

01;05

Моделирование процесса механического полирования со смазкой

© В.Л. Попов, А. Филиппов

Берлинский технический университет, Германия
Донецкий физико-технический институт, Украина

Поступило в Редакцию 28 апреля 2005 г.

Моделирование трения и износа со смазкой между шероховатыми поверхностями представляет собой важную проблему современных технологий. Ее сложность состоит в необходимости одновременного решения задач об упругой деформации контактирующих тел и о течении вязкой жидкости между телами. Мы показываем, что задача может быть существенно упрощена в представляющем наибольший интерес режиме, когда толщина слоя смазки настолько мала, что наибольший вклад как в контактное взаимодействие, так и в силу трения начинает вносить взаимодействие небольшого числа микрон неоднородностей, приближающихся на расстояние, существенно меньшее среднего расстояния между телами. При этом динамику смазки можно моделировать с помощью неконсервативных сил между частицами, зависящих как от расстояния, так и от скорости. Разработанный подход применяется нами к моделированию процесса полирования поверхностей в присутствии взвешенных в слое смазки абразивных частиц. Показано, что в результате процесса гидродинамического полирования формируются поверхности со статистически равновесной шероховатостью, имеющей фрактальный характер.

Введение. В последние годы приобретает большое значение получение высококачественных поверхностей с заданными параметрами как глобальных неоднородностей, так и микрошероховатости. Проблема создания таких поверхностей возникает при производстве магнитных дисков и электронных плат. Для обработки поверхности в настоящее время используется метод CMP (Chemical-Mechanical Polishing) [1], при котором вращающийся диск полируемого материала (обычно кремния) приводится в контакт с вращающейся подложкой через слой смазочного материала. Смазочный материал может содержать абразивные частицы. Типичный режим состоит в том, что абразивные частицы не приходят в прямой контакт с неровностями обрабатываемого материала. Таким

образом, необратимые изменения топографии поверхности происходят в результате флуктуаций давления, возникающих в тонком слое жидкости, разделяющим абразивные частицы и поверхность. Закономерности такого „гидродинамического полирования“ до сих пор не исследованы теоретически. В настоящем письме мы моделируем процесс изменения топографии поверхности в результате воздействия частиц, взвешенных в слое смазки.

В целях повышения эффективности численной модели мы используем новый подход к моделированию гидродинамических контактов. Мы показываем, каким образом моделирование взаимодействия через слой жидкости может быть осуществлено без решения соответствующей гидродинамической задачи. Эти идеи мы затем применяем для моделирования трения между двумя шероховатыми поверхностями со смазкой.

Гидродинамические силы в случае одиночного контакта. В описанной задаче о гидродинамическом полировании речь идет о системах, в которых среднее расстояние между телами намного превышает минимальные расстояния, на которые абразивные частицы приближаются к поверхности в местах „контакта“. Как мы увидим в дальнейшем, основной вклад в силу взаимодействия поверхностей при этом вносит только небольшая окрестность вблизи максимального сближения поверхностей. В результате задача о взаимодействии поверхностей распадается на задачи о взаимодействии пар микроконтактов. Одиночный микроконтакт будем в дальнейшем моделировать в виде твердой сферической поверхности радиусом R . Поскольку основной вклад в силу будет давать область максимального сближения поверхностей, допустимо рассматривать гидродинамику жидкости в приближении Рейнольдса [2]. Идею предлагаемого подхода можно проиллюстрировать на следующем примере. Рассмотрим твердую сферу радиуса R , приближающуюся с малой скоростью к твердой плоскости. Распределение давления в жидкости в приближении Рейнольдса определяется уравнением

$$\frac{dp}{dr} = -\frac{6\eta r \dot{h}}{h(r)^3}, \quad (1)$$

где η — динамическая вязкость жидкости, r — полярный радиус, отсчитываемый от точки наибольшего сближения тел, $h(r) = h_0 + r^2/2R$ — расстояние между поверхностью сферы и плоской поверхностью

