

·学科进展·

纳米切削加工工艺的分子动力学模拟研究进展

方刚 曾攀*

(清华大学机械工程系, 北京 100084)

[摘要] 介绍了国外分子动力学在纳米切削加工研究方面的进展,阐述了纳米切削加工分子动力学模拟的基本原理、分子运动方程的建立和求解算法,分子间作用力、温度的计算以及周期边界条件、宏观特性统计和控制技术等。最后列举了一些在纳米切削加工中应用分子动力学模拟的实例。

[关键词] 纳米切削, 分子动力学, 计算机模拟

20世纪60年代以来,微电子技术已经渗透到机械工程的各个领域,机电一体化已成为现代机械的重要特征,并推动机械装备向微型化发展。此外,现代科学技术进步对机械的工作精度提出了更高的要求,对光盘、光学镜头、精密镜面等光学产品以及计算机硬盘、集成电路等电子产品的加工精度要求越来越高。为了得到符合要求的精度、表面光洁度、表面完整性等,必须改善机械加工的机床和工艺技术,超精密切削技术就是为了适应上述要求而提出来的^[1]。目前,超精密切削的精度可以达到0.1—100 nm。在机械加工中,要达到1 nm的加工精度,加工的最小单位必然在亚微米级。由于原子间的距离为0.1—0.3 nm,纳米级的加工实际上已到了加工精度的极限。纳米级加工中试件表面的一个原子或分子将成为直接的加工对象,因此纳米级加工的物理实质就是要切断原子键的结合,实现原子或分子的去除。各种物质是以共价键、金属键、离子键或分子结构的形式结合而组成,要切断原子或分子的结合,必然要求超过该物质的原子间结合能,需要的能量密度是很大的,所以要研究材料原子键的能量密度、切断原子间结合所需的能量。而传统的切削加工消耗的能量密度较小,实际上是利用原子、分子或晶体间连接处的缺陷而进行加工的。用传统切削加工方法进行纳米级加工,要切断原子间的结合就相当困难了。纳米级加工要求达到极高的精

度,在使用基本能子进行加工时,如何进行有效地控制以达到原子级的去除,是实现原子级加工的关键^[1,2]。

在现代超精密制造技术中,典型的微切削工艺是采用金刚石单晶刀具,切削速度通常在1—100 m/s之间,它能够实现几十纳米尺度切削加工。最近已有报道可以生产1 nm的切屑,但是人们对于纳米切削过程中材料变形和剥离机理、表面与亚表面层材料性能以及切削刀具与工件之间的相互作用等方面缺乏深入的理解^[3]。通过实验来研究纳米切削中切屑成形的机理、加工表面的质量,需要一些精密、昂贵的检测和加工设备。当切削深度到达几个原子厚度时,实验上比较困难,要花费大量的时间和精力来研究切削机理和表面破坏等。为了研究刀具形状、加工条件对切削质量的影响,必需使用昂贵的单晶金刚石刀具。而在理论分析方面,传统的基于连续介质力学的分析方法已经不能满足要求了,因为1 nm的长度仅相当于几个原子的长度,材料不能看作是连续的。这样,另一种计算机模拟技术——分子动力学(Molecular Dynamics)模拟就被应用到该领域中,将加工材料和刀具看作是具有相互作用的原子的排列组合的晶体^[2,3]。

1 国外纳米切削的分子动力学模拟进展

最早将分子动力学方法用于材料研究中的是

* 1998年度国家杰出青年科学基金获得者。

本文于2001年3月21日收到。

Vineyard 在 1960 年探讨材料辐射损伤的动力学规律时,模拟结果给出了原子轨迹,这一工作使得过去对热力学性能的定性估计转入到相对微观过程的定量研究。1964 年 Rahman 用 MD 方法模拟液态氦,同时加入了周期性边界条件,结果他惊奇地发现可以用很少的粒子(864 个)来反映真实系统的热力学性质。自此,凝聚态物质的 MD 模拟成为可能,许多研究者纷纷投入这一研究工作中^[4-6]。

