



# 基于分子动力学模拟的金属材料 纳米加工机理研究进展

刘 欢, 郭永博, 赵鹏越, 苏殿臣

(哈尔滨工业大学 机电工程学院, 哈尔滨 150001)

**摘 要:** 微纳器件已经广泛应用于光学、电子、医学、生物技术、通信、航空航天等领域, 研究金属材料在纳米尺度下的变形特性及材料的去除机理对实现微纳器件的功能具有重要意义。利用分子动力学(Molecular dynamics, MD)模拟方法可以实现对纳米加工过程的“实时在线”观察, 从而能够更好地理解金属材料的纳米加工机理。从纳米压痕和纳米加工两个方面, 阐述近年来金属材料纳米加工机理的研究进展, 指出目前 MD 模拟方法的一些不足并提出几个改进建议。

**关键词:** 分子动力学; 金属材料; 加工机理; 纳米切削; 纳米压痕

**文章编号:** 1004-0609(2019)-08-1640-14

**中图分类号:** TG501.1

**文献标志码:** A

微纳米加工制造技术已经广泛应用于生物、化学、航天、医药、通信等领域<sup>[1-2]</sup>。然而, 当工件的结构尺寸从微米级过度到纳米级时, 由于尺寸效应、表面效应和量子效应等方面的影响, 材料在物理、化学、摩擦、机械等方面会呈现出不同的特性<sup>[3]</sup>。例如, 宏观上为绝缘体的 Si 在纳米尺度下变为导体, 宏观上不透明的 Cu 在纳米尺度下呈现透明状态, 宏观上化学性质稳定的 Al 在纳米尺度下变成了可燃物。因此, 实现在纳米尺度下操作原子的纳米加工制造技术给人们带来了无限遐想, 也将使 21 世纪的科技变得无限可能。

目前制造业对加工精度的要求日趋严苛, 产品向小型化、高可靠性、高集成度方向发展的趋势也越来越明显。微型发动机、微型反应器、微型热交换器、微型医用植入体等微纳器件在今后的科技发展中将起到至关重要的作用<sup>[4-5]</sup>。由于微纳米制造技术是实现结构和功能微纳米化的基础, 因此促进微纳米制造技术的发展, 理解并深入研究纳米材料的变形特性及材料的去除机理势在必行。然而, 在纳米尺度下由于结构尺寸的微型化使得一些现象不易被观察和分析, 进行微纳加工实验也耗时费力。利用计算机仿真模拟实验的方法可以克服上述困难。但在纳米尺度下材料中的原子呈离散状态, 导致基于经典力学和连续介质的分析方法已难以适用。因此, 利用量子力学、分子动力

学(MD)等现代物理学研究成果, 从原子之间相互作用的角度, 对纳米金属材料的力学性能、缺陷结构及去除机理等方面进行研究具有重要意义。本文针对 MD 模拟方法对纳米加工中金属材料的力学特性及变形机理进行了总结, 为后续研究提供一定的参考。

## 1 MD 模拟纳米压痕机理

目前已经有大量学者利用 MD 模拟纳米压痕实验, 其中主要以具有 FCC 晶体结构的 Cu、Al、具有 BCC 晶体结构的 Ta、Fe 和具有 HCP 晶体结构的 Ti、Mg、Zr 等为代表研究了纳米尺度下材料的塑性变形机理、内部缺陷结构的演化过程及纳米材料的力学性能<sup>[6]</sup>。近年来, 利用 MD 方法对纳米压痕过程的研究主要包括以下三个方面: 纳米压痕过程中晶体的各向异性, 晶界、孪晶层及晶粒尺寸和晶粒形状对纳米压痕过程的影响, 多晶 Cu 内部微观结构对纳米压痕过程的影响。

### 1.1 纳米压痕过程中晶体的各向异性

在纳米尺度下, 金属单晶体仍具有各向异性的特点, 如图 1 所示, 图中坐标轴的旋转方向是按照

基金项目: 国家自然科学基金重点资助项目(51535003); 国家自然科学基金面上资助项目(51775146)

收稿日期: 2018-07-31; 修订日期: 2019-03-11

通信作者: 郭永博, 副教授, 博士; 电话: 0451-86415244; E-mail: ybguo@hit.edu.cn

ZAMBALDI 等<sup>[7]</sup>规定的方向, 在不同晶向表面上 Mg 的表面压痕形貌差异显著<sup>[8]</sup>。此外, 工件表面的晶向对纳米压痕过程中工件内部的位错结构和应力分布也有较大的影响。REMINGTON 等<sup>[9]</sup>在不同晶向表面上对 Ta 进行了纳米压痕实验和 MD 模拟。研究发现, Ta 的塑性变形主要是由能够迅速转化成剪切位错环的纳米孪晶引起的, 同时剪切位错环的螺旋部分会发生交叉滑移, 从而产生棱形位错环。

RUESTES 等<sup>[10]</sup>的研究结果表明, 当采用不同势能函数模拟 Ta 的纳米压痕时, 表面压痕形貌均表现出各向异性, 如图 2 所示, 模拟结果与 BIENER 等<sup>[11]</sup>的实验结果较为一致。此外, GOEL 等<sup>[12]</sup>也利用 MD 模拟了 Ta 的纳米压痕过程, 压痕过程中试件内部的应力分布情况如图 3 所示。模拟结果显示, 在(010)晶面上变形区的最大剪切应力超过了 Ta 的理论剪切强度, 表明传统的最大剪切应力理论, 即最大剪切应力是平

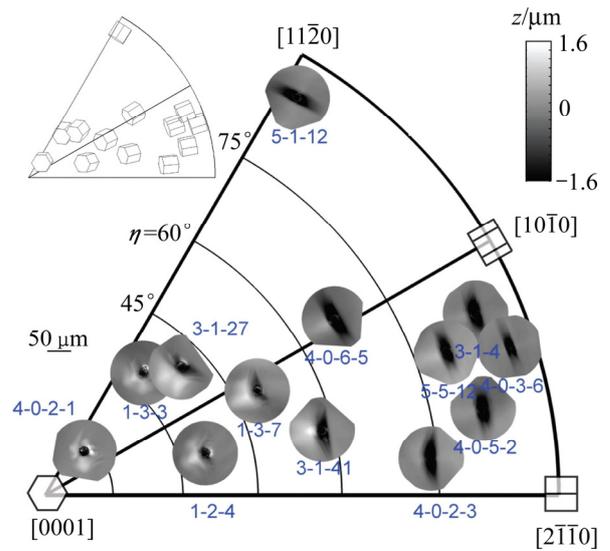


图 1 不同晶向表面上 Mg 的压痕形貌<sup>[7]</sup>  
 Fig. 1 Indent topographies of magnesium on different orientations<sup>[7]</sup>

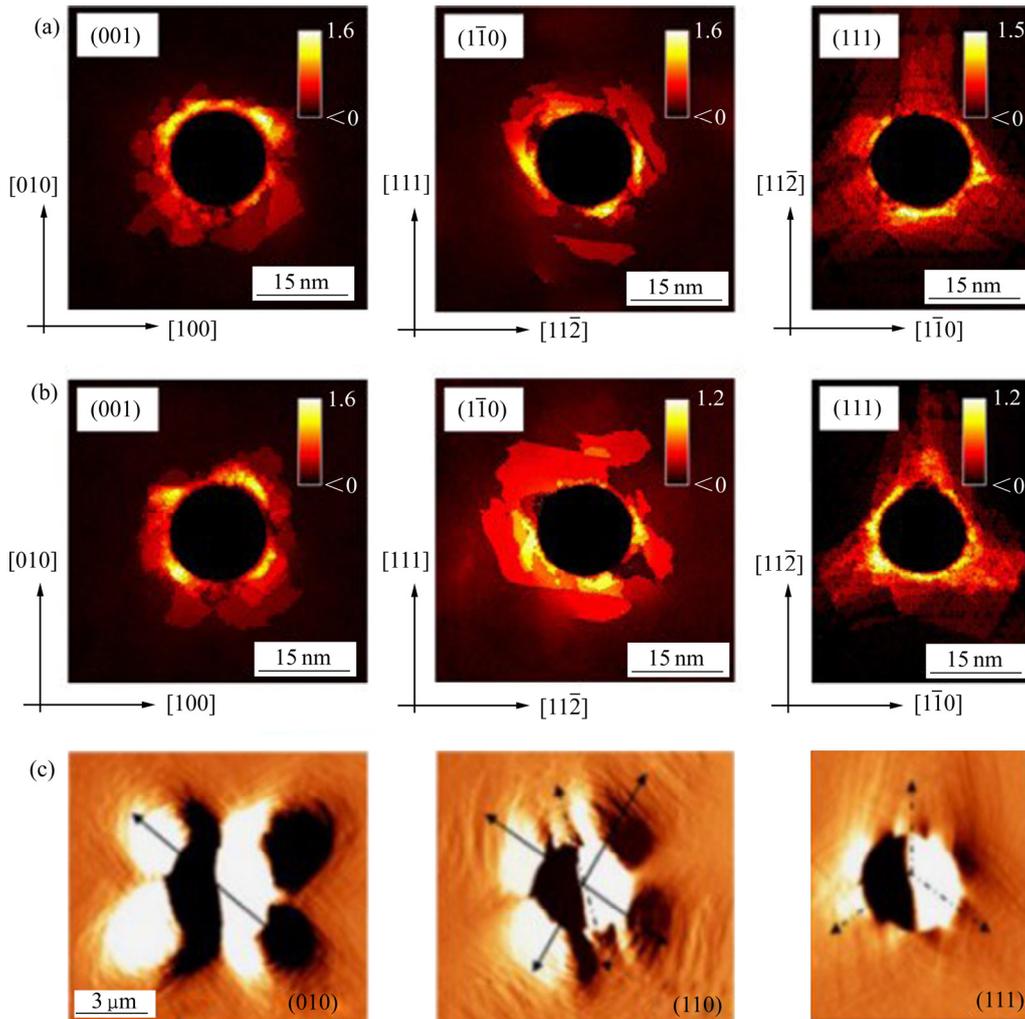


图 2 MD 模拟结果与实验结果比较<sup>[10-11]</sup>  
 Fig. 2 MD results compared with experiments<sup>[10-11]</sup>: (a) Dai-EFS potential; (b) Ravelo-EAM potential; (c) Experimental results obtained from nanoindentation on Ta on three different orientations

