

微纳米切削可视化研究现状

袁莎,陈定方,朱宏辉,余震,郑慧

(武汉理工大学 智能制造及控制研究所,湖北 武汉 430063)

摘要:当材料切削厚度达到几个原子层时,微纳米切削实验变得困难且耗时,目前的实验条件根本无法实现。而分子动力学仿真却能克服这些困难,能十分方便地改变切削条件、刀具的几何形状和加工工件材料的性质。对基于分子动力学仿真的微纳米虚拟切削基本原理及其国内外研究的现状进行阐述。介绍了几种分子动力学可视化软件。虽然目前存在很多优秀的分子动力学可视化软件,可是没有一个是针对微纳米切削的,也不能观察温度场、应力分布等信息。分析了微纳米切削可视化研究存在的问题和发展趋势,指出微纳米加工可视化将成为探索微纳米加工机理最有效的手段。

关键词:微纳米切削;分子动力学仿真;可视化

中图分类号:TG669

文献标识码:A

文章编号:1001-2303(2009)10-0061-05

Research status of micro-nanometric cutting visualization

YUAN Sha, CHEN Ding-fang, ZHU Hong-hui, YU Zhen, ZHENG Hui

(Intelligent Manufacturing and Controlling Institute, Wuhan University of Technology, Wuhan 430063, China)

Abstract: When the material thickness cut is a few atomic layers, micro-nanometric cutting experiment becomes more difficult and time-consuming. The current conditions is impossible. And Molecular Dynamics Simulation was able to overcome these difficulties. It can be very convenient to change the cutting conditions, the geometry of the tool and the nature of the material. In this article, the essential principle of the Molecular Dynamics Simulation and its current domestic and international research situation are expatiated. Several Molecular Dynamics visualization software are introduced. Although there are many excellent Molecular Dynamics visualization software, but no one is aim at the micro-nanometric cutting, do not observe the temperature field, stress distribution, and other information. The problem and development trend about micro-nanometric cutting visualization are analyzed. Micro-nanometric cutting visualization will become the most effective means to explore the micro-nanometric cutting mechanism.

Key words: Micro-nanometric cutting; molecular dynamics simulation; visualization

0 前言

随着量子力学、微观物理、统计物理等现代科学的日臻完善以及微电子技术、扫描隧道显微技术等先进技术的不断发展,电子计算机、原子能、激光、宇航和国防等高新技术部门对机械零件的加工精度和表面质量要求越来越高。高新技术产品的制造,很大程度上依靠超精密和纳米加工技术、加工精度的提高以及减小零件的表面粗糙度来保证,另外,在纳米尺度上,无论是材料的研究、制备还是功

能器件的应用,都与超精密和纳米加工技术的发展完善密不可分,因此,微纳米加工技术是目前面临的重要课题之一。

虽然目前超精密加工技术的加工精度已经达到几十 nm,表面粗糙度达到几个 nm,但是由于对纳米加工机理缺乏认识,在一定程度上限制了超精密加工领域的进一步发展,因为在纳米切削加工中,切削深度达到 1 nm 以下,只包含数个或数十个原子,切削现象在本质上是原子的、离散的物理现象,加工工件不再是连续固体,因此用建立在连续介质力学基础上的有限元方法以及剪切模型来解释纳米切削机理显然是不合适的,必须从分子、原子的角度来分析其加工机理。

为了系统描述材料的去除模式、切屑和加工表

收稿日期:2008-07-08;修回日期:2009-08-26

基金项目:广西制造系统与先进制造技术重点实验室开放课题基金(08037);机械传动与制造工程湖北省重点实验室开放基金重点资助项目(2007A01)

作者简介:袁莎(1982—),女,湖北武汉人,硕士,主要从事虚拟加工可视化方面的研究工作。

面形成过程等纳米加工机理,需要进行大量的纳米级加工实验。但是当材料切削厚度达到几个原子层时,实验变得困难且耗时,因为实验对超精密机床、检测仪器分辨率、切削条件、刀具及其几何形状的要求极其苛刻,目前的实验条件根本无法实现,而分子动力学^[1](Molecular Dynamics, MD)仿真却能克服这些困难,MD 仿真能够方便地改变切削条件、刀具的几何形状和加工工件材料的性质,微纳米切削可视化也正是基于分子动力学仿真来实现的。

