

基于桥域理论的 Cu 单晶纳米切削跨尺度仿真研究*

梁迎春 盆洪民[†] 白清顺 卢礼华

(哈尔滨工业大学机电工程学院, 哈尔滨 150001)

(2010 年 10 月 29 日收到; 2010 年 12 月 14 日收到修改稿)

桥域方法是一种典型的跨尺度仿真研究方法. 基于桥域理论, 本文分析了原子和连续介质耦合区域的处理问题, 即在耦合区采用不同的权重计算系统的能量, 通过 Lagrange 乘子法对原子和连续介质位移进行约束. 采用桥域方法, 建立了单晶 Cu 纳米切削的跨尺度仿真模型, 获得了单晶 Cu 纳米切削的材料变形机理. 同时, 研究了不同切削速度对纳米切削过程和原子受力分布的影响, 仿真结果表明: 随着切削速度的提高, 切削区原子所受的力值增大, 切屑变形系数减小, 已加工表面变质层厚度增加. 本文基于桥域理论, 实现了 Cu 单晶纳米切削跨尺度的建模和仿真, 为探索纳米切削的跨尺度仿真研究提供理论基础.

关键词: 桥域法, 纳米切削, 单晶 Cu, 切削速度

PACS: 02. 60. Cb, 47. 11. Fg, 47. 11. Mn, 81. 20. Wk, 61. 72. Lk

1. 引言

纳米切削是制造纳米级表面精度和亚微米级成形精度零件的机械加工方法. 由于切削行为的特殊性, 使得纳米切削具有许多与传统切削相异的特征. 从材料去除、能量演化以及加工表面的形成等方面来看, 纳米切削过程是涉及复杂条件下的多尺度变形行为. 工件和刀具接触区域变形的复杂性使得分析纳米切削机理和其影响因素成为实现高效而可靠的纳米加工技术的关键.

分子动力学 (molecular dynamics, MD) 方法是研究材料微观变形机理的一种重要数值模拟方法.^[1-4] 采用 MD 模拟方法研究纳米切削过程同样能够从原子的角度研究纳米切削过程中的本质问题. 因此近几年人们利用 MD 方法对纳米加工机理进行了较为广泛的研究, 并取得了丰富的成果. Ikawa 等^[5] 采用 MD 方法研究切削刃锋利度和工件材料间相互作用对最小切削厚度的影响. Maekawa 和 Itoh^[6] 通过降低碳原子的凝聚能来模拟微加工单晶 Cu 过程中金刚石刀具的磨损, 结果表明刀具磨损机理为工件-刀具原子间的相互扩散和磨损粒子

向刀具的重新粘着. Kim 和 Moon^[7] 采用 MD 方法模拟研究亚纳米切屑厚度下的微加工现象. Komanduri 等^[8] 通过 MD 模拟纳米切削单晶 Al 过程, 发现晶向和切削方向对材料的塑性变形模式有重要影响. Fang 等^[9] 进行单晶 Si 纳米切削的 MD 模拟, 发现切屑形成基于挤压.

然而, 由于计算效率和仿真规模的局限, 使得现有纳米切削 MD 的仿真结果很难达到与现实实验相匹配的最终目标. 因此, 扩大原子级模拟的规模已经成为当前纳米切削研究的焦点问题. 同时, 纳米切削是涉及宏观、介观甚至纳米尺度的复杂过程, 需要采用跨尺度的方法研究不同尺度条件的刀具-工件之间的作用机理. 针对工件和刀具间的纳米尺度接触区, 需要采用 MD 模拟的方法, 从原子的角度来分析纳米切削的变形过程. 而距接触区域较远的区域变形较小, 可利用连续介质力学理论模拟, 以节省计算时间. 近几年, 计算材料领域发展了很多连接原子和连续介质方法的跨尺度方法^[10, 11]. 然而这些多尺度方法多侧重于研究材料的力学性能^[12-15], 尚少应用到纳米切削领域.

本文基于桥域 (bridging domain, BD) 跨尺度理论, 建立了单晶 Cu 纳米切削的仿真模型, 研究了纳

* 国家杰出青年基金 (批准号: 50925521)、国家自然科学基金 (批准号: 50705023) 和哈尔滨工业大学科研创新基金 (批准号: HIT-NSRIF. 2009012) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: hmpen23@126.com

米切削单晶 Cu 加工过程中材料变形机理及切削速度对纳米切削的影响规律.