均接触应力的 0.465 倍，在纳米尺度下不适用。

纳米压痕过程中工件内部的位错分布方式也具有各向异性的特点。GAO 等<sup>[13]</sup>利用 MD 模拟了球形压头在具有 FCC 晶体结构的 Cu、Al 和具有 BCC 晶体结构的 Fe、Ta 上的纳米压痕过程，如图 4 所示。图中对于 BCC 材料，红色线代表位错的方向为柏氏矢量  $b = \frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ ，蓝色线代表位错的方向为柏氏矢量  $b = \langle 100 \rangle$ ；对于 FCC 材料红色线代表位错的方向为柏氏矢量  $b = \frac{1}{6}\langle 112 \rangle$ ，蓝色线代表位错的方向为柏氏矢

量  $b = \frac{1}{2}\langle 110 \rangle$ ；黄色部分表示变形表面，绿色箭头表示向量  $b$  的方向；深绿色区域表示堆垛层错。模拟结果显示，随着材料的类型和材料表面晶向的变化，压痕过程中工件内部的位错分布方式明显不同，SOMEKAWA 等<sup>[14]</sup>和 LU 等<sup>[15]</sup>在模拟 Mg 和 Zr 的纳米压痕实验时也发现了类似的现象。SOMEKAWA 等<sup>[14]</sup>还研究了在压痕初期压痕表面的晶体取向对 Mg 的塑性变形的影响。研究结果显示，在压痕过程中不同晶向表面下产生的位错结构不同，导致了基面与棱柱面相比具有更高的回弹载荷和回弹宽度。

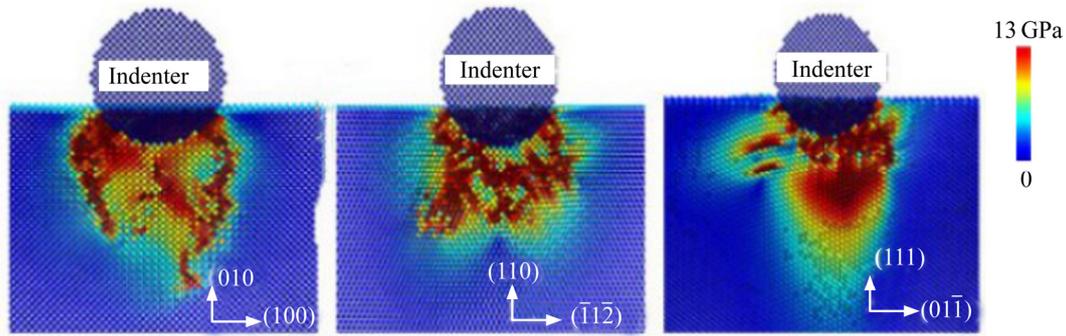


图 3 沿不同晶向纳米压痕时 Ta 内部剪切应力分布<sup>[12]</sup>

Fig. 3 Internal shear stress distribution of Ta on different orientations in process of nanoindentation<sup>[12]</sup>

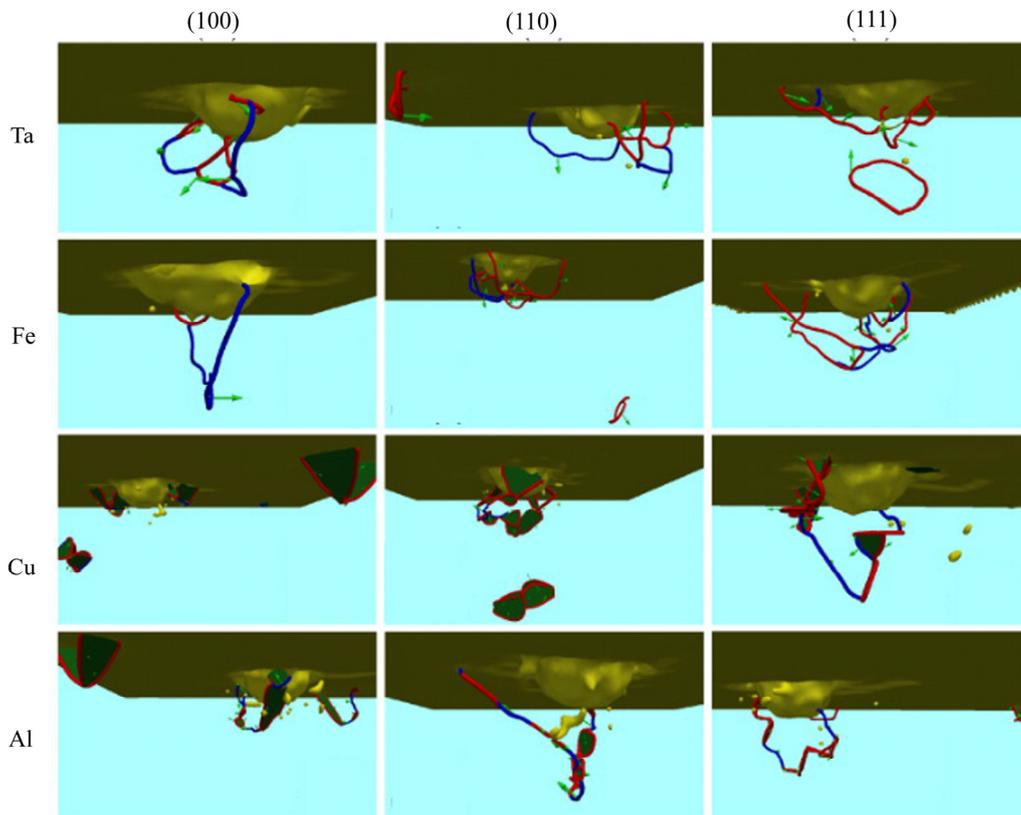


图 4 不同材料在不同晶向表面下由压痕产生的位错<sup>[13]</sup>

Fig. 4 Dislocations caused by indentations of different materials under different crystallographic surfaces<sup>[13]</sup>

## 1.2 晶界、孪晶层及晶粒尺寸和晶粒形状对纳米压痕过程的影响

相比于单晶 Cu, 在纳米压痕过程中多晶 Cu 和孪晶多晶 Cu 的塑性变形机理和内部缺陷结构的演化更为复杂, 晶界、孪晶层、晶粒尺寸和晶粒形状对多晶材料的塑性变形机理、内部缺陷结构的演化及材料的力学性能等方面都有较大影响。LI 等<sup>[16]</sup>利用 MD 模拟了单晶 Cu、多晶 Cu 和孪晶多晶 Cu 的纳米压痕过程, 压痕过程中产生的位错分布如图 5 所示, 图中原子根据中心对称参数着色且具有 FCC 结构的 Cu 原子未显示。研究表明, 三类晶体 Cu 的变形机理不同, 单晶 Cu 的塑性变形是由位错的产生、传播及相互作用引起的; 多晶 Cu 的塑性变形机理是基于晶界与位错的相互作用; 而孪晶多晶 Cu 的塑性变形是由孪晶与位错的相互作用及孪晶的产生和消失引起的。此外, 图 6 所示为不同孪晶层厚度下压痕产生的位错分布, 图中原子按中心对称参数法着色且具有 FCC 结构的原子未显示, 绿色圆圈用于标记位错和孪晶晶界的相互作用。模拟结果显示, 在纳米压痕过程中孪晶层对

位错的传播具有明显的阻碍作用, 这使得材料的硬度随孪晶层厚度的增加而减小。

ZHOU 等<sup>[17]</sup>通过 MD 模拟研究了晶粒尺寸和形状对多晶 Cu 力学性能的影响。模拟结果显示, 工件内部的晶粒形状不同导致了晶界的体积分数有所差异, 从而对工件的弹性模量产生了较大影响。与晶粒形状相比, 晶粒尺寸对力学性能的影响更为显著, 当平均晶粒尺寸在 20~53 nm 时, 晶粒尺寸越小流动应力越大; 但当平均晶粒尺寸在 20 nm 以下时, 晶粒尺寸减小会导致流动应力也减小; 当平均晶粒尺寸在 8 nm 以下时流动应力下降的更加明显, 呈现出逆 H-P 效应。产生逆 H-P 效应的主要原因是当晶粒尺寸变小时材料的塑性变形机制产生了变化, 如图 7 所示, HUANG 等<sup>[18]</sup>发现当晶粒尺寸小于 5 nm 时, 晶粒的旋转作用会导致晶粒融合, 从而引起纳米材料的软化效应。HU 等<sup>[19]</sup>通过实验及 MD 模拟研究了晶界的稳定性对材料硬度的影响。研究表明, 提高晶界的稳定性可使多晶材料的硬度提高, 材料在纳米尺度下也会出现 H-P 效应。