从 MD 的整个发展过程以及它在化学、物理以及材料科学中的应用情况来看,它已经是一门成熟的技术了。但是 MD 在机械加工方面的应用历史并不长,20 世纪 80 年代末至 90 年代初,美国 Lawrence Livermore 国家实验室的一个研究小组开始进行纳米切削的 MD 模拟^[7,8]。他们模拟的切削速度在 100—500 m/s,利用不同角度的切削刀具、不同切削深度的铜、铝和硅等加工材料的纳米级切削加工过程。他们试图找出纳米切削工艺与用单晶金刚石刀具进行铝和铜超精密切削的关系。这些工作引起了很多研究者的注意,激发了他们的兴趣,在最近几年中,纳米加工中的 MD 模拟技术研究方兴未艾。美国、日本的许多学者都利用 MD 模拟了纳米切削工艺。日本的 Ikawa 等人在 90 年代初模拟了金刚石刀具对铜的纳米切削工艺^[9,10],他们研究了两个切削方向(即 $\langle 110 \rangle$, $\langle 121 \rangle$ 方向)上刀锋圆角半径和最小切削深度对切屑成形过程、亚表面变形和特定的切削能的影响。Inamura 研究了准静态条件下的 MD 模拟^[11,12],在模拟中仅改变了最小能量位置,这些位置是振动原子的平均位置。遗憾的是,由于所模拟的原子数太少,对结果的分析很困难,不像其他 MD 模拟那样明显。Inamura 还提出了一种从原子模型(纳米切削)到平衡连续体模型(有限元方法)的变换方法^[13],试图通过 MD 对纳米切削的模拟,来找出常规切削的一些规律。Rentsch 等人还利用 MD 技术研究了研磨工艺^[14],从位错生成,表面粗糙度、残余应力和裂纹萌生等角度来研究铜和硅等加工材料的表面完整性。Komanduri 等人利用 MD 模拟纳米切削中刀具的几何形状对切削质量的影响^[15],他还与 Chandrasekaran 等人为提高纳米切削 MD 模拟的计算效率做了一些研究工作^[16],提出一些新的方法,提高了计算速度、减少了内存用量等。Inamura 等人还通过 MD 模拟研究了脆性材料加工过程中的脆塑转变现象^[16]。

2 分子动力学模拟的基本原理

分子动力学方法是一种描述微观现象的有效方

法,它是从统计物理学中衍生出来的一种计算机模拟技术。MD 模拟的基本原理是:建立一个粒子系统来模拟所研究的微观现象,系统中各粒子之间的相互作用根据量子力学来确定。对于符合经典牛顿力学规律的大量粒子系统,建立粒子动力学方程组,通过数值求解得到在各个时刻每个原子的坐标和速度,并把它们存储下来。这些坐标和速度数据给定了系统在各个特定时刻的微观状态。根据需要将这些数据取出来作适当的平均便可求得各种宏观性质。由于 MD 模拟具有沟通宏观特性与微观结构的作用,对于许多在理论分析中和实验观察上都难以了解的现象可以做出一定的微观解释,因此它在物理学、化学、生物学和材料科学等许多领域得到了广泛应用。MD 模拟的关键技术有:分子或原子的运动方程描述和求解;分子或原子间作用力模型的描述和计算;温度以及压力的计算;周期边界条件及最小镜像准则;宏观特性统计与控制等。

MD 模拟的基本点在于把连续介质看成一个由 N 个粒子组成的系统。如果不考虑量子效应,则系统中粒子的运动将遵循牛顿定律。MD 运动方程的求解算法通常有两种:即 Gear 预测修正算法和 Verlet 算法。这两种算法在每一个时间步中只需要对分子受力计算一次。Gear 算法经常是在一个特定的时间步中存储大量的原子坐标以及它对时间的导数(速度)。它的基本要点是先用泰勒展开,然后计算力,再修正坐标、速度以及加速度。与 Gear 预测修正算法不同的是,Verlet 算法利用当前步和前一时间步的信息来推出原子位置。在 Verlet 算法基础上出现了一种方法就是蛙跳式(Leap-frog)算法,另一种就是所谓的 velocity Verlet 算法,这样就会得到很好的能量守恒,因为动能是直接从速度计算而来的。然而,与标准的 Verlet 算法相比,它的表达式更复杂,所以计算上要花费更多的时间和存储空间。