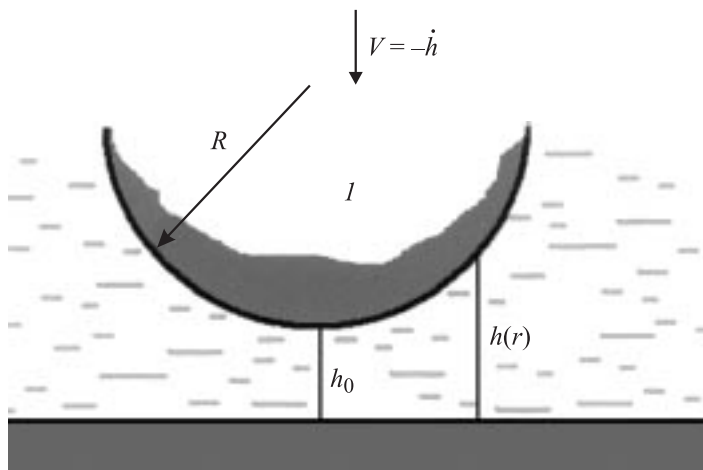


Рис. 1. Схема задачи. I — твердая сфера.

(рис. 1). Интегрирование уравнения (1) приводит к следующему распределению давления в жидкости:

$$p = - \int \frac{6\eta r \dot{h}}{h(r)^3} dr = - \int \frac{6\eta r \dot{h}}{(h_0 + r^2/2R)^3} dr = \frac{3\eta \dot{h} R}{(h_0 + r^2/2R)^2} + p_\infty. \quad (2)$$

Полная сила, действующая на сферу со стороны жидкости, равна

$$F = \int (p(r) - p_\infty) dr = \int_0^{\sim R} \frac{3\eta \dot{h} R}{(h_0 + r^2/2R)^2} 2\pi r dr.$$

Так как этот интеграл сходится на верхнем пределе, можно верхний предел заменить на бесконечность:

$$F \approx \int_0^\infty \frac{3\eta \dot{h}}{(h_0 + r^2/2R)^2} 2\pi r dr = \frac{6\pi \eta \dot{h} R^2}{h_0}. \quad (3)$$

Сходимость интеграла означает, что области, далекие от контакта (находящиеся на расстоянии много больше $r \approx \sqrt{2Rh_0}$), практически не дают

вклада в силу взаимодействия поверхностей. Интерес представляет поэтому только характер течения в непосредственной близости от точки максимального сближения поверхностей.

Уравнение (3) позволяет в принципе определять силу взаимодействия между шероховатыми поверхностями через слой жидкости, определяя статистику высот и радиусов кривизны микрошероховатостей и суммируя силы (3) по всем парам близких шероховатостей (или шероховатостей и взвешенных в жидкости частиц) — без решения гидродинамических уравнений.

В случае, если частицы могут быть охарактеризованы некоторым характерным значением радиуса кривизны, описанный подход может быть развит далее. Уравнение (3) показывает, что сила взаимодействия сферы с твердой поверхностью пропорциональна скорости и обратно пропорциональна расстоянию между поверхностями. Легко показать, что такая же зависимость получится, если ввести центральное взаимодействие элементов поверхности сферы с элементами плоскости по закону

$$dF = \frac{6\eta R}{\pi} \frac{v}{r^4} dA dA', \quad (4)$$

где dA и dA' — элементы поверхности сферы и плоскости, r — расстояние между этими элементами, а v — скорость их сближения. Интегрирование силы (4) по всем элементам сферы и плоскости приводит при условии $h \ll R$ к уравнению (3). Нелокальный характер взаимодействия твердых тел через жидкость проявляется здесь в явной зависимости силы взаимодействия от радиуса R .

Основным преимуществом замены точного взаимодействия через слой жидкости на взаимодействие (4) состоит в возможности моделировать трение между случайно шероховатыми поверхностями без необходимости решать гидродинамические уравнения.

