

DOI:https://doi.org/10.12442/j.issn.1002-185X.20260160

4H-SiC 热辅助纳米切削机理的分子动力学研究

耿瑞文^{1,2,3}, 涂佳俊¹, 田助新^{1,2}, 谢启明⁴, 游津京⁴, 李立军^{1,2}, 吴海华^{1,2}

(1 三峡大学 石墨增材制造技术与装备湖北省工程研究中心, 湖北 宜昌 443002)

(2 三峡大学 机械与动力学院, 湖北 宜昌 443002)

(3 隧道工程灾变防控与智能建养全国重点实验室 山东大学, 山东 济南 250061)

(4 昆明物理研究所, 云南 昆明 650223)

摘 要: 4H-SiC 因其优异的热导率、高击穿电压和良好的高温稳定性, 在功率电子与高频器件等领域具有重要应用。然而, 其极高的硬度和较低的断裂韧性导致在纳米尺度切削加工面临亚表面损伤严重、刀具磨损严重等问题。研究表明热辅助加工能显著改善材料的加工性能, 调控不同的切削温度有益于促进塑性变形和提高加工效率, 因此探究温度对 4H-SiC 纳米切削过程中材料去除机理的影响具有重要意义。本研究采用分子动力学模拟方法, 系统研究了不同切削温度(100-1000 K)下 4H-SiC 的切削力学行为、表面形貌、亚表面损伤、应力分布及位错演变规律。结果表明: 随着切削温度升高, 平均切削力显著降低, 在 1000 K 时切向与法向切削力较常温(300 K)分别下降 15.4%和 29.3%; 中高温(500-600 K)切削能有效抑制亚表面损伤、缓解应力集中并减少位错密度; 但温度过(≥800 K)则会因位错增殖与缠结加剧而导致损伤加深、应力分布范围扩大。本研究揭示了温度调控下 4H-SiC 的塑性去除机制与损伤演化规律, 为其高效低损伤纳米切削加工提供了理论依据。

关键词: 4H-SiC 晶体; 切削温度; 超精密切削; 亚表面损伤; 分子动力学

中图分类号: TG???

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2017)0?-0???-0?

1 引言

纳米切削是一种直接利用金刚石刀具实现原子级去除的先进加工技术^[1], 是实现原子级精度表面加工的前沿手段, 在半导体器件、光学元件和微机电系统等精密制造领域占据着不可替代的重要地位。然而, 传统的单点金刚石切削常面临加工效率低下、刀具磨损严重等问题。为解决这些问题, 学界已提出并测试了椭圆振动切削、激光辅助切削和离子注入等多种辅助技术^[2-4]。在半导体材料中, 碳化硅(Silicon carbide, SiC)因其高热导率、低热膨胀系数和高击穿电压等优异性能而被广泛应用^[5-7], 其中 4H-SiC 多型体更因在功率电子器件等领域的关键应用备受关注^[8]。但是, 4H-SiC 极高的硬度和较低的断裂韧性给纳米切削带来了严峻挑战。热辅助加工作为改善此类硬脆材料切削性能的有效途径, 已成为精密加工领域的研究热点^[9]。因此, 研究切削温度对 4H-SiC 纳米切削机理的影响, 对于优化材料塑性去除行为、实现低损高效加工具有重要的理论意义和工程价值。

分子动力学(Molecular dynamics, MD)模拟作为一种模拟分子与原子运动相互作用的有效方法, 可用于分析纳米加工过程中原子间的接触行为与材料去除机制。

Liu^[10]等人进行分子动力学模拟研究了晶体各向异性对 4H-SiC 纳米切割机制的影响。研究发现, 沿(0001)晶面<1-100>晶体取向加工时, 平均切向力和法向力较小, 切削力曲线波动幅度较低。(0001)晶面的晶体各向异性对亚表面缺陷厚度影响最小, 而(1000)晶面则显示出显著的各向异性效应。Liu^[11]等人通过分子动力学模拟研究了切削速度和未变形切削厚度对单晶 3C-SiC 纳米切削过程中材料去除机制的影响。研究发现, 提高切削速度可有效提升材料去除率, 并降低切削力与静水压力, 但同时也会降低已加工表面质量并增加亚表面损伤层厚度; 增大未变形切削厚度虽可提高加工效率, 但会导致亚表面损伤层增厚、位错原子增多以及静水压力上升。Ning^[12]等人进行分子动力学模拟研究了温度对多晶 3C-SiC 纳米压痕内部结构转变的影响。研究发现, 温度越高, 位错堆积程度越高, 位错结构从分散态向连续态转变; 温度升高会减少离散原子的转化数量, 增加立方晶格原子数量。Chavoshi^[13]等人进行分子动力学模拟研究了温度对单晶硅各向异性切削行为的影响。研究发现, 随着切削温度升高, 硅的各向异性(切削力、比切削能、屈服应力等)显著增强; 与 300 K 相比, 在 1173 K 时(111)晶面的比切削能和 von Mises 应力分别降低 25%和 32%。

收到初稿日期:

基金项目: 隧道工程灾变防控与智能建养全国重点实验室开放基金课题(TESKL202415)、湖北省教育厅科学技术研究项目(B2024020)、湖北省水利水电重点实验室开放基金课题(2024KJC04)、宜昌市自然科学研究项目(A25-3-005)

作者简介: 耿瑞文, 男, 1993 年生, 博士, 讲师, 三峡大学石墨增材制造技术与装备湖北省工程研究中心, 湖北 宜昌 443002, E-mail:precious.grw@gmail.com

综上所述,当前研究多集中于切削参数、晶体各异性等对于纳米切削加工的影响和温度对于 SiC 内部结构转变的影响。然而,对于不同切削温度对切削过程中材料变形、表面形成及损伤机制的影响规律的研究存在缺乏,对其内在机理的分析明显不足,亟待深入探索。

为了研究 4H-SiC 切削温度对于切削过程的影响规律,本研究通过分子动力学模拟的方法研究了不同切削温度下对 4H-SiC 纳米切削过程中的力学性能、亚表面损伤深度、表面形貌、应力分布和位错的影响,同时揭示了不同切削温度下材料的去除机理,为探究 4H-SiC 在不同切割温度下的高效加工提供了理论依据。旨在检验切削温度如何调控 4H-SiC 纳米切削的变形机制,并由此影响其力学响应与亚表面损伤。

2 分子动力学计算

2.1 仿真模型

本研究采用 AtomsK 通过扩胞命令建立 4H-SiC 的工件模型,工件尺寸为 $261.4 \text{ \AA} \times 138.5 \text{ \AA} \times 130.9 \text{ \AA}$,原子数量为 459680。通过大规模原子分子并行模拟器 LAMMPS 搭建纳米切削模型并进行模拟运算。切削模型如图 1,采用了前角和后角均为 10° 的金刚石刀具,刀具圆角半径为 2 nm,切削过程详细参数见表 1。切削距离设为 20 nm,是基于该长度已超出约 10 nm 的初始力值瞬态区并接近亚表面损伤的饱和尺度(约 18 nm),后续模拟中 10 - 20 nm 段平均切削力波动小于 10%且损伤深度不再单向增长,证实切削力与损伤形貌均已达到准稳态收敛。选取 $23.9 \text{ \AA}$ (2.39 nm) 的切削深度,是因其与金刚石刀具典型刃口半径(约 2 - 3 nm)相当,处于纳米切削中“耕犁 - 剪切”过渡的敏感区间,可最大程度激发尺寸效应并揭示材料去除由挤压非晶化主导向位错滑移辅助转变的竞争机制。该深度与文献中 4H-SiC 及同类硬脆材料纳米切削模拟广泛采用的 1 - 3 nm 切深范围高度吻合。切削温度选择的范围在 100 K-1000 K 之间,即能表征脆性断裂特征又覆盖了韧脆转变区(700-900 K),同时低于氧化温度规避了非切削干扰。

如图 1 所示,将工件划分为边界层、恒温层和牛顿层。边界层原子被设置为固定,恒温层的原子采用伯朗森热力学控制,牛顿层原子运动遵循牛顿第二定律^[4]。为了模拟不同温度下的纳米切削行为,当完成能量最小化后使用 NVT 弛豫将工件加热到指定温度,同时根据目标温度适当增加弛豫步数以保持弛豫稳定。针对在最高温度 1000 K 时 Berendsen 恒温器能否维持合理的正则系综分布,提取恒温层原子的动能和温度涨落进行计算。计算目标动能和瞬时动能的偏差及瞬时温度偏差,最后计算恒温层瞬时温度方差与理论值的比值 R 约等于 1,

