

前角对单晶镍纳米加工影响的分子动力学仿真

朱宗孝, 巩亚东, 周云光, 张艳祥
(东北大学 机械工程与自动化学院, 辽宁 沈阳 110819)

摘 要: 应用分子动力学仿真研究了单晶镍的纳米加工过程. 通过研究加工力的变化规律, 发现加工初期加工力剧烈波动与工件中产生了较大体积的层错结构有关. 采用不同前角的刀具进行了一系列加工仿真, 结果表明: 在刀具前角的增大过程中, 加工力及前刀面与切屑之间的摩擦系数逐渐减小; 由于前角的增大使刀具对切屑的推挤作用与切屑的整体弯曲减弱, 切屑高度增加及切屑中完好的 FCC 原子比也逐渐增加; 工件亚表面的缺陷原子数目逐渐减少, 损伤深度也呈减小趋势. 采用负前角加工时, 工件亚表面损伤较严重, 出现了层错四面体结构和 LC 位错; 工件内部高温原子数随刀具前角的增大而逐渐减少, 并且工件的温度分布以刀具圆角为中心向工件内部辐射.

关 键 词: 分子动力学; 单晶镍; 加工力; 前角; 亚表面损伤
中图分类号: TH 161 **文献标志码:** A **文章编号:** 1005-3026(2017)10-1436-06

Molecular Dynamics Simulating Effect of Rake Angle on Single Crystal Nickel Nanometric Machining

ZHU Zong-xiao, GONG Ya-dong, ZHOU Yun-guang, ZHANG Yan-xiang
(School of Mechanical Engineering & Automation, Northeastern University, Shenyang 110819, China.
Corresponding author: GONG Ya-dong, professor, E-mail: ydgong@mail.neu.edu.cn)

Abstract: Molecular dynamics simulation was used to study the nanometric machining process of single crystal nickel. The change rule of cutting force showed that the violent fluctuation of cutting force at initial stage is closely related to the generation of large stacking faults. The cutting tools with different rake angles were applied to conduct a series of simulations, the results showed that cutting force and the friction coefficient between rake face and chip decrease gradually with the increase of rake angle. The push and overall bending of chip decrease, and the chip height and the perfect FCC atom ratio gradually increase due to the increase of rake angle. The defect atom number decreases, as well as the damage depth of workpiece subsurface. In the process of machining with negative rake angle tool, the subsurface damage of workpiece is more serious, and the stacking fault tetrahedral structure and the LC dislocation are generated in workpiece subsurface. Meanwhile, the number of high temperature atoms decrease with the increase of rake angle, and the temperature distribution of the workpiece radiates from the tool corner to the workpiece.

Key words: molecular dynamics; single crystal nickel; cutting force; rake angle; subsurface damage

现代工业的发展使得纳米加工技术得到了广泛应用,并在国防、航空航天、核能等高新技术领域有着重要的影响,已成为各个国家高技术竞争的制高点之一^[1]. 在纳米加工过程中,材料的去除除发生在数个至数百个原子层,用建立在连续介质力学基础上的有限元方法及宏观切削理论很难解释纳米加工机理. 在此背景下,分子动力学模拟作为十分有效的工具,可以在极小的空间和时间

尺度上对正在进行的加工过程作细致深入的分析与研究.同时,又能方便、低成本地建立所要研究的加工系统模型,已经成为研究微/纳加工过程的一种重要手段^[2-3].应用分子动力学研究材料的纳米加工过程,前人大多采用单晶铜作为加工材料,本文采用在航空航天领域应用的单晶零件中占有较大成分的镍作为研究对象.由于单晶铜和单晶镍都是面心立方体(FCC)结构,所以前人对于单晶铜的纳米加工仿真研究为研究单晶镍的加工仿真提供了很好的借鉴.对于单晶铜的研究,Ji等^[4]研究了单晶铜纳米加工过程中刀具与切屑接触面的摩擦行为.Su等^[5]研究了单晶铜纳米加工过程中加工力和切屑温度的变化规律,研究结果表明不同的加工速度可以导致切屑产生不同的变形形式.Pei等^[6]研究了不同势函数的选取对于单晶铜纳米加工结果的影响,结果表明 Morse 势相对于 EAM 势能够使得加工力增加了 5% ~ 70%.Guo等^[7]研究了单晶铜纳米加工中的热效应,并且得出系统的温度分布呈同心圆分布,温度自切屑向工件内部逐渐降低.Tong等^[8]采用一种新的原子等值温度方法,研究了单刀刃和双刀刃加工时单晶铜的温度分布情况.