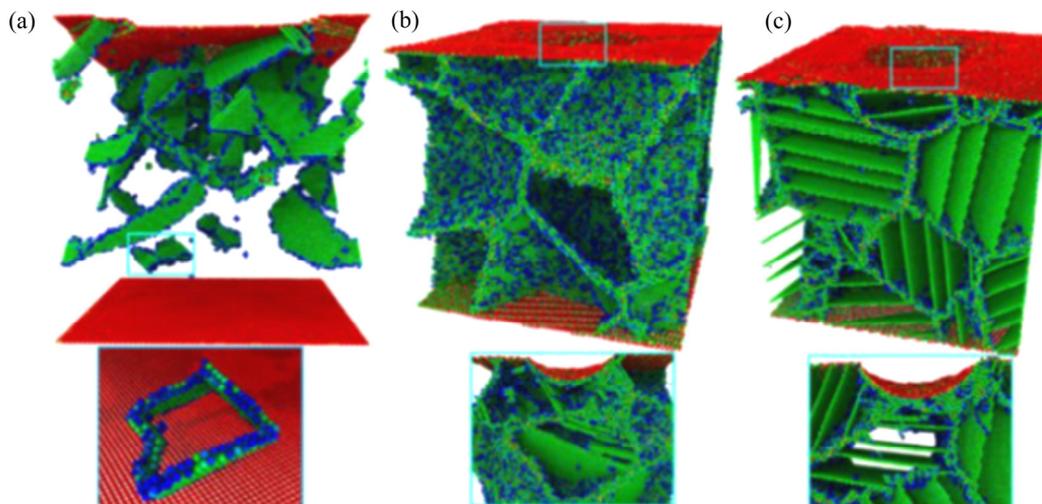


图 5 纳米压痕过程中不同晶体结构内的位错分布<sup>[16]</sup>

**Fig. 5** Dislocation distribution under different crystal structures in process of nanoindentation<sup>[16]</sup>: (a) Single crystalline; (b) Polycrystalline; (c) Nanotwinned polycrystalline

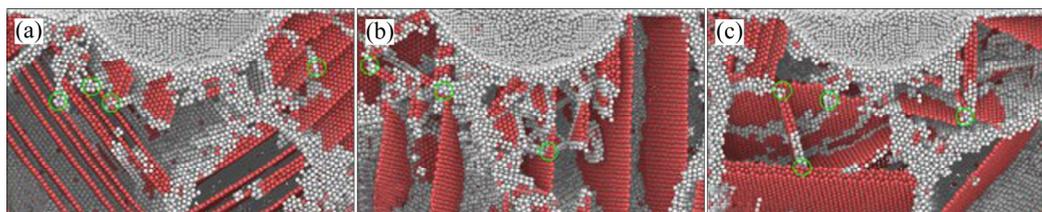


图 6 在不同孪晶层厚度下的位错结构<sup>[16]</sup>

**Fig. 6** Distribution of dislocations under different twin lamellae thicknesses<sup>[16]</sup>: (a) 0.903 nm; (b) 2.71 nm; (c) 3.61 nm

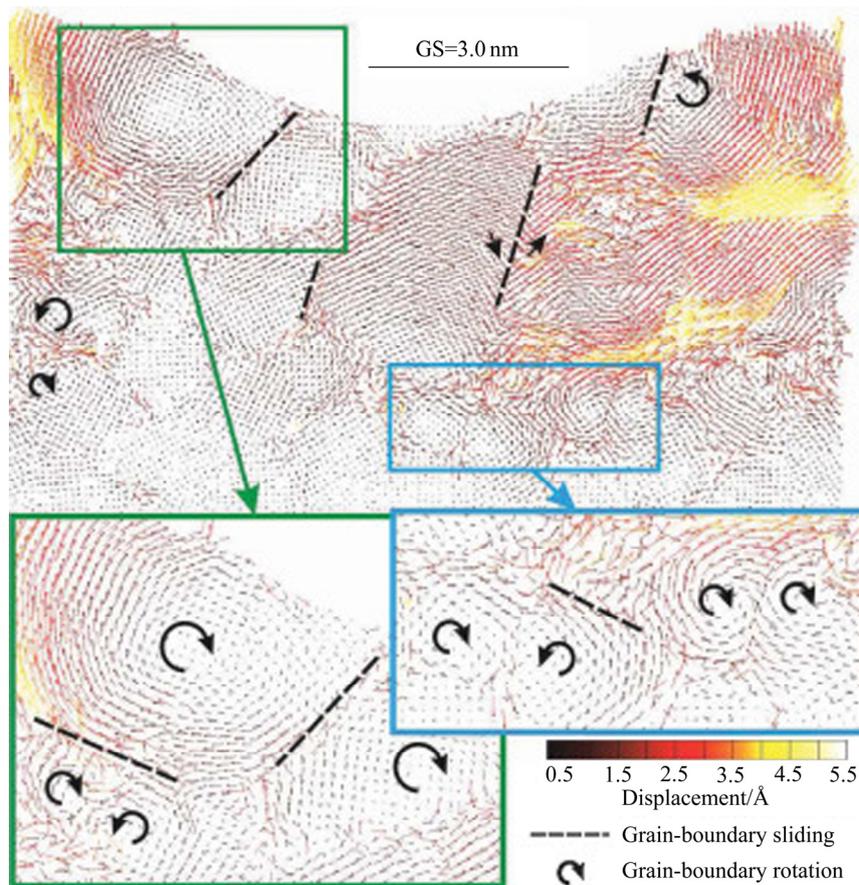


图7 晶粒尺寸为3 nm时晶界的滑移和旋转<sup>[18]</sup>

Fig. 7. GB sliding and rotation for grain size of 3 nm<sup>[18]</sup>

晶界结构对材料在纳米尺度下的力学性能有较大影响。TALAEI等<sup>[20]</sup>通过模拟Fe的压痕实验研究了晶界对其力学性能的影响。模拟结果显示,在纳米压痕过程中当压痕位置距离晶界较远时,晶界结构对工件的弹性模量影响较小;但当压痕位置距离晶界较近时,工件的弹性模量变小,如图8所示,晶界对位错的传播有阻碍作用。LIU等<sup>[21]</sup>通过模拟Cu的压痕实验研究了孪晶晶界对纳米材料塑性变形的影响。研究发现,棱柱位错环的边缘都是阶梯状位错,棱柱位错环和孪晶晶界的相互作用导致了孪晶晶界的迁移,结果产生了以Frank位错为边界的四边形阶梯状位错和孪晶位错。GAO等<sup>[22]</sup>模拟了多晶Fe的纳米压痕和纳米划刻实验。模拟结果显示,工件内部的晶界结构会使材料的硬度下降,晶粒的排布方向决定划刻过程中工件表面原子的堆积形状,划刻过程中的法向硬度和压痕硬度受压头尺寸的影响较小。

### 1.3 多晶Cu内部微观结构对纳米压痕过程的影响

如图9所示,赵鹏越等<sup>[23]</sup>将多晶Cu内部结构进

一步划分为四类微观结构,即晶粒、晶界面、三叉晶界、顶点团。模拟结果显示,纳米压痕过程中四类微观结构的应力状态不同。当晶粒内部区域表现为压应力时,与该晶粒相邻的顶点团、三叉晶界、晶界面表现为拉应力;压痕过程中内应力首先传递至顶点团和三叉晶界微观结构,而后传递至晶界面和晶粒内,位错的扩展具有与内应力相似的方向性。此外,赵鹏越等<sup>[24]</sup>还研究了当纳米压头位置分别处于四类微观结构上时多晶Cu的纳米压痕过程。模拟结果显示,纳米压痕位置对纳米压痕力的增长速率、位错向邻近晶粒扩散的难易程度及多晶Cu亚表面的位错分布范围等都有较大影响。

ZHAO等<sup>[25]</sup>基于多晶Cu的四类微观结构还研究了晶粒尺寸对纳米压痕过程的影响。模拟结果显示,材料的变形机制与材料内部的微观结构有关,顶点团区域的内应力和原子势能最高,其次是三叉晶界、晶界和晶粒内部,从而导致工件内部缺陷成核并传播。多晶Cu的压痕力低于单晶Cu的压痕力,随着多晶Cu中晶粒尺寸的减小,压痕力由于软化现象而持续减小。

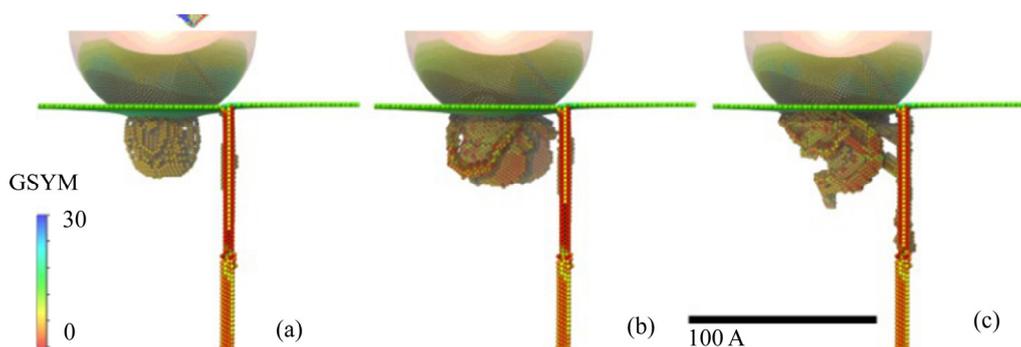


图 8 晶界对位错的阻碍作用<sup>[20]</sup>

Fig. 8 Role of grain boundary blocking dislocations<sup>[20]</sup>: (a) Before load drop; (b) After load drop; (c) Dislocation reaches GB at end of phase 3 and merged into grain boundary plane