说明此时涨落幅度与正则系综相符。为确保在切削开始前体系已处于稳定的热力学状态,选取最后 5000 步数据作为观察窗口。通过计算该窗口内每 100 步温度涨落幅度与目标温度的比值作为判断平衡的依据。当确保其比值偏差保持在 $\pm 0.2\%$ 时判断此时系统处于稳定状态。根据以上方法计算的系统弛豫到 800 K 时,其比值的变化图如图 2。根据上述要求针对不同温度采用的弛豫步数表如表 2。

表 1 纳米切削模拟参数

Table 1 Nanometric cutting simulation parameters	
Simulation condition	Parameters setting
Model dimension/ $\text{\AA}$	$261.4 \times 138.5 \times 130.9$
Cutting speed/(m/s)	100
Cutting depth/ $\text{\AA}$	23.9
Radius/ $\text{\AA}$	20
Rake angle/ $^\circ$	10
Clearance angle/ $^\circ$	10
Equilibration temperature/K	100、300、500、600、800、1000
Timestep/ps	0.01

表 2 不同切削温度的弛豫步数

Table 2 Relaxation steps at different cutting temperatures	
temperature	relaxation steps
100/K	50000
300/K	30000
500/K	50000
600/K	70000
800/K	90000
1000/K	120000

2.2 势函数描述

Vashishta 势函数是一种包含两体和三体项的多项势,并明确考虑了长程库伦相互作用和电荷转移效应,因其对位错、堆垛层错和亚表面损伤的预测质量明显优于 Tersoff,被广泛应用于评估单晶 4H-SiC 的材料性能^[15]。Cai^[2]等人通过分子动力学研究 4H-SiC 激光辅助单磨粒划擦表面/亚表面损伤机理时采用了 Vashishta 势函数,虽然该研究针对激光辅助划擦,存在显著温度梯度,但其对 Vashishta 势函数在高温下稳定性的验证仍为本研究均匀预热条件的势函数选用提供了有力支撑。为了更好的预测温度对于纳米切削过程中材料的亚表面损伤和位错演变,因此本研究采用 Vashishta 势函数来描述 4H-SiC 中内部原子的相互作用力,其系统能量表达式如下:

$$E = \sum_{i < j} V_{ij}^{(2)}(r_{ij}) + \sum_{i, j < k} V_{ijk}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}, \cos\theta_{ijk})$$

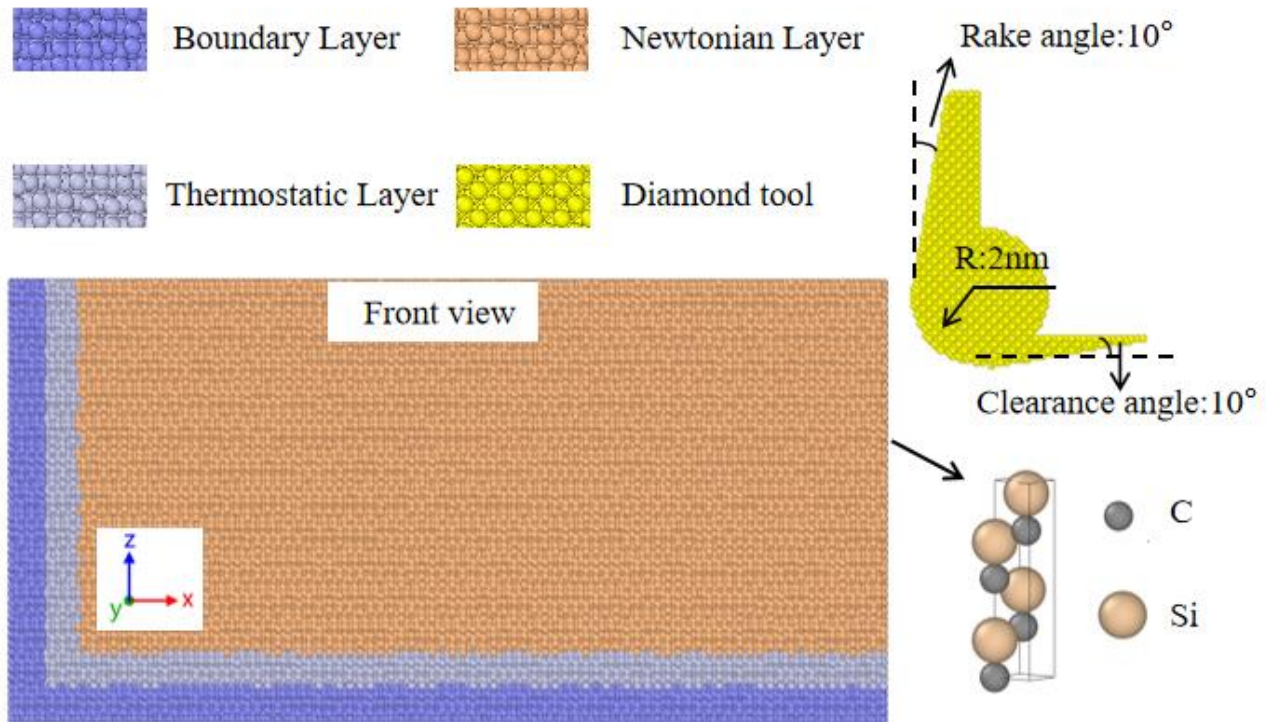


图 1 纳米切削模型

Fig.1 Thermally assisted nanometric cutting model

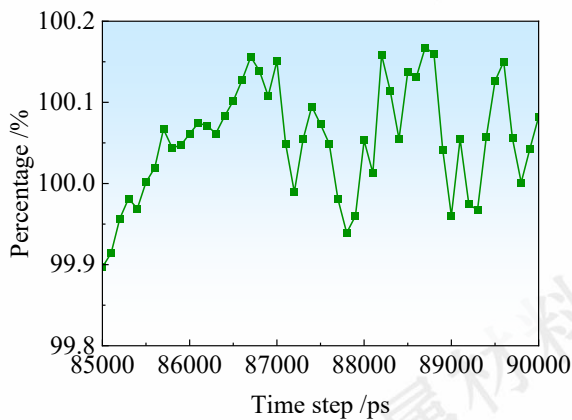


图 2 不同时间步下目标温度与时间温度的比值

Fig.2 Ratio of target temperature to time temperature at different time steps

其中, E 是总能量, $\sum_{i<j} V_{ij}^{(2)}(r_{ij})$ 是一个两体项,

$\sum_{i,j,k} V_{ijk}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}, \cos\theta_{ijk})$ 是一个三体项, r_{ij} 和 r_{ik} 分别表示原子 ij 与 ik 之间的距离。

采用 Lennard - Jones(LJ) 势描述金刚石刀具与 4H-SiC 工件之间的相互作用力^[16], 其能量表达式如下:

$$E = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], r < r_0$$

其中 r 、 r_0 、 ϵ 和 σ 分别表示两个原子之间的距离、

截止半径、内聚能和平衡距离。对于 Lennard-Jones 势, 通常截止半径取 2.5σ 到 3.5σ 。这个范围能保证势能已衰减至势阱深度 ϵ 的 1%~0.1% 以下, 同时力也基本消失。将截止半径设置为 $10\text{ \AA}$, 此时一方面 LJ 吸引部分已基本衰减至零, 另一方面也不会影响工件原子对刀具的吸附作用, 其他相关参数如表 3 所示。

表 3 刀具与工件之间 LJ 势函数电位参数

Table 3 The parameters of LJ potential between the tool and the

workpiece		
Pair	$\sigma(\text{\AA})$	$\epsilon(\text{eV})$
C-C	3.8983	0.00412
C-Si	4.158	0.00412

考虑到截止半径的选择是否会对切削力的计算结果存在敏感性和高温下截断效应是否会导致力的偏差出现温度依赖性, 故以 C - Si 键为例计算在 $10\text{ \AA}$ 处的势能:

$$V(10) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \approx -9.18 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

其对应力的大小与切削力的量级差距过大, 故在高温下原子热振动幅度增大引起的切削力的跳变远小于切削力的涨落。在分子动力学模拟中, 由于金刚石与 4H-SiC 工件存在显著的硬度差, 为了聚焦于工件的微观特性和提高计算效率, 因此将金刚石刀具设置为刚体。

