先进光电测量、分析与制造

DOI：10.16818/j.issn1001－5868.20250626001

通过分子动力学研究3C-SiC晶体在纳米抛光中的材料去除

李　萌，王路凯，王大伟*，赵鹏越，刘　欢
（哈尔滨工业大学 仪器科学与工程学院，哈尔滨 150001）

摘　要： 3C-SiC晶体在航空航天、能源、化工及电子等工程领域应用广泛，但其表面摩擦和磨损机制的深入理解与低损伤加工仍面临挑战。文章采用分子动力学模拟方法，系统探究了纳米抛光深度对3C-SiC晶体材料去除机制的影响。通过在特定范围内改变抛光深度，详细分析了其对工件原子运动和结构转变的作用规律。模拟结果表明，减小抛光深度可降低抛光引起的亚表面损伤和相变程度。具体而言，1～3 nm的抛光深度范围能有效抑制非晶化转变和六方结构生成，减小亚表面损伤层厚度，并获得更优的表面形貌（如更窄的堆积区、更低的切屑高度）。该研究在原子尺度上深化了对3C-SiC材料去除机制的理解，对实现其表面及亚表面的超精密加工具有重要指导价值。

关键词： 纳米抛光；碳化硅晶体；材料去除；表面生成；分子动力学
中图分类号： TB34；TN304.24　**文章编号：** 1001－5868(2025)05－0757－08

Material Removal of 3C-SiC Crystals via Nanopolishing Based on Molecular Dynamics

LI Meng, WANG Lukai, WANG Dawei, ZHAO Pengyue, LIU Huan
(**School of Instrument Science and Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, CHN**)

Abstract: Although 3C-SiC crystals are extensively applied in aerospace, energy, chemical engineering, and electronics, challenges persist in enhancing their surface friction and wear mechanisms. This study investigates the effect of nanopolishing depth on the material-removal mechanism of 3C-SiC crystals using molecular dynamics simulations. By varying the polishing depths within a specific range, we examine their effects on atomic motion and structural transformations in the workpiece. Simulation results demonstrate that reducing the polishing depth effectively decreases subsurface damage and phase transformation. Specifically, polishing depths of 1～3 nm effectively suppress amorphization and the formation of hexagonal structures, reduce the subsurface-damage layer thickness, and yield a superior surface morphology—characterized by narrower pile-up regions and reduced chip heights. This research advances atomic-scale understanding of 3C-SiC material-removal mechanisms, thereby providing critical insights for achieving ultra-precision surface and subsurface machining.

Key words: nanopolishing; SiC crystal; material removal; surface generation; molecular dynamics

收稿日期：2025－06－26.
基金项目：国家自然科学基金项目（52405585，52205560）.
* **通信作者：**王大伟

0 引言

碳化硅(SiC)因其出色的机械性能和低密度[1]，一直是航空航天应用领域中备受青睐的材料，例如火星直升机核心传动部件[2-4]。然而，SiC的脆性和高硬度使其难以加工，限制了其在复杂结构中的应用。为克服该限制，常采用超精密纳米抛光技术来加工脆性材料并获得高表面质量[5-6]。此外，由于航空航天材料要求高使用寿命，研究SiC的表面形成和亚表面损伤机制对于指导制备具有低亚表面损伤的SiC部件至关重要。

以往的研究通过实验、理论和模拟方法探究包括SiC在内的硬脆材料的去除机制。研究发现，金刚石切削是研究材料对纳米抛光响应的有效实验方法[7-11]。当研究纳米压痕对SiC材料去除机制的影响时，Cai等[12]通过实验探究了两次纳米压痕的耦合效应，而Shi等[13]则在不同SiC晶面上进行了纳米压痕和纳米划痕实验。这些研究为理解SiC的材料特性和去除机制提供了参考，可指导航空航天应用中低亚表面损伤SiC部件的制备。

研究SiC纳米抛光机制的实验研究方法常受到时间和检测方法的限制，难以分析应变率和热软化对材料去除机制的影响[14]。分子动力学(Molecular Dynamics，MD)模拟已成为研究SiC等硬脆材料纳米抛光过程和机制的一种主流方法[15-16]。Tian等[17]进行MD模拟研究单晶SiC的划擦过程，发现(0001)碳原子面上的位错和滑移导致了材料的塑性去除。Liu等[18]研究了多晶SiC的纳米划擦机制，证明通过将SiC从晶体转变为非晶态可以实现延性去除。MD模拟为理解SiC的纳米抛光机制提供了重要参考，并为开发更有效的制造工艺提供了一种有前景的方法。

