

DOI:10.3969/j.issn.1001-4551.2016.09.007

软脆铌酸锂晶体磨削的实验仿真研究^{*}

胡天明, 孔凡志^{*}, 贡 燕, 洪 滔

(浙江工业大学 特种装备制造与先进加工技术教育部重点实验室, 浙江 杭州 310014)

摘要:针对铌酸锂晶片在磨削加工时经常发生断裂的问题,对晶片断裂的原因进行了理论分析,并从晶体学的角度分析发现断裂与实验采用的晶片晶体结构有关。提出了基于多物理场耦合软件 COMSOL Multiphysics 对铌酸锂晶片磨削加工仿真的方法,为模拟铌酸锂晶片磨削减薄过程,对比分析了7种不同厚度的铌酸锂晶片在磨削加工时的应力分布和变形情况,对有外加电载荷磨削加工情况也进行了耦合仿真。研究表明,未施加电场时铌酸锂晶片的变形量随着晶片减薄过程逐渐减小,当铌酸锂晶片减薄至80 μm 时,晶片的外围出现均匀分布的4个应力集中位置,容易导致晶片产生裂纹甚至破裂;铌酸锂晶片变形量因外加电载荷而减小,因此合理施加外电场能够有效减弱晶片的应力集中趋势。

关键词:铌酸锂;COMSOL Multiphysics;磨削;有限元仿真分析;断裂

中图分类号:TH14;TN305.1

文献标志码:A

文章编号:1001-4551(2016)09-1071-05

Simulation and experimental of grinding soft-brittle lithium niobate crystals

HU Tian-ming, KONG Fan-zhi, GONG Yan, HONG Tao

(Key Laboratory of Special Purpose Equipment and Advanced Processing Technology of Ministry of Education, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310014, China)

Abstract: Aiming at solving the problems of lithium niobate chip while grinding, the reason for fracture of lithium niobate chip in experiment was briefly proposed with crystallographic options. Finite element analysis method using COMSOL Multiphysics was employed for simulating grinding lithium niobate crystals. To simulate the process of grinding and thinning lithium niobate chip, its deformation and stress when grinding were analyzed under seven kinds of thickness for lithium niobate chip. Also grinding lithium niobate chip under electric load was simulated. The results indicate that deformation displacement of lithium niobate chip is gradually decreased while grinding under no electric load and the stress of four symmetric area on lithium niobate chip is much bigger when its thickness was 80 μm , which are inclined to fracture. And the results also show that deformation and stress concentration of lithium niobate chip is degraded which under electric load.

Key words: lithium niobate; COMSOL Multiphysics; grinding; finite element simulation; fracture

0 引 言

铌酸锂晶体(LiNbO_3 , LN)因其具有优良的压电、铁电、介电、声学、非线性光学、光折变、电光、热电性能,而且物理和化学性能稳定,原材料成本价格低廉,

生长大块单晶不需要非常复杂的技术,被视为集成光学系统中许多光学元件重要的衬底材料,并且通过不同掺杂手段还可以呈现出不同的性能^[1-2]。LN晶体是人们至今发现的光学性能最多、综合性能指标最好的晶体。它被广泛应用于光导、光调制器、声表面波、光开

收稿日期:2016-03-28

基金项目:浙江省自然科学基金资助项目(Y14E050057)

作者简介:胡天明(1991-),男,江西景德镇人,硕士研究生,主要从事压电晶体超精密加工方面的研究. E-mail: timmy_hu@163.com

通信联系人:孔凡志,男,副教授,硕士生导师. E-mail: franzkong@zjut.edu.cn

关和二次谐波发生器等器件,受到人们很大的关注^[3-4]。

LN 晶体可以用来制作热释电器件因为其优良的热释电性能,但其具有的比较高的热释电系数会使表面容易产生大量的静电荷,静电荷会在电极间、晶片间自发释放。当静电场比较高的时候,容易对晶片造成损伤(如微畴翻转、开裂等),故而增加了加工难度。

LN 晶体是一类具有压电、热释电效应并且硬度低(莫氏硬度为 5),易破损的“铁电软脆”晶体,加工的时候易出划痕,加工速度慢,对温度具有敏感性,易产生微畴反转,加工过程中易产生角度很小的尖劈碎片^[5-7]。针对 LN 晶体材料特性及应用要求,急需开发与之相适应的高效超精密磨削加工技术,并具有非常重要的理论与工程意义^[8]。