3 结果分析

3.1 温度对切削力的影响

在纳米切削中, 切削力主要源于材料的变形抗力、切屑与刀具间的摩擦阻力。切削力的波动直接影响着切削过程中材料去除的难易程度, 因此分析切削力的变化对于揭示材料去除和变形行为具有重要意义^[17, 18]。图 3 展示了不同温度下单晶 4H-SiC 纳米切削过程切向和法向切削力与切削距离之间的关系。从图 3 可以看出, 切向和法向切削力在切削过程中均经历了一个激增的过程, 此时处于刀具切削进入工件内部的阶段。当刀具由开始切削到完全进入的过程中, 随着切削距离的增加刀具前方聚集的原子数量增加, 同时材料的变形也由弹性变形向塑性变形转变导致出现切削力大幅度增加^[19]。当切削距离增大之后切削过程逐渐进入到稳定阶段, 此时虽然切削力仍有波动但稳定在一定的范围内。如何准确划分两个阶段的转折点对于后续切削力的深度分析具有重要意义。以法向切削力为例, 针对其曲线先进行非线性拟合后选取窗口宽度为 4 进行滑动平均, 最后微分得到曲线移动平均斜率图如图 4。通过计算稳态均值发现, 当斜率绝对值小于 0.01 时, 此时系统趋于稳定。参考移动平均斜率发现在 300 K 时, 系统在 33 Å 时达到稳定, 同时随着温度的升高系统会更早达到稳定阶段。

为了更好地观察到温度对于切削过程中切削力变化的影响, 通过计算稳定阶段的平均切向和法向切削力绘制不同温度下切削力的变化图。由图 5a 可以看出, 随着温度的升高, 切削过程中的平均切削力呈现递减的现象。当温度低于 600 K 时, 平均切削力降低的幅度并不明显。当温度超过 600 K 以后, 高温引发的热软化效应变得显著, SiC 的原子间结合力减弱, 材料对刀具的抵抗作用

减弱, 因此高温下切削力显著降低。当温度为 1000 K 时, 相比于常温下的纳米切削, 此时平均切向和法向切削力分别下降了 15.4% 和 29.3%。同时出于评估温度对加工动态性的考量, 分别计算了稳定阶段切削力波动的标准差。结果表明, 当温度为 300 K 时切削力波动的标准差为 0.42, 低温能够有效的降低切削力的波动, 此时切削力波动的标准差为 0.35。同时, 随着温度的升高, 标准差的值也逐渐降低, 800 K 时切削力波动的标准差值最低仅为 0.27, 1000 K 时出现反弹上升至 0.30。切削力波动的标准差说明高温能够有效提高切削过程的稳定性, 但当温度达到 1000 K 以后, 虽然此时切削力仍然下降, 但是由于热扰动的影响使加工稳定性下降。

为完整评判热辅助加工在能量效率层面的优劣, 通过对切向切削力曲线积分得到切削总功, 再将其除以材料去除体积, 求得比切削能。图 6 给出了切削距离为 199.55 Å 时, 比切削能随温度的变化情况。由图 6 可以看出, 随着温度的升高, 比切削能逐渐降低, 说明高温能够有效提高能量利用率和材料去除率。

3.2 温度对表面形貌的影响

在纳米切削过程中, 为了更清晰地观察到原子的运动轨迹和材料去除行为, 在可视化软件 OVITO 中能够通过标记粒子的方法更好地呈现切削过程中原子的运动轨迹^[20]。如图 7 所示, 展示了切削温度为 300 K 时切削过程中原子的运动轨迹变化图。如图 7a 所示, 将待切削区域在 X 方向以 30 埃的长度均匀划分为 6 个区域并着色。观察图 7b 可以看出切削原子在刀具切削作用下呈侧向卷积状, 切屑原子组成与着色区域规律大致相同。由于较小的刀具前角增大了前刀面对切屑的挤压运动, 使切屑更易向上卷曲。着色区域的一致性符合切削过程的

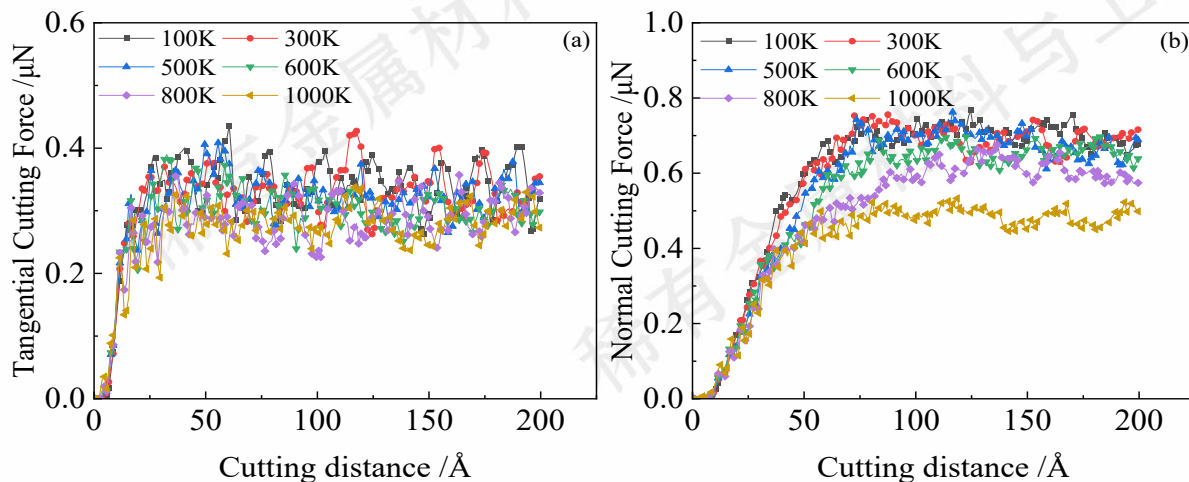


图 3 不同温度下切削力与切削距离曲线: (a)切向切削力; (b)法向切削力

Fig.3 Curves of cutting force versus cutting distance at different temperatures

(a) Tangential cutting force; (b) Normal cutting force

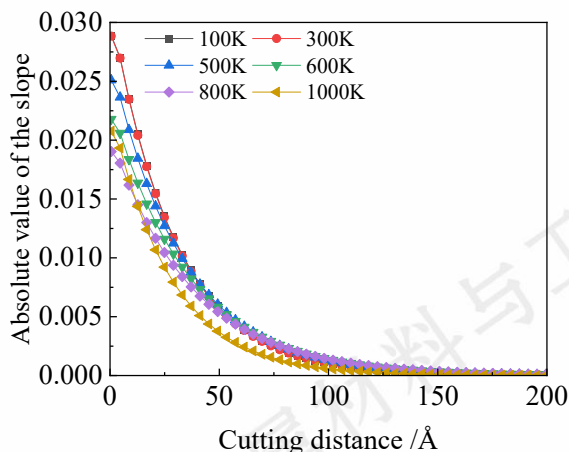


图 4 不同切削距离时斜率的绝对值

Fig.4 Absolute value of the slope at different cutting distances

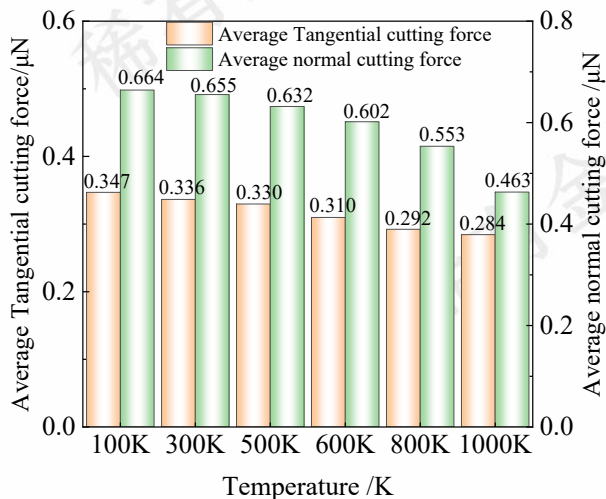


图 5 不同温度下的平均切削力

Fig.5 Average cutting force at different temperature

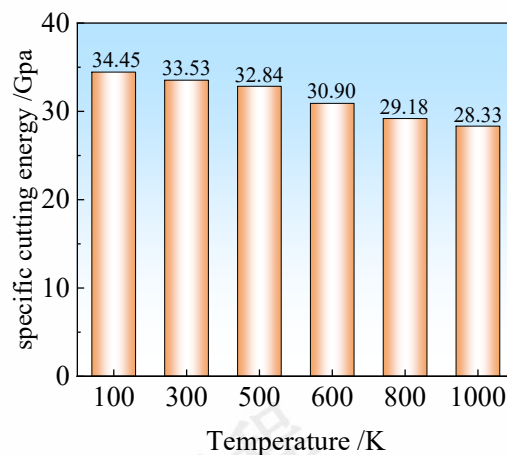


图 6 不同切削温度时的比切削能

Fig.6 Specific cutting energy at different cutting temperatures

连续性和层状剪切特性。

图 8 给出了不同切削温度下切削后工件的表面形貌图。在特定刀具形状的作用下，不同切削温度下的切屑形态均呈现卷积状，但是切削卷积方向各有差异，造成上述差异的原因主要是温度对于材料特性复杂的影响机制。为了更直观观察到切屑流动行为的转变，针对切屑原子提取速率较高的部分原子便于观察，得到 600 K 和 800 K 的原子速度矢量图如图 9。由图 9 可以看出，切削温度为 600 K 时切屑原子速度方向更多集中在向上和向前，切削温度增加到 800 K 以后，更多的高速率切屑原子方向转变为向右，该现象与切屑卷积方向的改变一致。在低温的环境下，切屑更加以依赖犁削挤出，被刀尖推送沿前向流动通道卷曲。常温下多个位移系被激活，刀具几何形状造成的侧向应力分量开始对塑性流动产生显著影响。随着温度的增加，热软化效应开始作用，此时