原子间作用力的计算较为复杂,可以采用两种方法。第一种方法就是根据量子力学知识,计算任何一种原子排列构型的总能量,需要求解该构型下多电子体系的薛定谔方程,也称为 Ab initio 方法。但是由于量子力学的计算规模非常大,而且需要一些近似,对于一般的复杂系统,这几乎是不可能的。为解决这一问题,一些学者提出对偶势,如 Lennard-Jones 势函数, Morse 势函数和多体势等势函数形式。在多体势基础上,还分为原子嵌入法 EMA(Embedded Atom Method)、胶合模型(Glue Model)以及 Finnis-Sinclair 势。这些方法中势函数的一些参数需要根

据对应材料的物理性质而确定。

MD方法能够有效地模拟原子受力和变形的传递,因为原子的位移和力的计算可以直接通过它与周围原子相互作用的势能而得到。对于大多数纳米切削模拟来说,可以将热状况考虑进去。在MD模拟中,当势能自动地转换为动能时,在理论上能够模拟出生成的热,这种热是通过位错移动引起的晶格振动来体现的。共价固体(Covalent Solid)中,热的转换是通过晶格振动来实现的,但金属中的热传导主要是由电子的移动来实现的。一般来讲,实际金属都具有很高的热传导率,这样,与用晶格振动方式计算温度的MD模拟相比,在金属温度场中也就有了比较小的温度梯度。分析微切削的温度场时,就要对温度梯度进行比例变换或调整,使得它与连续热传导理论一致。

在计算机模拟中,边界条件的选择取决于实际问题的边界要求。但是计算机的运算能力是有限的,模拟计算系统的粒子数要比实际系统的粒子数少得多,这就产生了所谓的“尺寸效应”问题。为了使得从十分有限的粒子数模拟得到的结果更好地应用于粒子数很多的实际系统,在MD模拟中经常采用周期边界条件。

在求解出模拟系统中 n 个粒子在相空间的轨迹后,还要应用统计物理原理计算该系统的宏观物理特性和结构特点,从而完成分析动力学模拟的全过程。

3 分子动力学模拟在纳米切削中的应用实例

图1是对铜微切削过程的MD模拟的例子,在模拟中,使用了6076个原子,切削速度为200 m/s,切屑厚度为1 nm,切削距离只设为35 nm(这与实际不符,只是为了减少计算时间),整个模拟用了170 h。在模拟过程中,原子之间的作用力模型采用的是Morse势函数。

文献[17]中的作者提出了重整化分子动力学(Renormalized Molecular Dynamic)模拟方法,并利用这种方法模拟了纳米与微米范围内的无缺陷脆性材料切削加工中的脆塑转变现象。据断裂力学原理,加工脆性材料时存在着脆塑转变,裂纹扩展是因为晶体内部存在着缺陷。通过对内部无缺陷的单晶硅的切削过程模拟,发现这样的材料在切削过程中同样会发生脆塑转变(图2),空气在这一现象中起着很重要的作用。由于刀尖的切入,工件中刀尖处原子

的势能被改变,并导致硅原子动能的突然增加,这就打破了原子的排列,引起局域晶格结构向无序状态的相变,这种无序状态位于刀尖前部的下面,随着切削方向发展,在它的前部形成空穴。这一过程是靠刀尖处高应变能提供的能量驱动的。当应变能转变为动能时,空穴扩展,最后发展成清晰的裂纹(图2b)。空气与晶体的化学反应能又增加了原子的动能,原子运动加剧,拉长了原子间的距离,使得裂纹扩展。