2. BD 法耦合模型

BD 法首先是由 Belytschko 和 Xiao 提出的一种跨尺度仿真实论,主要用于研究波的传播和裂纹的扩展问题^[16].该方法中,系统的整个能量为原子能量和连续介质能量之和.在原子尺度模型中,材料作为晶体描述,其变形符合经典牛顿定律.在宏尺度模型中,材料的非线性弹性变形采用有限元 (finite element, FE) 中的 Lagrangian 方法描述.其中,非线性本构方程由 Cauchy-born 规则给出^[17].

原子模型的控制方程通过著名的 Hamiltonian 正则运动方程的推导,可写为

$$m_I \ddot{d}_I = f_I^{\text{ext}} - f_I^{\text{int}}, \quad (1)$$

其中, d_I 为原子 I 的位移, f_I^{ext} 和 f_I^{int} 分别为外部和内部原子力.

在连续介质区,可得如下离散方程:

$$M_I \ddot{u}_I = f_I^{\text{extC}} - f_I^{\text{intC}}, \quad (2)$$

其中, M_I 是节点 I 的集中质量矩阵, u_I 是节点位移, f_I^{extC} 和 f_I^{intC} 分别为外部和内部节点力.

在 BD 区,整个 Hamiltonian 函数为原子和连续介质 Hamiltonian 函数的线性连接

$$H = (1 - \alpha)H^M + \alpha H^C \quad (3)$$

其中,权重函数 $\alpha(X) = l(X)/R$, 代表每个区域对整个 Hamiltonian 函数的贡献^[18]. $l(X)$ 和 R 分别为距 Γ^R 边界(进入桥区第一个原子)的距离和 BD 区的长度,如图 1 所示.

BD 区中原子区和连续介质区分别通过 Lagrange 乘子约束

$$g_I = \left\{ \sum_J N_J(X_J) u_{IJ} - d_{IJ} \right\} = 0, \quad (4)$$

其中, g_I 是 Lagrange 乘子, u_{IJ} 是单元节点位移, d_{IJ} 是 MD 原子位移.

在 Lagrange 乘子法中,系统的整个 Hamiltonian 函数为

$$H_L = H + \sum_I \lambda_I^T g_I, \quad (5)$$

其中, $\lambda_I = \{\lambda_{IJ}\}$ 为 Lagrange 乘子向量,其向量组分为原子 I 的位移.

由 Lagrange 乘子法得整个系统的耦合运动方程为

$$\bar{M}_I \ddot{u}_I = f_I^{\text{extC}} - f_I^{\text{intC}} - f_I^{\text{LC}}, \quad (6)$$

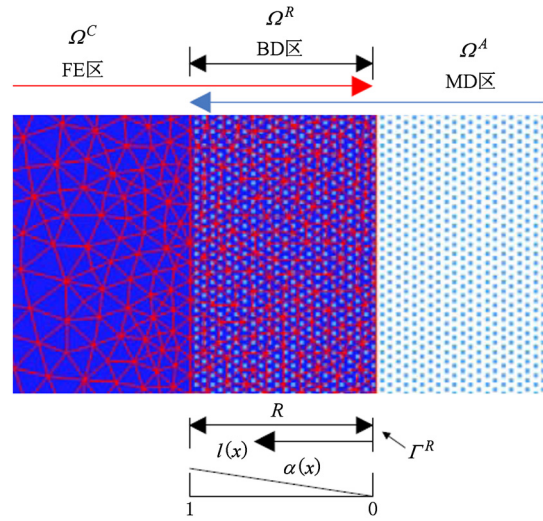


图 1 BD 法耦合模型

$$\bar{m}_I \ddot{d}_I = f_I^{\text{ext}} - f_I^{\text{int}} - f_I^{\text{L}}, \quad (7)$$

其中, $\bar{m}_I = \alpha(X_I) M_I, \bar{M}_I = (1 - \alpha(X_I)) m_I, f_I^{\text{LC}}$ 和 f_I^{L} 为由 Lagrange 乘子引入的约束

$$f_I^{\text{LC}} = \sum_J \lambda_J^T \frac{\partial g_J}{\partial u_I},$$

$$f_I^{\text{L}} = \sum_J \lambda_J^T \frac{\partial g_J}{\partial d_I}. \quad (8)$$

