systems, 2016, 25(2):275-

285.

- [14]Qian Z, Hui Y, Liu F, et al. Graphene-aluminum nitride NEMS resonant infrared detector[J]. *Microsystems and Nano Engineering*, 2016, 2 (1): 7
- [15]陈凯文. 基于氮化铝的双波段可调 DFB 激光器的设计[D]. 南京邮电大学.
- [16]诸政, 吕世涛, 张敖宇,等. 环形氮化铝压电 MEMS 谐振器的支撑结构设计研究[J]. *传感器与微系统*, 2022, 41(3):5.
- [17]Miwa K, Fukumoto A. First-principles calculation of the structural, electronic, and vibrational properties of gallium nitride and aluminum nitride[J]. *Physical Review B Condensed Matter*, 1993, 48(11):7897.
- [18]张乃夫. AlN 和 hBN 晶体生长及表征[D]. 中国科学院大学.
- [19]Lilyana K,Vasiliy C,Anna S,et al. Pulsed laser deposition of aluminum nitride films: correlation between mechanical, optical, and structural properties[J]. *Coatings*,2019,9(3):195.
- [20]Kwiseon, Kim, Walter, et al. Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN, and InN[J]. *Physical Review B*, 1996, 53(24):16310-16326.
- [21]Gerlich D, Dole S L, Slack G A. Elastic properties of aluminum nitride[J]. *Journal of Physics & Chemistry of Solids*, 1986, 47(5):437-441.
- [22]Thokala R, Chaudhuri J. Calculated elastic constants of wide band gap semiconductor thin films with a hexagonal crystal structure for stress problems[J]. *Thin Solid Films*, 1995, 266(2):189-191.
- [23]李琛,张飞虎,张宣等.硬脆单晶材料塑性域去除机理研究进展[J].*机械工程学报*,2019,55(03):181-190.
- [24]卢守相,杨秀轩,张建秋等.关于硬脆材料去除机理与加工损伤的理性思考 [J].*机械工程学报*,2022,58(15):31-45.
- [25]刘宁,朱永伟,李学等.硬脆材料平面研抛的材料去除机理研究进展[J].*材料导报*,2022,36(07):86-97.
- [26]林佳明. 基于分子动力学仿真的蓝宝石去除机理研究[D].华侨大学,2021.
- [27]Linquan Cai,Xiaoguang Guo,Shang Gao,et al. Material Removal Mechanism

- And Deformation Characteristics Of AlN Ceramics Under Nanoscratching[J]. Ceramics International, 2019, 45(16):20545-20554.
- [28] Paulo S. Nakano A .Kalia R K , et al.. Shock Loading On AlN Ceramics: a Large Scale Molecular Dynamics Study[J]. International Journal Of Plasticity, 2013, 51:122-131.
- [29] Paulo S. Branicio. Rajiv K. et al.. Atomistic Damage Mechanisms During Hypervelocity Projectile Impact On AlN: a Large-Scale Parallel Molecular Dynamics Simulation Study[J]. Journal Of The Mechanics & Physics Of Solids, 2008, 56(5):1955-1988
- [30] Henggao Xiang, Haitao Li, Tao Fu, et al. Molecular Dynamics Simulation Of AlN Thin Films Under Nanoindentation[J]. Ceramics International, 2017, 43(5):4068-4075.
- [31] Yuhong Cui, Haitao Li, Henggao Xiang, et al. Plastic Deformation In Zinc-Blende AlN Under Nanoindentation: a Molecular Dynamics Simulation[J]. Applied Surface Science, 2018, 466.
- [32] Henggao Xiang, Haitao Li, Jingjing Chen, et al. Plastic Deformation In Zinc-Blende AlN Under Nanoindentation: a Molecular Dynamics Simulation[J]. Applied Surface Science, 2019, 466:757-764.
- [33] Baozhen Li, Jianyong Li, Pengzhe Zhu, et al. Influence Of Crystal Anisotropy On Deformation Behaviors In Nanoscratching Of AlN[J]. Applied Surface Science, 2019, 487:1068-1076.
- [34] Jian Guo, Shilian Tan, Chen Xiao. Atomistic understanding Of Scratching-Induced Material Attrition Of Wurtzite Single-Crystal AlN Using Nanoscale Diamond Abrasive[J]. Tribology International, 2022, 169:107483.
- [35] Yan H, Jingting S, Peng G, et al. Atomic removal mechanism of nano polishing for single-crystal AlN substrate via molecular dynamics[J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2023, 156:107294.
- [36] Takahashi Y, Kikuchi M, Suzuki S, et al. Transmission electron microscopy of surface damages resulting from wet polishing in a polycrystalline