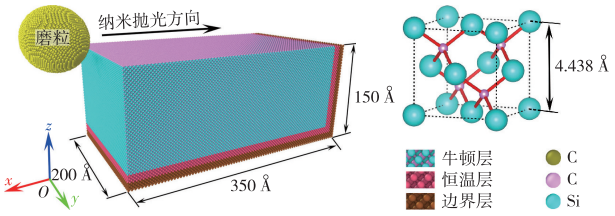
为改善SiC加工过程中的材料去除过程，优化加工参数、研究材料各向异性以及考察温度的影响至关重要。Wu等[19]发现，随着切削深度的增加，SiC的纳米切削变形机制从弹性变形转变为塑性变形，然后再转变为间歇性解理。Zare等[20]使用MD方法研究了3C-SiC晶体的纳米切削，揭示出亚表面变形在(111)表面最为明显，在(110)表面最弱，并且亚表面损伤(Subsurface Damage，SSD)随切削温度线性增加。此外，Goel等[21]通过准静态纳米压痕研究了4H-SiC的纳米机械响应，观察到压痕后残余深度的三种不同模式，归因于压缩残余应力。为更好地理解其材料去除机制，需要进一步研究加工参数和温度的影响，以及高速纳米抛光下SiC的相变。

以往的研究利用MD模拟分析了SiC晶体的材料去除机制，但缺乏对SSD的研究。本研究利用MD模拟分析不同抛光深度下3C-SiC纳米抛光过程中的应力、温度和相变过程。所获得的综合结果可为制备和加工复杂SiC部件提供参考。

1 模拟方法

1.1 模拟模型

为研究不同纳米抛光深度对3C-SiC纳米抛光过程的影响，采用MD方法在原子尺度上模拟材料的去除过程。图1为3C-SiC纳米抛光的MD模型，包括磨粒和3C-SiC试样。



(a) MD纳米抛光模型 (b) 3C-SiC晶体模型

图1 3C-SiC纳米抛光的MD模型

磨粒被简化为一个包含47 239个金刚石原子的球体，直径为8 nm，晶格常数为3.57 Å，位于试样的左上角。3C-SiC试样是一个尺寸为35 nm×20 nm×15 nm的长方体，晶格常数为4.438 Å，总共包含1 022 028个原子。试样从上到下被划分为三层：牛顿层、恒温层和固定层。纳米抛光过程中的抛光表面平行于牛顿层的上表面，纳米抛光方向对应于负x方向。x和z方向设置为非周期性边界条件，而y方向设置为周期性边界条件。金刚石磨粒被视为一个刚体，其中心距离试样的左端面5 nm，距离加工上表面2 nm，即纳米抛光深度为2 nm。刚体设置是通过停用金刚石磨粒的内部相互作用实现的，确保其原子的相对位置保持不变，这有助于在本工作中仅关注SiC材料的性质和行为。使用LAMMPS软件进行整个分子动力学模拟。

纳米抛光的MD模拟包括三个阶段：预抛光弛豫阶段、纳米抛光阶段和后抛光弛豫阶段。在预抛光弛豫阶段，系统通过采用共轭梯度法进行弛豫以达到能量最小化状态。接着，试样在NVT系综中从293 K温度开始进一步弛豫100 ps。图2

为 3C-SiC 试样在 293 K 弛豫过程中的温度和总势能变化。在纳米抛光阶段，弛豫后的试样在 NVE 系综下，以不同的纳米抛光深度进行磨削，抛光距离为 30 nm。最后，试样在 NVT 系综中弛豫 100 ps 以稳定试样中的原子，在此阶段可以直观地观察到试样表面和亚表面的原子结构及应力分布。

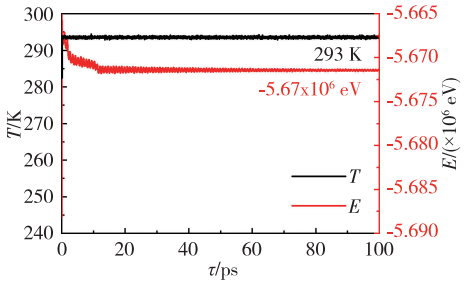


图 2　3C-SiC 试样在弛豫过程中温度及总势能演变

1.2　势函数

为精确模拟纳米抛光中 Si—Si，C—C 和 Si—C 原子之间的相互作用，须选择合适的势函数。Tersoff 势函数是一种三体势函数，如公式(1)所示，其能够更真实地描述共价键合材料。因此，本文使用 Tersoff 势函数，来描述 3C-SiC 试样内部的原子相互作用。

$$F=\frac{1}{2}\sum_{m}\sum_{m\neq n}E_{mn} \tag{1}$$

式中，E_{mn} 为原子 m 和 n 之间的储存能量，可表示为：

$$E_{mn}=f_{\mathrm{R}}(r_{mn})\left[f_{\mathrm{C}}(r_{mn})+b_{mn}f_{\mathrm{A}}(r_{mn})\right] \tag{2}$$

式中，f_{R} 为成对排斥相互作用，f_{A} 为三体吸引相互作用，f_{C} 为平滑截断函数。

使用兰纳-琼斯(Lennard-Jones，L-J)势来描述试样原子与磨粒原子之间的相互作用，即：

$$E(r)=4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right],r<r_0 \tag{3}$$

式中，r 为两个原子间的距离，σ 和 ε 分别为平衡距离和内聚能。Tersoff 势也是一种适用于多组分系统的经验原子间势，它通过对各自元素的势进行插值来处理异核键。Si—C 和 C—C 相互作用的 L-J 势参数如表 1 所示。本模拟中的截断半径 r_0 设置为 3 Å，以确保计算的效率和准确性。MD 模拟中使用的参数如表 2 所示。