1 分子动力学仿真的基本原理^[2]

分子动力学仿真的核心问题是计算系统粒子的运动规律和轨迹,分子动力学仿真的基本原理是:(1)先将所研究的对象抽象成一个粒子系统,建立以该系统作为研究对象的分子动力学模型,如图 1 所示;(2)建立或选择分子动力学仿真的数学模型(即为能正确表达粒子之间相互作用的势函数);(3)通过粒子动力学方程组的数值求解,确定系统各粒子在相空间的运动规律和轨迹;(4)按统计物理学原理得出系统相应的宏观物理特性。

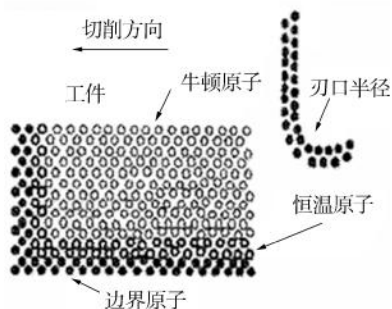


图 1 分子动力学模型

由于分子动力学所涉及的物理系统很大,包含数千、数万甚至数十万个粒子,对系统的全部粒子逐一进行迭代计算,其计算量之大是人工计算所难以承受的。计算机科学与技术的发展为分子动力学的研究提供了有力的计算工具,尤其是计算机仿真技术使分子动力学研究结果走出微观世界。通过仿真在计算机上可以以形象的图案、图形、曲线等将计算结果显示出来,甚至可以模拟出系统中全部粒子运动的动态过程,其效果栩栩如生。如果数学模型准确,其仿真的结果可以替代实验或用以验证实验结果。分子动力学仿真技术的最大意义在于它可以完成在极温、板压、超高速条件下很难或根本无法进行的实验。利用分子动力学仿真技术可以研究高温、高压、高速下气体、液体、固体的平衡特性;分

子动力学也是研究复杂凝聚态系统的有力工具,它能对微观物理系统进行确切的宏观描述,既能获得系统的静态特性又能得到系统的动态特性。

2 分子动力学仿真在微纳米虚拟切削中的应用

2.1 国外研究状况

20 世纪 90 年代末美国 Lawrence Livermore 国家实验室的研究人员将分子动力学仿真技术用于机械制造领域^[3],主要研究超精加工。加工对象是铜、铝和硅,所用刀具是单晶金刚石,加工类型是切削。这项研究工作持续了 7 年,1989 年 Hoover 等人、1990 年 Belak 和 Stowbers、1993 年 Belak 等人、1994~1996 年 Belak 参加了该项研究工作。他们的目的是将纳米切削加工与超精加工联系起来,1996 年 J. Belak 制作了纳米切削分子动力学仿真动画片,这项工作引导其他的研究者扩展了纳米切削分子动力学仿真的研究空间。

1991 年 Ikawa 等人,1992~1994 年 Shimada 等人研究用金刚石刀具对铜进行纳米切削加工,试图用分子动力学研究切屑的形成过程、次表面变形和比切削能对刀刃半径和最小切深的影响。1991~1994 年间 Inamura 等人用了 4 年的时间研究准静态条件下的分子动力学仿真,但由于当时的计算机硬件条件,不允许选取更多的原子数,所以对计算结果解释有点困难。

1993 年日本的 S.Shimsda, N.Lkawa, H.Tanaka 等人运用分子动力学仿真技术研究了微切削中可能获得的极限精度问题^[4],指出切削的最小厚度至少是 1 nm,也就是实际切削半径的 1/20~1/10。通过分子动力学计算机仿真,研究人员发现,在铜的加工表面极限加工表面粗糙度和变形层的深度分别为 0.5 nm 和 5.0 nm;铝工件的表面加工质量比铜差,分析原因可能是由于铝更容易塑性变形和与金刚石的相互作用更强的缘故。