- aluminum nitride substrate[J]. Journal of the Ceramic Society of Japan, 2010, 99(1151):613-619.
- [37]Filatov Y,Sidorko D. Formation of flat surfaces of optoelectronic components in diamond polishing[J]. Journal of superhard materials: Sverkhтвердые материалы, 2017, 39(2):129-133.
- [38]Zhou Z Z, Yuan J L, Lu B H. Study on the Finishing Process for the Aluminum Nitride Substrates[J]. Advanced Materials Research, 2009, 69-70:282-286.
- [39]尹青, 张国玲, 唐会明,等. SiO₂抛光液对 AlN 基片抛光性能的影响[J]. 微纳电子技术, 2010, 47(6):376-380.
- [40]Jung H L, Cheol W P, Jae H P, et al.Optimization of chemical mechanical polishing for bulk AlN single crystal surface [J].Journal of the Korean Crystal Growth and Crystal Technology, 2018, 28(1): 51-5.
- [41]王建彬,朱永伟,谢春祥等.固结磨料研磨蓝宝石单晶过程中研磨液的作用[J].光学精密工程,2014,22(11):3004-3011.
- [42]王建彬. 固结磨料研磨蓝宝石工件的材料去除机理及工艺研究[D].南京航空航天大学,2015.
- [43]Allen M P, Tildesley D J. Computer simulation of liquids [M]. Clarendon: Oxford University Press, 1987.
- [44]文玉华,朱如曾,周富信等.分子动力学模拟的主要技术[J].力学进展,2003(01):65-73.
- [45]朱博. 基于分子动力学纳米压痕模拟的单晶碳化硅变形机理研究[D].吉林大学,2020.
- [46]王超,李淑娟,柴鹏等.单晶 SiC 微切削机理分子动力学建模与仿真研究[J].兵工学报,2018,39(08):1648-1654.
- [47]苏文锻.系综原理[M].厦门大学出版社,1991.
- [48]Hoover G W. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions[J]. Physical Review A,1985,31(3): 1695-1697
- [49]Berendsen C J H,Postma M P J,Gunsteren V F W, et al. Molecular dynamics

- p>with coupling to an external bath[J]. Journal of Chemical Physics,1984,81(8):3684-3690.
- [50]Schneider, T, Stoll, E. Molecular-dynamics study of a three-dimensional one-component model for distortive phase transitions[J]. Physical Review B, 1978, 17(3): 1302.
- [51]Hoover W G. Constant-pressure equations of motion[J]. Physical Review A, 1986, 34(3): 2499.
- [52]Fang T H, Weng C I. Three-dimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale[J]. Nanotechnology, 2000, 11(3):148.
- [53]Benkabou F , Certier M , Aourag H .Elastic Properties of Zinc-blende G a N, A l N and I n N from Molecular Dynamics[J].Molecular Simulation, 2003, 29(3):201-209.
- [54]Tungare M, Shi Y, Tripathi N, et al. A Tersoff-based interatomic potential for wurtzite AlN[J]. physica status solidi (a), 2011, 208(7):1569.
- [55]Vashishta P, Kalia R K, Nakano A, et al. Interaction potential for aluminum nitride: a molecular dynamics study of mechanical and thermal properties of crystalline and amorphous aluminum nitride[J]. Journal of Applied Physics, 2011, 109(3):1550.
- [56]Kamal Choudhary,Tao Liang,Kiran Mathew, et al. Dynamical properties of AlN nanostructures and heterogeneous interfaces predicted using COMB potentials[J]. Computational Materials Science,2016, 113:80-87.
- [57]Henggao Xiang,Haitao Li,Xianghe Peng. Comparison of different interatomic potentials for MD simulations of AlN[J]. Computational Materials Science,2017, 140:113-120.
- [58]Mayo Stephen L.Olafson Barry D.Goddard William A. DREIDING: a generic force field for molecular simulations[J]. The Journal of Physical Chemistry,1990, 94(26) : 8897-8909.
- [59]Rappe A K , Casewit C J , Colwell K S , et al. UFF, A Full Periodic Table