3. 仿真模型

跨尺度仿真分析是在高性能计算机上进行.图 2(a)为纳米切削 BD 跨尺度仿真模型,采用的程序为 LibMultiScale-1.3^[19].工件的上表面为(100), x 方向为晶向[100],作为刀具的切削方向; y 和 z 方向分别为晶向[010]和[001].其中工件尺度约为 29 nm × 44 nm × 4 nm,包含约 2.6×10^5 个原子,9216 个六面体单元和 10625 个节点.刀具尺度约为 7 nm × 9 nm × 4 nm,包含约 3.6×10^4 个原子.工件 Cu 原子间相互作用采用嵌入原子势 (EAM) 势^[20]描述,刀具和工件间与刀具 C 原子间分别采用 Morse 势^[21]描述.表 1 给出模拟中的主要计算参数.图 2 (b)显示切削速度 200 m/s,切削距离为 10 nm 时位移分布.在塑性变形较大的剪切区,MD 区到 FE 区的位移连续性变化.这表明原子区的高频波穿过 BD 区以低频波的形式进入连续介质区.工件材料位移的分布验证本多尺度模型 MD 和 FE 区间的耦合是有效的.

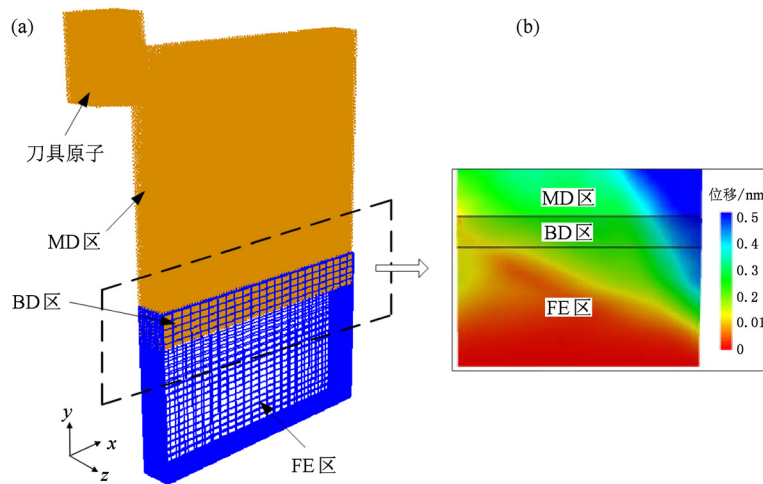


图2 BD法跨尺度纳米切削原理图 (a) 仿真模型; (b) 位移场, 切削速度 200 m/s, 切削距离 10 nm

表1 主要计算参数

参数	工件		刀具		切削深度 /nm	切削速度 $v/(m/s)$	系统温度 /K
	材料	晶向设置	材料	前角/(°) 后角/(°)			
BD法切削	单晶 Cu	(100)[100]	金刚石	6 6	5	100, 200, 400, 800	293

4. 结果和讨论

4.1. 材料去除机理分析

图3为切削速度为 200 m/s 时切削距离 s 分别为 1, 5 和 10 nm 时工件原子的变形情况, 图中云图为原子位移标量值, 箭头显示原子位移向量, 箭头方向表示位移矢量方向, 箭头大小标明位移大小. 从原子位移方向可把工件变形区分为三个区域: 切屑区 A, 位错形成区 B 和已加工表面区 D, 如图3(c)所示, 其中位错形成区是工件亚表层缺陷的主要形成区域. 切屑区工件原子位移与切削方向大约成 45° 角, 位错形成区与切削方向大约成 -45° 角, 已加工表面区的原子近似垂直于已加工表面的方向向下运动.