表 1　Si—C 和 C—C 相互作用的 L-J 势能参数

元素	σ/Å	ε/MeV	r_0
Si—C	4.066 9	8.909 2	3.0
C—C	3.851 0	4.553 2	3.0

表 2　分子动力学模拟中的计算参数

参数	值
试样材料	碳化硅(3C-SiC)
试样尺寸/nm³	35×20×15
表面晶向	[100]
纳米抛光方向	[100]
磨粒材料	金刚石(C)
磨粒直径/nm	8.0
势函数	Tersoff，L-J
纳米抛光速度/(m/s)	100，200，500
初始温度/K	293
纳米抛光深度/nm	1，2，3
纳米抛光距离/nm	30
时间步长/fs	1

模拟结果利用 OVITO 软件进行分析，以研究试样的原子位移、亚表面损伤和相变。

纳米抛光过程中试样的温度变化通过评估动能方程来确定，温度计算公式为：

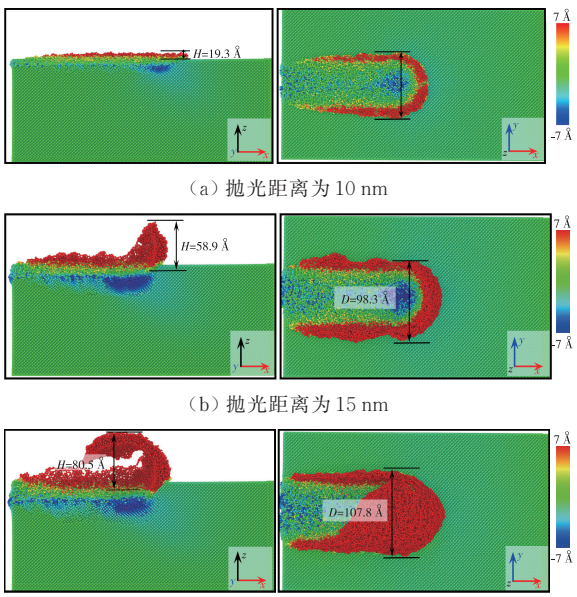
$$E_k=\frac{3}{2}NkT \tag{4}$$

式中，E_k 为系统的动能，N 为原子数量，玻尔兹曼常数 $k=1.381\times10^{-23}$ J/K，T 为系统的温度。

2　结果与讨论

2.1　材料去除机理

图 3 为当纳米抛光深度为 1 nm 时，3C-SiC 试样在纳米抛光过程中沿 z 方向的原子位移。位移



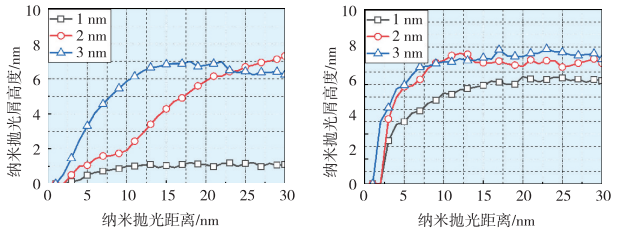
(a) 抛光距离为 10 nm

(b) 抛光距离为 15 nm

(c) 抛光距离为 25 nm

图 3　纳米抛光深度为 1 nm 时，不同抛光距离下试样原子在 z 方向的位移

值通过测量每个原子的初始位置与当前位置间的距离计算。图3中绿色表示没有位移的原子，红色表示被磨粒推向正z方向的原子，蓝色表示被磨粒压向负z方向的原子。结果表明，试样最表层在磨粒的作用下发生剧烈运动。如图3所示，一部分原子被磨粒推动并积聚在磨粒前端，形成切屑；另一部分原子沿着磨粒的两侧流动，并积聚在沟槽边缘，形成堆积区。这种材料流动行为与抛光深度密切相关，深度增加会扩大磨粒与工件的接触面积，加剧原子塑性变形，导致更多材料向两侧迁移（堆积区增宽）和切屑高度显著上升，如图4所示。