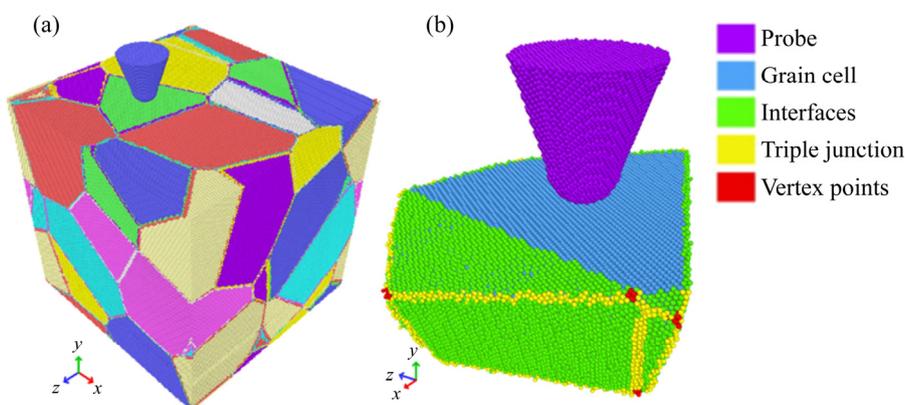


图 9 多晶 Cu 纳米压痕分子动力学模拟模型<sup>[23]</sup>

Fig.9 3D model of polycrystalline copper<sup>[23]</sup>: (a) 3D model of single compressed grain with probe; (b) Nanoindentation molecular dynamics (MD) model

## 2 MD 模拟纳米切削过程

目前,可实现在纳米尺度下加工金属材料的方法有很多种,例如:光刻、化学蚀刻、激光图案化、聚焦离子束(FIB)光刻和原子力显微镜(AFM)等<sup>[26]</sup>。然而,这些加工方法都有各自的局限性<sup>[27-31]</sup>。金刚石刀具切削作为加工效率最高的纳米加工方法之一,可以在工件表面上加工出复杂的几何形状并获得较好的表面质量。而 MD 作为研究纳米切削过程的有力工具,已经被大量学者所采用并取得了一系列成果。近年来,利用 MD 方法对纳米切削过程的研究主要包括以下几个方面。

### 2.1 亚表面缺陷结构及已加工表面特性

在纳米切削过程中由于刀具与工件之间的相互作

用,不可避免地会导致工件内部出现缺陷结构。WANG 等<sup>[32]</sup>利用 MD 模拟研究了单晶 Cu 在切削过程中工件内部缺陷结构的演化过程。如图 10 所示,剪切滑移区的原子一部分堆积在前刀面上形成切屑,另一部分在刀具的挤压和摩擦作用下形成已加工表面。如图 11 所示,纳米切削过程中剪切滑移区出现了堆垛层错、位错环、V 形位错环和大量的点缺陷。当切削距离大于 7 nm 时切削达到稳定阶段,位错原子的数量趋于稳定。同时,切削过程中产生的位错在工件表面上分别沿着  $[\bar{1}01]$ 、 $[\bar{1}0\bar{1}]$  晶向传播。纳米切削会导致工件表层下方出现空穴缺陷、原子簇位错、四面体堆垛层错和阶梯状位错,其中阶梯状位错是由两个相互作用的堆垛层错产生的,四面体堆垛层错是由剪切滑移区的压应力和摩擦区的拉应力共同作用产生的<sup>[33]</sup>。

纳米加工过程中已加工表面的力学特性对纳米加工精度和纳米材料的使用性能都有较大影响,ZHANG 等<sup>[34]</sup>模拟了连续两次切削单晶 Cu 的加工过程,并分

别在未加工的单晶 Cu 表面和加工后的单晶 Cu 表面上模拟了纳米压痕实验。模拟结果表明，已加工过的单晶 Cu 表面比未加工过的单晶 Cu 表面硬度低。这是因为在纳米切削过程中产生的表面缺陷和残余应力使位错成核和扩展更加容易，也导致了在进行第二次切削时工件内部产生了更多的缺陷结构。LIU 等<sup>[35]</sup>通过对

单晶 Cu 进行纳米切削和纳米压痕的模拟，进一步研究了单晶 Cu 工件中四面体堆垛层错的演化过程。四面体堆垛层错的形成过程如图 12 所示，模拟发现，四面体堆垛层错在具有不同取向的堆垛层错平面交叉处成核，四面体堆垛层错最初是一个中空结构，只包含不完全的四面体表面，随后四面体堆垛层错内部原子的数量逐渐增加，直至最终演变为稳定且孤立的缺陷结构。

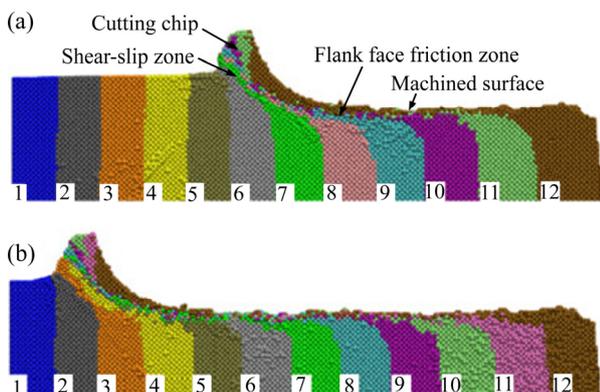


图 10 切屑和已加工表面的形成过程<sup>[32]</sup>

Fig. 10 Formation process of cutting chip and machined surface<sup>[32]</sup>: (a) Cutting distance  $l$  is 25 nm; (b) Cutting distance  $l$  is 35 nm

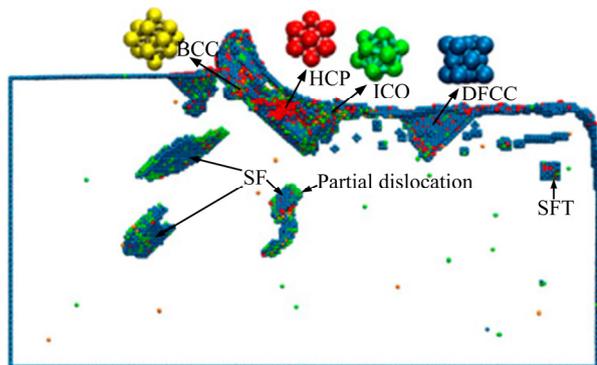


图 11 工件亚表层局部原子结构分布的截面图<sup>[32]</sup>

Fig. 11 Sectional view of local atomic structure distribution in subsurface of workpiece<sup>[32]</sup>

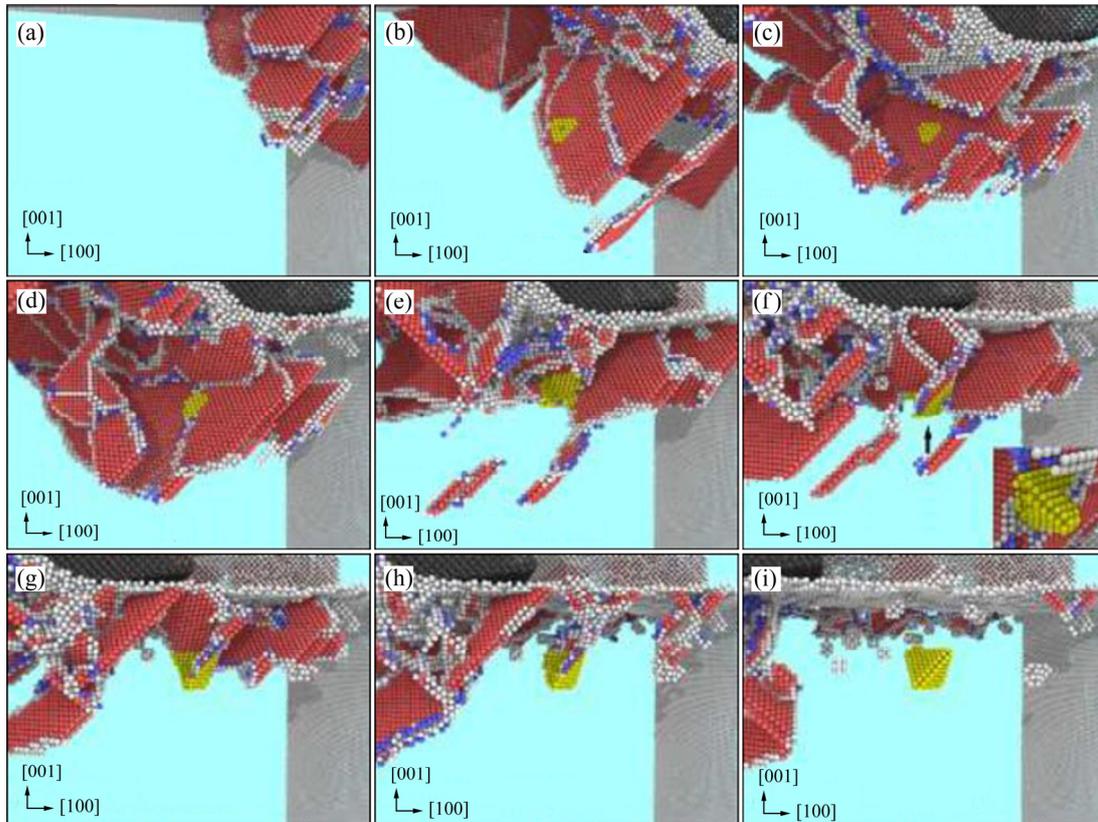


图 12 单晶 Cu 纳米加工过程中工件内部的缺陷结构<sup>[35]</sup>

Fig. 12 Defect structure inside workpiece during single crystal copper nanomachining<sup>[35]</sup> (Atoms are colored based on following scheme, yellow for marked SFT atoms, red for hexagonal close-packed (HCP) atoms, blue for body-centered cubic (BCC). Atoms in perfect face-centered cubic (FCC) are removed for a better view)

