

Molecular Dynamics (MD) Simulation of AFM-Based Nanometric Cutting of Some Single-Crystal Cubic Metals *

ZHANG Jurjie, SUN Tao*, YAN Yong-da, LIANG Ying-chun, DONG Shen
(School of Mechatronics Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

Abstract : Molecular dynamics (MD) simulations of AFM-based nanometric cutting have been carried out on some single-crystal cubic metals, both FCC (Al, Cu, and Ni) and BCC (FCC) to investigate the effect of ductility of metal material on the nature of deformation during the nanometric cutting process. The Morse potential was utilized to compute both the interactions between workpiece atoms, interactions between workpiece atoms and tool atoms. Chip formation, workpiece deformation region, and system potential energy variation were observed. The results reveal that the AFM-based nanometric cutting process is significantly affected by the ductility of single-crystal metal material.

Key words : nanometric cutting; AFM; molecular dynamics; single-crystal metal; ductility

EEACC:2575

单晶金属 AFM 切削过程的分子动力学模拟 *

张俊杰, 孙涛*, 闫永达, 梁迎春, 董申

(哈尔滨工业大学机电工程学院, 哈尔滨 150001)

摘要 : 使用三维分子动力学方法模拟了基于 AFM 针尖的不同结构 (FCC, BCC) 的单晶金属 (铝, 铁, 铜, 镍) 的纳米切削过程, 研究了单晶金属延展性能对切削过程工件材料变形的影响。使用 Morse 势计算工件原子之间, 工件原子和刀具原子之间的相互作用。观察和分析了切削过程中切屑形成, 工件变形区域, 以及系统势能变化。模拟结果显示单晶金属延展性能对基于 AFM 的纳米切削过程有显著影响。

关键词 : 纳米切削; AFM; 分子动力学; 单晶金属; 延展性能

中图分类号 : TP391.9

文献标识码 : A **文章编号 :** 1004-1699(2008)04-0636-04

随着扫描探针技术的发展, 基于 AFM 的纳米切削技术用于对工件表面进行原子级加工, 成为 MEMS/NEMS 领域制造微/纳器件的一项关键技术。为了制造高精度的微/纳结构, 需要研究基于 AFM 的纳米切削机理, 如切屑形成, 切削过程工件材料变形, 摩擦磨损等。然而, 纳米加工过程只包含几个或数十个原子层, 对实验设备要求极高, 目前无法通过实验研究纳米切削机理。并且纳米切削过程本质上是一个离散的过程, 传统的建立在宏观连续介质力学上的经典切削理论不适合解释纳米切削过程。分子动力学方法已经被证实为研究纳米切削机理的一种有效手段^[1-2]。

1980s 美国劳伦斯实验室 (LLNL) 最早将分子动力学用于加工模拟, 他们采用 MD 方法模拟了使用金刚石刀具切削单晶铜的纳米切削过程, 研究了刀具角度和切削深度对加工结果的影响^[3]。这项工作使得分子动力学模拟方法扩展到其它加工领域, 目前已经被用于模拟基于 AFM 的纳米切削过程, 国内外许多学者做了相关研究, 典型的工作包括: Sukky Jun 等人进行了大尺度的分子动力学模拟, 研究了刻蚀条件和基体产生缺陷的关系^[4]。D. Mulliah 等人使用并行分子动力学计算方法模拟了压痕和接下来的刻蚀过程中耕犁作用和压头的磨损机理^[5]。哈尔滨工业大学闫永达等研究了 AFM 针

基金项目 : 国家自然科学基金资助项目 (50575058, 50605012)

收稿日期 : 2007-09-30 **修改日期 :** 2008-03-04

尖切削过程中工件原子势能变化与原子变形程度的关系^[6]。

金属结构不同,其延展性能也不同。为了更好地选取制造微/纳器件的单晶金属材料,本文研究了单晶金属延展性能对纳米切削过程的影响。因此,本文建立了基于 AFM 的纳米切削过程的三维分子动力学模型,模拟了不同结构的单晶金属(FCC 金属:铝、铜、镍;BCC 金属:铁)的纳米切削过程,观察了切削过程中切屑形成、工件变形、加工表面质量和系统势能变化,研究了金属延展性能对切削过程的影响。