然而,对于单晶镍的纳米加工仿真研究还十分稀少.作为航空发动机的核心部件,单晶叶片的主要成分为镍,所以对于单晶镍的加工研究具有十分重要的意义.本文通过研究不同刀具前角对于单晶镍纳米加工的影响及加工力和工件内部缺陷的关系,将会为单晶零件加工制定合理的工艺参数提供理论依据.

1 分子动力学模拟方法

1.1 仿真模型

图 1 为单晶镍加工分子动力学模型.模型尺寸为 29 nm × 12 nm × 7.5 nm,共由 207 080 个原子组成,包含 57 661 个碳原子,其余都为镍原子.为了减少模拟系统小于真实系统带来的尺寸效应,工件在 Z 方向采用周期性边界条件^[9].而在 X

和 Y 方向采用非周期性边界条件.最外层原子为固定层,其作用为防止仿真过程中工件的整体移动,黄色原子为恒温层原子,其作用为保证加工过程中工件原子之间的热传递^[10].绿色和蓝色原子为牛顿层原子,是仿真加工过程中的重点研究对象,牛顿层和恒温层原子都遵从牛顿第二定律.所建模型体系对比其他研究所采用的模型足够大^[5].

1.2 原子间的势函数

工件原子之间的相互作用采用嵌入原子势(EAM)描述.EAM 能够很好地描述金属原子之间的相互作用.总能量公式为^[11]

$$\sum E_{\text{t}} = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \varphi_{ij}(R_{ij}). \quad (1)$$

式中: F_i 为嵌入能函数; ρ_i 为原子所在处的电子密度; φ_{ij} 为 i 原子核与 j 原子核之间的相互作用对势.

用 Morse 势描述工件原子和刀具原子间的相互作用:

$$E_i = \sum_{i \neq j} D [e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}] . \quad (2)$$

式中: D 为结合能; α 为势能曲线梯度系数; r_0 为分子作用力为零时的原子间距.查阅参考文献,得到 C—Ni 原子间 Morse 势函数相关参数; $D_e = 0.100 \text{ eV}$, $\alpha = 2.2 \times 10^{-8} \text{ cm}^{-1}$, $r_e = 2.4 \times 10^{-8} \text{ cm}$ ^[12].构成刀具的金刚石原子间的相互作用采用 Tersoff 势来描述.

2 加工参数

纳米加工材料为单晶镍,仿真参数见表 1.

表 1 单晶镍纳米加工仿真参数
Table 1 Simulation parameters of single crystal nickel nanometric machining

参数	值
刀具前角/(°)	-30, -15, 0, 15, 30
切削深度/nm	1.5
切削方向	(1 0 0)
切削速度/(m·s ⁻¹)	200
步长/fs	1

3 模拟结果与讨论

3.1 加工力与内部缺陷

加工力是纳米加工过程的重要物理参数.在图 2 中, F_x , F_y 和 F_z 分别表示切向加工力、法向加工力和沿 Z 方向的加工力.由于切削力的计算

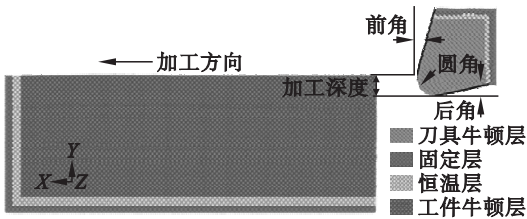


图 1 单晶镍纳米加工模型

Fig. 1 Nanometric cutting model of single crystal nickel

是通过统计刀具原子所受的总力得到的,其作用方向与 x 轴正方向相反,所以取值为负.通过切向和法向加工力的变化规律将加工过程分为两个阶段:初期加工阶段(加工距离小于 9 nm)与稳定加工阶段(加工距离大于 9 nm).可知,切向和法向加工力在加工初期变化较为剧烈,且波动幅度较大.当进入稳定加工阶段后,加工力的变化程度趋于平缓.这是由于加工初期工件中形成了较多且体积较大的层错结构,对于加工的进行产生了阻碍作用,使得加工力增大;由于层错结构的排列呈一定间隔,所以加工力会出现较大幅度的波动.