Модель. В настоящей работе мы рассматриваем упрощенную дискретную модель упругих тел, схематически изображенную на рис. 2. Она представляет собой ряд эквидистантно расположенных материальных точек, упруго связанных с жесткой поверхностью, имеющей заданный профиль. Считаем, что поверхности взаимодействуют друг с другом только через взвешенные в слое смазки между ними частицы. Последнее взаимодействует с поверхностями также через слой жидкости. Как было показано выше, это взаимодействие может быть описано

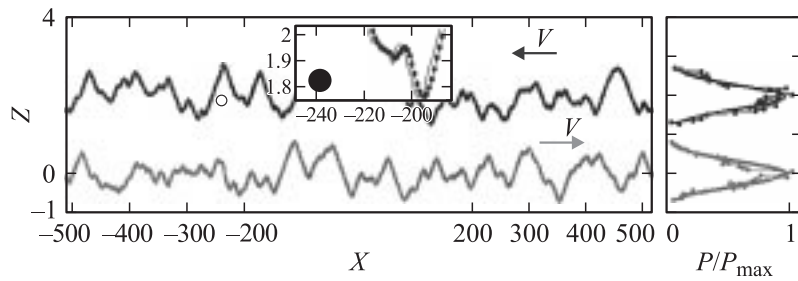


Рис. 2. Дискретная модель двух упругих шероховатых тел. Показан фрагмент двумерного сечения (x, z) -плоскостью. Жесткие затравочные профили верхней и нижней поверхностей изображены темной и светлой серыми линиями соответственно. Направление движения пластин показано стрелками. Отклонение текущих положений материальных точек, обозначенных кружками тех же цветов, от затравочных профилей можно заметить на увеличенном фрагменте рисунка в центре. Черным кружком показана взвешенная в смазке частица, вызвавшая данное отклонение. На вставке справа изображены мгновенные и усредненные по времени (жирные линии) распределения высот обеих поверхностей, устанавливающиеся в результате длительного полирования.

силами вида (4), зависящими от относительных расстояний и скоростей между частицами. Неупругие взаимодействия между частицами и поверхностями будем описывать, предполагая, что при превышении силы, действующей на одну из частиц, образующих поверхность, „затравочный профиль“ получает „вмятину“ или наоборот „выпуклость“ в зависимости от знака давления.

Динамические уравнения для сформулированной таким образом модели можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \partial v_{z1,2}/\partial t &= K_z (w_{1,2}(x) - z_{1,2}(x)) + K_z (z_{1,2}(x + dx) \\ &\quad + z_{1,2}(x - dx) - 2z_{1,2}(x)) - F_z^{(1,2) liquid} - F_z^{(1,2) repuls}, \quad (5) \\ \partial V_{x,z}/\partial t &= \sum_{(1,2)} [F_{x,z}^{(1,2) liquid} + F_{x,z}^{(1,2) repuls}] - F_{x,z}^{diss} + D\xi(X, Z). \end{aligned}$$

Здесь введены обозначения: $\partial X/\partial t = V_x$; $\partial Z/\partial t = V_z$; $\partial x_{1,2}/\partial t = v_{x1,2}$; $\partial z_{1,2}/\partial t = v_{z1,2}$; K_z — постоянная упругости для связи между подвижными элементами („материальными точками“) верхней и нижней

поверхностей, расположенными в позициях с координатами $z_{2,1}(x)$ соответственно, и квазистатическими „затравочными“ формами тех же поверхностей $w_{2,1}(x)$, а суммирование $\Sigma_{(1,2)}$ выполняется по всем элементам каждой из поверхностей. Кроме того, учтена упругость самих поверхностей, которая в нижайшем приближении может быть воспроизведена упругой связью последовательно соединенных на расстоянии dx между собой поверхностных элементов $K_z(z_{1,2}(x+dx) - z_{1,2}(x))$ каждой из поверхностей (с той же упругой постоянной K_z).

