

# 金属铜纳米切削的分子动力学模拟

宿昊<sup>1,2</sup>, 唐兴龄<sup>1</sup>, 陈岑<sup>2</sup>

<sup>1</sup>中国核电工程有限公司; <sup>2</sup>中国科学院力学研究所

**摘要:** 微纳米科技的发展和器械的小型化对精细加工过程提出了更高的要求, 深入理解微纳米的切削规律至关重要。本文运用分子动力学方法, 对大尺寸的单晶及多晶铜进行了切削深度为 0.1 μm 的计算模拟, 并就切削过程中单晶和多晶内部微结构演化、温度及切削力变化进行了分析及对比。结果表明: 多晶铜在切削过程中位错滑移集中在刀具前沿几个晶粒内, 对未切削工件区域的影响较小, 温度分布更为集中, 切削力也略小于单晶。

**关键词:** 分子动力学; 纳米切削; 位错滑移; 切削力

**中图分类号:** TG50; TH142

**文献标志码:** A

## Nanometric Machining of Copper by Molecular Dynamics Simulation

Su Hao, Tang Xingling, Chen Cen

**Abstract:** The progress in micro- and nano-technologies and miniaturized components requires a higher precision in fabrication, and it is important to well understand the physical mechanisms of nanomachining process. In this paper, large scale monocrystal and polycrystal copper cutting are studied by molecular dynamics, and the cutting depth is 0.1 μm. With the temperature and the cutting force together, the evolution of micro-structures in cutting monocrystalline and polycrystalline are analysed. The results show that dislocations slip in polycrystal grains near the front cutting tool and effect is smaller than monocrystalline cutting region, and leading to a more concentrated distribution of temperature and smaller cutting force.

**Keywords:** molecular dynamics; nanometric machining; dislocation slipping; cutting force

## 1 引言

高精度纳米尺度切削加工是未来工业发展趋势。在纳米尺度切削加工时, 通常只有几层到几十层原子从工件表面被剥离, 表面效应和尺度效应十分显著, 尚不清楚传统的宏观连续介质的一些准则是否适用, 用传统试验手段进行研究也变得十分困难, 因此有必要借助计算与模拟的方法对微观尺度的金属切削过程进行研究。

分子动力学模拟是研究微纳米尺度物理现象的有效方法, 已经被广泛应用于纳米材料的加工工艺以及纳米切削过程的研究。Maekawa K. 等<sup>[1]</sup>用分子动力学研究了刀具与工件之间的摩擦以及刀具的磨损; Komanduri R. 等<sup>[2]</sup>用分子动力学研究了刀具形状与切削力的关联; Su H. 等<sup>[3]</sup>用分子动力学研究了切削速度对工件内部结构及切屑形态的影响。上述纳米尺度切削研究的切削深度大多在 10nm 以下, 近期工艺水平很难达到要求。

本文采用大规模分子动力学模拟, 对单晶和多晶铜 (Cu) 展开切削深度为 100nm (0.1 μm) 的研究, 达到了可以与已有精细切削试验相比对的结果, 对

切削过程中单/多晶的内部结构演化、温度分布及切削力变化进行分析, 以更好地理解切削机制及提高微纳米加工工艺。

## 2 模型与方法

### 2.1 势函数

势函数的精确度影响到系统原子间相互作用力的大小, 因此也会对模拟结果产生影响。作为多体势的嵌入原子势 (Embedded Atom Method, EAM) 经常被应用于金属原子系统的模拟, 具体形式为

$$E_i = F_\alpha \left[ \sum_{j \neq i} \rho_\alpha(r_{ij}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \varphi_{\alpha\beta}(r_{ij}) \quad (1)$$

式中,  $\alpha$  和  $\beta$  分别表示原子  $i$  和原子  $j$  的类型;  $F$  为嵌入能, 是原子电子密度  $\rho$  的函数;  $\varphi$  为原子间的对势函数。本文切削工件 Cu - Cu 间的势函数即为 EAM 势函数, 各参数取值参考文献[4]。

切削刀具为金刚石, Cu - C 之间的势函数为 Morse 势, 具体形式为

$$E_i = \sum_{j \neq i} D_0 \left[ e^{-2\sigma(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\sigma(r_{ij}-r_0)} \right] \quad (2)$$