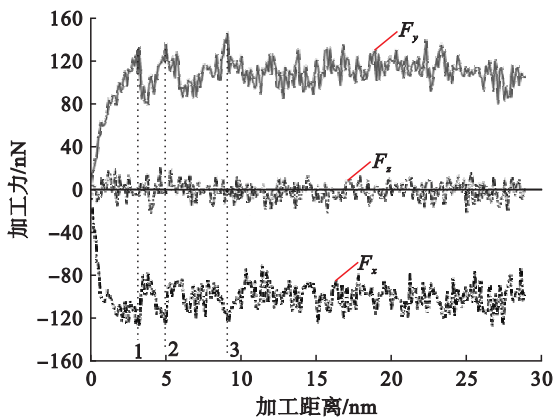


图 2 加工力变化曲线

Fig. 2 Change curves of cutting force

通过加工力的分析可知,切向和法向两种加工力的峰值和谷值总是同时出现.这主要由于加工中演化和发展的位错和层错等结构与加工方向呈 45° ,对 X 和 Y 方向的加工力同时产生阻碍作用.对加工力出现峰值的加工距离进行标记发现:3 个加工力波动峰值分别出现在 3.2, 4.9 和 9 nm 处.

切削距离为 3.6 nm 时的工件原子情况如图 3 所示.由于刀具对工件原子的挤压和剪切,工件

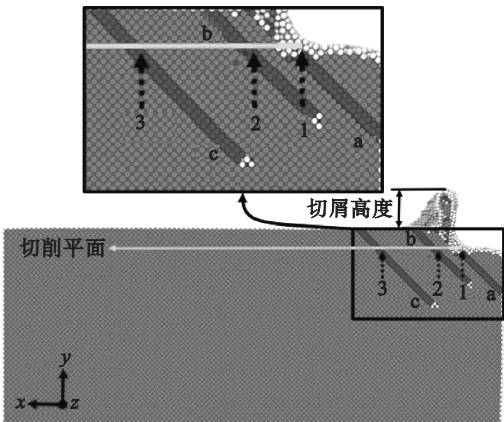


图 3 切削距离为 3.6 nm 时的工件原子情况

Fig. 3 Snapshot of workpiece atoms at cutting distance of 3.6 nm

中形成了 3 条沿 (1 1 1) 方向相互平行的层错结构 a, b, c, 且在刀具前方形成一定高度的切屑,切削平面与这 3 条层错的交点分别为 1, 2, 3. 当刀具经过这 3 点时,由于构成层错的 HCP 结构原子相对于被加工晶体中原有的 FCC 结构原子有更大的平面密集度,破坏 HCP 结构比 FCC 结构更加困难,所以切削力会有一个增大的过程.随着刀具的进给,当刀具离开 HCP 层错结构进入 FCC 原子结构后,切削力逐渐减小.这说明较大体积的层错导致了加工力的大幅度波动.

3.2 刀具前角对加工力和切屑的影响

为了研究刀具前角对于纳米加工的影响,采用不同刀具前角进行了一系列纳米加工仿真.对比不同前角加工时的平均加工力、平均摩擦系数、切屑高度和切屑中未被破坏的 FCC 原子比,分析引起各个参数发生变化的原因.此外,在计算平均摩擦系数时,为了直接体现刀具前角与切屑接触面的摩擦,计算公式为^[13]

$$\mu = \frac{F_x \sin \alpha + F_y \cos \alpha}{F_x \cos \alpha - F_y \sin \alpha} \quad (3)$$

式中: α 为刀具的前角; μ 为平均摩擦系数.