- Force Field for Molecular Mechanics and Molecular Dynamics Simulations[J]. Journal of the American Chemical Society, 1992, 114(25):10024-10035.
- [60]Plimpton S J. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics[J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1):1-19.
- [61]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.
- [62]Tang Peng, Feng Junyuan, Wan Zhenping, et al. Influence of grain orientation on hardness anisotropy and dislocation behavior of AlN ceramic in nanoindentation[J]. Ceramics International, 2021, 47(14) : 20298-20309.
- [63]张泰华.微/纳米力学测试技术: 仪器化压入的测量,分析,应用及其标准化[M]. 科学出版社, 2013.
- [64]Branco R, Pearsall E J, Rundle C A, et al. Quantifying the plant actin cytoskeleton response to applied pressure using nanoindentation[J]. Protoplasma, Protoplasma, 2017, 54(2): 1127 - 1137.
- [65]黄虎. 压痕/划痕测试若干理论与基于自制仪器的试验研究[D]. 吉林大学, 2014.
- [66]张广辉. 金刚石纳米抛光碳化硅的分子动力学数值模拟研究[D]. 天津理工大学, 2019.
- [67]Robert M. Elder, William D. Mattson, Timothy W. Sirk. Origins of error in the localized virial stress[J]. Chemical Physics Letters, 2019, 731:136580-136585.
- [68]José P, Rino, Ingvar Ebbsjö, et al. Short- and intermediate-range structural correlations in amorphous silicon carbide: A molecular dynamics study[J]. Physical Review B, 2004, 70(4):2199-2208.
- [69]E. Maras, O. Trushin, A. Stukowski, et al. Global transition path search for dislocation formation in Ge on Si(001)[J]. Computer Physics Communications, 2016, 205 : 13-21.
- [70]Oliver W C, Pharr G M. Measurement of hardness and elastic modulus by

- instrumented indentation: Advances in understanding and refinements to methodology. *Journal of materials research*, 2004, 19(1):3-20.
- [71]张泰华. 微/纳米力学测试技术——仪器化压入的测量、分析、应用及其标准化[M].北京: 科学出版社, 2013:33-36.
- [72]翟文杰, 杨德重. 立方碳化硅 CMP 过程中机械作用分子动力学仿真[J]. 材料科学与工艺, 2018, 26(03): 10-15.
- [73]张桐齐, 岳晓斌, 雷大江, 等. 磨粒半径对金刚石研磨加工影响机制的仿真研究 [J]. 金刚石与磨料磨具工程, 2021, 41: 89-94.
- [74]韦嘉辉. 单晶氧化镓纳米力学行为及游离磨料研磨实验研究[D].江苏大学.
- [75]唐鹏. 氮化铝陶瓷压痕/划痕的各向异性变形行为及产生机理[D].华南理工大学.
- [76]敖萌灿, 黄金星, 曾毓贤等. 超精密磨削 YAG 晶体的脆塑转变临界深度预测[J]. 光学精密工程, 2024, 32(01):84-94.
- [77]崔杰, 杨晓京, 李云龙等. 基于纳米压痕与纳米划痕实验的单晶硅超精密切削特性研究[J]. 人工晶体学报, 2023, 52(09):1651-1659.
- [78]李娟, 陈秀芳, 马德营, 等. SiC 单晶片的超精密加工[J]. 功能材料, 2006: 70-72.
- [79]陈勇臻. SiC 单晶抛光片的制备与表征[D]. 西安: 西安理工大学, 2008.
- [80]Cheng W, Yin Y G, Li Y P, et al. Discussion on the lapping and polishing process of 4H-SiC wafer[C]. 8th Annual IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems (NEMS), 2013: 841-844.
- [81] Tsai M Y, Wang S M, Tsai C C, et al. Investigation of increased removal rate during polishing of single-crystal silicon carbide[J]. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2015, 80(9-12): 1511-1520.
- [82]张银霞, 杨乐乐, 郜伟, 等. 固结磨料研磨 SiC 晶片亚表面损伤截面显微检测技术[J]. 人工晶体学报, 2013, 42: 906-910.