### 2.2 工件内部硬质颗粒对加工机理的影响

实际加工过程中, 工件材料内部有时会掺杂一些硬质颗粒, 从而引起加工精度下降和刀具磨损等问题。SHARMA 等<sup>[36]</sup>利用 MD 模拟了 Cu-Be 合金的纳米切削过程, 进而研究纳米切削过程中刀具与工件内部硬质颗粒的相互作用。如图 13 所示, 根据硬质颗粒与刀具的相对位置关系, 模拟了 3 种情况下工件内部硬质颗粒对纳米切削过程的影响。图 13(a)中硬质颗粒在切削平面的上方或下方, 硬质颗粒尺寸小于刀尖圆弧半径; 图 13(b)中硬质颗粒在切削平面上, 硬质颗粒尺寸等于刀尖圆弧半径; 图 13(c)中硬质颗粒中心在切削平面内, 硬质颗粒尺寸小于刀尖圆弧半径。

研究表明, Shockley 部分位错是 Cu-Be 合金

塑性变形的主要机制, 硬质颗粒的尺寸和相对于切削平面的位置对工件亚表面的损伤程度及已加工表面的质量有很大影响。在切削平面上的硬质颗粒使已加工表面产生空穴, 较大尺寸的硬质颗粒会导致更严重的亚表面变形, 同时在刀具与硬质颗粒相互作用处切削力骤增导致了工件表面的损伤, 硬质颗粒在刀具经过后有回弹现象。如图 14 所示, 在切削过程中硬质颗粒与金刚石刀具的相互作用使刀具上的等效应力增大, 从而导致了金刚石刀具的磨损。此外, XU 等<sup>[37]</sup>研究了单晶 Al 工件内部的硬质颗粒对纳米切削过程的影响。模拟结果显示, 硬质颗粒在切削过程中会发生旋转, 旋转方向取决于硬质颗粒相对于切削平面的位置。

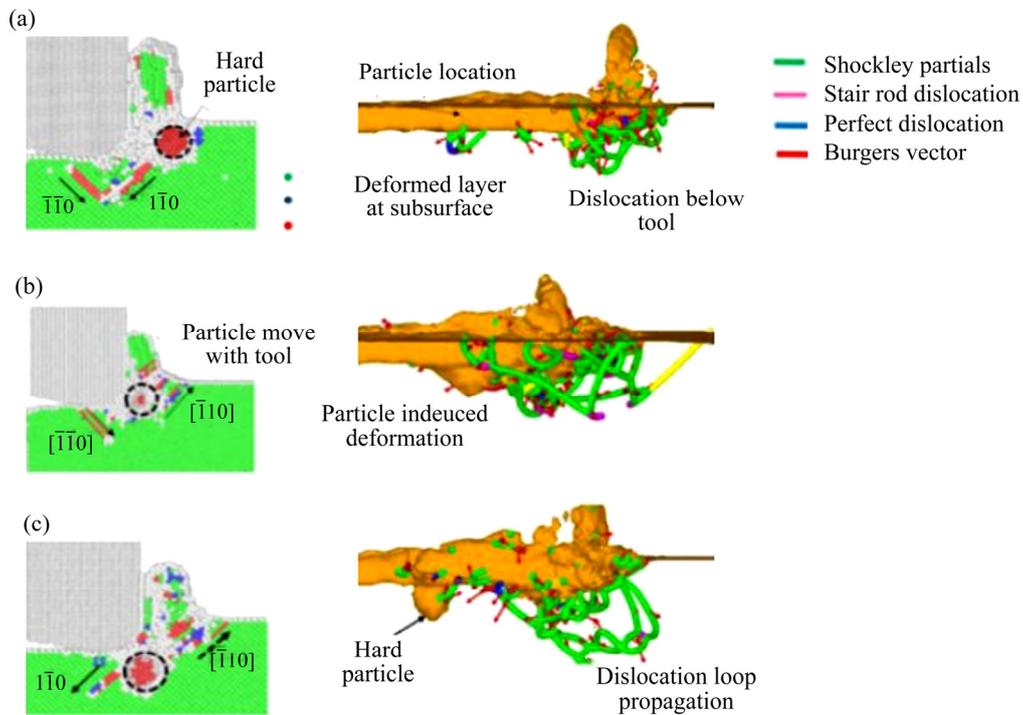


图 13 硬质颗粒对纳米切削过程的影响<sup>[36]</sup>

Fig. 13 Effect of hard particles on nano-cutting process<sup>[36]</sup>: (a) Particle is either above or below the cutting plane and particle size is smaller than tool edge radius; (b) Particle center lies at cutting plane and particle size is smaller than tool edge radius; (c) Particle is at cutting plane, and particle size is equal to tool edge radius

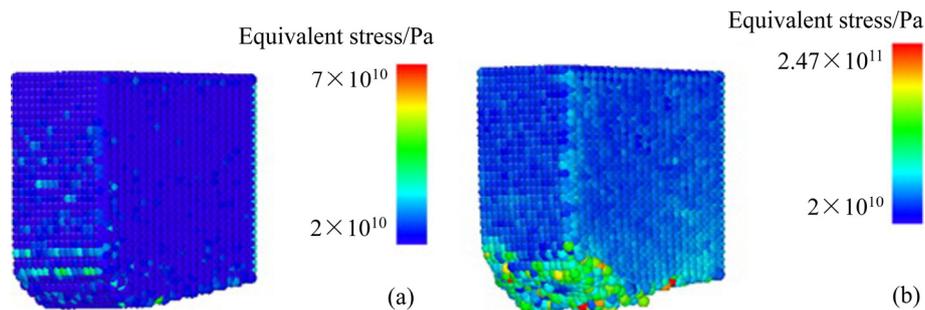


图 14 金刚石刀具原子的等效应力分布<sup>[36]</sup>

Fig. 14 Equivalent stress distribution of diamond tool atoms<sup>[36]</sup>: (a) Initial stage; (b) Particle location

### 2.3 切削用量对切削过程的影响

在纳米加工过程中切削用量对已加工表面质量有很大影响，LAI 等<sup>[38]</sup>利用 MD 模拟了单晶 Zr 的连续多次车削实验，如图 15 所示，当采用不同的进给量进行连续切削时已加工表面的形貌明显不同。同时，如图 16 所示，进给量和切削深度对已加工表面的质量有较大影响，切削深度越大，亚表面变形层厚度越大，增大进给量会导致已加工表面的粗糙度增加。研究发现，在纳米切削过程中刀具的犁削作用是导致扇贝形已加工表面的主要因素，并且可以通过增加刀尖圆弧半径、优化刀具表面几何形状和合理选择切削参数等方法减小切削过程中的侧流体积和侧流速度，从而获得较好的已加工表面质量。模拟结果还显示，与进给量相比，切削深度对切向切削力的影响更大；在切削深度相同的条件下，多次切削产生的非晶相变形层厚度比单次切削产生的非晶相变形层厚度小。李勇等<sup>[39]</sup>研究了切削速度和切削深度对单晶 Cu 纳米切削过程的影响。模拟结果显示，切削速度增加使得切屑堆积的体积和位错缺陷分布区域增大，切削深度越大，在刀具前方切屑堆积的体积越大。

### 2.4 晶粒尺寸和晶界对纳米切削过程的影响

在纳米切削过程中，多晶 Cu 的晶界对已加工表面的形貌有重要影响。图 17 所示为 LIU 等<sup>[40]</sup>模拟的退火多晶 Cu 切削过程中晶界台阶的形成过程。研究发现，由于切削刀的犁削作用和晶粒的旋转，在晶界处形成了具有过渡晶体取向的亚晶粒。一方面，亚晶粒的滑移方向与原始晶粒的滑移方向不同导致了晶界台阶的产生；另一方面，由于几何硬化效应切削力在晶界处出现最大值，切削力的变化会增加工具的振动从而有助于晶界台阶的形成。纳米切削过程中，多晶 Cu 已加工表面的最大峰谷高度大于单晶 Cu 已加工表面的最大峰谷高度，相邻晶粒间晶向的角度差对已加工表面的最大峰谷高度有明显影响。当角度差分别为 28.07°、43.06°时，最大峰谷高度分别是 1.6 nm、2 nm。

此外，切削用量、晶粒尺寸和刀具几何形状对多晶 Cu 的纳米切削过程也有很大影响。SHI 等<sup>[41]</sup>利用 MD 模拟了不同晶粒尺寸下的纳米切削过程。模拟结果显示，当晶粒尺寸从 5.32 nm 增加到 14.5 nm 时，切削力逐渐增加，呈现出逆 Hall-Petch 关系；当晶粒尺寸大于 14.5 nm 时，切削力随着晶粒尺寸的增加而