1 分子动力学模拟方法

图 1 所示为本文使用的基于 AFM 的纳米切削的三维分子动力学模型,由单晶金属工件和 AFM 针尖刀具组成。

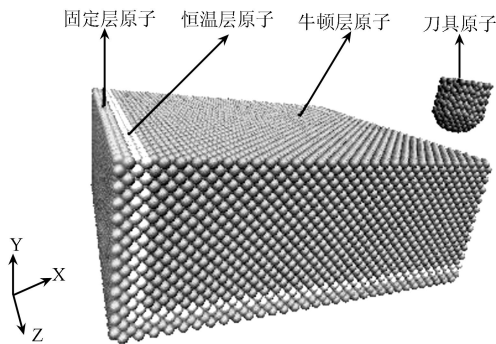


图 1 基于 AFM 的纳米切削的分子动力学模型

工件材料为不同结构的单晶金属,即 FCC 金属(铝、铜、镍)和 BCC 金属(铁)。工件尺寸为 10 nm × 4 nm × 10 nm,工件所包含的原子数目与金属结构有关。工件由三种原子类型组成,即固定层原子,恒温层原子和牛顿层原子。固定层原子被固定住,恒温层和牛顿层原子的运动遵守牛顿运动定律。工件初始温度为 293 K,每隔一定分子动力学步数调整恒温层原子速度,使恒温层平均温度保持在 293 K。沿工件 Z 向施加周期边界条件。

为了简化模型,使用圆头 AFM 针尖刀具,其材料是金刚石,刀具半径为 1.08 nm。在本模拟中,将刀具设为刚性。

采用 Morse 势计算工件原子之间,工件原子与刀具原子之间的作用。Morse 势具有形式简单、编程方便的特点,其表达式如下:

$$E_{ij} = D_0 \left[e^{-2(r-r_0)} - 2e^{-(r-r_0)} \right] \quad (1)$$

式中, D_0 和 r_0 分别为结合能,弹性模量和平衡位置的原子间距。本文使用的 Morse 势计算参数如表 1 所示。

表 1 Morse 势函数参数

材料	晶体结构	D_0 (ev)	r_0 (Å)	$(1/A)$	晶格常量 (nm)
铝	FCC	0.2703	3.253	1.1650	0.405
铜	FCC	0.3429	2.866	1.3590	0.361
铁	BCC	0.4172	2.845	1.3890	0.287
镍	FCC	0.4205	2.780	1.4199	0.352
Meta-C		0.100	2.200	1.700	

在当前模拟中,为了节省计算时间,切削速度选为 200 m/s。Ikawa 等人进行了分子动力学模拟,证明切削速度对切削过程的影响很小^[7]。表 2 归纳了本模拟中使用的计算参数。

表 2 分子动力学模拟计算中的参数

材料	工件:单晶金属 (铝,铁,铜,镍)	刀具:金刚石 (刚性)
尺度	10 nm × 4 nm × 10 nm	刀具半径: 1.07 nm
原子数	铝/ 25000 铜/ 36064 铁/ 34300 镍/ 37364	830
步长	0.5 fs	
初始温度	293 K	
切削深度	0.5 nm	
切削长度	9.0 nm	
切削速度	200 m/s	
晶向和切削方向	(0 1 0)晶面 [1 0 0]晶向	

2 结果与讨论

2.1 纳米切削过程变形机理

图 2 是单晶铜的纳米切削过程中刀具切削不同长度的分子动力学图像。由图 2 可知,纳米切削过程同时存在耕犁和切削两种状态。由于存在切削状态,在针尖刀具前面有工件原子堆积形成切屑,切屑高度随着刀具的切削长度的增加而增加,这是因为切削过程中被剥离的原子数目增加所致。同时由于存在耕犁状态,在切削形成的沟槽两旁有工件原子堆积。

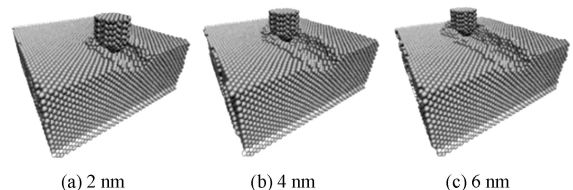


图 2 单晶铜 AFM 针尖纳米切削过程

AFM 针尖纳米切削过程中工件原子的变形机理可以解释为:在纳米切削过程中,AFM 针尖刀具挤压工件原子,刀具周围区域的工件原子的晶格发生变形。当存储在工件变形原子中的应变能超过一个特定值时,原子的晶格重新排列以释放应变能,在刀具与工件接触处产生位错。一部分位错沿着向上

的滑移平面运动到剪切区形成切屑,同时在切削形成的沟槽两旁由于耕犁作用有工件原子堆积。另一部分位错沿着向下的滑移平面运动并压入到工件里。切削过后,已加工工件表面进行弛豫,压入到工件里的位错向上运动到工件表面并最终消失,但是工件亚表面的原子仍然存在程度不同的晶格变形^[8]。