攻读硕士学位期间发表学术论文及参研项目

一、发表学术论文

- [1] 潘飞,王建彬,徐慧敏等.氮化铝陶瓷的超精密加工研究现状与发展趋势[J].陶瓷学报,2023,44(02):208-216.
- [2] Wang, Q.; Wang, J.; Pan, F. Effect of Strain Rate and Temperature on the Tensile Properties of Long Glass Fiber-Reinforced Polypropylene Composites. Polymers 2023, 15, 3260.
- [3] 王巧玉,王建彬,潘飞等.塑料后尾门的拓扑优化及其轻量化研究[J].井冈山大学学报(自然科学版),2023,44(03):83-90.
- [4] 徐慧敏,王建彬,潘飞等.碳化硅晶片的化学机械抛光技术研究进展[J].现代制造工程,2022(06):153-161+116.

三、参研项目

- [1] 安徽省高校优秀青年人才支持计划重点项目(gxyqZD2019051);
- [2] 安徽省仿真设计与现代制造工程技术研究中心开放基金项目(SGCZXYB1804);
- [3] 2018年安徽工程大学中青年拔尖人才培养计划和芜湖市科技计划资助项目(2020yf20);
- [4] 军民两用航空发动机密封组件替代进口的关键核心技术研究与应用
- [5] 轻量化铝合金车身结构成型及连接技术研究 with 规模化应用;

致谢

鲜衣怒马少年时，不负韶华行且知。行文至此，思绪万千，二十余载求学生涯即将落下帷幕。以前总觉得来日方长，毕业遥遥可及，可以写下去的梦很长。我与安徽工程大学的故事始于 17 金秋，终于 24 盛夏，本科四年、研究生三年时光转瞬即逝，回首三年光阳，满眼繁华，日光所及，皆是回忆，纵有万般不舍，皆是感恩，今借此文聊表谢忱，碎碎念几句。

饮水思其源，学成念吾师。首先感谢恩师王建彬教授在三年的研究生时光给与我的照顾和帮助。初与老师交谈时，便为迷茫的我指点的学习方向，实验遇到问题时，老师总能够提出针对性的建议，从论文的开始到结束，离不开老师的细致入微的指导。从老师身上学到远不止专业知识，更多的是解决问题思维的转变，老师严谨细致，一丝不苟的作风更是对我影响深。同时也要感谢同课题组的老师和其他帮助过我的老师，祝各位老师今后工作顺利，身体健康。

焉得援草，言树之背。感谢我的父母和姐姐对我学业上的支持和二十余载，父母倾尽他们最好的一切供我求学，暖衣饱食，无后顾之忧，学有成，惜父母之恩无以为报，愿你们永远平安、健康和快乐是我最大的心愿。

愿岁并谢，与友长兮。感谢朋友、同窗、同学三载，朝夕相处，一起并肩作战为梦想拼搏的日子弥足珍贵。我们将跃入人海，各有风雨灿烂，山顶见。

初见乍惊欢，久处仍怦然。感谢与我一路相伴的冯女士，你一直以来给与最大的鼓励和安慰，总能够提供情绪价值让我静下心来做事，未来还要继续携手前行，书写美好人生。

尚德敏学 唯实惟新