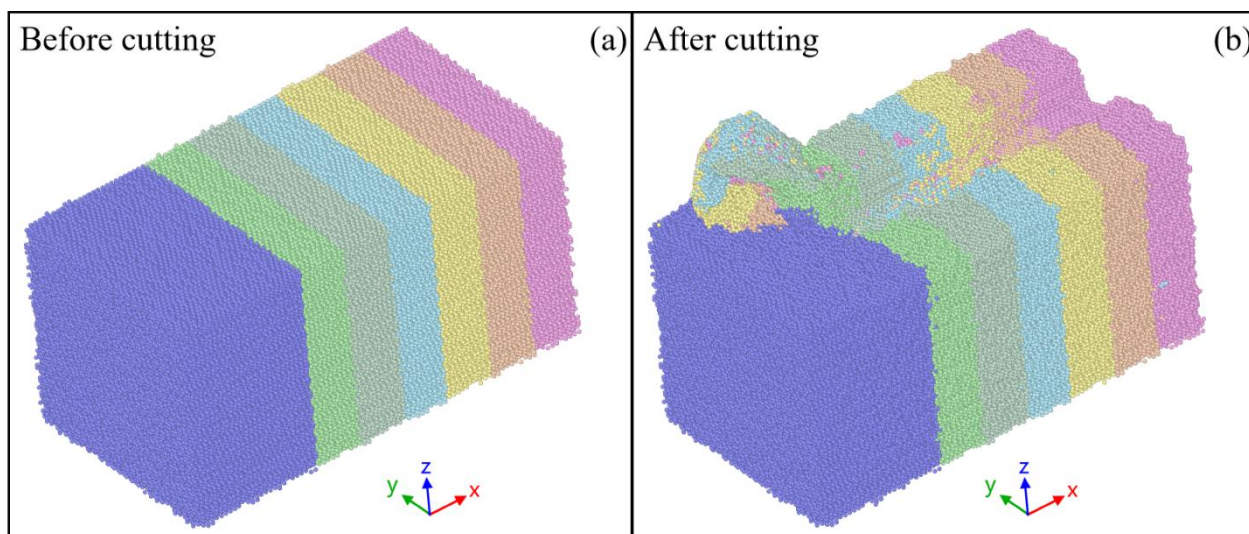


图 7 原子着色图 (a)切削前; (b)切削后

Fig.7 Atomic color maps. (a) Before cutting; (b) After cutting

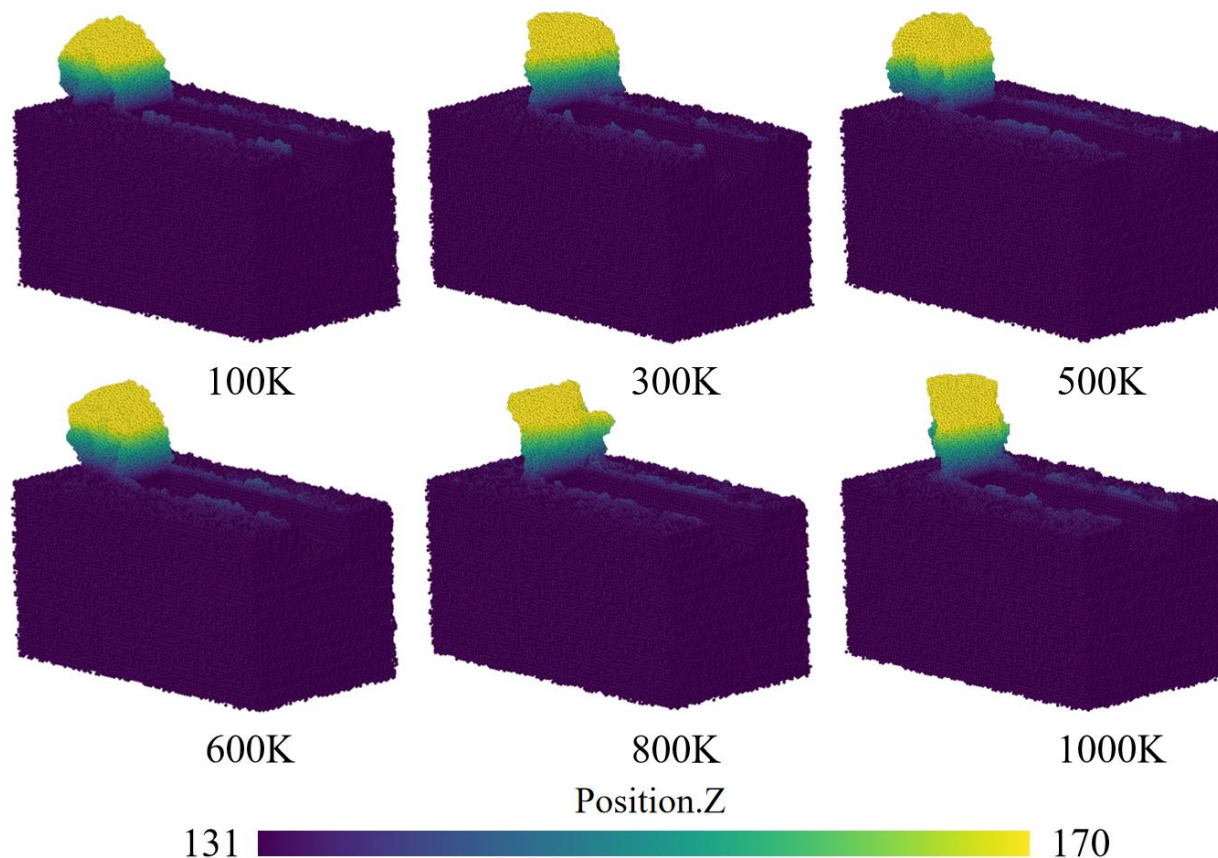


图 8 不同切削温度下切削后工件的表面形貌图

Fig.8 Surface morphology diagrams of the workpiece after cutting at different cutting temperatures

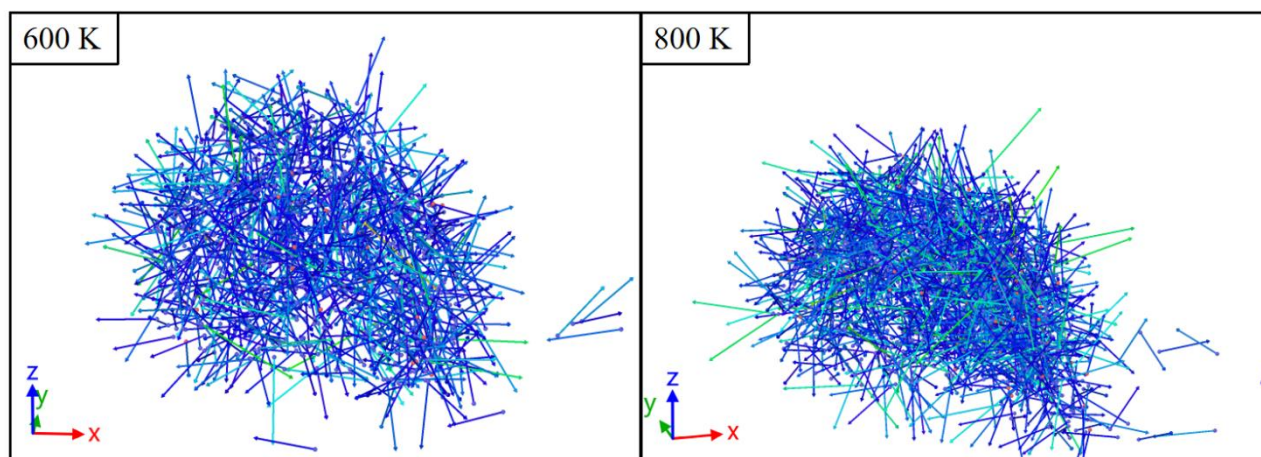


图 9 原子速度矢量图

Fig.9 Vector diagram of atomic velocities

材料更容易沿阻力最小的路径移动。当温度达到 800 K 以后,高温显著增加了原子动能,促进扩散和位错攀移,导致切屑流动更具有各向同性,侧向路径阻力降低^[21]。