2.2 不同结构的单晶金属对切削过程的影响

为了研究金属延展性能对基于 AFM 的纳米切削过程的影响,分别进行了 FCC 金属(铝、铜、镍)和 BCC 金属(铁)的纳米切削过程的分子动力学模拟。选取了分子动力学模拟中工件的 XY 剖面(左图)和 YZ 剖面(右图)来观察了切削过程中切屑形成、刀具周围工件材料变形区域大小,如图 3 所示。图 3 (a)~(d)分别对应着单晶金属 Al, Cu, Fe, Ni。下面的讨论内容不仅基于图 3,同时也基于使用 VMD 软件生成的分子动力学模拟动画过程^[9]。

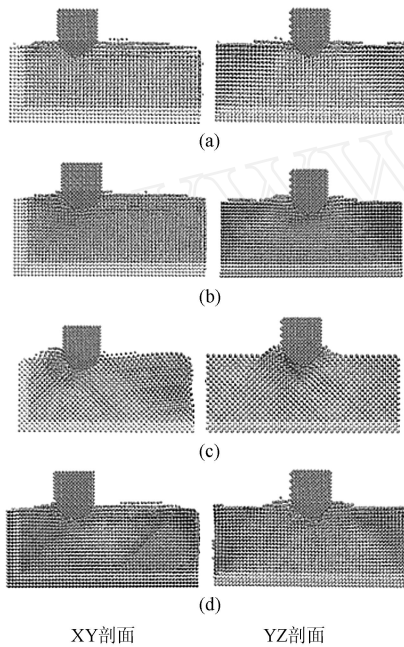


图 3 切削不同单晶金属的分子动力学剖视图

由图 3 可知,对于 FCC 和 BCC 结构的单晶金属,在切削过程中刀具前面均有原子堆积形成切屑,切削形成的沟槽两边均有原子堆积,刀具下方的工件原子均发生了不同程度的变形。然而,比较四种单晶金属切削过程,可以发现切削 Al 产生的切屑体积最小,沟槽两旁堆积的原子体积最小,刀具下方工件材料产生变形区域的深度也最小。可见切削单晶 Al 时工件材料发生的变形最小。切削单晶 Cu, Ni 和单晶 Fe,工件材料发生的变形依次增加。在这四种单晶金属中,Al 的延展性能最好,Cu, Ni, Fe 的延展性能依次降低。结果显示金属延展性能对纳

米切削过程中工件材料的变形有显著影响。随着金属延展性能的降低,切削过程中切屑体积增加,沟槽两旁堆积的原子体积增加,刀具下方工件材料发生变形区域的深度增加。

由图 3 可以看到,对于 FCC 金属,切削过程中工件材料有明显的大量位错产生,同时结合生成的分子动力学模拟动画可以看到工件材料的变形贯穿整个 Z 方向。而对于 BCC 金属,切削过程中工件材料只有极小的位错现象发生,并且工件材料的变形在 Z 方向局限在刀具周围有限的区域。这可能是由于 BCC 金属原子的最大应变能比 FCC 金属小,BCC 金属更容易发生晶格改变并组成新的结构。