随着切削的进行, 与金刚石刀具接触的最外层 Cu 原子受到切削刀的挤压和内部 Cu 原子的作用, 使刀具前端和切削刀附近的 Cu 原子晶格受压发生扭曲变形. 当存储在变形晶格中的应变能超过原子间结合所需能量时, Cu 原子键发生断裂以释放晶格应变能, 如图3(a)刀尖与工件接触最大原子位移处所示. 从原子键断裂处工件原子运动分为两部分:

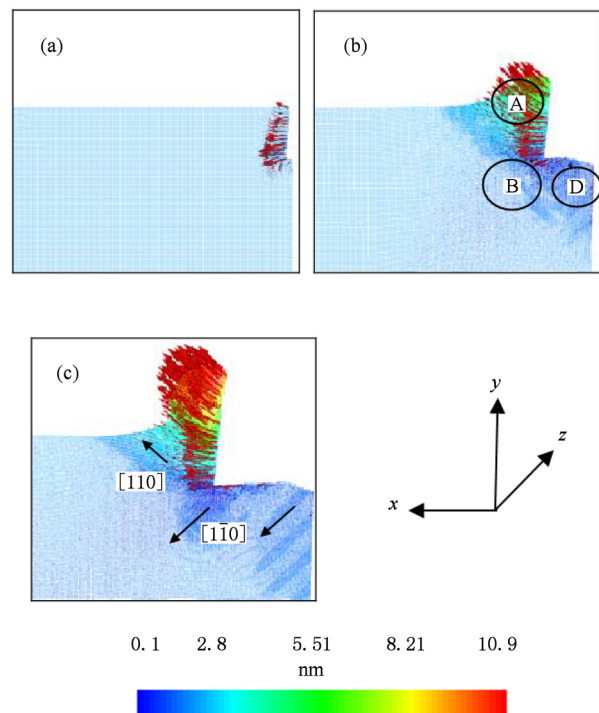


图3 不同切削距离下工件原子的变形情况 (a) $s = 1$ nm; (b) $s = 5$ nm; (c) $s = 10$ nm

一部分沿着前刀面向上向前运动逐渐形成切屑, 如图3(b)区域 A 处原子所示; 另一部分向下向前移

动,如图 3(b)区域 B 所示,且随着刀具的切过流回母体材料形成已加工表面.当变形过程中工件材料所受挤压产生的最大分切应力超过单晶 Cu 临界剪切应力时,工件晶格中便产生位错滑移来释放晶格应变能,如图 3(b)和(c)所示.位错主要产生在两个区域,即 A 区域和 B 区域.在 A 区域由于前刀面的挤压和剪切作用,在刀尖和工件接触的切屑根部首先形成位错,位错发射方向为 $[110]$,如图 3(c)所示.这部分位错穿过剪切区向前运动,直到到达自由表面消失.在 B 区域由于后刀面的挤压和剪切作用,在工件基体形成大量的位错,位错发射方向为 $[\bar{1}10]$,如图 3(c)所示.且随着切削的进行,这部分位错相对于刀具逐渐向后移动.对应 A 和 B 区域,我们可发现原子位移方向近似和位错的发射方向一致.刀具滑过后,已加工表面区域发生弹性恢复.此时大部分位错消失,但一部分位错由于表面的吸引流向已加工表面,并露出已加工表面使已加工表面变得粗糙不平,这些位错在加工表面的突出可看作是纳米切削可达到的表面粗糙度;另一部分位错残留在工件亚表层并和其他变形原子共同构成已加工表面的变质层,如图 3(c)所示.

4.2. 切削速度对工件变形的影响

图 4 显示切削距离为 10 nm 时不同速度下原子 y 方向位移的变化.在切削速度为 100 m/s 时,切屑前端工件原子由于刀具前刀面的挤压作用发生较大的堆积变形,如图 4(a)所示.这种堆积变形可看作是纳米切削加工后加工表面毛刺产生的原因.随着切削速度的提高,这种堆积变形逐渐减小,如图 4 中(b)—(d)所示.由图 4 还可看出,随着切削速度的提高,切屑变形系数越小.这主要是由于在小的切削速度下,切削过程产生的位错向前扩展的缘故,而在大的切削速度下位错尚没来得及堆积,切削就已经发生.

从已加工表面来看,切削速度为 100 m/s 时,已加工表面晶格缺陷最少.而随着切削速度的提高,工件已加工表面产生的滑移面深度变大.这点可从切削切入点处工件原子的变形方式看出,如图 4 圆圈所标区域.在切削速度为 100 m/s 和 200 m/s 时,该处工件原子朝着切削方向变形,也就是主要受刀具后刀面拉力作用;而在切削速度为 400 m/s 和 800 m/s 时,工件原子朝着切削反向变形,受到刀具大的挤压作用.这种挤压作用导致已加工表面变质层

加深.