1994 年,Shoichi Shimada, Naoya Ikawa 等人运用分子动力学仿真进行了极限加工精度的研究,通过对单晶铜的切削仿真得到了极限表面粗糙度为 1 nm 或更小的结论^[5]。

1995 年 K.Maekawa 和 A.Itoh 将分子动力学仿真技术用于纳米切削过程的摩擦与刀具磨损的研究中^[6]。对于切削机理和刀具磨损现象,如材料如何变形和去除、刀具和工件如何相互作用、表面和副

表面的损伤如何被减小等进行了分子动力学计算机仿真研究。结果发现在纳米加工中,摩擦和刀具磨损的影响类似于宏观机加工中所观察的那样。

1995 年日本的 Rudiger Rentsch 和 Ichiro Inasaki 运用分子动力学仿真研究了加工表面的完整性^[7]。主要是由于当加工材料时,测量磨料与工件的接触以及确定加工表面完整性是很困难的,而借助于分子动力学仿真使人们研究磨削加工对加工表面的完整性的影响才变得可能。这项研究描述了在粒子中的位错、表面粗糙度、残余应力和裂纹的起源。研究了延性加工中表面的生成、位错的产生及堆积现象。指出 Lennard-Jone 和 Morse 势函数适用于像铜和铝这样的延性具有面心立方晶格的均匀结构的金属材料。迄今为止还没有得出可以比较的成套数据和生成函数。这项研究中,对于硅他们推荐并使用了 Tersoff 势函数,并成功地进行了脆性材料的压痕仿真实验。研究结果表明,加工零件的表面完整性影响现象的全部范围,从延性材料到脆性材料,都能用分子动力学进行仿真研究。

1997 年澳大利亚悉尼大学的 Liangchi Zhans, Hiroaki Tanaka 等人运用分子动力学仿真技术研究了铜的微切削过程^[8]。同年日本的 Yoshitda ISONO 和 Takeshi TANAKA 对原子级的精密加工进行了三维分子动力学仿真^[9],他们运用分子动力学计算机仿真技术研究了在原子级加工时刀具与工件之间的温度效应和原子间的作用力,使用的是 Morse 势函数,在仿真中改变温度和 Morse 函数的参数。分子动力学仿真对理解原子级直接切削过程是有用的,三维(3D)MD 分析能揭示晶体方向性对切削机理的影响,但分析需要较长的计算时间。在这项研究中,研究人员借助高性能超级计算机进行了 3DMD 直接切削仿真。

2002 年日本 Ibaraki 大学系统工程系的 SHIMIZU Jun, ZHOU Libo 和 ESA Hiroshi 应用分子动力学仿真技术对超高速磨削加工中材料的去除机理进行了成功的仿真研究^[10]。

2.2 国内研究状况

1997~2001 年,天津大学的于思远、林滨、韩雪松等人进行了单晶硅磨削分子动力学计算机仿真研究。他们采用 Tersoff 势函数,分别进行了静态压痕和动态单磨粒磨削的分子动力学仿真实验,研究了单晶硅材料在剪应力和挤压应力的作用下晶格的变形、位错、原子键断裂的微观表现,从仿真结果

上能发现原子堆积在磨粒的前方而被去除,并探讨了切深、刀尖圆弧半径对切削力和切削温度的影响。

1999~2002 年,哈尔滨工业大学的董申、罗熙纯、梁迎春等人进行了单颗粒金刚石超精密切削的分子动力学计算机仿真研究。分别采用 Morse 势函数和 Tersoff 势函数对单晶铝和单晶硅进行了分子动力学仿真,探索了切屑的形成机理和加工表面的形成原理,并对刀具刃口半径对加工表面质量的影响进行了分子动力学计算机仿真研究^[11]。