不同前角的平均切削力如图 4 所示,切向加工力、法向加工力和两者的合力均随着前角的增大而减小.这是由于刀具前角直接影响切屑的形成和移动.在切屑形成后,负前角刀具对切屑产生向下的挤压,当切屑在前刀面下方逐渐堆积后,一方面对刀具前方未加工区域产生挤压破坏使得加工力增大,另一方面,形成的切屑原子由于刀具的挤压和摩擦作用,开始沿着前刀面向上运动,这个过程中由于刀具对切屑中原子的进一步作用,使得切屑中部分 FCC 结构原子被进一步破坏.

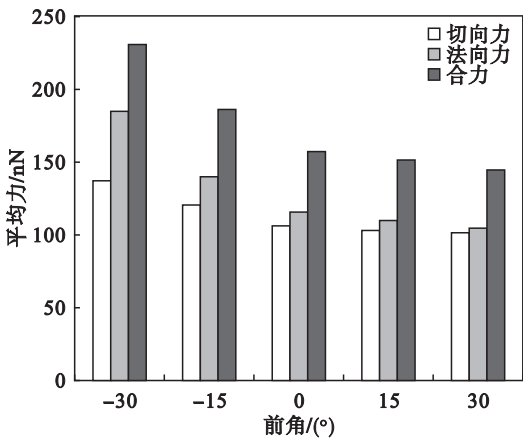


图 4 不同前角的平均切削力

Fig. 4 Average cutting forces under different rake angles

随着前角的增大,切屑被顺利带走,不再堆积在刀具前方阻碍加工,使得刀具对切屑的挤压和摩擦作用减弱,所以加工力逐渐减小.此外可以看出,当前角从 -30° 变为 0° 时,加工力减小程度相对前角从 0° 变为 30° 时较大,说明负前角的变化对于加工力影响更加显著,具体见图 5,6.

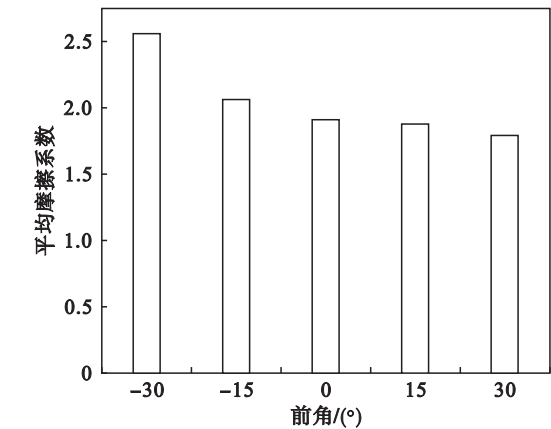


图 5 不同前角的平均摩擦系数
Fig. 5 Mean friction coefficients under different rake angles

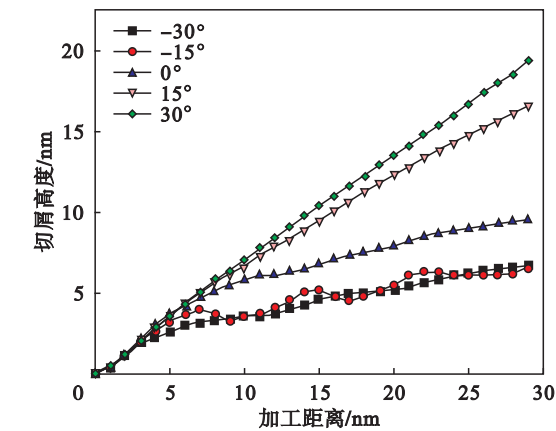


图 6 不同前角下的切屑高度
Fig. 6 Chip heights under different rake angles

不同前角的平均摩擦系数如图 5 所示,随着刀具前角的逐渐增大, μ 逐渐减小,说明在前角增加的过程中,沿切屑界面的切向力比法向力降低得快.

不同前角下的切屑高度如图 6 所示.当加工距离超过 3 nm 以后,切屑高度随着前角的增大而增大.这是由于前角对切屑的推挤使得切屑向加工方向发生弯曲,前角越小这种推挤作用导致的弯曲作用就越明显,切屑高度就越小.