式中,  $D_0$  为势阱深度;  $\sigma$  为刚度参数;  $r_0$  为原子  $i$  和  $j$  的平衡位置<sup>[5]</sup>。由于金刚石的硬度远大于晶体 Cu, 因此在切削过程中将金刚石视为刚体。

## 2.2 切削模型

切削模型如图 1 所示,作为工件的单晶/多晶 Cu 尺寸为  $1200a_0 \times 600a_0 \times 4a_0$  ( $a_0$  为 Cu 的晶格常数,  $a_0 = 3.615 \text{ \AA}$ ), 大约 865 万个原子。将垂直于纸面的厚度方向设置为周期性边界条件,而在底部和左边的 10 层原子设置为边界原子,紧邻着它们的 10 层原子为恒温原子,内部切削区域为牛顿原子区,初始统计温度设为 300K。

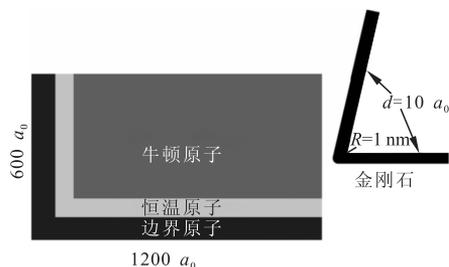


图 1 切削示意图

由于金刚石刀具内部与工件的距离远大于 Cu-C Morse 作用势的截断距离,为了节省计算量,刀具只保留宽度稍大于截断距离的边界处原子。刀具底部和左边宽度均设为  $3.615 \text{ nm}$ ,刀角的半径为  $1 \text{ nm}$ ,刀具共计约有 16.7 万个原子。金刚石刀具的前刀角为  $\alpha = 20^\circ$ ,后刀角为  $0^\circ$ ,在切削中不考虑刀角的反转即此刀角切削中保持不变。切削速度设置为  $100 \text{ m/s}$ 。

图 2 是工件单晶和多晶 Cu 经能量最小化处理后的初始结构,由 Vornoi 方法构建多晶内部晶粒,每个晶粒的初始尺寸半径约为  $31 \text{ nm}$ 。

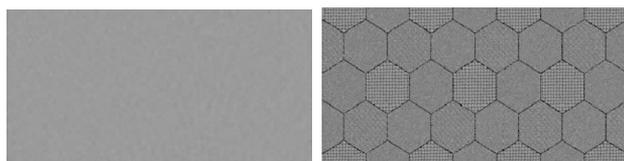


图 2 单晶和多晶 Cu 的初始结构

## 3 试验结果与分析

### 3.1 切削过程中的结构分析

对金属微观结构进行分析一般采用公共近邻分析方法 (Common Neighbor Analysis)。图 3 是单晶 Cu 切削距离分别为  $10 \text{ nm}$ 、 $20 \text{ nm}$ 、 $30 \text{ nm}$ 、 $50 \text{ nm}$  时的原子构型图,其中深蓝色原子为 FCC,亮兰色原子为 HCP,红色的为无序原子。由图可知,刀具尖端发生位错,在切削前端形成了一块位错区,该区的位错一部分向上扩展至单晶表面,另一部分向前滑移。位错的交割和相互作用使得内部完整晶格紊乱错动。由于切削前方没有晶界的阻挡,单晶中原完整晶格