采用传统的分析 ANSYS 等软件分析 LN 晶片具有一定的局限性,因为 LN 压电材料的参数定义和机电耦合之间的关系比较复杂,而 COMSOL Multiphysics 软件具有压电材料模块,操作起来简单^[9]。

本研究采用多物理场耦合软件 COMSOL Multiphysics 对 LN 晶片在磨削时的电场和应力场进行分析,为 LN 晶片磨削加工提供理论依据。

1 压电本构方程和 LN 晶片的参数选择

压电材料的压电耦合是一种可逆效应,所以压电材料的介电、压电、热电灯宏观物理性能之间的相互关系,可以用热力学原理进一步讨论。压电材料的力-电-热本构方程可以用下式描述:

$$\begin{cases} T_{ij} = c_{ijkl}^E S_{kl} - e_{ikl}^{\theta} E_k - \alpha_{ij}^E \theta \\ D_i = e_{ikl}^{\theta} S_{kl} + \varepsilon_{ikl}^S E_k + \lambda_i^S \theta \\ K = \alpha_{kl}^E S_{kl} + \lambda_k^S E_k + \frac{\rho c}{T} \theta \end{cases} \quad (1)$$

式中: T_{ij} —应力张量; D_i —电位移矢量; K —熵; S_{kl} —应变张量; θ —温度增量; c_{ijkl}^E —弹性柔顺系数; e_{ikl}^{θ} —压电系数; α_{ij}^E —热膨胀系数; ε_{ij}^S —介电系数; λ_i^S —热电系数; $(\rho c)/T_0$ —热容量(其中: ρ —密度, c —比热, T_0 — θ 温度增量的初始温度值); 右边第一项—机械形变导致的正压电效应、逆压电效应、弹性膨胀效应; 右边第二项—电场引起的充放电效应、逆压电效应和电热效应; 右边第三项—热电效应,热弹效应和热容增量。

压电材料的热力学方程表征了压电体的电-弹-热效应(即力-电-热效应)之间的相互关系,以及各种物理效应^[10]。

LN 晶片的密度 $\rho = 4.64 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$, LN 晶片的主要参数压电系数、介电系数、劲度系数矩阵为:

压电系数 d (单位: C/m^2):

$$d = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 3.7 & -2.5 \\ -2.5 & 2.5 & 0 & 3.7 & 0 & 0 \\ 0.2 & 0.2 & 1.3 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2)$$

介电系数 ε (单位: F/m):

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} 3.89 & 0 & 0 \\ 0 & 3.89 & 0 \\ 0 & 0 & 2.57 \end{bmatrix} \times 10^{-10} \quad (3)$$

劲度系数矩阵 c (单位: N/m^2):

$$c = \begin{bmatrix} 20.3 & 5.3 & 7.5 & 0.9 & 0 & 0 \\ 5.3 & 20.3 & 7.5 & -0.9 & 0 & 0 \\ 7.5 & 7.5 & 24.5 & 0 & 0 & 0 \\ 0.9 & -0.9 & 0 & 6.0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 6.0 & 0.9 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.9 & 7.5 \end{bmatrix} \times 10^{10} \quad (4)$$

2 铌酸锂磨削实验结果分析

本研究采用横向减薄磨削机床对 LN 进行减薄磨削试验,发现 LN 晶片在磨削的过程中,尤其是当晶片厚度磨至 $80 \mu\text{m}$ 以下的时候,晶片沿磨削方向发生断裂。

铌酸锂晶片磨削时的断裂路径如图 1 所示。

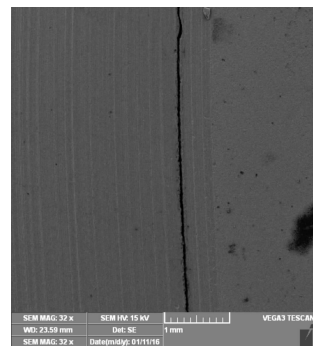


图 1 铌酸锂晶片磨削时的断裂路径

从断裂表面可以看出铌酸锂晶片沿着砂轮旋转的方向(磨粒的方向)断裂,可以认为晶片在磨削的过程中,晶片内部产生了很大的残余应力^[11]。当残余应力集中时,就会导致晶片产生破裂。