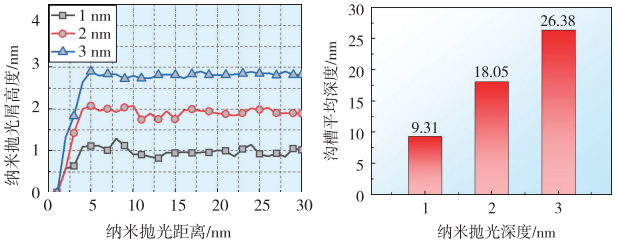


（a）切屑高度H　　（b）切屑宽度D

图4　在不同纳米抛光深度下，切屑高度H和切屑宽度D与纳米抛光距离的关系

纳米抛光过程结束后，在试样表面形成了一个U型沟槽，该沟槽的特征由切屑高度H和切屑宽度D来描述。图4为在不同纳米抛光深度下，H和D随纳米抛光距离增加的曲线。如图4(a)所示，H随纳米抛光距离单调增加，这是由于磨粒前端碎屑不断积聚造成的。D先急剧增加，然后逐渐趋于稳定。当纳米抛光距离在10 nm以内时，D迅速增加；当距离超过10 nm后，D基本保持不变。在纳米抛光距离从10 nm到25 nm的范围内，变化的最大差异小于1 nm。最大D值出现在当纳米抛光距离为25 nm时，为107.8 Å。这表明在单点纳米抛光过程中，堆积区宽度在一个有限的范围内。另外，纳米抛光深度的增加导致U型沟槽两侧的堆积区变宽，并在试样最表层留下更多碎屑，从而降低试样的加工表面质量。在抛光距离为25 nm处，当纳米抛光深度从1 nm增加到3 nm时，H从1.2 nm增加到6.4 nm，增加了约433.33%；D从8.5 nm增加到10.6 nm，增加了约24.71%。此外，当深度从1 nm增加到2 nm时，堆积区面积显著增加；而在深度从2 nm增加到3 nm的过程中，堆积区宽度的最大增长幅度不超过1 nm。

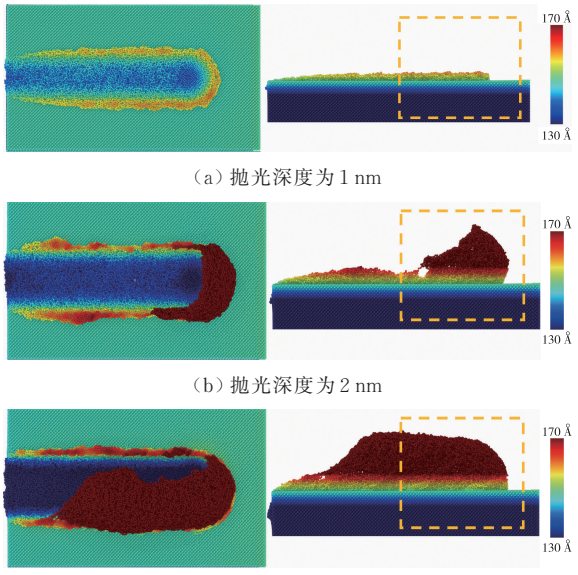
图5(a)为在不同纳米抛光深度下进行纳米抛光后，3C-SiC试样上U型沟槽深度的变化情况。如图5(b)所示，在较低的纳米抛光深度下(1 nm)，得到的沟槽平均深度约为9.31 nm；而在较高的纳米抛光深度下(3 nm)，得到的沟槽平均深度约26.38 nm。加工表面深度与初始施加深度之间的差异主要归因于纳米抛光后材料发生的弹性回复现象。较低的纳米抛光速度增加了磨粒与试样之间的相互作用时间，从而在一定程度上减轻了弹性回复现象。



（a）U型槽深度的变化　　（b）平均深度变化

图5　不同纳米抛光深度下纳米抛光后3C-SiC试样上U型槽深度及其平均深度变化

为更深入分析纳米抛光深度对试件加工表面质量的影响，对试件表面形貌进行研究。当纳米抛光距离为27 nm时，不同抛光深度下试件在XY平面的表面质量图像及其在XY平面相应切屑区域的放大图，如图6所示。无论采用何种纳米抛光深度，试件表面均会形成U形沟槽。三个沟槽的内表面形态相似，但沟槽前端的切屑形态与沟槽两侧的堆积区域存在显著差异。在1 nm的纳米抛光深度下，加工过程中产生的切屑包裹在磨粒表面，形成连续切屑，沟槽两侧仅产生少量堆积。在2 nm的纳米抛



（a）抛光深度为1 nm

（b）抛光深度为2 nm

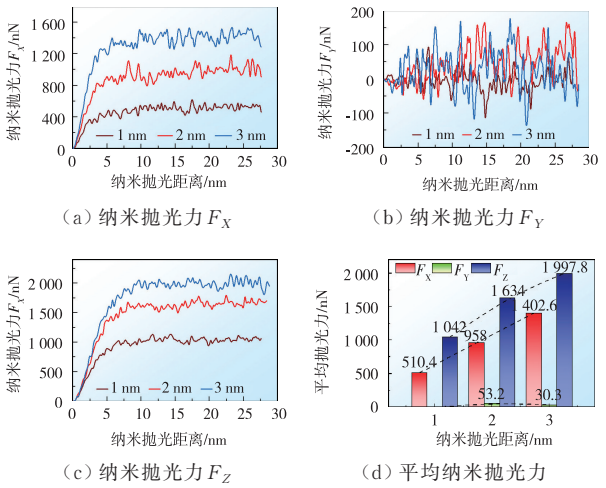
（c）抛光深度为3 nm

图6　不同纳米抛光深度下3C-SiC试样的表面形貌

光深度下，包裹磨粒的切屑显著减少，沟槽两侧边缘的堆积宽度明显增加。当深度增加到 3 nm 时，磨粒周围几乎不产生切屑，被去除的材料均匀地在凹槽两侧形成堆积区域。这表明使用更大的纳米抛光深度可以提高加工效率，但也会导致被加工试件的表面质量下降，表面残留大量堆积物。