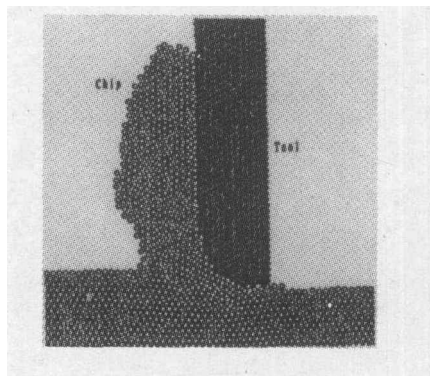


图1 铜微切削的分子动力学模拟

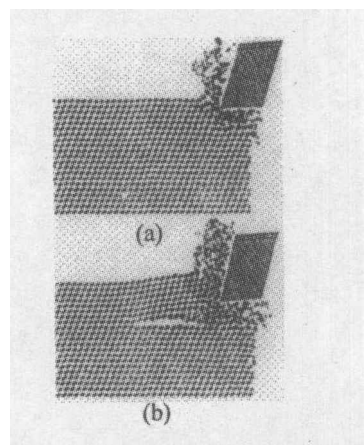


图2 脆塑转变现象分子动力学模拟

在脆性材料的超精密机械加工或研磨加工中,当切削深度很小时,所用的大部分刀具都采用相对于切削深度很大的棱角半径和很大的负前角,例如,在对硅的单刃切削中,前角将会达到 -30° 或更大。正是这种大的负前角产生了必要的压力,才使得刀锋下的工件材料产生塑性变形。这种塑性变形与传统机械加工中的负前角刀具前工件材料的塑性变形不同。脆性材料在带有较大负前角刀具作用下的塑性变形,相对一般的负前角刀具加工,是一种能量集中而且对材料的剥离是无效的。在模拟中,发现刀具负前角过大时,产生了无效的材料切除,通过模拟看到,由于刀具前面压凹效果,在刀具下面材料产生了剧烈的塑性变形(图3)。如果使用的是正前角刀

具或很尖的刀锋,即棱角半径相对切除深度很小,就不会产生足够的压力以产生塑性变形和弹性变形,结果会产生裂纹,导致脆性微断裂的发生。只有合理的刀具形状才能够产生合理的切削或磨削过程。因为制造这样的原子尺度的尖锐刀具是不可能的,所以以上假说的验证很困难。但通过 MD 的模拟,可以检验以上的假说。在文献[15]中作者研究了刀具形状对纳米切削加工质量的影响。