结构受切削破坏的区域较大。

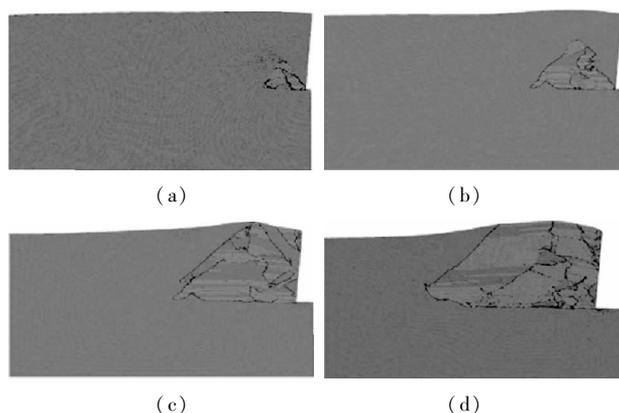


图 3 单晶 Cu 切削过程中的内部结构演化

图 4 是多晶 Cu 切削距离分别为  $5 \text{ nm}$ 、 $10 \text{ nm}$ 、 $15 \text{ nm}$ 、 $50 \text{ nm}$ 、 $100 \text{ nm}$  时的原子构型图(只截取受影响的右半边区域)。图 4a - 图 4c 清晰显示了位错穿过晶界的过程:从刀尖附近区域发射的位错先滑移到晶界附近,与晶界相互作用或部分被吸收导致晶界的完整性遭到破坏,新的位错从被破坏的晶界产生滑移进入第二个晶粒;随着刀具的前进,邻近晶粒的晶界不断被破坏,持续产生发射的位错和在刀尖压力作用下大量产生的无序原子就形成一条微型的塑性带(见图 4d 和图 4e)。该过程类似于文献[6]中的微米切削试验。另外,不同于单晶切削,由于有了晶界的阻挡,多晶切削过程中对整个工件原内部结构的破坏及影响区域较小。

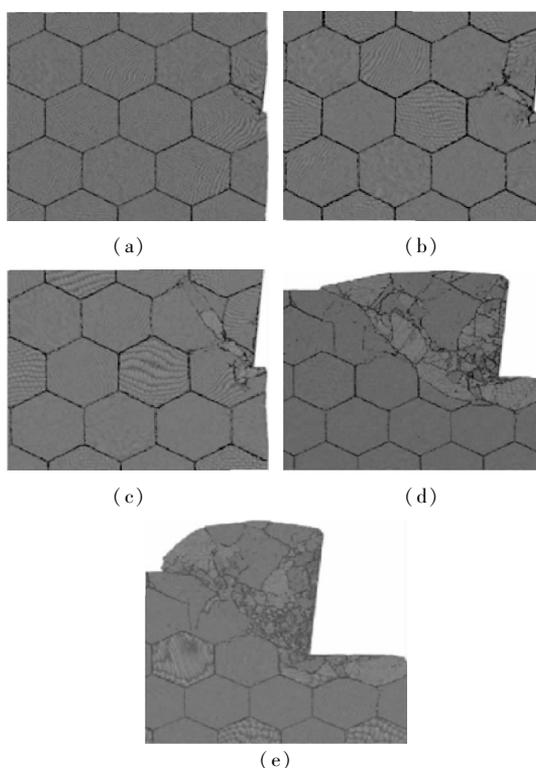


图 4 多晶 Cu 切削过程中的内部结构演化

### 3.2 切削过程中的温度分析

图5是单晶Cu切削距离分别为18nm、54nm、72nm、108nm时的区部温度分布图。温度计算方法为取刀具附近 $30\text{nm} \times 30\text{nm}$ 的区域平均分成 $30 \times 30$ 个小格子,对每一个小格子内的原子视为处于同一温度,进行统计计算。由图5a可以看出,刀尖处的温度最高,约为1200K;随着切削的进行,一条斜穿工件的高温带逐渐形成(见图5b和图5c),但由于单晶Cu的热导性能优异,导致了热量无法聚集而迅速扩散到工件其他区域,最终使整个工件温度普遍升高(见图5d)。

图6是多晶Cu切削距离分别是18nm、54nm、126nm、162nm时的区部温度分布图。由图6a可以看出,刀尖处温度最高,大约为1200K,这与单晶相同;但在切削过程中高温区域逐渐集中于刀具与工件接触面(见图6b和图6c),最终形成一条沿接触面的高温层,而且向内部成一定的梯度分布(见图6d)。其原因在于多晶的晶格方向不一,晶界对声子和电子有散射作用,导热性比单晶差,故而摩擦及原子相互作用产生的热量无法迅速扩散,随着切削的进行,接触面的温度也越来越高。