2.2　机械响应分析

在纳米抛光过程中，磨粒与试件间存在剧烈相互作用。如图 7 所示，当抛光距离小于 5 nm 时，F_X 与 F_Z 随抛光距离增加显著上升，这源于磨粒与试件表面接触面积逐渐增大。当抛光距离超过 5 nm 后，切向力 F_X 和法向力 F_Z 逐渐趋于平稳并在均值附近波动。上述现象是由于该阶段磨粒与试件表面充分接触，且磨粒前方的碎屑堆积影响其运动。由于磨粒沿 X 轴方向运动，F_Y 在整个过程中始终围绕零值波动，如图 7(b)所示。对比不同抛光深度下的抛光力，当深度为 1 nm 时，F_X 均值经逐步下降后约为 510.4 nN，F_Z 均值约为 1 042 nN；当深度为 2 nm 时，两分量均值分别为 958 nN 和 1 634 nN。值得注意的是，在初始加工阶段磨粒未与工件完全接触，此时抛光力值随加工深度增加而增大，波动幅度也同步增强；当磨粒与工件完全接触后，力值及波动幅度均趋于稳定。当抛光深度为 3 nm 时，F_X 与 F_Z 的均值分别为 1 402.6 nN 和 1 997.8 nN。由此可见，磨粒主要对试件施加垂直向下的压力，其次才是向前推进及去除切屑。此外，图 7(d)显示纳米抛光力随抛光深度增加呈线性上升，表明抛光深度越高，其与试件间相互作用越大，该规律与图 6 所示的试件表面质量及切屑堆积程度完全吻合。

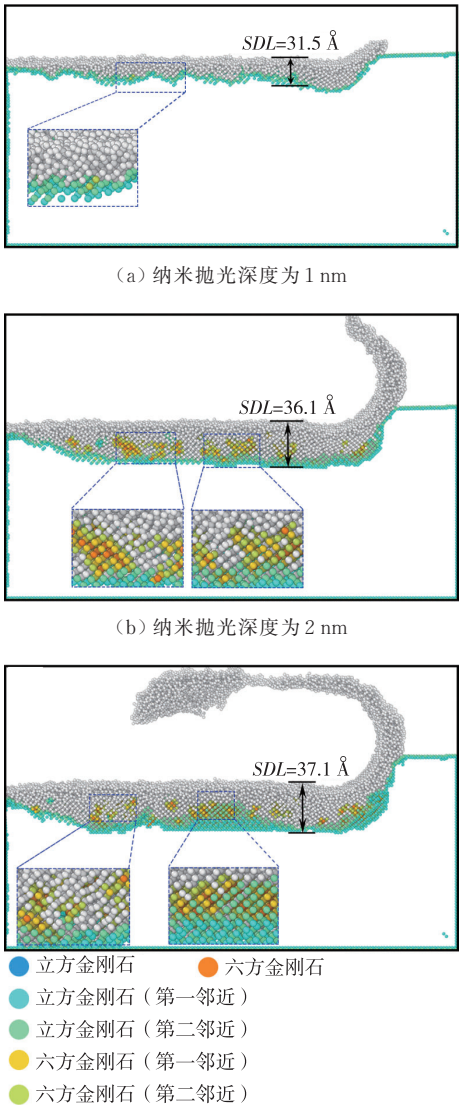


（a）纳米抛光力 F_X　（b）纳米抛光力 F_Y

（c）纳米抛光力 F_Z　（d）平均纳米抛光力

图 7　不同深度下纳米抛光力分量及其平均值随纳米抛光距离的变化曲线

在纳米抛光过程中，磨粒不仅与试样表层相互作用形成加工表面，同时会压缩试样的原子层，导致亚表面损伤层（SDL）的形成。图 8 为纳米抛光距离 27 nm 时，不同纳米抛光深度下碳化硅试样的 SDL 区域晶体结构图。



（a）纳米抛光深度为 1 nm

（b）纳米抛光深度为 2 nm

（c）纳米抛光深度为 3 nm

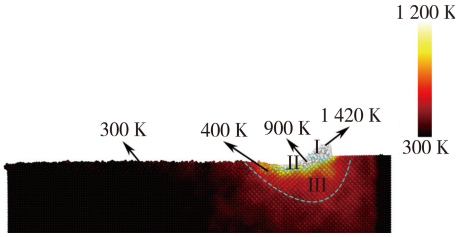
图 8　不同纳米抛光深度下 SDL 层厚度及其局部放大图

研究发现试样亚表面区域的 SiC 原子结构发生变化，即立方晶体结构（立方金刚石）转变为非晶结构，同时生成少量六方晶体结构（六方金刚石）。在碳化硅试样表面及亚表面区域观察到的非晶化现象，可能源于 SiC 试样与金刚石磨粒剧烈相互作用引发的局部高温。这种热效应导致 SiC 试样原子晶体结构从晶态向非晶态转变。不同晶体结构的原子具有不同的势能与应力状态。在纳米抛光过程