国内外研究现状表明,采用分子动力学研究微纳米加工机理已经取得了一定的研究基础。

3 分子动力学可视化软件的开发

分子动力学可视化就是运用计算机图形学或者一般图形学的原理和方法,将分子动力学计算产生的大规模数据转换为图形、图像,以直观的形式表现出来,分子动力学可视化主要应用于生物学和物理化学领域。

1964 年麻省理工学院的 Cyrus Levinthal 和同事开发了在示波镜上用线框模型展示大分子结构的系统,从此开启了计算机渲染生成分子结构的时代。目前已开发的分子可视化软件^[12-15]主要有:

RasMol 是使用最为广泛的分子三维结构显示软件之一,它由 Roger Sayle 开发。RasMol 读取蛋白质结构的 PDB 文件,有适用于不同机器、不同操作系统的各种版本,有 8 位、16 位和 32 位三种显示深度,支持 8 种分子的显示模式。它的最新版本为 2.7.2。RasMol 格外小心地处理 PDB 数据,经常重新计算信息,以弥补在基本数据中出现的 inconsistency,它代表了软件驱动三维图像显示的重大进展。

Cn3D 是 NCBI 数据库提供的可以浏览 NCBI ASNA 格式的蛋白质结构的三维结构浏览器,用于浏览 MMDB (Molecular Modeling Database) 数据记录。由于 MMDB 数据记录克服了一些 PDB 条目数据化学图像模棱两可的缺点,并且所有的键信息是“显性的”,所以 Cn3D 具有可靠地显示三维数据库结构的能力,而不需要语法分析、校验和 PDB 文件读入程序的例外情况处理等环节。Cn3D 默认的结构图像更具有资料存储与显示处理的能力,因为它不会受数据错误表达的影响。

Swiss-PDBViewer 相对开发较晚,它应用于 Swiss-Model 蛋白质结构构建服务器准备同源蛋白立体结构构建的输入。同时也可以作为一个独立的可视化

工具。Swiss-PDBViewer 整合了很多有用的功能,包括结构的叠加、分子表面的计算、高质量的渲染、扭转角的分析、结构变化的生成等。

随着分子动力学的发展,针对分子动力学的可视化软件不断出现,自由软件有 Aviz、Atomsviewer、VMD 等,商业软件有 CHARMM、Discover 等。

Aviz 全名为 Atomistic Simulation Visualization,运行平台为 UNIX 和 LINUX,采用 C 语言开发。主要可视化分子动力模拟金刚石、石墨、铝等材料的表面现象,提供旋转、缩放功能。

Atomsviewer 采用 C++ 和 OpenGL 技术开发,主要可视化百万个以上原子的分子动力学模拟结果,它采用独特的数据压缩算法、基于八叉树的去除观察者视野以外的原子、多分辨率剪切算法等技术,大大加速了可视化程序的相应速度。

VMD 采用 C++ 和 OpenGL 技术开发,主要是可视化和模拟分子动态运动的轨道,同时它也可以生成非常优秀的单个分子的三维可视化图形。VMD 可以运行在 MacOS-X, Unix 和 Windows 平台上,它使用了 OpenGL 来提供高性能的三维分子图形;VMD 可以显示和分析蛋白质、核酸、双层脂质等生物结构,能够读取多种标准文件格式并显示其结构;VMD 提供了大量的显示模式和颜色模式,它能够可视化、模拟和分析分子动态运动的轨道;它还可以通过远程计算机的仿真,作为外部 MD 程序的图形前端,来进行分子的显示和动画。

CHARMM (Chemistry at Harvard Macromolecular Mechanics) 由哈佛大学开发,它可以进行分子结构和动力学仿真,应用在蛋白质建模、基于结构的设计、结构生物学和纳米科技等方面。

4 微纳米切削可视化研究存在的问题和发展趋势

综上所述,微纳米切削可视化研究似乎已取得很大进展,但目前还存在以下几个问题:

(1) 模拟规模小。模拟的工件原子数只有几千个,如 Shimada 等人模拟的单晶铜、单晶铝的二维切削过程, Komanduri 等人模拟的晶体晶面、切削方向以及刀具对纳米切削机理的影响,甚至有的模拟只有几层原子^[16-17]。

(2) 模拟的材料基本上都是理想材料。目前研究的材料大部分都是理想的无缺陷的单晶材料,对多晶材料的研究很少, Inamura^[18]等人模拟的多晶体是

简化了的多晶铜,只包含一个晶界,而且晶界的位置和形状固定。

(3) 研究内容大部分局限在加工表面的几何特性、机械特性(如表面形成过程、切屑去除机理、刀具的磨损、摩擦等)。

(4) 目前分子动力学仿真所需的势函数数量还很有限,仿真时需要根据所研究的具体材料及其结构类型而选定。目前已报道的文献仅有单晶铜、单晶铝、单晶硅或锗等材料的势函数,对于多晶材料、陶瓷材料尤其是像结构钢及其合金材料的势函数尚未见公开报道。

(5) 分子动力学仿真技术还处于发展阶段,国际上分子动力学仿真技术用于机械加工领域的研究成果尚不丰硕,到目前为止还未见到将分子动力学仿真技术用于实际工程材料的报道。

(6) 虽然存在很多优秀的分子动力学可视化软件,可是没有一个是针对于微纳米切削分子动力学可视化的,微纳米切削还需要观察温度场、应力分布等信息,这也是现有的分子动力学仿真可视化程序所不能满足的。

因此今后对微纳米切削可视化的研究主要有以下几个方面:

(1) 扩大模拟规模。由于计算机的容量太小、计算速度慢,目前模拟的原子数太少,可考虑与其他统计力学的方法相结合,如 Monte Carlo 方法,来提高模拟的规模。

(2) 拓展模拟系统中的材料种类。现在模拟的材料大部分是无缺陷的单晶材料,而实际应用的大多数材料不可避免的存在空穴、位错等缺陷,因此在模拟中应考虑材料的缺陷。缺陷的密度、尺寸、形状可通过统计力学方法进行模拟,如 Monte Carlo 方法。而实际常用的材料大部分都是多晶体,因此应研究多晶材料的纳米加工机理。

(3) 对加工表面的物理、化学特性进行研究。目前国内外对纳米加工机理的研究大部分是针对加工表面的几何特性、机械特性(如表面形成过程、切屑去除机理、磨损、摩擦等)进行研究,对加工表面的化学特性(如加工表面的原子有无重排、重构现象,有无吸附原子等现象)鲜有报道。

(4) 研究开发描述常用多晶材料、陶瓷材料的新形势函数,加速研究以填补空白。

(5) 加强分子动力学仿真技术的实用性,将其运用到实际的机械加工工程中去。

(6)针对微纳米切削开发出专门的分子动力学可视化软件,能够模拟出切削过程中的温度场、应力分布等信息。

5 展望

根据国内外资料分析可知,分子动力学仿真技术将成为对微纳米切削加工进行确切的宏观描述的有效工具,成为除理论分析和实验观察之外的第三种科学研究手段,虽然我国微纳米切削可视化研究才刚刚起步,但在现有的研究成果基础上,一定会取得更丰硕的成果,微纳米加工可视化也将成为探索微纳米加工机理的最有效的手段。

参考文献:

- [1] 唐玉兰,梁迎春,程 凯.纳米切削分子动力学仿真的研究进展[J].系统仿真学报,2004,16(4):745-748
- [2] 郑雪梅.面向超精密切削加工的并行分子动力学仿真研究[D].天津:天津大学,2005.
- [3] Komandurit N R, Chandrasekaran. Some aspects of machining with negative-rake tools simulating grinding: a molecular dynamics simulation approach[J]. Philosophical Magazine, 1999, 79(7):955-968.
- [4] Shimada N S, axawa H, Tanaka G, et al. Feasibility Study on Ultimate Accuracy in Microcutting Using Molecular Dynamics Simulation[J]. Annals of the CIRP, 1993, 42(1):91-94.
- [5] Shoichi Shimada, Naoya Iiawa, et al. Structure of Micromachined Surface Simulated by Molecular Dynamics Analysis[J]. Annals of the CIRP, 1994, 43(1):51-54.
- [6] Rudiger Rentsch, Lchiro Lnasaki. Investigation of Surface Integthy by Molecular Dynamics simulation[J]. Annals of the CIRP, 1995, 44(1):295-298.
- [7] Liangchi Zhang, Hiroaki Tanaka. Towards a deeper understanding of wear and friction in the atomic scale-amolecular dynamics analysis[J]. Wear, 1997(211):44-53.
- [8] Yoshitada Isono, Takeshi Tanaka. Tree-Dimensional Molecular Dynamics simulation of Atomic Scale Precision Processing Using a pin Tool[J]. JSME International Journal, 1997, 40(3):211-218.
- [9] SHIMIZU Jun, ZHOU Libo, EDA Hiroshi. Simulation and Experimental Analysis of Super High-Speed Grinding of Ductile Material[C]. Proceedings of the 10th International Manufacturing Conference 2002.
- [10] 罗熙淳,梁迎春,董 申,等.单晶硅纳米加工机理的分子动力学研究[J].航空精密制造技术,2000,36(3):21-24.
- [11] 罗熙淳,梁迎春,董 申.单晶铝纳米切削过程分子动力学模拟技术研究[J].中国机械工程,2000(8):860-862.
- [12] Joan Adler. Visualization of MD and MC simulations for atomistic[J]. Computer Physics Communications, 2002, 147:665-669
- [13] Ashish Sharma, Rajiv K. Kalia, Aiichiro Nakano, et al. Scalable and portable visualization of large atomistic datasets[J]. Computer Physics Communications, 2004(163):53-64.
- [14] William Humphrey, Andrew Dalke, and Klaus Schulten. VMD- Visual Molecular Dynamics[J]. Journal of Molecular Graphics, 1996(14):33-38.
- [15] 谢欣荣.分子可视化建模及其软件实现[D].湖北:华中科技大学,2004.
- [16] Doyama M, Nozaki T, Kogure Y. Cutting, compression and shear of silicon small single crystals[J]. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 1999(153):147-152.
- [17] doyama M, Nozaki T, Kogure Y, et al. Plastic deformation of pure silicon nanocrystals by molecular dynamics[J]. NanoStructured Materials 1999(12):333-338.
- [18] 林 滨,韩雪松,于思远,等.纳米磨削过程中分子动力学计算机仿真实验[J].天津大学学报,2000,33(5):652-656.

《电焊机》杂志 2008 年合订本简介

2008 年《电焊机》杂志不但将前沿性的焊接技术、实用工艺、生产和使用维修经验奉献给了读者,而且更以技术系统化、行业信息及时全面化展现在大家面前。

2008, 杂志社精心策划, 推出了 11 期“专题讨论”——焊接软件的开发与应用, 焊缝跟踪与图像处理, 第十二次全国焊接学术会议论文, 奥运场馆焊接暨国家体育场(鸟巢)焊接技术, 焊接机器人与先进焊接设备, 焊接材料, 现代铁路焊接技术与装备, 精密连接与微细连接技术, 电力建设中的焊接技术, 新型钢种可焊性研究及应用, 船舶焊接技术

与设备。您能从中了解到行业人士最关心、关注的技术问题, 它为您提供了深层次、系统化和广泛的技术, 是您掌握国内外技术发展的最佳途径。

2008 年, 杂志的优秀栏目——专题综述、研究与设计、生产与应用、产品导购等, 在 2008 年得到了进一步发扬光大, 连续刊载的“使用与维修”, 将更多的维修经验介绍给大家。

《电焊机》杂志 2008 年合订本已正式出版发行, 每套订价 120 元/套(含邮寄费)。

联系人: 黄秀艳

联系电话: 028-83267908

传真: 028-83262878