根据图 1 的断裂轨迹,可以推论,铌酸锂晶片在受到磨削力的作用下,在磨削轨迹方向开始有一个小点产生裂纹,在机械应力和热电效应产生的作用下,提供了裂纹沿断裂方向扩展的能量,从而裂纹不断沿磨削方向扩展,直至整个晶片发生断裂。

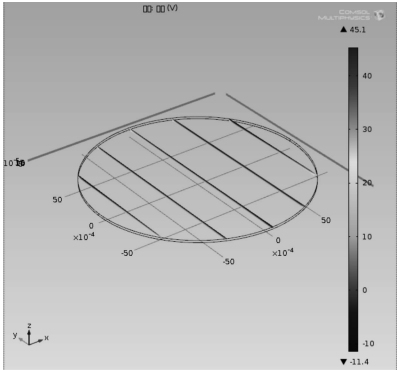
从晶体学方面分析断裂原因,可能与试验所用的铌酸锂晶片密切相关。LN 晶片根据切割方向不同,可以分为 X-cut、Y-cut 和 Z-cut,实验中选取的 LN 晶片为 Y-cut。

根据文献[12]中的纳米力学实验结果,Y-cut 晶面的弹性模量和硬度最小,X-cut 晶面的弹性模量和硬度最大,而相同米勒指数的晶面和晶向相互垂直,即Y-cut对应的 $[1\bar{1}00]$ 晶向的硬度最小。

由原子排布可以看出,在X方向原子排布密集,而在Y方向排布的原子较少。由于LN晶体的各向异性,对于不同晶向或晶面的晶体,发生变形的难易程度也存在差异,一般而言,弹性模量E值越大,变形时需要的应力也越大,由此可以推断,Y-cut晶面易于加工,但同时在Y向 $[1\bar{1}00]$,即垂直于晶面的方向存在易于变形,甚至产生裂纹的风险。

3 基于 COMSOL Multiphysics 的铌酸锂压电晶片力电耦合分析

由于在磨削时使LN晶片的破损的机理比较复杂



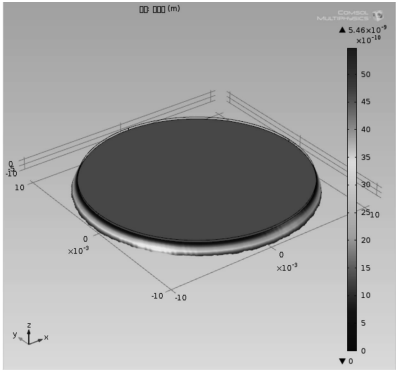
(a) 电位分布图

杂,因素较多,很难从理论公式推导得出破损的主要原因。于是本研究采用 COMSOL Multiphysics 对 LN 晶片磨削过程进行力电耦合分析。仿真分析流程依次为维度选择、模块的选择、模型的建立与定义、网格划分、指定物理、求解、进行结果的可视化处理。

为了模拟 LN 进行减薄磨削的过程,本研究分别模拟了晶片厚度为 200 μm 、180 μm 、160 μm 、140 μm 、120 μm 、100 μm 、80 μm 时的变形情况。由于 LN 晶片不仅具有压电效应还有热电效应,在磨削的过程中,磨削力作用下会产生逆压电效应,产生电场。磨削热的作用下,也会产生压电效应,从而对晶片的变形产生影响。底面加载位移约束,上面加载 $5 \times 10^6 \text{ Pa}$ 的磨削力。

本研究对模型进行建模,然后划分网格,添加物理场。对模型进行求解,最后对结果进行后处理。

铌酸锂晶片的变形云图和电位分布图如图 2 所示。



(b) 变形云图

图2 铌酸锂晶片的变形云图和电位分布图

在对结果进行后处理后,可得到LN晶片的电位分布图如图2(a)所示。由图2(a)可以看出LN晶片的下表面的电位比较高。

后处理后得到LN晶片的变形图如图2(b)所示。由图2(b)可以看出,LN晶片的上表面变形位移比较小,晶片边缘变形较大。

本研究对减薄过程中(厚度为200 μm 、180 μm 、160 μm 、140 μm 、120 μm 、100 μm 、80 μm)LN晶片的变形位移和晶片两端的电势(即电压)进行模拟,得到了LN晶片的变形程度和厚度之间的关系,它们之间的关系如图3所示。从图3可以看出铌酸锂加工时的变形位移随着晶片减薄逐渐减小。