Если абсолютное значение разности $|w_{1,2}(x) - z_{1,2}(x)|$ превосходит порог текучести W , имеет место (относительно малая) пластическая деформация самих поверхностей $w_{2,1}(x)$. В рамках модели она описывается соотношениями:

$$\begin{aligned} w_{2,1}(x) &= w_{2,1}(x) && \text{при } |w_{2,1}(x) - z_{2,1}(x)| < W; \\ w_{2,1}(x) &= \mu w_{2,1}(x) + \nu z_{2,1}(x) && \text{при } |w_{2,1}(x) - z_{2,1}(x)| > W \end{aligned} \quad (6)$$

(где $\mu + \nu = 1$ и $\mu/\nu \gg 1$), которые следует решать согласованно с уравнениями (5).

Пренебрегая взаимодействием частиц, помещенных между пластинами, можно рассматривать результат их воздействия на поверхности как воздействие со стороны единственной частицы, т.е. представить его как некоторую статистическую реализацию процесса, с последующим усреднением по длительному времени численного эксперимента (или по реализациям, при многократном его повторении). Координаты такой частицы обозначены большими буквами X и Z .

Взаимодействие частицы с элементами поверхности складывается из упомянутого выше жидкого трения $F_{x,z}^{(1,2) liquid}$ и потенциала отталкивания между нею и элементами поверхности, задаваемого (для простоты) гауссовой функцией расстояния $U_{1,2} = Cc \times \exp\{-[(X - x_{1,2})^2 + (Z - z_{1,2})^2]/c\}/2$, так что: $F_x^{(1,2) repuls} = -\partial U_{1,2}/\partial x$; $F_z^{(1,2) repuls} = -\partial U_{1,2}/\partial z$.

Температурные флуктуации (как обычно в рамках уравнения Ланжевена) должны быть учтены посредством введения δ -коррелированного случайного источника сил: $D = 2k_B T \eta$; $\langle \xi(X, Z; t) \xi(X', Z'; t') \rangle = D \delta(X' - X) \delta(Z' - Z) \delta(t - t')$ — и диссипации, интенсивность которой пропорциональна разности между скоростями частицы и каждой из пластин соответственно: $F_z^{(1,2) diss} = \eta V_z$; $F_x^{(1,2) diss} = \eta(V_x \pm V)$.

Для симметрии (повышающей в данном случае точность численного эксперимента) в данной работе было предположено, что верхняя и нижняя поверхности движутся в противоположные стороны с постоянными скоростями V , как показано на рис. 2. В этом случае диссипативная сила $F_{x\,diss}$ редуцируется к виду $F_{x\,diss} = \eta(V_x + V) + (V_x - V) = 2\eta(V_x)$.

Вдоль Z граничные условия для частицы являются зеркальными (т.е. при выходе за пределы интервала между средними $\langle w_2(x) \rangle$ и $\langle w_1(x) \rangle$ частица возвращается внутрь его с противоположным направлением скорости V_z). Граничные условия вдоль направления X выбраны периодическими.

Формирование равновесной поверхности трения. Численный эксперимент с построенной выше моделью показывает, что в результате локальных столкновений абразивных частиц и неоднородностей поверхности происходит постоянное изменение ее топографии, причем формируется некоторая равновесная шероховатость. Если численный эксперимент начать с ровных поверхностей, то они становятся более шероховатыми, чем в исходном состоянии. На рис. 3 показан типичный сценарий квазислучайного блуждания абразивной частицы, взвешенной в смазке, помещенной в момент времени $t = 0$ в начало координат. Внешне это движение напоминает обычную диффузию, однако более подробное исследование показывает, что эту диффузию следует считать аномальной. Основным признаком аномальной диффузии является наличие в процессе длинных скачков (баллистических полетов) [3–5]. В данном случае такие „полеты“ имеют как простой физический смысл, так и существенное практическое значение.

Статистический анализ показывает, что „полеты“ непосредственно связаны с теми периодами движения частицы, когда она существенно ближе к верхней или нижней поверхности (и интенсивнее взаимодействует с нею) соответственно. В это время частица движется вместе с данной пластиной и может достаточно далеко удаляться от исходного положения. Последнее принципиально связано с наличием в системе со смазкой „жидкого трения“, которое значительно повышает интенсивность перемешивания и, следовательно, эффективность процесса полирования.