3.3 温度对亚表面损伤的影响

亚表面损伤通常是由切削过程中刀具与工件表面的相互作用引起的,导致的局部变形和损坏,由此会影响加工工件的表面质量^[22, 23]。图 10 展示了不同切削温度

下切削距离达到 20 nm 时工件的亚表面损伤深度。亚表面损伤深度定义为工件表面到最深亚表面相变位置之间的距离。其中最深相变深度的位置通过统计去除表面原子后的非晶原子纵坐标确定。相比于常温切削,低温和中高温(500 K-600 K)都能有效的减小切削过程中的亚表面损伤。当温度继续升高至 800 K 及以上时,亚表面损伤深度反而增加。在低温切削的过程中,材料的塑性变

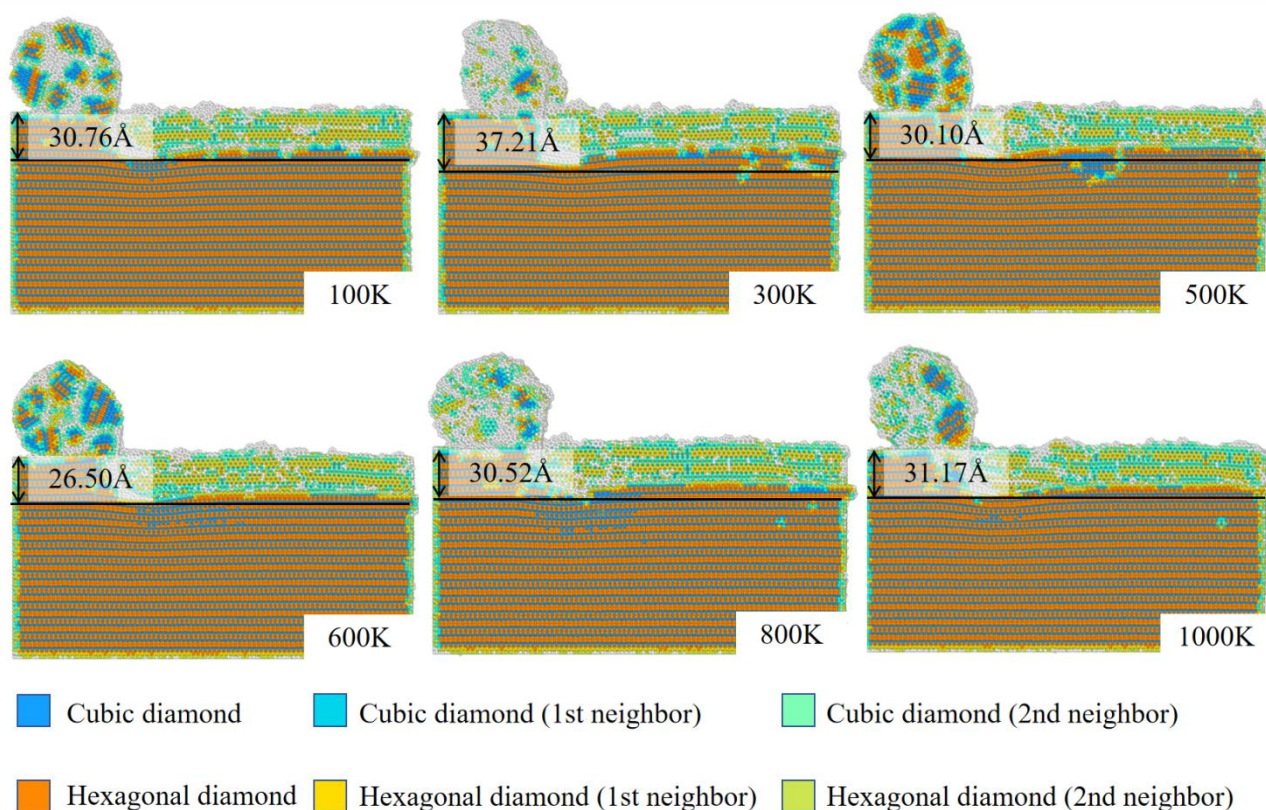


图 10 不同切削温度下的亚表面损伤图

Fig.10 Subsurface damage diagrams at different cutting temperature

形能力有限, 原子迁移率低。损伤区域不易通过塑性流动, 亚表面损伤被限制在较浅的切削影响层中。当切削温度上升至中高温区间时, 热软化效应使材料屈服强度适度降低, 配合位错运动, 切削力部分转化为塑性功而非形成深层晶格缺陷, 从而降低亚表面损伤深度。然而温度升高到 800 K 以上时, 此时高温导致了位错增殖、滑移, 形成位错缠结, 导致亚表面损伤层加剧。

针对内部原子结构变化引入 Identify Diamond Structure 进行识别分析。随着切削温度升高, 非晶原子占比先降低后上升, Cubic diamond 和 Hexagonal diamond 占比变化呈现先增加后减少的趋势, 第一近邻和第二近邻的占比随切削温度的变化趋势与非晶原子相同。在 600 K 时为原子占比的转折点, 此时非晶原子占比为 2.8%, 相比于 300 K 时下降了 0.6%。第一近邻和第二近邻原子占比下降趋势在 0.2% 左右。通过原子内部结构占比随温度的变化可以得知, 切削温度的增加能够有效减少缺陷原子的数量, 改善加工的表面质量。但是当温度超过临界值后, 反而会开始促进原子内部的损伤加剧。高温时 Hexagonal diamond 占比下降意味着此时可能发生了 4H-SiC 向 3C-SiC 的局部相变, 受限于当前势函数的层错能精度, 本研究未对该相变进行定量表征。

为了更加清晰的了解不同切削温度对于 4H-SiC 晶体结构变化的影响, 引入了径向分布函数(Radial

Distribution Function, RDF)来分析晶格缺陷^[24]。径向分布函数是宏观热力学性质和分子间作用力之间连接的重要纽带, 图 11 展示了不同切削温度下弛豫完成时和切削距离为 20 nm 时的径向分布函数曲线。位于 1.88 Å 和 3.61 Å 处特征峰对应的 Si-C 原子间的间距, 而 3.08 Å 和 4.36 Å 的特征峰对应 Si-Si 和 C-C 原子间的间距。以位于 1.88 Å 处第一峰位对应的 Si-C 键为例, 弛豫完成后的径向分布函数说明了热振动引起的德拜-沃勒效应对峰宽化的影响。通过对比同一温度下不同时态的径向分布函数曲线数据, 切削完成后的峰宽相比于弛豫完成后的峰宽增加了 0.08 Å, 这种宽化来源于不可逆塑性损伤。整体分析径向分布函数可以看出: 随着切削温度的增加, 峰值高度降低、峰宽则逐渐增加。上述现象表明, 随着切削温度的升高, 原子间相互作用加剧, 导致晶体结构变形加剧。此外, 径向分布函数的降低对应着晶格无序度的增加, 这会导致更多 Si-C 键断裂, 从而提高原子去除的概率^[25]。

3.4 温度对应力分布的影响

在纳米切割过程中, 应力分布与工件内部的原子位错形核扩展及结构相变紧密相关, 因此研究纳米切削过程中的应力分布对于分析和预测工件内部缺陷具有重要价值^[26, 27]。为了探究切削温度对于工件内部应力分布的