铌酸锂晶片表面的电压跟晶片的厚度之间的关系如图3所示。

从图3中可以看出铌酸锂晶片的电压随着减薄的过程逐渐减小。

后处理后得到晶片的应力云图,片的边缘处的应

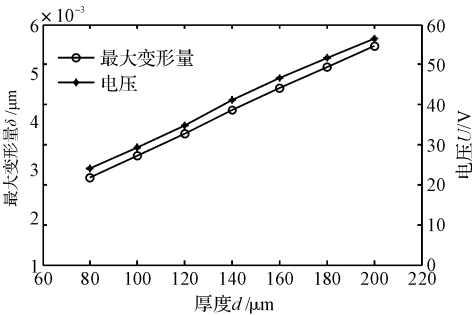


图3 铌酸锂晶片的最大变形量、电压与厚度关系图

力最大,上、下表面的应力分布都比较均匀。在晶片逐渐减薄的过程中,在200 μm ~ 140 μm 的厚度的时候,晶片的应力大小及分布没有发生什么变化。在140 μm 逐渐减薄至80 μm 的过程中,晶片的应力大小逐渐减小,但仍然是晶片的边缘应力最大。在铌酸锂晶片减薄至80 μm 的时候,应力云图如图4所示。

由图4可以看出,晶片外围有对称分布的4个凸

起位置,比边缘其他位置明显要大。根据这个现象,可以推断晶片的这几个位置容易发生断裂,这与实验中晶片沿着磨削方向断裂相符。

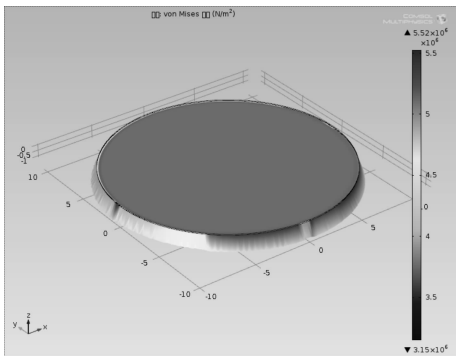


图 4 厚度为 80 μm 的 LN 应力云图

借鉴压痕断裂力学中的尖锐压头印压中位裂纹深度 c 的理论计算方法,如下式所示:

$$c = \alpha_K^{2/3} \left(\frac{E}{H} \right)^{2(1-m)/3} (\cot\psi)^{4/9} \left(\frac{P}{K_r} \right)^{2/3} \quad (5)$$

$$\alpha_K = 0.027 + 0.09(m - 1/3)$$

式中: c —裂纹深度, P —压痕压制载荷, ψ —压头锐角角度, E —材料的弹性模量, H —材料的表面硬度, K_r —压痕应力场塑性应力强度因子, m — $1/3 \sim 1/2$ 之间的常数。

由以上公式可知,在磨削过程中产生的裂纹深度 c 与施加的载荷 P 成正比,但对于本研究试验中的连续磨削减薄的过程,保持施加载荷 P 不变,但材料的厚度持续降低,可以看作类似于提高载荷 P ,从而导致裂纹深度增加,最终出现磨削实验中的断裂现象。

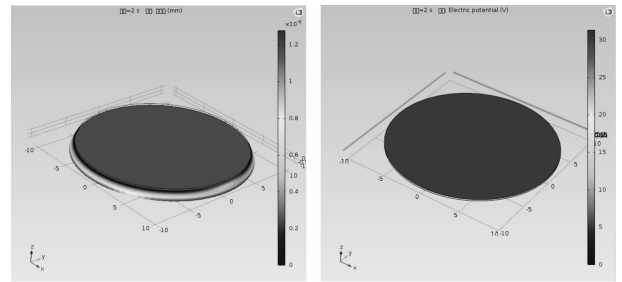
另外一方面,由于铌酸锂晶片具有压电效应,在磨削时由于受到力的作用,会产生电场。同时在磨削的时候也会产生磨削热,因其具有的热电效应,也会产生电场。它们之间的关系比较复杂。而且因为铌酸锂晶体具有比较高的热释电系数,易使表面产生大量的静电荷,静电荷会在晶片间自发释放。如果静电场比较高,则容易使铌酸锂晶片产生微畴翻转、开裂等损伤。