На вставке к рис. 3 описанное наблюдение проиллюстрировано распределением мгновенных скоростей частицы $P(V_x)$, аккумулированного

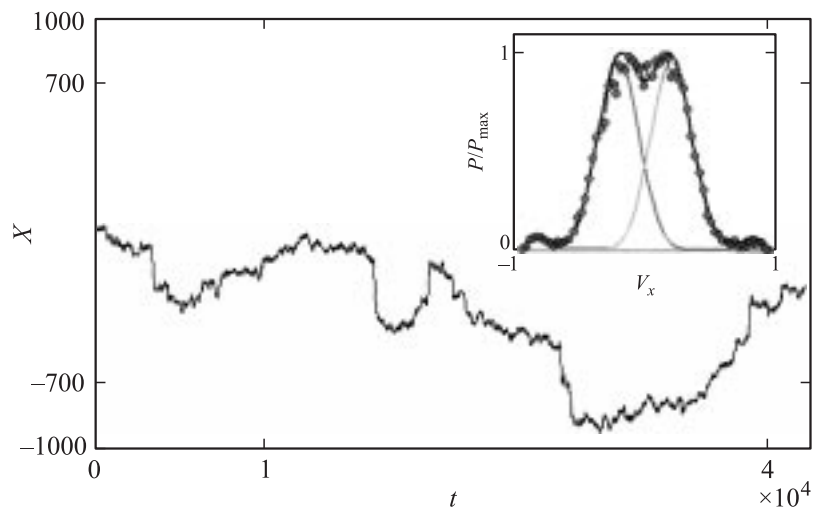


Рис. 3. Типичный сценарий квазислучайного блуждания частицы смазки (помещенной при $t = 0$ в начало координат). На вставке показано распределение мгновенных скоростей частицы для данного сценария (кружочки) и среднее по ансамблю (жирная черная линия). Светлая и темная серые линии соответствуют тем периодам движения частицы, когда она ближе к верхней или нижней поверхности (и интенсивнее взаимодействует с ней).

для конкретного сценария диффузии, изображенного на рис. 3 (кружки). Там же приведено и среднее по ансамблю распределение $P(V_x)$ (жирная черная линия). Светлая и темная серые линии соответствуют периодам движения, когда частица в основном следует верхней и нижней пластинам соответственно.

Необратимые изменения поверхностей, описываемые соотношениями (2), приводят к постоянному смещению обеих поверхностей в противоположные стороны, что отвечает процессу их стирания при полировании (т.е. к некоторому суммарному смещению $dZ < 0$, необходимому для поддержания расстояния между ними неизменным). Аккумулируя данное смещение, можно получить зависимость $dZ(t)$, отражающую, как видно из рис. 4, практически постоянную скорость стирания при полировании. На вставке к тому же рисунку изображено распределение вероятности обнаружить частицу с данной координатой Z между

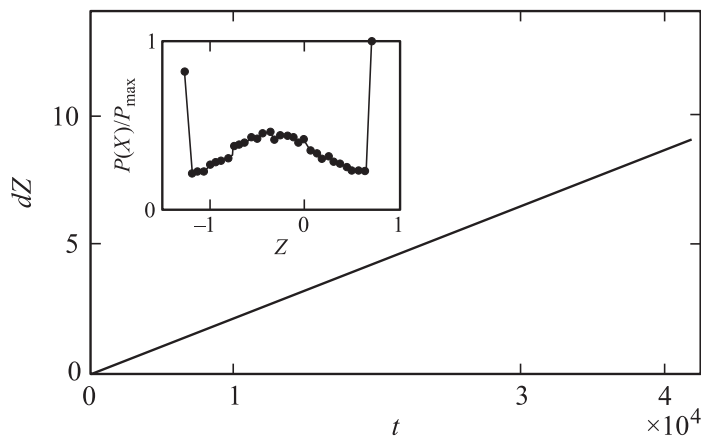


Рис. 4. „Стирание“ обеих поверхностей, вызванное их взаимодействием с абразивной частицей, взвешенной в смазке, для конкретной реализации, показанной на рис. 3. Зависимость $dZ(t)$ показывает суммарный сдвиг средних позиций поверхностей $z_{1,2}$ за время t , необходимый для поддержания среднего расстояния между ними неизменным. На вставке изображено распределение вероятности обнаружить частицу с данной координатой Z между пластинами, накопленное для того же сценария.