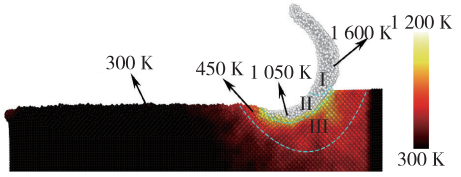
中，磨粒下方高应力区引发SiC材料内部原子相变，相变类型与亚表面局部区域的应力状态相关。SDL边缘区域主要由立方金刚石结构的第一、第二近邻原子构成；而在SDL内部区域，部分SiC晶体结构转变为六方晶体结构，其第一、第二近邻原子形成晶体与非晶结构间的过渡层，该现象在图8局部放大图中呈现。本研究采用SDL厚度表征不同深度下纳米抛光后试样的损伤范围，其定义为SDL最底层原子与试样加工表面之间的距离。观察发现，随着纳米抛光深度的提升，SDL区域厚度逐渐增大，同时六方结构比例同步上升：当深度从1 nm增至3 nm时，SDL厚度由31.5 Å增至37.1 Å，增幅约达17.78%。上述数据证明，更小的纳米抛光深度能有效缩小试样SDL区域范围，从而减轻表面损伤并提升加工表面质量；而深层抛光会加剧相变程度，导致更多立方晶体向亚稳态六方结构及非晶态转变，加重亚表面损伤。

2.3 温度分布分析

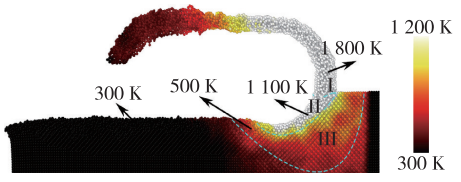
图9为当抛光距离为27 nm时，不同纳米抛光深度下试样的温度分布情况。根据温度分布特征，试样被划分为四个区域：切削区I、磨粒底部区II、亚表面区III及加工表面区IV。研究结果表明，纳米抛光过程中磨粒与试样表面发生剧烈相互作用，导致I区和II区温度显著升高。其中切削区I温度最高，该区域切屑从磨粒前端挤压排出；温度沿磨粒前缘至后缘方向快速递减。加工表面区IV的温度最终稳定在约300 K，接近初始加工温度。



（a）纳米抛光深度为1 nm



（b）纳米抛光深度为2 nm



（c）纳米抛光深度为3 nm

图9 纳米抛光距离为27 nm时，不同纳米抛光深度下试样的温度分布

图10分析了图9中试样表面四个区域的平均温度随纳米抛光深度的变化趋势。研究结构表明，当纳米抛光深度从1 nm增至3 nm时，磨粒前方碎屑最高温度从1 420 K升至1 800 K，磨粒底部温度由900 K升至1 100 K。温度梯度随深度增加而减小，加工后试样表面温度最终稳定在初始加工温度附近，这意味着更大的纳米抛光深度会导致表面/亚表面原子温度升高。

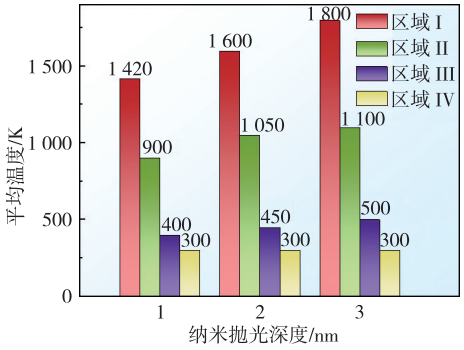
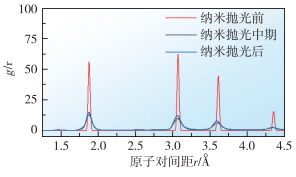


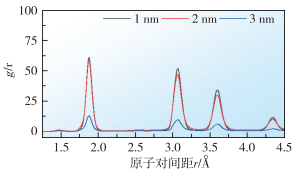
图10 试样平均表面温度随磨削深度的变化趋势

2.4 相变分析

在硬脆材料相变过程分析中，原子径向分布函数（RDF）与配位数（CN）分析是常用表征方法。SiC的RDF曲线主要包含四个特征峰，其1.88 Å，3.07 Å，3.61 Å和4.35 Å的峰位分别对应C—Si，C—C，Si—C及Si—Si共价键键长。如图11所示，RDF曲线四峰强度显著下降，表明SiC晶体结构发生破坏与转变；抛光结束后四峰强度部分恢复，说明部分受损晶体结构得到重构，但大量结构损伤在抛光过程中持续存在。图11(b)呈现了RDF峰值随抛光深度提升逐渐减小，表明更小的纳米抛光深度可减轻SiC晶体结构破坏程度。