4 基于 COMSOL Multiphysics 的铌酸锂压电晶片瞬态分析

因为 LN 晶片所具有的逆压电效应, LN 晶体在受到外加电载荷时,会产生机械应变,或者拉伸或者压缩。为了分析当 LN 晶片在磨削的时候,同时受到外加交变电载荷的时候, LN 晶片在磨削的时候产生的应力及电位分布,本研究在 LN 晶片表面施加正弦交变电压 ($U = 36 \sin 100 \pi t$) 后,仿真发现当厚度不变的时候,一个周期内 LN 晶片的变形位移没有随时间发生

变化,但电位随时间呈现周期性变化。

铌酸锂晶片的瞬态变形云图和电位图如图 5 所示。



(a) 瞬态变形云图

(b) 瞬态电位图

图 5 铌酸锂晶片的瞬态变形云图和电位图

$t = 2 \text{ s}$ 时的变形位移如图 5(a) 所示。从图 5(a) 中可以看出在 LN 晶片的变形位移边缘较大,变形比没有加交变电压的时候明显要小。后处理得到的 LN 晶片表面的电位图, $t = 2 \text{ s}$ 时的电位图如图 5(b) 所示,从图 5(b) 中可以看出相比没有加载交变电压的时候,晶片表面的电势及两端的电压明显变小。

通过模拟磨削加工铌酸锂晶片时加载交变电压,仿真发现外加电载荷可以减小铌酸锂晶片下表面的变形程度。

5 结束语

本研究通过磨削实验发现, LN 晶片在磨削减薄至 80 μm 左右时,经常会发生断裂。根据轨迹进行了推论,从晶体学的角度分析进行了验证。分析发现实验采用的 Y-cut 晶片相比 X-cut 和 Z-cut 易于加工,但是 Y-cut 晶体在垂直于晶面的方向易于变形甚至产生裂纹。借助 COMSOL Multiphysics 有限元分析软件对 LN 晶片磨削加工进行了模拟分析,发现晶片的变形量随着晶片的减薄逐渐减小。当晶片减薄至 80 μm 时,晶片外围有均匀分布的 4 个位置应力最大,这几个位置也是最容易发生断裂的区域,这与实验现象基本相符。

对磨削加工时同时加载外加电场的情况进行了模拟分析,结果发现,外加电场有利于降低变形和减弱应力集中趋势,这显然有利于改善磨削的性能。因此,可以考虑在磨削设备上以合适的方式加载外电场或设计新型真空夹具,以便提高 LN 晶片的磨削效率和表面质量。

参考文献 (References):

- [1] 师丽红, 阎文博. 纯铌酸锂晶体红外光谱的低温研究[J]. 物理学报, 2009, 58(7): 4987-4991.
- [2] FAZIO E, ZALTRON A, BELARDINI A, et al. Influence of iron doping on spatial soliton and fixing in lithium niobate crystals[J]. Optical Materials, 2014, 37(1): 175-180.

[3] 张 玲,韩文卿,孙 军,等. 高温稳定性系列铌酸锂电光调 Q 开关的研制[J]. 人工晶体学报,2010,39(4):931-935.

[4] 王志斌,李克武,张 瑞,等. 基于铌酸锂制作光弹调制器用压电驱动器[J]. 光学精密工程,2015,23(1):63-68.

[5] 邢 彤,袁巨龙,赵文宏,等. 铌酸锂晶片的化学机械抛光质量研究[J]. 机械工程师,2003(7):19-27.

[6] BROWN H, BALLMAN A A, CHIN G Y. Knoop micro-hardness measurements on lithium niobate and lithium tantalate [J]. **Journal of Materials Science**, 1975, 10 (7) : 1157-1160.

[7] 刘立新,张学建,张 莹,等. 铌酸锂晶体的抛光机理及精密加工工艺[J]. 机械工程师,2003(7):19-21.