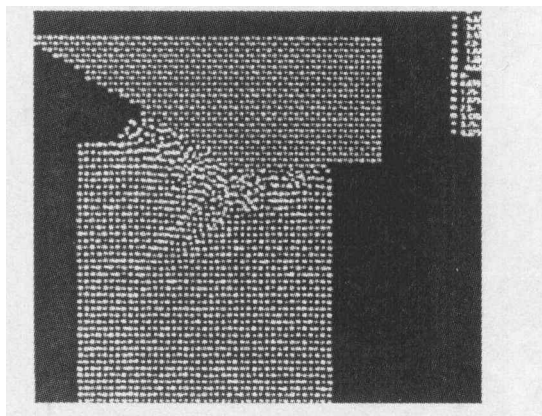


图3 负前角刀具纳米切削的分子动力学模拟

目前,纳米切削的模拟大都采用二维 MD 模拟,这样可以大大节约计算时间。但是为了深入研究那些刀具或工件形状都比较复杂的纳米切削工艺,用二维模拟显然是不够的。日本的 Isono 和 Tanaka 用三维 MD 模拟分析了金属镍的纳米切削和压痕(Indentation)的温度场,可切削性(Machinability)和原子间作用力^[22,23]等。台湾成功大学机械工程系 Cheng-I Weng 教授的研究小组对金属铜的纳米切削进行了三维 MD 模拟^[24]。他们用 MD 模拟了用扫描探针显微镜(SPM)的探针(pin)来制做纳米器件时的工艺过程,研究了切削抗力(cutting resistance)的影响因素以及探针形状对成形效果的影响。在文献[24]的模拟中,采用金刚石探针(diamond pin tool)切削单晶铜(图4),一共用了4 000个原子。模型中的横向(x方向)采用了周期性边界条件,而左侧和下面的三层原子被固定。Cu-Cu原子和Cu-C原子间作用力的模型采用Morse势。切削速度为100 m/s。图5显示的是切削过程中间隔10 ps时的工件变形情况。模拟结果表明,原子尺度(Atomic-scale)切削与微观尺度(Micro-scale)的切削中的切削抗力系数是相似的。原子尺度切削中,在切削速度相同的情况下,探针锥角和切削深度的增加都会引起切削力的增加。探针前方的位错聚集和堆积引起的加工硬化,会使切削力增大。该文中还提到,利用MD模拟验证了

Mate 等人第一次用扫描探针显微镜(SPM)观察的粘滑(stick-slip)现象^[25]。

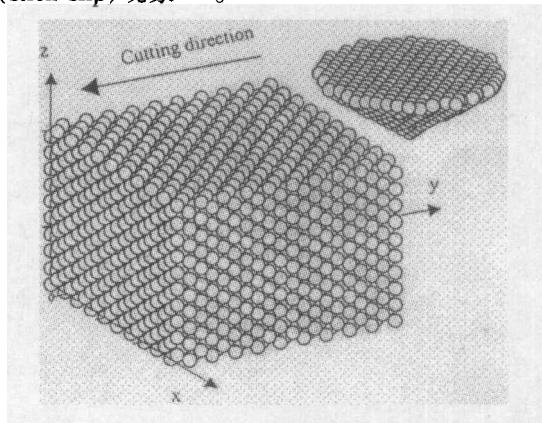


图4 纳米切削的三维分子动力学模型

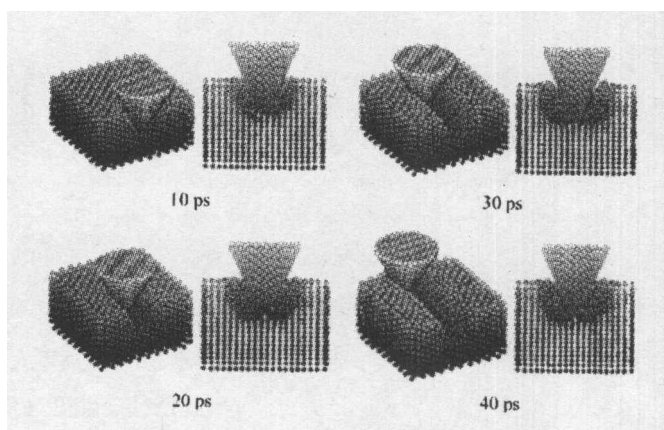


图5 探针(pin tool)对单晶铜的加工过程

参 考 文 献

- [1] 袁哲俊,王先逵. 精密和超精密加工技术. 北京:机械工业出版社,1999,9—11.
- [2] 温诗铸. 纳米摩擦学. 北京:清华大学出版社,1998,171—176.
- [3] Taniguchi N. The state of the art of nanotechnology for processing of ultra-precision and ultrafine products. Precision Engineering, 1993, 16(1):5—24.
- [4] 罗旋,费维栋等. 材料科学中的分子动力学模拟研究进展. 材料科学与工艺, 1996, 4(1):124—128.
- [5] 张永伟,王自强. 分子动力学方法在研究材料力学行为中的应用进展. 力学进展, 1996, 26(1):14—26.
- [6] Andrew R L. Molecular Modelling, Principle and Applications. London: Addison Wesley Longman Limited, 1990, 313—316.
- [7] Belak J F, Stowers I F. A Molecular Dynamics Studies of Surface Indentation in Two Dimension. MRS Symposium, San Francisco, Apr. 16—21, 1993:259—264.
- [8] Belak J F, Stowers I F. A Molecular Dynamics Model of the Orthogonal Cutting Process. ASPE 1990 Annual Conference, Rochester, Sep. 23—28.
- [9] Ikawa N, Shimada S, Tanaka H. An atomistic analysis of nanometeric chip removal as affective by tool-work interaction in diamond turning.