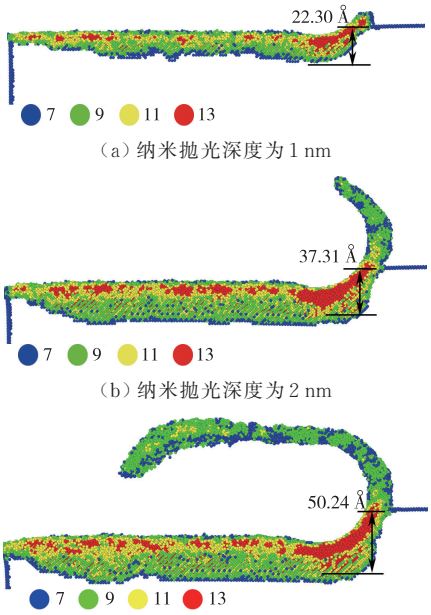
（a）不同抛光阶段



（b）不同抛光深度

图11 3C-SiC试样RDF曲线图

为定量分析晶体结构转变过程，需通过 *CN* 对试样原子进行精细解析。如图 12 所示，试样表面及 SDL 区域底层原子的 *CN* 值为 7，而 SDL 区域内大部分原子的 *CN* 值为 9 和 11；加工表面区域存在少量 *CN*=13 的原子，磨粒底部则分布有大量 *CN*=11 的原子。此外，研究发现当深度从 1 nm 增至 3 nm 时，磨粒底部 *CN*=11 原子的分布区域厚度逐渐减小；在 1 nm 抛光深度下观测到 *Z* 向最大厚度 22.30 Å，2 nm 时厚度增至 37.31 Å，3 nm 时达到最大厚度 50.24 Å。



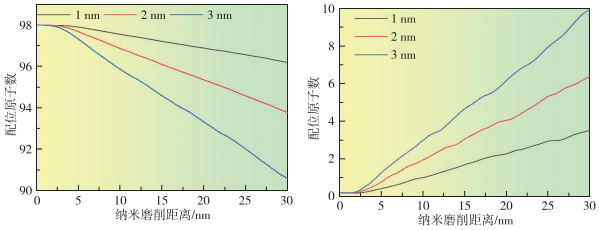
（a）纳米抛光深度为 1 nm

（b）纳米抛光深度为 2 nm

（c）纳米抛光深度为 3 nm

图 12　不同抛光深度下 SiC 试样 SDL 区域的 *CN* 分布

为定量分析不同纳米抛光深度对试样原子 *CN* 变化的影响，需对不同 *CN* 值原子的数量进行统计分析，如图 13 所示。随抛光深度增加，*CN*=16 原子数量减少，而 *CN*=13 原子数量逐渐增加，表明纳米抛光过程中磨粒作用导致原子间距发生显著改变，证实更小纳米抛光深度可有效抑制试样 SDL 区域的相变过程，从而获得更优的亚表面质量。



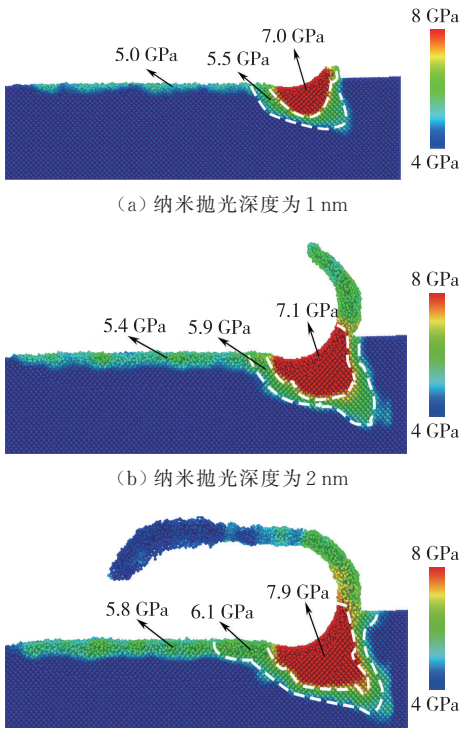
（a）*CN*=16　　（b）*CN*=13

图 13　不同纳米抛光深度下原子数随纳米抛光距离的变化曲线

2.5　残余应力分布分析

纳米抛光后，试样表面/亚表面层中大量硅、碳原子发生晶体结构变化，导致残余应力累积。

如图 14 所示，按颜色近似划分为三个区域：与磨粒直接接触的红色区域、绿色过渡区域及加工表面的蓝色区域。红色区域因直接承受磨粒挤压作用而呈现最高 σ_{vm} 应力，过渡区域次之。加工表面区域因 SiC 原子结构恢复及压力释放，σ_{vm} 应力显著降低。测得最大 σ_{vm} 应力值分别为 7.0 GPa，7.1 GPa 和 7.9 GPa。研究发现：磨粒直接接触区最大应力随深度提升而增大，但深度影响有限，3 nm 时的最大应力仅较 1 nm 高 12.86%。这是因为材料弹性回复释放了深层抛光产生的高瞬时应力的主要部分，但残余应力即使小幅波动仍会诱导微裂纹和降低 SiC 器件的疲劳寿命，需严格控制。



（a）纳米抛光深度为 1 nm

（b）纳米抛光深度为 2 nm

（c）纳米抛光深度为 3 nm

图 14　抛光距离为 27 nm 时，不同纳米抛光深度下 SiC 试样的等效应力分布

3　结论

本研究通过分子动力学模拟，探究了纳米抛光深度对 3C-SiC 材料去除机制形成的影响。模拟结果表明：抛光深度对试样表面质量具有显著影响。较高抛光深度（3 nm）虽会增大抛光后残留堆积区

域并导致加工温度升高,但也会降低加工表面质量与磨粒服役寿命。另外,低深度抛光能一定程度降低抛光力,并减小试样SDL厚度及残余应力,即减轻试样SSD。此外,低深度抛光还可抑制相变过程。总体而言,本研究关于抛光深度的发现对提升加工表面质量、抑制亚表面损伤具有重要指导意义,为优化纳米抛光工艺提供了理论依据。

参考文献:

[1] Goel S. The current understanding on the diamond machining of silicon carbide[J]. Journal of Physics D: Applied Physics, 2014, 47(24): 243001.