пластинами, накопленное для того же конкретного сценария, что и зависимость $dZ(t)$. Нетрудно видеть, что частица проводит наибольшее время в непосредственной окрестности каждой из пластин и достаточно часто оказывается в тех же областях, где она в среднем ближе к той или иной пластине. Последнее также повышает интенсивность полирования и хорошо согласуется с описанным выше механизмом аномальной диффузии.

Одной из важнейших характеристик процесса является спектральная структура $S(q)$ квазиравновесных поверхностей, возникающих в процессе полирования. Многократные численные эксперименты, выполненные в широком интервале параметров уравнений (1)–(2), показывают, что такие поверхности устойчиво формируются в рамках модели при достаточно произвольных начальных условиях (плоские пластины, поверхности, заданные методом случайного набрасывания или определяемые по их спектральной структуре).

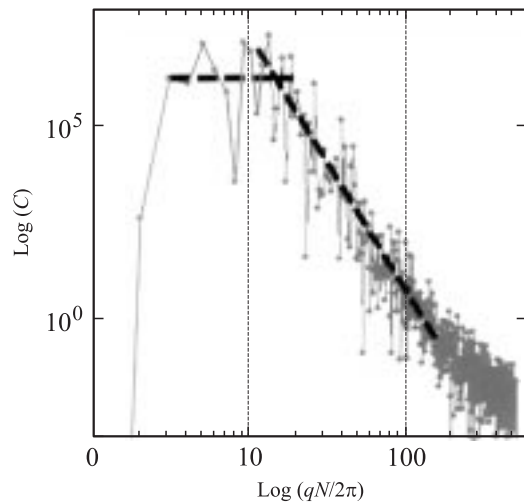


Рис. 5. Спектральная плотность квазиравновесных поверхностей $z_{1,2}$, полученных в результате полирования. Область переменной q , где наблюдается скейлинговое поведение $C(q)$, отмечена пунктирными линиями, она соответствует масштабам от 10 до 100 единиц длины в реальном пространстве.

На рис. 5 показана типичная спектральная плотность $C(q)$ квазиравновесных поверхностей $z_{1,2}$, полученных в результате полирования. Эта плотность имеет типичный вид, характерный для широкого класса реальных поверхностей [6]. В частности, она имеет хорошо выраженную область переменной q , где наблюдается скейлинговое поведение $C(q)$. На рис. 5 эта область отмечена пунктирными линиями. Она соответствует масштабам от 10 до 100 единиц длины dx в реальном пространстве.

Заключение. В настоящей работе разработана новая эффективная методика моделирования упругогидродинамических контактов между шероховатыми поверхностями, а также изменения их топографии при трении. Показано, что в результате относительного движения тел, разделенных слоем смазки со взвешенными абразивными частицами, формируются статистически равновесные поверхности с характерной фрактальной топографией. Предложенный метод моделирования может быть использован для оптимизации параметров процесса полирования, применяемого при производстве жестких дисков.

Авторы благодарны Deutsche Forschungsgemeinschaft за финансовую поддержку.

Список литературы

- [1] *Nanz G., Camilletti L.E.* // IEEE Trans. Semicond. Manuf. 1995. V.8. P. 382.
- [2] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Гидродинамика. М.: Наука, 1988.
- [3] *Shlesinger M.F., Zaslavsky G.M., Klafter J.* // Nature. London. 1993. V. 363. P. 31.
- [4] *Klafter J., Shlesinger M.F., Zumofen G.* // Phys. Today. 1996. V. 49. P. 33.
- [5] *Zumofen G., Klafter J.* // Phys. Rev. E. 1995. V. 51. P. 1818.
- [6] *Persson B.N.J., Albohr O., Tartaglino U., Volokitin A.I., Tosatti E.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2005. V. 17. P. R1–R62.