- Annals of the CIRP, 1991, **40**(1):551—554.
- [10] Ikawa N, Donaldson R R, Komanduri R. etc. Ultraprecision metal cutting—the past, the present, the future. Annals of the CIRP, 1991, **40**(2):587—594.
- [11] Inamura T, Takezawa N, Taniguchi N. Atomic-scale cutting in a computer using crystal model of copper and diamond. Annals of the CIRP, 1992, **41**(1):121—124.
- [12] Inamura T, Takezawa N, Kumaki Y. Mechanics and energy dissipation in nanoscale cutting. Annals of the CIRP, 1993, **42**(1):79—82.
- [13] Inamura T, Takezawa N, Kumaki Y et al. On a possible mechanism of shear deformation in nanoscale cutting. Annals of the CIRP, 1994, **43**(1):47—50.
- [14] Rentsch R, Ichiro Inasaki. Investigation of surface integrity by molecular dynamics simulation. Annals of the CIRP, 1995, **44**(1):295—298.
- [15] Komanduri R, Chandrasekaran N, Raff L M. Effect of tool geometry in nanometric cutting: a molecular dynamics simulation approach. Wear, 1998, **219**:84—97.
- [16] Chandrasekaran N, Noon-Khajavi, Raff L M et al. A new method for molecular dynamics simulation of nanometric cutting. Philosophical Magazine B, 1998, **77**(1):7—26.
- [17] Inamura T, Shimada S. Brittle/ductile transition phenomena observed in computer simulations of machining defect-free monocrystalline silicon. Annals of the CIRP, 1997, **46**(1):31—34.
- [18] Riley M E, Raff L M, Thompson D L. A velocity reset method of simulating thermal motion and damping in gas-solid collision. Journal of Chemical Physics, 1988, **88**(9): 5 934—5 942.
- [19] Komanduri R, Chandrasekaran N, Raff L M. M. D. simulation of nanometric cutting of single crystal aluminum—effect of crystal orientation and direction of cutting. Wear, 2000, **242**:60—80.
- [20] Taminiau D, Dautzenberg J H. Bluntness of the tool and process forces in high-precision cutting. Annals of the CIRP, 1991, **40**(1):65—68.
- [21] Lee W B, Zhou M. A theoretical analysis of the effect of crystallographic orientation on chip formation in micromachining. International Journal of Machine Tool and Manufacturing, 1993, **33**:439—444.
- [22] Isono Y, Tanaka T. Three-dimensional molecular dynamic simulation of atomic scale precision processing using a pin Tool. JSME Int. J. Ser. A: Mech. Eng., 1997, **40**:55.
- [23] Isono Y, Tanaka T. Molecular dynamic simulation of atomic scale indentation and cutting process with atomic force microscope. JSME Int. J. Ser. A: Mech. Eng., 1999, **42**:158.
- [24] Te-Hua Fang, Cheng-I Weng. Three-dimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale. Nanotechnology, 2000, **11**:148—153.
- [25] Mate C M, McClelland G M. Atomic scale friction of a tungsten tip on a graphite surface. Phys. Rev. Lett., 1987, **59**:1 942.

THE ADVANCE OF MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION FOR NANOMETRIC CUTTING PROCESS

Fang Gang Zeng Pan

(Department of Mechanical Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084)

Abstract The Molecular Dynamics (MD) Simulation is an important tool used to study nanometric cutting process. In this paper, the advance of MD simulation for nanometric cutting process is introduced. The authors introduce the principles and some basic technologies of MD, for example, establishment and solution algorithms of motion equations, model of intermolecular force, temperature computation, periodic boundary condition, statistic and control of macroscopic properties. In the end of the paper, some examples of MD simulation used to analyze nanometric cutting are introduced.

Key words nanometric cutting, molecular dynamics, computer simulation