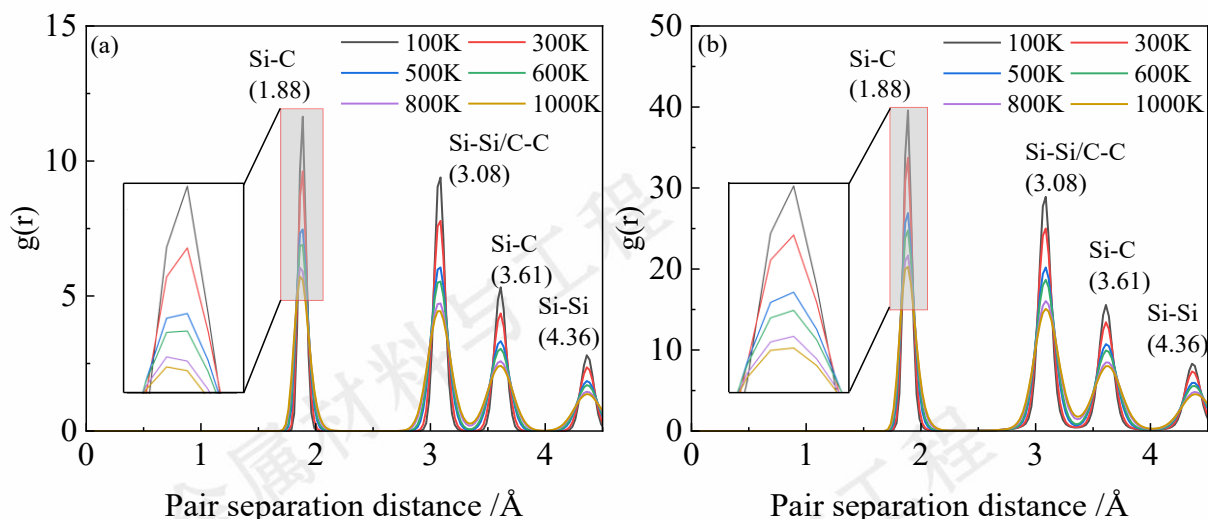


图 11 不同切削温度下的径向函数分布图 (a)弛豫后; (b)切削后

Fig.11 Radial distribution function diagrams at different cutting temperatures. (a) After relaxation; (b) After cutting.

影响, 分别计算了加工过程中的 Von Mises 应力和静水应力。

图 12 和图 13 分别展示了切削距离为 20 nm 时, 不同切削温度下加工截面的 Von Mises 应力和静水应力分布图。Von Mises 应力能够表征原子内部的应力状态, 反映剪切应变能密度, 常用于预测材料发生塑性屈服的指标^[28]。从图 12 可以看出, 在纳米切削的过程中高剪切应力主要集中位于刀具刃口下方和前方, 并且在已加工表面残留有部分剪切应力。图 12 中给出了加工截面最大 Von Mises 应力, 发现低温对于应力分布缓解效果并不明

显。当切削温度处于中高温(500 K-600 K)时, Von Mises 应力聚焦范围和最大值都出现明显的**减弱**。随着温度升高达到 800 K 以后, 反而加剧了 Von Mises 应力分布的区域和大小。在中高温的切削温度作用下, 材料的局部屈服应力减小, 塑性机制增强使局部应力得到释放。当温度过高时, 高温会加剧晶界滑移、空位聚集或微裂纹扩展, 这些损伤行为会引入新的应力集中源, 扩大应力分布范围并提高其峰值。在 OVITO 中通过去除 Von Mises 应力低于 40 的原子, 聚焦于高应力原子的分布, 通过高应力原子坐标原子坐标计算应力影响深度。通过

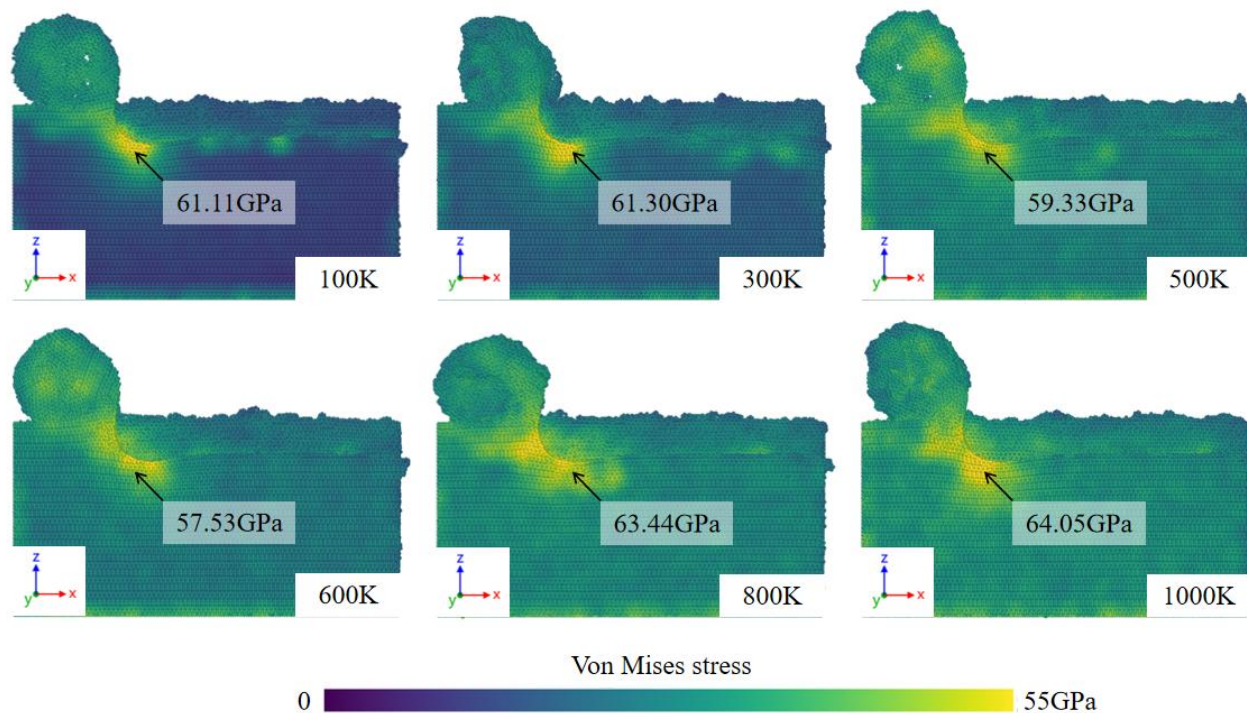


图 12 不同切削温度下的 Von Mises 应力分布

Fig.12 The distribution of Von Mises stress under different cutting temperatures

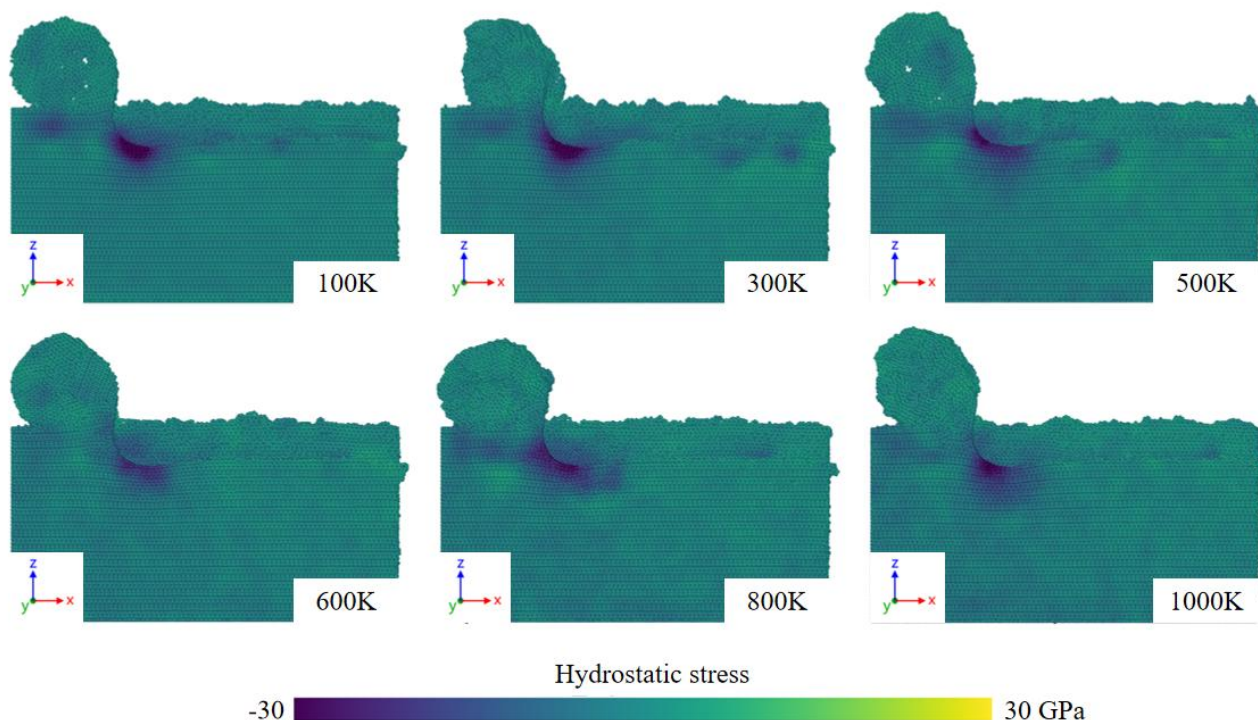


图 13 不同切削温度下的静水应力分布

Fig.13 The distribution of hydrostatic stress under different cutting temperatur

数据统计得出高应力分布范围逐渐扩大, 高温时尤为显著。切削温度为 100 K 时高应力原子最小的 Z 坐标为 95.5 Å, 应力影响区深度为 11.62 Å。当切削温度上升至 1000 K 时, 应力影响区的深度已经增加到 32.81 Å。