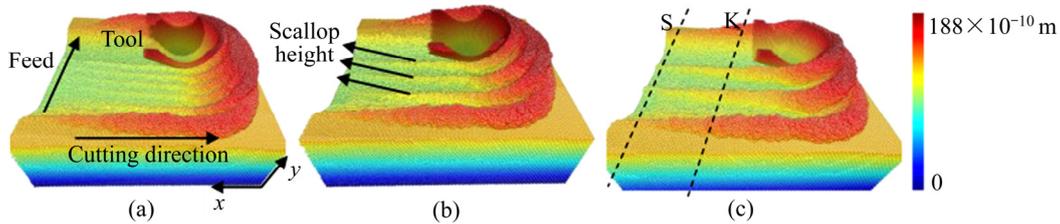


图 15 进给量对表面形貌的影响<sup>[38]</sup>

Fig. 15 Effect of feed ( $f$ ) on surface morphology<sup>[38]</sup>: (a)  $f=3$  nm; (b)  $f=5$  nm; (c)  $f=8$  nm

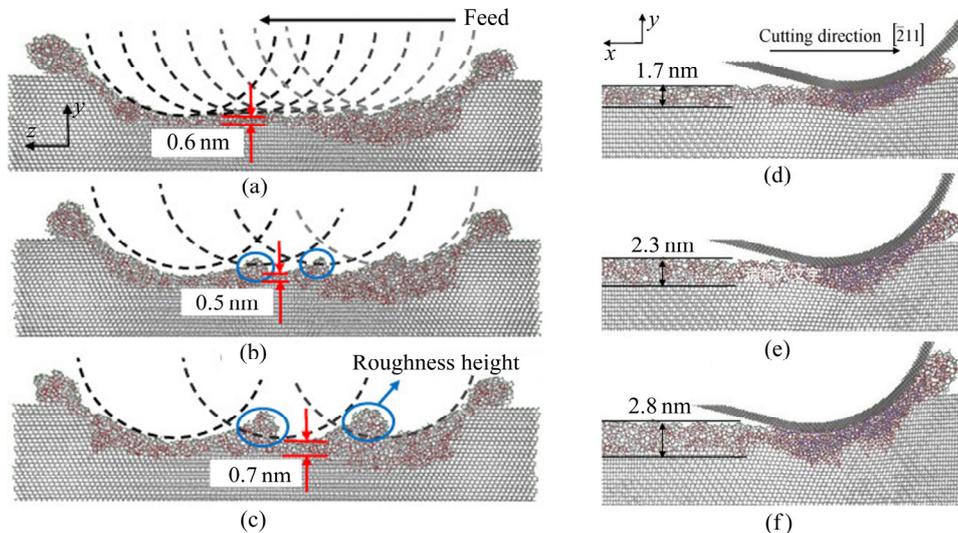


图 16 切削深度和进给量对亚表面变形层的影响<sup>[38]</sup>

Fig. 16 Influence of depth ( $d$ ) of cut and feed ( $f$ ) on subsurface deformation layer<sup>[38]</sup>: (a)  $f=3$  nm; (b)  $f=5$  nm; (c)  $f=8$  nm; (d)  $d=1$  nm; (e)  $d=2$  nm; (f)  $d=3$  nm

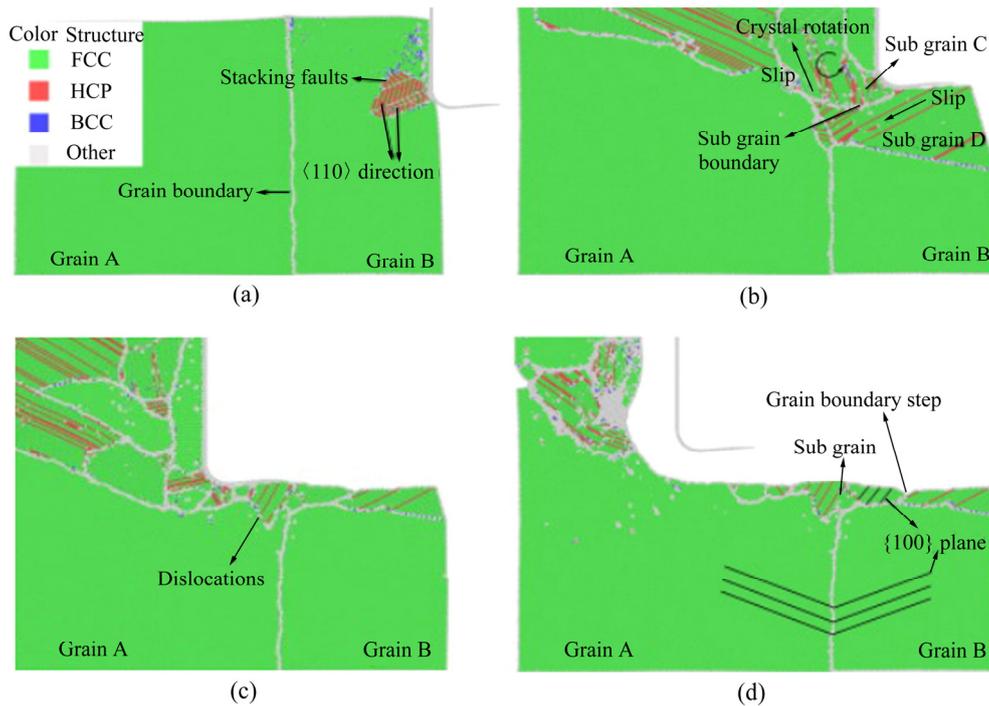


图 17 晶界台阶的形成过程<sup>[40]</sup>

Fig. 17 Formation process of grain boundary steps with different cutting distances<sup>[40]</sup>: (a) 2 nm; (b) 19 nm; (c) 37 nm; (d) 54 nm

减小, 符合 H-P 关系。其中, H-P 关系是由于晶界对位错传播的阻碍作用, 但当晶粒尺寸较小时在外载荷作用下工件内部的晶界会产生运动, 从而导致了逆 Hall-Petch 关系。同时 SHI 等<sup>[41]</sup>还研究了切削用量和刀具几何形状对纳米切削过程的影响。模拟结果显示, 法向力和切向力随着切削深度或切削速度的增加而增加; 随着刀具前角的增加, 法向力和切向力会产生不同幅度的下降, 法向力下降的趋势更加明显。

### 2.5 晶体各向异性对纳米加工的影响

金属材料在纳米划刻过程中会表现出各向异性。GAO 等<sup>[42]</sup>利用 MD 模拟了 Fe 的纳米划刻过程。模拟结果显示, 在划刻过程中出现了空穴和孪晶变形。同时, 位错之间的相互作用会使划痕中部的位错减少, 塑性变形和位错主要集中在划痕前方, 划刻深度的增加会引起材料的软化效应。随后 GAO 等<sup>[43]</sup>又以(111)、(110)、(010)晶面为划刻表面, 并且在每个晶面上分别沿着两个不同的方向进行划刻, 研究了纳米划刻过程中 Fe 的各向异性。如图 18 所示, 图 18(a)中的原子按高度着色; 图 18(b)中的红色原子表示第一层原子, 蓝色原子表示第二层原子, 实线箭头表明滑移方向在试件表面的平面内, 虚线箭头表明滑移方向与试件表面相交, 交角越大, 虚线箭头越短越粗。模拟结果显示, 在具有不同晶向的表面上沿不同方向划刻所产生的原子堆积情况明显不同, 主要原因是在 BCC 晶体结构的

Fe 中原子易于沿原子密度大的方向滑动。此外, 工件表面的晶向和划刻方向对划刻过程中工件内部的位错分布也有较大影响, 但对摩擦因数、法向力和切向力的影响不大。模拟结果还显示, 位错区的弛豫作用导致在划刻过程中的法向硬度比压痕过程中的法向硬度小。如果认为在划刻过程中压头与工件间接触面积会发生变化, 则计算结果显示划痕深度对法向硬度的影响很小; 如果在计算切向硬度时不考虑堆积区的面积, 那么在划刻过程中切向硬度的变化很小。ALHAFEZ 等<sup>[44]</sup>发现类似的现象也出现在具有 HCP 晶体结构 Ti 和 Mg 的纳米划刻模拟中。此外, ZHU 等<sup>[45]</sup>利用 MD 模拟了单晶 Cu 的纳米划刻试验。研究发现, 工件材料的最小去除深度与工件表面的晶向和划刻方向密切相关。工件表面的晶体方向为(001)、划痕方向为 $[\bar{1}00]$ 和工件表面的晶体方向为(111)、划痕方向为 $[\bar{1}10]$ 。这两种组合在一定的加工条件下, 可以实现单层原子的去除, 而对于(110)[001]组合难以实现单层原子的去除。当工件表面的晶体方向为(001)和(111)时, 虽然表面材料的去除深度为一个原子层, 但工件材料却不是逐层去除, 工件中最上层的一些原子会进入到第二层中, 第二层中的一些原子也会移动到最上层。

SHARMA 等<sup>[46]</sup>利用分子动力学模拟研究了单晶 Cu 工件的晶向对纳米切削过程的影响, 如图 19 所示。在不同晶向下切削时, 单晶 Cu 材料的滑移面与切削