[8] 赵 霞,郭建亮,迟 军,等. 磨削加工质量与生产效率的综合优化研究[J]. 机电工程,2014,31(6):749-752.

[9] 吕琼莹,杨 艳,焦海坤,等. 基于 COMSOL Multiphysics

超声波电机的谐振特性分析[J]. 压电与声光,2012,34(6):864-867.

[10] 李 远,秦自楷,周志刚. 压电与铁电材料的测量[M]. 北京:科学出版社,1984.

[11] ARAI S, WILSON S A, CORBETT J, et al. Ultra-precision grinding of PZT ceramics-Surface integrity control and tooling design [J]. **International Journal of Machine Tools and Manufacture**,2009,49(12-13):998-1007.

[12] ZHANG Zhen-yu, YANG Song, XU Chao-ge, et al. Deformation and stress at pop-in of lithium niobate induced by nanoindentation[J]. **Scripta Materialia**, 2014, 77 (12) : 56-59.

[编辑:李 辉]

本文引用格式:

胡天明,孔凡志,贡 燕,等. 软脆铌酸锂晶体磨削的实验仿真研究[J]. 机电工程,2016,33(9):1071-1075.

HU Tian-ming, KONG Fan-zhi , GONG Yan, HONG Tao, et al. Simulation and experimental of grinding soft-brittle lithium niobate crystals[J]. *Journal of Mechanical & Electrical Engineering*, 2016,33(9):1071-1075.

《机电工程》杂志:<http://www.meem.com.cn>

(上接第 1065 页)

同时该处理模块具有可移植性,可以作为子模块嵌入到其他系统的采集模块与信号生成模块之间,进行相似的数据处理,充分体现 LabVIEW 在数据采集和信号分析处理中的强大功能。

4 结束语

针对脉冲法测量铁磁性材料构件早期损伤检测装置中,磁滞回线在脉冲放电间隔区出现奇异点的问题,本研究提出了运用样条插值的方法,通过 LabVIEW 中的样条插值模块进行了上位机程序的编制,并且采集了不同材料的实验数据绘制生成磁滞回线来进行对比实验。

实验研究与结果表明:对于脉冲法得到的铁磁性材料磁滞回线中的奇异点问题,通过运用 LabVIEW 中的样条插值模块,可以使曲线中未处理部分与经过处理的部分连接处的一阶导数连续,从而在上位机显示面板上获得整体光顺的磁滞回线,为进一步获得准确、可靠的磁性参数提供了基础。

参考文献 (References):

[1] WILSON J W, TIAN G Y, BARRANS S. Residual magnetic field sensing for stress measurement[J]. **Sensors and Actuators A: Physical**,2007,135(2):381-387.

[2] KAHROBAEE S, KASHEFI M, ALAM A S. Magnetic NDT

Technology for characterization of decarburizing depth[J]. **Surface and Coatings Technology**, 2011, 205 (16) : 4083-4088.

[3] WANG Z D, GU Y, WANG Y S. A review of three magnetic NDT technologies[J]. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**,2012,324(4):382-388.

[4] 曹鸿泰,黄汝霖,姚缨英. 磁滞回线测量方法与 Simulink 仿真分析研究[J]. 机电工程,2014,31(3):383-387.

[5] 王宗罡. 脉冲法测量残余应力的新装置[D]. 长春:吉林大学物理学院,2012.

[6] PEREVERTOV O, STUPAKOV O, TOMÁŠ I, et al. Detection of spring steel surface decarburization by magnetic hysteresis measurements[J]. **NDT & E International**, 2011, 44(6):490-494.

[7] 袁 龙. 基于 LabVIEW 测量材料磁特性参数的新系统[D]. 长春:吉林大学物理学院,2013.

[8] 黄东岩. 一种测量铁磁性材料应力的新装置[D]. 长春:吉林大学物理学院,2007.

[9] 许小勇,钟太勇. 三次样条插值函数的构造与 Matlab 实现[J]. 兵工自动化,2006,25(11):76-78.

[10] 朱立勋. 三次样条插值的收敛性及一类三次广义样条插值的误差估计[D]. 长春:吉林大学数学学院,2006.

[11] 陈文略,王子羊. 三次样条插值在工程拟合中的应用[J]. 华中师范大学学报:自然科学版,2004,38(4):418-422.

[编辑:李 辉]