不同前角的切屑中 FCC 原子比如图 7 所示.当加工距离小于 9 nm 时,加工未进入稳定阶段,切屑中的 FCC 原子比迅速增加.当加工进入稳定阶段后,切屑中 FCC 原子比增速减缓.此外,随着刀具前角的增大,切屑中 FCC 原子比也越大.这是因为较小的刀具前角不仅增大了刀具对切屑原子的推挤作用,同时也由于刀具对切屑的推挤使得切屑向下卷曲堆积,切屑原子与刀具的作用时间增加,切屑中部分完好的 FCC 原子被进一步破坏.

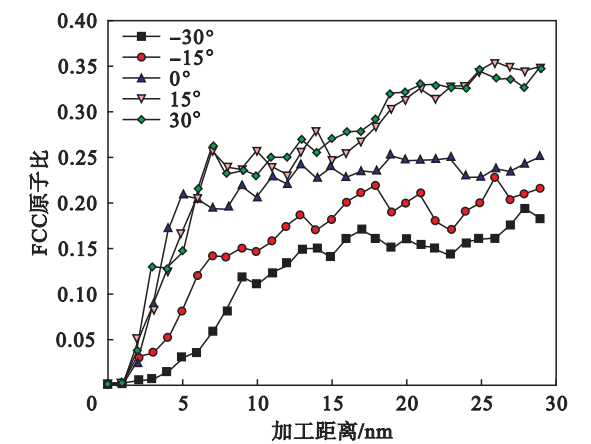


图 7 不同前角时切屑中 FCC 原子比
Fig. 7 Proportion of FCC atoms in chips under different rake angles

3.3 刀具前角对亚表面和温度分布的影响

不同前角下的原子缺陷如图 8 所示.刀具的前角越小,工件已加工表面下方的缺陷原子越多,且缺陷原子在已加工表面下方的深度越深.说明加工后工件的亚表面损伤越大,其中采用 -30° 前角加工时,工件的表面下方出现了层错四面体结构.此外,由于负前角加工导致切屑沿着前刀面逐渐堆积,使得刀具前方的未加工区域受到挤压并

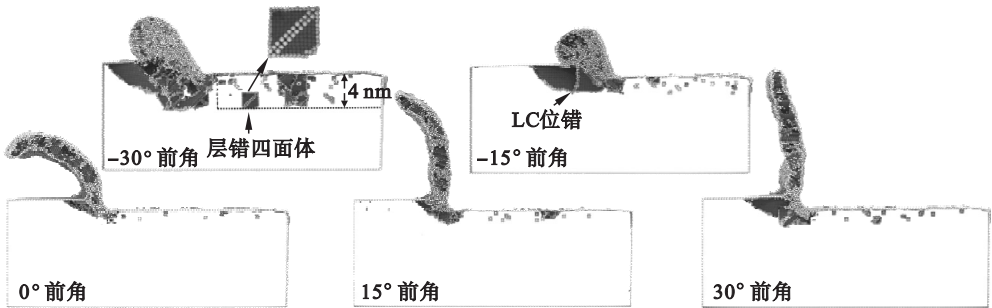


图 8 不同前角下的原子缺陷
Fig. 8 Snapshot of workpiece defects under different rake angles

产生缺陷,这些形成的缺陷阻碍彼此的发展,对加工产生阻碍作用.当刀具前角为 -15° 时,刀具前方出现了 LC 位错结构,这种结构对于加工有明显的阻碍作用,使得加工力增大.此外,为了更好地研究工件的亚表面损伤情况,对工件的已加工表面下 $0\sim4\text{ nm}$ 深度的缺陷进行分层统计,统计结果见图 9.