静水应力与工件的原子相变和位错成核相关^[29]。由图 13 可以看出, 切削过程中静水应力分布与 Von Mises 应力分布相似, 但静水应力聚集范围更加紧凑和稳定。为了探究切削温度对于切削过程中静水应力的影响, 针对应力集中区域提取原子计算其平均静水应力。同时, 记录加工截面的最大静水应力, 最后绘制出不同切削温度下的平均静水应力和最大静水应力的变化如图 14。从图 14 可以看出, 切削过程中不同切削温度下静水应力的变化趋势与 Von Mises 应力相同。因此, 采用中高温(500 K-600 K)作为切削温度可以有效缓解切削过程中的应力分布。

3.5 温度对位错分布的影响

通过可视化软件 OVITO 中的位错分析(Dislocation analysis, DXA)功能自动识别和提取模拟过程中的位错线网络, 以此分析不同切削温度对工件内部位错演变的影响^[30, 31]。如图 15 所示, 为切削距离 20 nm 时不同切削温度下的位错分布。在 4H-SiC 纳米切削的过程中, 产生了 3 种位错类型。其中绿色位错线代表的是伯氏矢量为 $1/3\langle 1-210 \rangle$ 的完全位错, 橙色位错线代表伯氏矢量为 $1/3\langle 1-110 \rangle$ 的不完全位错以及红色位错线代表可识别的其他位错^[32]。在纳米切削过程中, 刀具切削区域原子

间的键和作用遭到破坏导致原子位移, 因此在切削路径

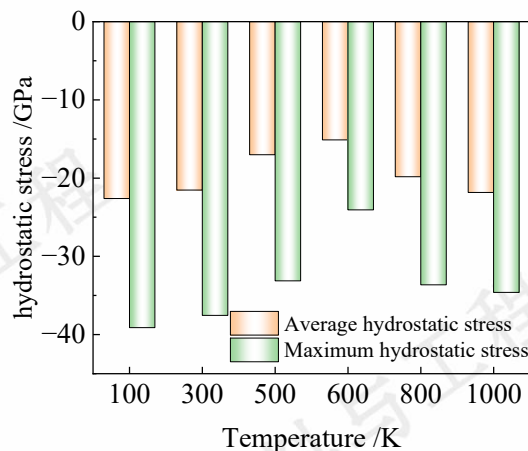


图 14 不同切削温度下的平均静水应力和最大静水应力

Fig. 14 Average hydrostatic stress and maximum hydrostatic stress under different cutting temperatures

中引发了大量位错线产生。由图 15 可以看出, 各种位错之间相互发生交截、反应、缠结, 形成大量的位错环、刃位错、螺位错以及难以简单归类为某一种伯格斯矢量的位错节点和网络。位错线沿切削路径两侧分布呈条状分布, 当温度升至高温(800-1000 K)时两侧的位错线长度逐渐增加, 同时刀具下方的位错缠结数量扩大, 位错环开始出现。

为了直观地观察切削温度对于位错分布的影响, 绘制了不同切削温度下的位错段数量和总长度的变化如

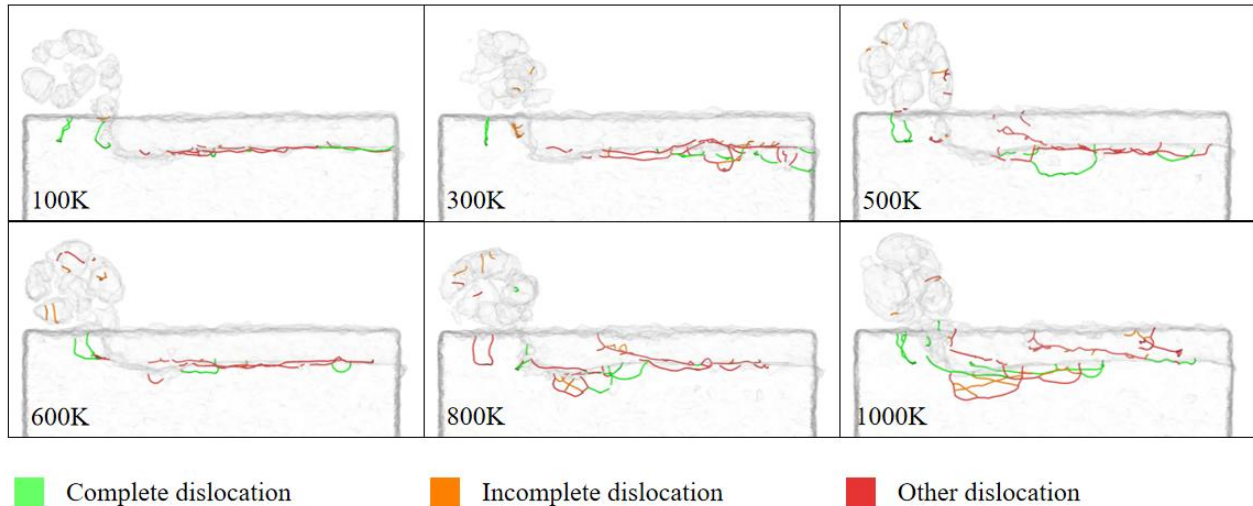


图 15 不同切削温度下的位错分布图

Fig.15 Dislocation distribution under different cutting temperatures

图 16。在低温下，原子热振动能量很低，无法为大量的位错形核和长距离滑移提供足够的能量，因此位错网络并不发达。温度达到中高温(500-600 K)时,此时温度足够提供一定的热激活，高温软化使材料的原子间结合力减弱，材料的局部屈服更容易发生。结合应力分析可以得知，此时应力分布也能够得到有效缓解，从而减少了位错总量。当温度升至高高温(800-1000 K)时，结合图 12 可以看出,此时刀具下方高应力区域由于空位或间歇原子的过饱和凝聚形成了位错环。通过估算空位缺陷能和热激活能的大小，结果表明热激活能比空位缺陷能小 2 个数量级，故过饱和凝聚的解释在热力学上具有可行性。同时，高温引起原子的剧烈运动使位错成核的壁垒被进一步降低，导致位错数量显著增加。

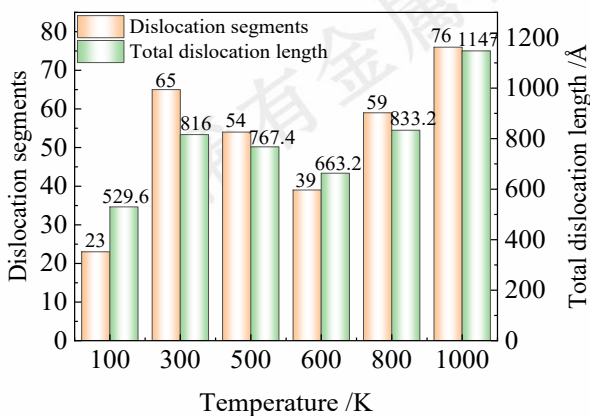


图 16 不同切削温度下的位错段数量和位错总长度

Fig.16 Number of dislocation segments and total dislocation length under different cutting temperatures

4 结论

1)随着温度的增加，切削过程中的切削力显著降低，温度达到 1000 K 时，切向与法向平均切削力较常温分别下降 15.4%与 29.3%，同时原子去除数量也随温度的升高而递增。在低温下切屑以犁削挤出为主，沿前刀面方向卷曲，随着温度升高，材料塑性流动路径更趋向各向同性，切屑卷曲形态发生明显变化。