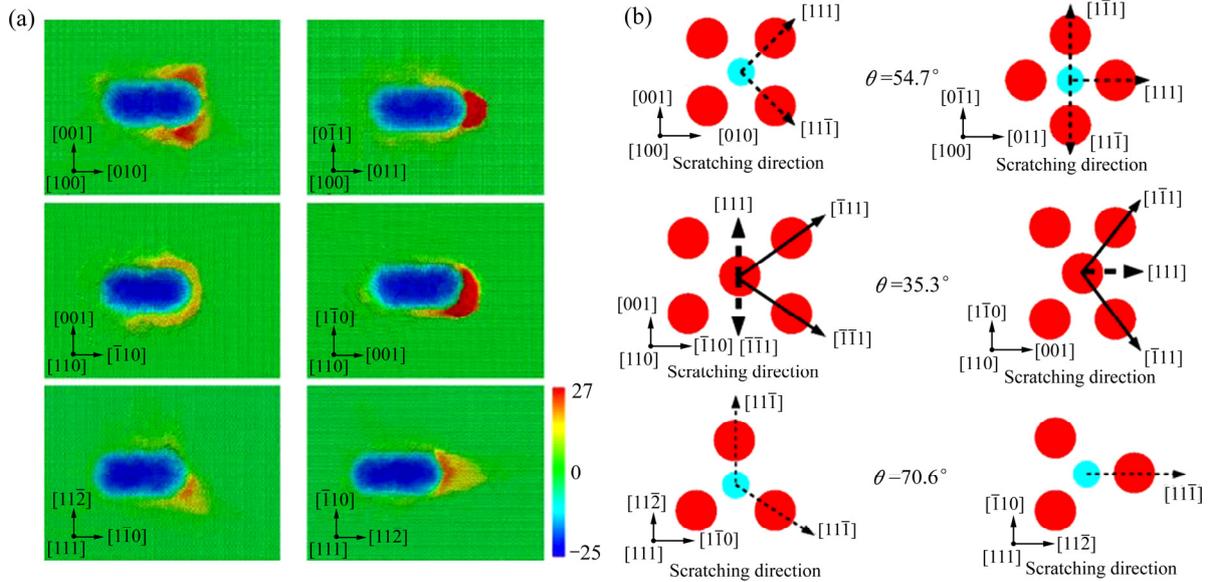


图 18 表面晶向对划刻过程中原子堆积情况的影响<sup>[43]</sup>

Fig. 18 Effect of surface orientation on atomic deposition in scratching process<sup>[43]</sup>: (a) Material pile-up on different surface; (b) Formation mechanism of pile-up on workpiece surface.

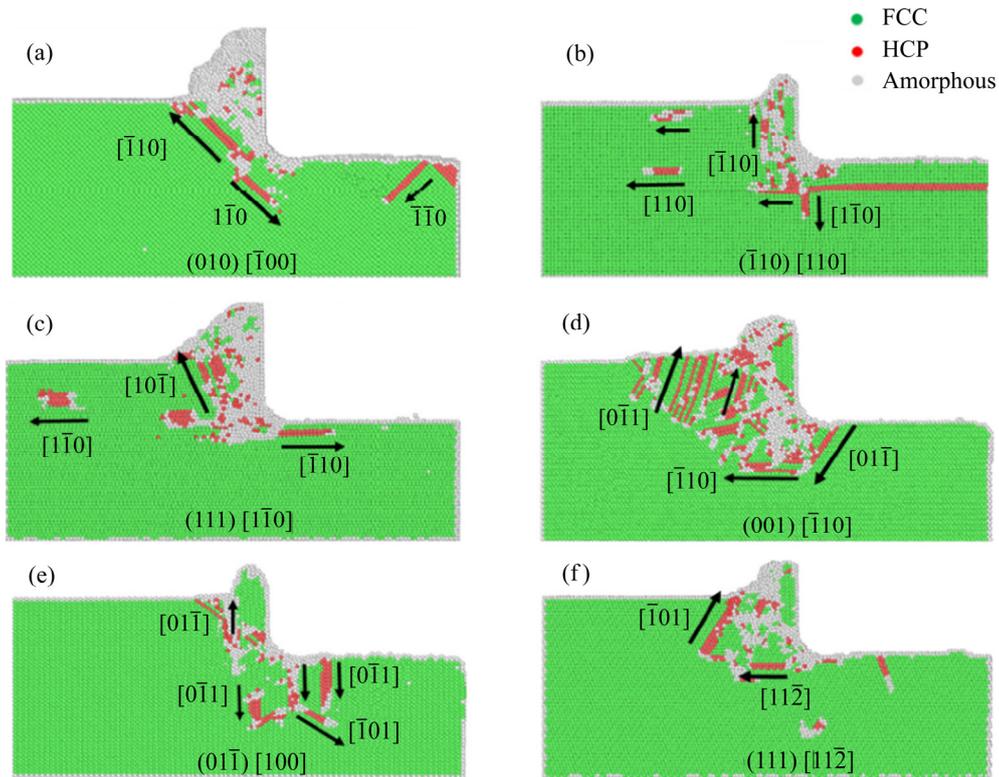


图 19 纳米切削 Cu 过程中不同晶向下的材料变形<sup>[46]</sup>

Fig. 19 Material deformation during nanocutting of Cu for various orientations<sup>[46]</sup>: (a)(010)[100]; (b)(110)[110]; (c)(111)[110]; (d)(001)[110]; (e)(011)[100]; (f)(111)[112]

方向的空间位置关系会发生改变，导致晶体取向对切削过程中切屑的形成及工件内部缺陷结构的分布有较大影响。此外，晶向对纳米切削过程中的切削力及刀具

两侧原子的堆积情况也有较大影响。在(011)[100]组合下切削力最大，在(111)[110]组合下切削力最小。同时，在不同刀尖圆弧半径下晶向对纳米切削过程中

的切削力、切屑厚度和刀具下方的位错密度等有相似的影响。

### 3 结语

在纳米尺度下金刚石刀具切削的本质是原子的离散化去除,需借助纳米切削实验和计算机模拟等手段,并结合物理、化学、材料、摩擦学等多个领域的研究成果来探索金属材料的纳米加工机理。MD模拟作为研究金属材料纳米加工机理的重要方法,使得人们能够对纳米加工过程进行深入细致的研究,目前应用MD模拟对纳米加工机理的研究还处于分析对比阶段,并没有形成较为完备的理论体系。应用MD模拟研究金属材料的纳米加工机理时应注意以下几个方面:

1) 由于缺乏相关元素之间的势能函数,目前用于模拟纳米切削过程的环境相对简单,多数模拟都是在真空环境下进行的,没有考虑空气、杂质等因素对切削过程的影响。

2) 目前对单晶材料的纳米切削机理研究较多,对于多晶材料的纳米切削机理研究不足,而实际加工的材料多为纳米多晶材料或纳米合金材料,同时目前用于MD模拟的多晶体模型与实际纳米多晶体存在较大差异。因此,在未来的研究中,构建更加符合实际的多晶材料模型尤为重要。

3) 绝大多数切削模型都没有考虑实际切削过程中的非线性因素,如再生震颤、切削力耦合、机械热震颤等。因此,构建更加符合实际情况的纳米切削模型能够更好地理解金属材料的纳米加工机理,也会加速纳米切削加工技术的推广使用。

4) 开发能更精确地对原子之间的相互作用进行描述的势能函数,同时控制计算量,这会使模拟结果更贴近实际情况。

5) 随着计算机运算能力的提高,仿真模型尺寸和模拟仿真时间虽有所增加,但与实际工件尺寸和实验过程所需的时间相比仍有较大差距。

### REFERENCES

[1] LUO Xi-chun, CHENG Kai, WEBB D, WARDLE F. Design of ultraprecision machine tools with applications to manufacture of miniature and micro components[J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2005, 167(2/3): 515–528

[2] QIN Yi. *Micromanufacturing engineering and technology*[M]. Oxford: William Andrew, 2010.

[3] KHAN Z H, KUMAR A, HUSAIN S, HUSAIN M. *Introduction to nanomaterials*[M]. New Delhi: Springer, 2016.

[4] ALTING L, KIMURA F, HANSEN H N, BISSACCO G. *Micro engineering*[J]. *CIRP Annals-Manufacturing Technology*, 2003, 52(2): 635–657.

[5] CRICHTON M L, ARCHER-JONES C, MELIGA S, EDWARDS G, MARTIN D, HUANG H, KENDALL M A F. Characterising the material properties at the interface between skin and a skin vaccination microprojection device[J]. *Acta Biomaterialia*, 2016, 36: 186–194.

[6] RUESTES C, ALHAFEZ I, URBASSEK H. Atomistic studies of nanoindentation—A review of recent advances[J]. *Crystals*, 2017, 7: 293.

[7] ZAMBALDI C, RAABE D. Plastic anisotropy of  $\gamma$ -TiAl revealed by axisymmetric indentation[J]. *Acta Materialia*, 2010, 58: 3516–3530.

[8] ZAMBALDI C, ZEHNDER C, RAABE D. Orientation dependent deformation by slip and twinning in magnesium during single crystal indentation[J]. *Acta Materialia*, 2015, 91: 267–288.

[9] REMINGTON T P, RUESTES C J, BRINGA E M, REMINGTON B A, LU C H, KAD B, MEYERS M A. Plastic deformation in nanoindentation of tantalum: A new mechanism for prismatic loop formation[J]. *Acta Materialia*, 2014, 78: 378–393.

[10] RUESTES C J, STUKOWSKI A, TANG Y, TRAMONTINA D R, ERHART P, REMINGTON B A, URBASSEK H M, MEYERS M A, BRINGA E M. Atomistic simulation of tantalum nanoindentation: Effects of indenter diameter, penetration velocity, and interatomic potentials on defect mechanisms and evolution[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2014, 613: 390–403.