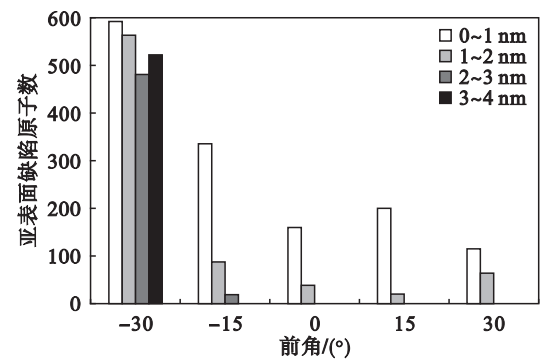


图 9 不同前角下的亚表面缺陷原子数
Fig. 9 Numbers of subsurface defect atoms under different rake angles

由图 9 可知,随着刀具前角的逐渐增大,亚表面的损伤深度逐渐减小.当前角为 -30° 时,损伤分布在 $0\sim4\text{ nm}$ 的深度;当前角为 $0\sim30^{\circ}$ 时,损伤主要分布在 $0\sim2\text{ nm}$ 的深度,并且亚表面的缺陷原子数目从加工表面向工件内部逐渐减小.由此可知,刀具的前角越小,工件下表面的缺陷原子越多,损伤程度越大.

不同前角下的原子温度分布如图 10 所示,可以看出被加工原子的温度主要分布在 $300\sim1\,200\text{ K}$.切屑部分的原子温度最高,一方面由于切屑中原子的化学能几乎都转化为了热能,另一方面由于切屑离恒温层较远,不能及时将产生的热能传递出去.通过对比图 10 中不同工件的温度分布情况,发现采用负前角加工时,工件内部的高温原子数目较多,随着刀具前角逐渐增大,工件内部高温原子数目逐渐减小.为了更好地对比几种加工结果中高温原子的分布情况,对工件中不同温度段的原子数目进行统计,结果如图 11 所示.

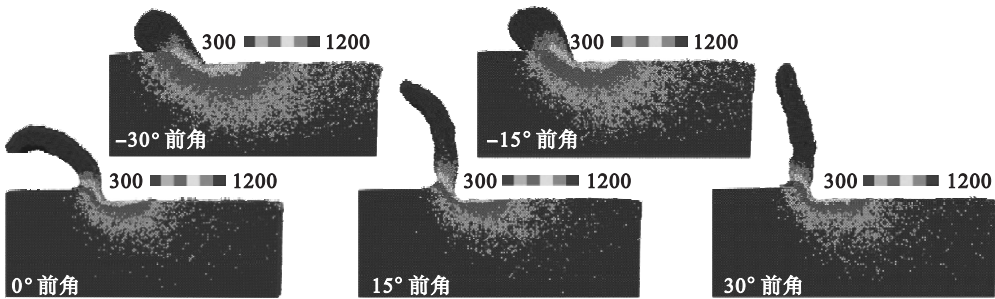


图 10 不同前角下的原子温度分布
Fig. 10 Temperature distribution of wokpiece atoms under different rake angles

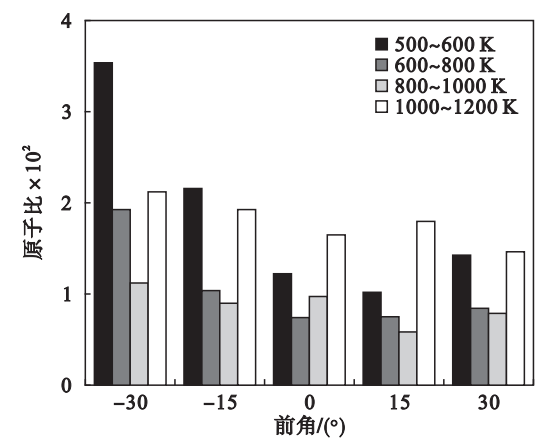


图 11 不同前角加工工件后各个温度段的原子比
Fig. 11 Proportion of atom in different temperature ranges under different rake angles

由图 11 可知,随着刀具前角的增加,工件中各个温度段的原子比呈总体上减少的趋势.其中温度相对较低处于 $500\sim600\text{ K}$ 的原子比最大.温

度范围处于 $1\,000\sim1\,200\text{ K}$ 的原子比也较大,处于这个温度范围的主要是切屑原子,这和切屑原子数目较多有关.温度分布处于 $600\sim800\text{ K}$ 和 $800\sim1\,000\text{ K}$ 的原子比相对较小,由于这部分原子主要处于主剪切区,受到较大的挤压和剪切作用,使得相邻原子间的温度梯度变大,所以在固定温度范围内的原子数目较少.