2)低温和中高温(500-600 K)的切削温度均可以有效抑制亚表面损伤；但当温度进一步升高至 800 K 及以上时，由于位错增殖与滑移加剧，损伤深度反而增大。同时，中高温(500-600 K)的切削温度为缓解应力分布的最优窗口，此时 Von Mises 应力与静水应力的分布范围与峰值均明显减小。当温度过高时反而会扩大应力集中区域和峰值，加剧内部缺陷。

3)中高温(500-600 K)切削下，位错段数量与总长度相比于常温切削明显降低，有利于抑制位错网络的过度发展；而高温(800-1000 K)会显著促进位错形核与缠结，形成复杂的位错环与节点结构。通过现有的碳化硅高温下的力学研究表明，温度在 300 摄氏度时材料的脆性断裂受到抑制，塑性显著提升，该温度与文中最优温度窗口基本符合。

需明确指出，当前模拟所采用的势函数在描述脆性断裂方面存在固有局限。该势函数虽然能够较好地再现 SiC 共价键断裂、非晶化及位错滑移等过程，但对微裂纹的萌生、解理扩展及裂纹面的原子尺度分离可能捕捉不足。因此，低温条件下(特别是 100 - 300 K)所观察到的亚表面损伤被有效抑制的现象，可能在一定程度上反映了势函数对脆性微裂纹成核与扩展的低

敏感度, 实际材料在低温切削时因脆性增强而可能出现的微裂纹损伤并未被充分捕捉。本研究基于分子动力学模拟的纳米切削过程, 切削速度设为 100 m/s、切深为 2.39 nm, 由此引起的应变率远高于实际单点金刚石切削, 两者在应变率上存在数量级差异。对于位错形核、增殖及热激活攀移等强烈依赖应变率的热激活过程, 这种差异的影响比几何尺寸效应更为根本, 导致高温下的热激活位错运动在模拟中很可能被显著低估。因此, 模拟获得的切削力、亚表面损伤深度及位错演化规律不宜直接作为宏观工艺的定量参考。更为合理的做法是, 在本文揭示的纳米尺度变形特征基础上, 采用与实际工况匹配的应变率条件, 结合晶体塑性有限元或相场模型开展跨尺度校验, 从而实现从纳米力学机制到宏观可观测工艺响应的桥接。

参考文献 Reference

- [1] Luo X, Goel S, Reuben R L. Journal of the European Ceramic Society[J], 2012, 32(12): 3423-3434
- [2] Cai J, Guo X, Gao D. Applied Surface Science[J], 2025, 689: 162421
- [3] Zhao L, Zhang J, Zhang J, et al. Ceramics International[J], 2021, 47(2): 2358-2366
- [4] Fan Y, Xu Z, Song Y, et al. Computational Materials Science[J], 2021, 200: 110837
- [5] Lim K, Kim Y, Kim K J. Ceramics International[J], 2014, 40(7): 10577-10582
- [6] Zhang W. Current Opinion in Solid State and Materials Science[J], 2022, 26(4): 101000
- [7] Xu W, Xia F, Chen L, et al. Journal of Alloys and Compounds[J], 2018, 768: 722-732
- [8] Li Y, Hou P, Pan S, et al. Materials Science in Semiconductor Processing[J], 2025, 187: 109147
- [9] Ye G, Zhang P, Zhang J, et al. Journal of Manufacturing Processes[J], 2023, 93: 275-286
- [10] Liu B, Zhang W, Li X, et al. Materials Science in Semiconductor Processing[J], 2025, 200: 110007
- [11] Liu B, Li X, Kong R, et al. Materials[J], 2022, 15(6): 2325
- [12] Ning X, Wu N, Li G, et al. Materials Today Communications[J], 2024, 40: 109360
- [13] Chavoshi S Z, Goel S, Luo X. Journal of Manufacturing Processes[J], 2016, 23: 201-210
- [14] Chen B, Wu Z, Liu C, et al. Journal of Manufacturing Processes[J], 2024, 124: 581-589
- [15] Gao S, Wang H, Huang H, et al. International Journal of Mechanical Sciences[J], 2023, 247: 108147
- [16] Wang H, Gao S, Guo X, et al. Journal of Electronic Materials[J], 2023, 52(7): 4865-4877
- [17] Liu B, Xu Z, Wang Y, et al. Computational Materials Science[J], 2020, 174: 109476
- [18] Yin Z, Zhu P, Li B. Tribology Letters[J], 2021, 69(2).
- [19] Wu Z, Liu W, Zhang L. Computational Materials Science[J], 2017, 137: 282-288
- [20] Wang Q, Bai Q, Chen J, et al. Applied Surface Science[J], 2015: 1153-1160
- [21] Liu C, Xu W, Zhang J, et al. International Journal of Mechanical Sciences[J], 2022, 220: 107172
- [22] Li J, Meng W, Dong K, et al. Nanoscale Research Letters[J], 2018, 13(1)
- [23] CAO Lin(曹琳), JIANG Wugui(江五贵), WANG Jin(王津), et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程) [J], 2025, 54(11): 2825-2832
- [24] Zhou P, Shi X, Li J, et al. Ceramics International[J], 2019, 45(12): 14614-14624
- [25] Cui F, Yang M, Deng B, et al. Tribology International[J], 2026, 214: 111150
- [26] Ou Z, Wu W, Dai H. Applied Physics A[J], 2023, 129(9)
- [27] Zhang S, Cheng X, Chen J. Applied Surface Science[J], 2022, 588: 152944
- [28] Zhang P, Zhou H, Ge S, et al. Vacuum[J], 2024, 230: 113734.
- [29] Dai L, Chen G, Shan Z. Diamond and Related Materials[J], 2021, 111: 108224
- [30] Wu W, Hu Y, Meng X, et al. Journal of Manufacturing Processes[J], 2022, 79: 356-368
- [31] LI Xiang(李翔), YIN Yihui(尹益辉), ZHANG Yuanzhang(张元章), et al. Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程) [J], 2026, 55(02): 510-516
- [32] Zhou Y, Huang Y, Li J, et al. Journal of Manufacturing Processes[J], 2023, 105: 99-111.

Study on the Material Removal Mechanism of 4H-SiC in Thermally Assisted Nanometric Cutting

Geng Ruiwen^{1,2,3}, Tu Jiajun², Tian Zhuxin^{1,2}, Xie Qiming⁴, You Jinjing⁴, Li Lijun^{1,2}, Wu Haihua^{1,2}

(1.Hubei Provincial Engineering Research Center for Graphite Additive Manufacturing Technology and Equipment, China Three Gorges University, Yichang 443002, China)

(2.College of Mechanical and Power Engineering, China Three Gorges University, Yichang 443002, China)

(3.State Key Laboratory of Disaster Prevention and Mitigation for Tunneling and Underground Engineering, Shandong University, Jinan 250061, China)

(4.Kunming Institute of Physics, Kunming 650223, China)

Abstract: Owing to its excellent thermal conductivity, high breakdown voltage, and high-temperature stability, 4H-SiC is a promising material for power electronics and high-frequency devices. However, its extreme hardness and low fracture toughness cause severe subsurface damage and rapid tool wear during nanoscale cutting. Thermally assisted machining can improve machinability by promoting plastic deformation and enhancing efficiency; therefore, understanding the temperature-dependent material removal mechanism in nanometric cutting of 4H-SiC is essential. This study employs molecular dynamics simulations to systematically investigate the cutting mechanical behavior, surface morphology, subsurface damage, stress distribution, and dislocation evolution of 4H-SiC under different cutting temperatures (100 – 1000 K). The results show that the average cutting forces decrease markedly with increasing temperature. At 1000 K, the tangential and normal forces are reduced by 15.4% and 29.3%, respectively, compared with those at room temperature (300 K). Cutting at intermediate temperatures (500 – 600 K) effectively suppresses subsurface damage, alleviates stress concentration, and reduces dislocation density. However, excessively high temperatures (≥ 800 K) aggravate damage and broaden the stress distribution due to enhanced dislocation multiplication and tangling. This work reveals the plastic removal mechanism and damage evolution of 4H-SiC under different temperatures, offering a theoretical basis for efficient, low-damage nanometric cutting.

Key words: 4H-SiC crystal; Cutting temperature; Ultra-precision cutting; Subsurface damage; Molecular dynamics

Corresponding author: Tian Zhuxin, male, born in 1983, Ph.D., Associate Professor, Hubei Engineering Research Center for Graphite Additive Manufacturing Technology and Equipment, China Three Gorges University, Yichang, Hubei 443002, China, E-mail: zhuxintian@ctgu.edu.cn