[2] Zhao P, Quan Q, Chen S, et al. Geometry shape selection of NACA airfoils for Mars rotorcraft [J]. Acta Astronautica, 2019, 157: 300-309.

[3] Zhao P, Quan Q, Chen S, et al. Experimental investigation on hover performance of a single-rotor system for Mars helicopter [J]. Aerospace Science and Technology, 2019, 86: 582-591.

[4] Jiang W, Wu D, Dong W, et al. Design and validation of a nonparasitic 2R1T parallel hand-held prostate biopsy robot with remote center of motion [J]. Journal of Mechanisms and Robotics, 2024, 16(5): 051009.

[5] Luo X, Goel S, Reuben R L. A quantitative assessment of nanometric machinability of major polytypes of single crystal silicon carbide[J]. Journal of the European Ceramic Society, 2012, 32(12): 3423-3434.

[6] 陈 鹏,高 健,吴 磊,等. 单晶硅表面机械划痕和氧化层在湿法刻蚀中的掩膜行为对比研究[J]. 半导体光电, 2021, 42(2): 246.
Chen Peng, Gao Jian, Wu Lei, et al. Comparative study on the mask effect of mechanical scratch and oxide layer in wet etching on monocrystalline silicon surface[J]. Semiconductor Optoelectronics, 2021, 42(2): 246.

[7] Zhang Z, Guo D, Wang B, et al. A novel approach of high speed scratching on silicon wafers at nanoscale depths of cut [J]. Scientific Reports, 2015, 5: 16395.

[8] Lawn B R, Borrero-Lopez O, Huang H, et al. Micromechanics of machining and wear in hard and brittle materials[J]. Journal of the American Ceramic Society, 2021, 104(1): 5-22.

[9] Yin L, Vancoille E Y J, Ramesh K, et al. Surface characterization of 6H-SiC (0001) substrates in indentation and abrasive machining[J]. International Journal of Machine Tools and Manufacture, 2004, 44(6): 607-615.

[10] Duan N, Yu Y, Shi W, et al. Investigation on diamond damaged process during a single-scratch of single crystal silicon carbide[J]. Wear, 2021, 486-487: 204099.

[11] 宋 婕,陈智辉. 基于硅基光子晶体微流通道的荧光定向发射增强特性研究[J]. 半导体光电, 2024, 45(5): 732-737.
Song Jie, Chen Zhihui. Directional fluorescence emission enhancement using silicon-based photonic crystal microfluidic channels[J]. Semiconductor Optoelectronics, 2024, 45(5): 732-737.

[12] Cai L, Guo X, Gao S, et al. Material removal mechanism and deformation characteristics of AlN ceramics under nanoscratching[J]. Ceramics International, 2019, 45(16): 20545-20554.

[13] Shi S, Yu Y, Wang N, et al. Investigation of the anisotropy of 4H-SiC materials in nanoindentation and scratch experiments[J]. Materials, 2022, 15(7): 2496.

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

[15] Chen M, Dai H. Molecular dynamics study on grinding mechanism of polycrystalline silicon carbide[J]. Diamond and Related Materials, 2022, 130: 109541.

[16] Gao S, Wang H, Huang H, et al. Molecular simulation of the plastic deformation and crack formation in single grit grinding of 4H-SiC single crystal[J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2023, 247: 108147.

[17] Tian Z, Chen X, Xu X. Molecular dynamics simulation of the material removal in the scratching of 4H-SiC and 6H-SiC substrates[J]. International Journal of Extreme Manufacturing, 2020, 2(4): 045104.

[18] Liu Y, Li B, Kong L. A molecular dynamics investigation into nanoscale scratching mechanism of polycrystalline silicon carbide [J]. Computational Materials Science, 2018, 148: 76-86.

[19] Wu Z, Liu W, Zhang L. Revealing the deformation mechanisms of 6H-silicon carbide under nano-cutting [J]. Computational Materials Science, 2017, 137: 282-288.

[20] Chavoshi S Z, Luo X. Atomic-scale characterization of occurring phenomena during hot nanometric cutting of single crystal 3C - SiC[J]. RSC Advances, 2016, 6(75): 71409-71424.

[21] Goel S, Yan J, Luo X, et al. Incipient plasticity in 4H-SiC during quasistatic nanoindentation [J]. Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials, 2014, 34: 330-337.

作者简介:

李 萌(1999-),男,黑龙江省人,博士研究生,主要研究方向为精密仪器与机械;

王大伟(1989-),男,黑龙江省人,博士,副教授,主要研究方向为航空发动机超精密测量。