[11] BIENER M M, BIENER J, HODGE A M, HAMZA A V. Dislocation nucleation in bcc Ta single crystals studied by nanoindentation[J]. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 2007, 76(16): 165422.

[12] GOEL S, BEAKE B, CHAN C W, HAQUE F N, DUNNE N. Twinning anisotropy of tantalum during nanoindentation[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2015, 627: 249–261.

[13] GAO Y, RUESTES C J, TRAMONTINA D R, URBASSEK H M. Comparative simulation study of the structure of the plastic zone produced by nanoindentation[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2015, 75: 58–75.

- [14] SOMEKAWA H, TSURU T, SINGH A, MIURA S, SCHUH C A. Effect of crystal orientation on incipient plasticity during nanoindentation of magnesium[J]. *Acta Materialia*, 2017, 139: 21–29.
- [15] LU Z, CHERNATYNSKIY A, NOORDHOEK M J, SINNOTT S B, PHILLPOT S R. Nanoindentation of Zr by molecular dynamics simulation[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2015, 467: 742–757.
- [16] LI Jia, GUO Jia-wen, LUO Hao, FANG Qi-hong, WU Hong, ZHANG Liang-chi, LIU You-wen. Study of nanoindentation mechanical response of nanocrystalline structures using molecular dynamics simulations[J]. *Applied Surface Science*, 2016, 364: 190–200.
- [17] ZHOU K, LIU B, YAO Y, ZHONG K. Effects of grain size and shape on mechanical properties of nanocrystalline copper investigated by molecular dynamics[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2016, 615: 92–97.
- [18] HUANG C C, CHIANG T C, FANG T H. Grain size effect on indentation of nanocrystalline copper[J]. *Applied Surface Science*, 2015, 353: 494–498.
- [19] HU J, SHI Y N, SAUVAGE X, SHA G, LU K. Grain boundary stability governs hardening and softening in extremely fine nanograined metals[J]. *Science*, 2017, 355: 1292–1296.
- [20] TALAEI M S, NOURI N, ZIAEI-RAD S. Grain boundary effects on nanoindentation of Fe bicrystal using molecular dynamic[J]. *Mechanics of Materials*, 2016, 102: 97–107.
- [21] LIU Q, DENG L, WANG X. Interactions between prismatic dislocation loop and coherent twin boundary under nanoindentation investigated by molecular dynamics[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2016, 676: 182–190.
- [22] GAO Y, URBASSEK H M. Scratching of nanocrystalline metals: A molecular dynamics study of Fe[J]. *Applied Surface Science*, 2016, 389: 688–695.
- [23] 赵鹏越, 郭永博, 白清顺, 张飞虎. 基于微观结构的多晶Cu 纳米压痕表面缺陷研究[J]. *金属学报*, 2018, 54(7): 1051–1058.
- ZHAO Peng-yue, GUO Yong-bo, BAI Qing-shun, ZHANG Fei-hu. Research of surface defects of polycrystalline copper nanoindentation based on microstructures[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2018, 54(7): 1051–1058.
- [24] 赵鹏越, 郭永博, 白清顺, 张飞虎. 压痕位置对多晶铜纳米压痕变形机理的影响[J]. *哈尔滨工业大学学报*, 2018, 50(7): 11–16.
- ZHAO Peng-yue, GUO Yong-bo, BAI Qing-shun, ZHANG Fei-hu. Influence of indentation position on the nanoindentation deformation mechanism of polycrystalline copper[J]. *Journal of Harbin Institute of Technology*, 2018, 50(7): 11–16.
- [25] ZHAO Peng-yue, GUO Yong-bo. Grain size effects on indentation-induced defect evolution and plastic deformation mechanism of polycrystalline materials[J]. *Computational Materials Science*, 2018, 155: 431–438.
- [26] GAO S, HUANG H. Recent advances in micro- and nano-machining technologies[J]. *Frontiers of Mechanical Engineering*, 2017, 12: 18–32.
- [27] WEITEKAMP R A, ATWATER H A, GRUBBS R H. Photolithographic olefin metathesis polymerization[J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2013, 135(45): 16817–16820.
- [28] CHEN Y, PEPIN A. Nanofabrication: Conventional and nonconventional methods[J]. *Electrophoresis*, 2001, 22(2): 187–207.
- [29] CHONG T C, HONG M H, SHI L P. Laser precision engineering: From microfabrication to nanoprocessing[J]. *Laser & Photonics Reviews*, 2010, 4(1): 123–143.
- [30] TSENG A A. Recent developments in nanofabrication using focused ion beams[J]. *Small*, 2005, 1(10): 924–939.
- [31] CHEN Y, PEPIN A. Nanofabrication: Conventional and nonconventional methods[J]. *Electrophoresis*, 2001, 22(2): 187–207.
- [32] WANG Quan-long, BAI Qing-shun, CHEN Jia-xuan, SUN Ya-zhou, GUO Yong-bo, LIANG Ying-chun. Subsurface defects structural evolution in nano-cutting of single crystal copper[J]. *Applied Surface Science*, 2015, 344: 38–46.
- [33] WANG Q, BAI Q, CHEN J, GUO Y, XIE W. Stress-induced formation mechanism of stacking fault tetrahedra in nano-cutting of single crystal copper[J]. *Applied Surface Science*, 2015, 355: 1153–1160.
- [34] ZHANG L, ZHAO H, DAI L, YANG Y, DU X, TANG P, ZHANG L. Molecular dynamics simulation of deformation accumulation in repeated nanometric cutting on single-crystal copper[J]. *RSC Advances*, 2015, 5(17): 12678–12685.
- [35] LIU H T, ZHU X F, SUN Y Z, XIE W K. Evolution of stacking fault tetrahedral and work hardening effect in copper single crystals[J]. *Applied Surface Science*, 2017, 422: 413–419.
- [36] SHARMA A, DATTA D, BALASUBRAMANIAM R. An investigation of tool and hard particle interaction in nanoscale cutting of copper beryllium[J]. *Computational Materials Science*, 2018, 145: 208–223.

- [37] XU F, FANG F, ZHANG X. Hard particle effect on surface generation in nano-cutting[J]. *Applied Surface Science*, 2017, 425: 1020–1027
- [38] LAI M, ZHANG X, FANG F, BI M. Fundamental investigation on partially overlapped nano-cutting of monocrystalline germanium[J]. *Precision Engineering*, 2017, 49, 160–168.
- [39] 李勇, 杨晓京. 纳米尺度单晶铜材料表面切削特性分子动力学模拟[J]. *中国机械工程*, 2016, 27(6): 721–726.  
LI Yong, YANG Xiao-jing. Molecular dynamics simulation of single crystal copper material surface cutting properties in nano-scale[J]. *China Mechanical Engineering*, 2016, 27(6): 721–726.
- [40] LIU D, WANG G, YU J, RONG Y. Molecular dynamics simulation on formation mechanism of grain boundary steps in micro-cutting of polycrystalline copper[J]. *Computational Materials Science*, 2017, 126: 418–425.
- [41] SHI J, WANG Y, YANG X. Nano-scale machining of polycrystalline coppers-effects of grain size and machining parameters[J]. *Nanoscale Research Letters*, 2013, 8: 1–18.
- [42] GAO Y, RUESTES C J, URBASSEK H M. Nanoindentation and nanoscratching of iron: Atomistic simulation of dislocation generation and reactions[J]. *Computational Materials Science*, 2014, 90: 232–240.
- [43] GAO Y, BRODYANSKI A, KOPNARSKI M, URBASSEK H M. Nanoscratching of iron: A molecular dynamics study of the influence of surface orientation and scratching direction[J]. *Computational Materials Science*, 2015, 103: 77–89.
- [44] ALABD A I, URBASSEK H M. Scratching of hcp metals: A molecular-dynamics study[J]. *Computational Materials Science*, 2016, 113: 187–197.
- [45] ZHU P, FANG F. Study of the minimum depth of material removal in nanoscale mechanical machining of single crystalline copper[J]. *Computational Materials Science*, 2016, 118: 192–202.
- [46] SHARMA A, DATTA D, BALASUBRAMANIAM R. Molecular dynamics simulation to investigate the orientation effects on nanoscale cutting of single crystal copper[J]. *Computational Materials Science*, 2018, 153: 241–250.

## Research progress on nano-machining mechanism of metallic materials based on molecular dynamics simulation

LIU Huan, GUO Yong-bo, ZHAO Peng-yue, SU Dian-cheng

(School of Mechanical and Electrical Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

**Abstract:** Micro-nano devices are widely used in the fields of optics, electronics, medicine, biotechnology, communication, aerospace and other fields. It is of great significance to study the deformation characteristics of metallic materials at the nanometer scale and the removal mechanism of materials to realize the function of micro-nano devices. Molecular Dynamics (MD) simulation methods can be used to achieve "real-time online" observation of nanofabrication process, so as to better understand the nanofabrication mechanism of plastic materials. From the aspects of nanoindentation and nanofabrication, the research progress of nanomaterial processing mechanism of metallic materials in recent years was expounded. Some shortcomings of current MD simulation methods were pointed out and several suggestions for improvement were put forward.

**Key words:** molecular dynamics; metallic material; processing mechanism; nano-cutting; nanoindentation

**Foundation item:** Project(51775146) supported by the National Natural Science Foundation of China; Project (51535003) supported by the State Key Program of National Natural Science Foundation of China

**Received date:** 2018-07-31; **Accepted date:** 2019-03-11

**Corresponding author:** GUO Yong-bo; Tel: +86-451-86415244; E-mail: ybguo@hit.edu.cn

(编辑 王超)