4 结 论

1) 加工初期,切向和法向加工力变化较为剧烈,当进入稳定加工阶段,加工力的变化程度趋于平缓.加工力剧烈波动与工件中生成了较大体积的 HCP 结构层错有关.且加工初期,由于加工中演化和发展的位错和层错等结构与加工方向呈 45° ,对 X 和 Y 方向的加工力同时产生阻碍作用,导致切向和法向加工力的峰值和谷值同时出现.

2) 刀具前角减小时,加工力变大,刀具前刀

面与切屑的摩擦系数增大. 由于前角对切屑的推挤使得切屑向加工方向发生弯曲,前角越小推挤作用导致的弯曲越明显,切屑的高度越小,切屑中完好 FCC 原子比也越小.

3) 已加工表面的缺陷原子数随着前角的减小而增多,且缺陷的深度逐渐增加,工件内部的高温原子数也增多. 当采用负前角加工时,工件下表面出现了层错四面体和 LC 位错结构. 此外,亚表面缺陷原子数自加工表面向工件内部呈逐渐减小趋势. 工件整体的温度分布是以刀具圆角为中心,呈递减向内部基体辐射.

参考文献：

[1] Shimada S,Ikawa N,Tanaka H. Feasibility study on ultimate accuracy in micro cutting using molecular dynamics simulation [J]. *CIRP Annals: Manufacturing Technology*, 1993,42(10):91 – 94.

[2] 罗熙淳,梁迎春,董申,等. 分子动力学在纳米机械加工技术中的应用[J]. 中国机械工程,1999,10(6):692 – 696. (Luo Xi-chun, Liang Ying-chun, Dong Shen, et al. Application of molecular dynamics to nanometric machining technology [J]. *China Mechanical Engineering*, 1999, 10 (6):692 – 696.)

[3] Shimada S,Ikawa N,Ohmori G, et al. Molecular dynamics analysis as compared with experimental result of micro machining[J]. *Annals of the CIRP*,1992,41(1):117 – 120.

[4] Ji C H,Shi J,Wang Y C, et al. A numeric investigation of friction behaviors along tool/chip interface in nanometric machining of a single crystal copper structure [J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*,2013,68(1):365 – 374.

[5] Su H,Tang Q H. Chip formation dependence of machining

velocities in nano-scale by molecular dynamics simulations [J]. *Science China Technological Sciences*,2014,57(12): 2426 – 2433.

[6] Pei Q X, Lu C, Fang F Z, et al. Molecular dynamics simulation of nanometric cutting process[J]. *Computational Materials Science*,2006,5(4):633 – 638.

[7] Guo Y B,Liang Y C. Atomic simulation of thermal effects and defect structures during nanomachining of copper[J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*,2012,22 (1):2762 – 2770.

[8] Tong Z,Liang Y C, Yang X C, et al. Investigation on the thermal effects during nanometric cutting process while using nanoscale diamond tool [J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*,2014,74(9): 1709 – 1718.

[9] Zhang L,Zhao H W, Zhang P, et al. Influences analysis of nanometric cutting single-crystal copper via molecular dynamics simulation [J]. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*,2013,10(10): 2462 – 2472.

[10] Chen M J,Xiao G B, Lu L H, et al. Mechanism of chip-formation in nanometric cutting of single-crystal copper by molecular dynamics [J]. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*,2012,9(1):110 – 116.

[11] Stowers I F,Komanduri R, Baird E D. Review of precision surface generation processes and their potential application to the fabrication of large optical components[J]. *Proceeding of the SPIE*,1989,8(12):62 – 73.

[12] Lin Z C,Huang J C,Jeng Y R. 3D nano-scale cutting model for nickel material [J]. *Journal of Materials Processing Technology*,2007,192(1):27 – 36.

[13] Romero P A,Anciaux G,Molinari A, et al. Insights into the thermomechanics of orthogonal nanometric machining [J]. *Computational Materials Science*,2013,72(1):116 – 126.