同时观察了这四种单晶金属切削过程中系统势能的变化情况,得出了势能-步长曲线如图 4 所示。图 4(a)~(d)分别对应着单晶金属 Al, Fe, Cu, Ni。

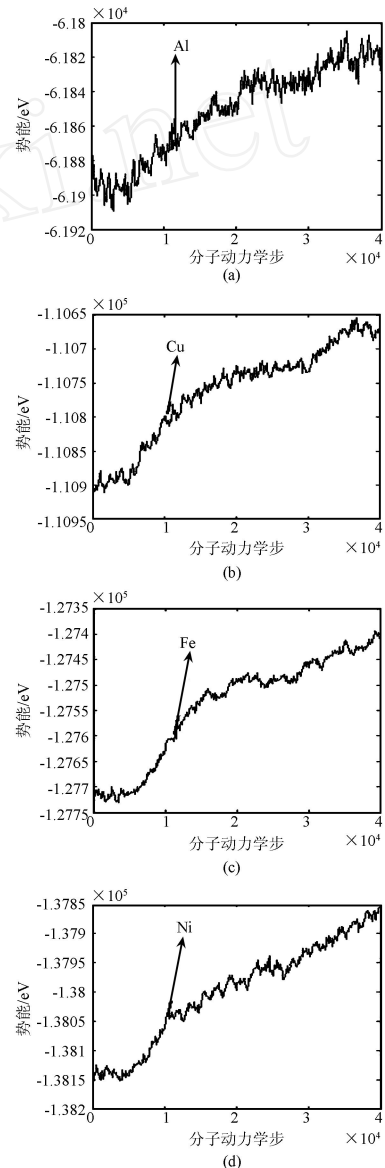


图 4 不同单晶金属切削过程系统势能变化曲线

由图4可知,随着切削长度的增加,切削过程所包含的原子数目增加,用于移除原子所需的能量随之增加,四种单晶金属切削过程的势能-步长曲线均有这种趋势。由于单晶金属切削过程是大量位错引起的塑性变形,因此系统能量发生涨落,导致系统势能-步长曲线产生波动^[10]。然而,对于 FCC 金属,势能-步长曲线波动的程度比 BCC 金属要大。切削单晶 Al 的势能-步长曲线发生剧烈的波动。在上升的过程中,势能剧烈增加,达到一个数值后在这个数值周围波动,然后突然增加到一个更大的数值。而切削单晶 Fe 的势能-步长曲线仅发生轻微的波动。同时对于 FCC 金属,切削单晶 Al 的势能-步长曲线波动程度最大,切削单晶 Cu, Ni 的势能-步长曲线波动程度依次减弱。这表明随着金属延展性能的降低,单晶金属切削过程中产生的位错减少,能量涨落幅度减小,系统势能-步长曲线的波动程度减弱。

3 结论

建立了基于 AFM 的单晶金属纳米切削过程的三维分子动力学模型,研究了单晶金属延展性能对切削过程的影响。基于以上分析,可以得到结论:

(1) 单晶金属的延展性能对基于 AFM 的纳米切削过程有显著影响。

(2) 金属延展性能降低,切削过程中切屑体积增加,沟槽两旁堆积的原子体积增加,刀具下方工件材料发生变形区域的深度增加。

(3) 金属延展性能降低,单晶金属切削过程中产生的位错减少,能量涨落幅度减小,系统势能-步长曲线的波动程度减弱。

参考文献:

- [1] J. Belak, I. F. Stowers, 1990, A Molecular Dynamics Model of the Orthogonal Cutting Process[J]. Proc. of ASPE Annual Conference, Oct. 13-18, 1991, pp. 100-104.
- [2] Belak J, Lucca D A, Lomanduri R, et al. , Molecular dynamics simulation of the chip forming process in single crystal copper and comparison with experimental data [J]. Proc of the ASPE Annual Conference, 1991:100-103.
- [3] Belak, J. , Lucca, D. A. , Komanduri, R. et al. 1991, Molecular Dynamics Simulation of the Chip Formation Process in Single Crystal Copper and Comparison With Experimental Data [J]. Proc. ASPE Annual Conference, Oct. 13-18, pp. 100-109.
- [4] Sukky Jun, Youngmin Lee, Sung Youb Kim et al. Large-scale molecular dynamics simulations of Al (111) nanoscratching [J]. Nanotechnology 15 (2004) 1169-1174.
- [5] D. Mulliah1, S D Kenny, Roger Smith et al. Molecular dynamic simulations of nanoscratching of silver (100) [J]. Nanotechnology 15 (2004) 243-249.
- [6] Y. D. Yan, T. Sun, S. Dong et al. , Molecular dynamics simulation of processing using AFM pin tool [J]. Appl. Sur. Sci, 252 (2006) 7523-7531.
- [7] Shimada S, Ikawa N, Tanaka H, et al. , Structure of Micromachined Surface Simulated by Molecular Dynamics Analysis [J]. Annals of CIRP 1994, 43(1) :51-54.
- [8] S. Shimada, R. Inoue, J. Uchikoshi and N. Ikawa, Molecular dynamics analysis on microstructure of diamond turned surfaces [J]. 1995, SPIE Vol. 2576, pp. 396-405.
- [9] W. Humphrey, A. Dalke and K. Schulten, VMD- Visual Molecular Dynamics [J]. J. Molec. Graphics 14, 33(1996).
- [10] 唐玉兰, 梁迎春, 霍德鸿, 程凯. 单晶硅和单晶铝纳米切削过程比较 [J]. 哈尔滨工业大学学报, 2004, 36(6) :711-714.



张俊杰(1982-),男,哈尔滨工业大学机电工程学院在读博士研究生,研究领域为微纳米制造,主要从事基于 AFM 的纳米加工机理的分子动力学研究, jjzh505@gmail.com.



孙涛(1964-),男,教授,博士生导师,哈尔滨工业大学精密工程研究所所长。主要从事精密超精密加工技术、微纳制造技术、超精密测量及纳米测量学的研究, taosun@hit.edu.cn.