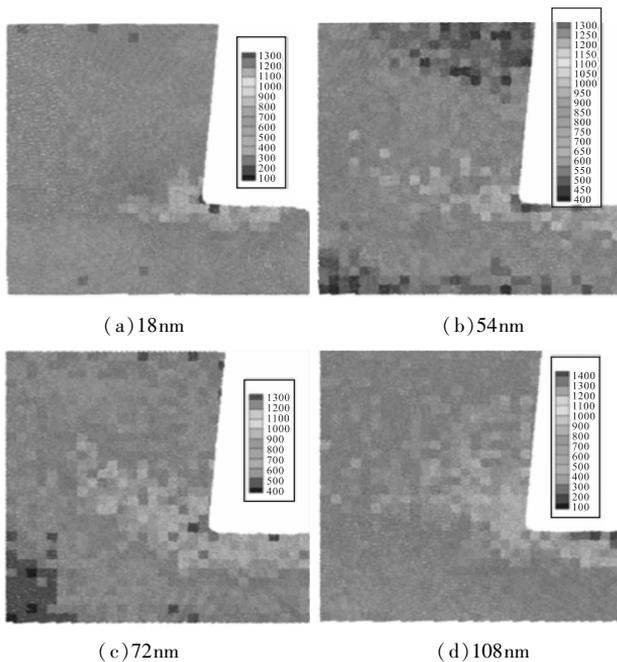


图5 单晶Cu在不同切削距离时的温度分布

采用测温仪器测量切削过程中刀具及工件的温度较为困难,尤其是当工件尺寸很小时。Sutter G.等<sup>[6]</sup>和Abukhshim N. A.等<sup>[7]</sup>分别用较为精细的试验手段测得切削厚度为0.5mm的中碳钢以及切削厚度为0.04mm的高强合金钢时,刀尖部分的温度都是全区域最高,分别约为 $825^\circ\text{C}$  (1102K)及 $850^\circ\text{C}$

(1123K),其它区域则稍低。另外,在中碳钢的切削试验中,刀具前沿观察到一条平均温度为 $800^\circ\text{C}$ 左右的高温带。由此可见,试验中的温度计算分析与实际切削具有很好的一致性。

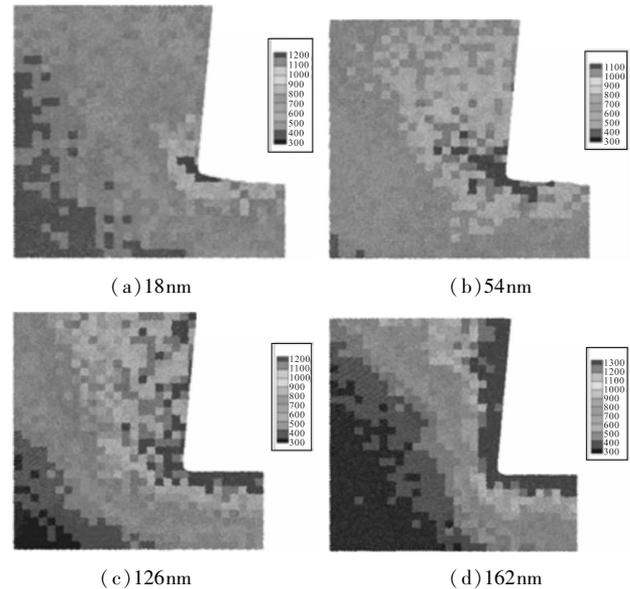


图6 多晶Cu在不同切削距离时的温度分布

### 3.3 切削过程中的切削力分析

图7是不同切削距离下单晶和多晶Cu的切削力及纵向力的数值。对比可知,两者在纵向力(与切削方向垂直方向上的力)基本上没有差别,都是在平均值约 $0.2\text{N}/\text{mm}$ 附近波动。刀具从初始接触工件到完全接触的过程,导致两者的切削力(Principal Force)都有上升,随着刀具继续推进,大量位错的形核和滑移使切屑剥离工件变得容易,切削力下降。

当刀具达到30nm时,单晶和多晶Cu切削力波动上升,但多晶Cu的上升幅度较小,这与前文分析的工件内部结构演化和温度都紧密相关。对于单晶Cu切削,刀具前端形核的位错在整个工件内部不断滑移交割相互作用,内部积累的位错和无序原子把完整的晶格破坏成了数个晶向不同的小晶粒,影响了切屑从工件表层的顺利剥离,对刀具的阻碍也越来越大;而多晶Cu在切削进行到一定距离时,受影响的只有刀具前沿数个已被破坏的晶粒区域,加上刀具和工件接触面的高温使切屑表面软化,有利于材料的形变和切屑的剥离,因此多晶的切削力上升小于单晶。

图7表明单晶Cu的平均切削力约为 $0.83\text{N}/\text{mm}$ ,多晶Cu的平均切削力约为 $0.78\text{N}/\text{mm}$ 。文献<sup>[8]</sup>和文献<sup>[9]</sup>给出了无氧高导电铜(OFHC,含Cu99.99%以上)的切削试验数据:当切削深度为

100nm 时,两者的结果分别是约 0.7N/mm 及 0.8 - 1.2N/mm。可知,切削力模拟结果与文献试验数据具有较好的吻合性。

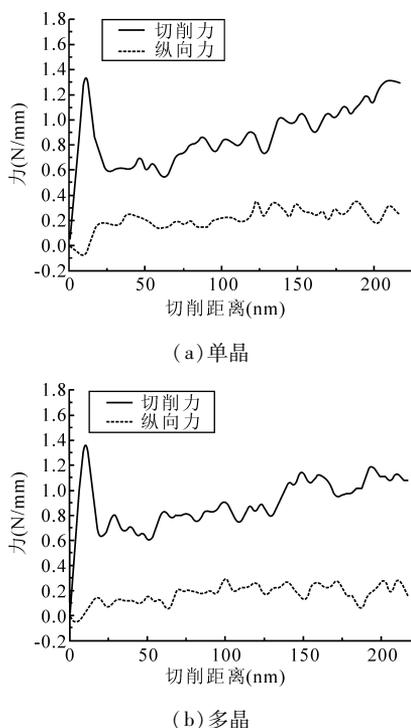


图7 切削力和纵向力曲线

在纵向力方面,图7的模拟结果平均约为 0.2N/mm,小于上述两个试验文献给出的平均为 1.6N/mm(1989年)和 0.5N/mm(2005年)的数据,原因可能在于随着加工工艺的增强以及材料和切削刀具的进步,切削试验精度更为精准,垂直方向的抖动误差更小,本文切削模拟的材料和刀具更趋于理想状态,所以纵向力也趋于一个极限数值。

#### 4 结语

对单/多晶 Cu 的 100nm 厚度切削进行了大规模的分子动力学模拟,结果表明结构、温度及切削力的计算结果均与切削试验一致。对比单晶和多晶 Cu 的切削结果,得出以下结论:

(1)结构方面:单晶中位错传播不受阻挡,位错滑移区域大;多晶只有局部受影响,可观测到一条微型塑性带。

(2)温度方面:平均温度基本相同,最高温度都在刀尖附近。由于热导不同,最终单晶的温度分布比较均匀,多晶在接触面附近形成了有梯度的高温区。

(3)作用力方面:总体而言,单晶的切削力略大于多晶,两者的切削力都随切削距离波动上升,而纵

向力数值基本相同。

#### 参考文献

- [1] Maekawa K, Itoh A. Friction and tool wear in nano-scale machining—a molecular-dynamics approach[J]. *Wear*, 1995, 188(1): 115 - 122.
- [2] Komanduri R, Chandrasekaran N, Raff L M. Molecular dynamics simulation of the nanometric cutting of silicon[J]. *Philos Mag B*, 2001, 81(12): 1989 - 2019.
- [3] Su H, Tang Q H. Chip formation dependence of machining velocities in nano-scale by molecular dynamics simulations[J]. *Sci China Tech Sci*, 2014, 57(12): 2426 - 2433.
- [4] Foiles S M, Baskes M I, Daw M S. Embedded-atom-method functions for the FCC metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys[J]. *Phys Rev B*, 1986, 33(12): 7983.
- [5] Zhang L C, Tanaka H. Towards a deeper understanding of wear and friction on the atomic scale - a molecular dynamics analysis[J]. *Wear*, 1997, 211(1): 44 - 53.
- [6] Sutter G, Faure L, Molinari A, et al. An experimental technique for the measurement of temperature fields for the orthogonal cutting in high speed machining[J]. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 2003, 43(7): 671 - 678.
- [7] Abukhshim N A, Mativenga P T, Sheikh M A. Heat generation and temperature prediction in metal cutting: a review and implications for high speed machining[J]. *Int J Mach Tool Manu*, 2006, 46(7-8): 782 - 800.
- [8] Moriwaki T. Machinability of copper in ultra-precision micro diamond cutting[J]. *CIRP Annals-Manufacturing Technology*, 1989, 38(1): 115 - 118.
- [9] Son S M, Lim H S, Ahn J H. Effects of the friction coefficient on the minimum cutting thickness in micro cutting[J]. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 2005, 45(4-5): 529 - 535.

第一作者:宿昊,博士,工程师,中国核电工程有限公司,100840 北京市

First Author: Su Hao, Doctor, Engineer, China Nuclear Power Engineering Co., Ltd., Beijing 100840, China