同时可看出,工件产生大量的与切削方向成 45° 角的位错,如图 4 中曲线标注所示.且速度越大,这种位错传播得越深.但当切削速度为 800 m/s,远高于单晶 Cu 塑性波扩展速度^[22]时,切屑已不再是晶体状态,呈散乱状,如图 4(d)所示.该切削速度下,工件原子处在融化状态,而不是发生塑性变形,这与文献[22]所得结论一致.

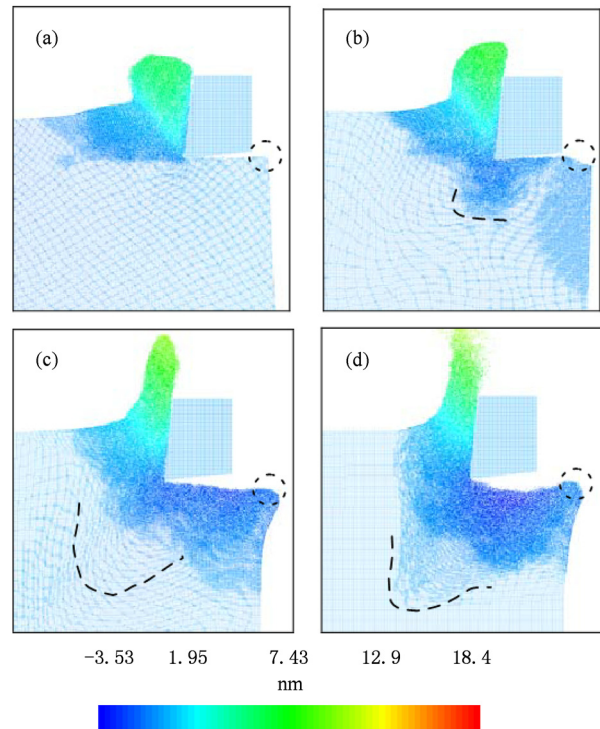


图 4 不同切削速度下原子 y 方向位移分布云图 (a) $v = 100$ m/s; (b) $v = 200$ m/s; (c) $v = 400$ m/s; (d) $v = 800$ m/s

4.3. 切削速度对原子受力分布的影响

工件材料原子受力为其周围 Cu 原子和刀具 C 原子作用力的合力.可通过原子受力大小和分布研究工件材料变形情况.图 5 为切削速度为 200 m/s 时原子受力分布云图.由图可看出,工件受 x 和 y 方向力主要集中在工件与刀具前刀面和后刀面接触的区域.由于受到前刀面和后刀面的挤压和剪切作用,工件原子在该区主要受压力作用.刀具经过以后,已加工表面的发生弹性恢复,工件表面所受压力得到一定的释放,导致已加工表面原子区域主要受拉力作用.

图 6 和 7 显示在切削距离 10 nm 时不同切削速度下工件原子 x 和 y 方向受力的统计分布结果.图

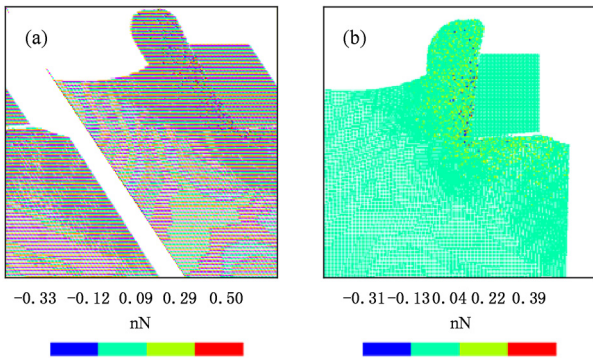


图5 切削速度为200 m/s下原子受力分布云图 (a) x向力; (b) y向力

中横坐标轴为每个原子受力大小,纵坐标轴为对应的原子数.从两幅图中可看出,工件原子所受力主要分布在 $-0.5\sim 0.5$ nN之间,近似服从 Gaussian 分布.从两幅图的局部放大图中可看出,四种不同切削速度下工件 x 和 y 方向原子受力分布相似.略有不同的是:在切削速度为100 m/s和200 m/s时,工件原子 y 方向受力分布差别不明显.

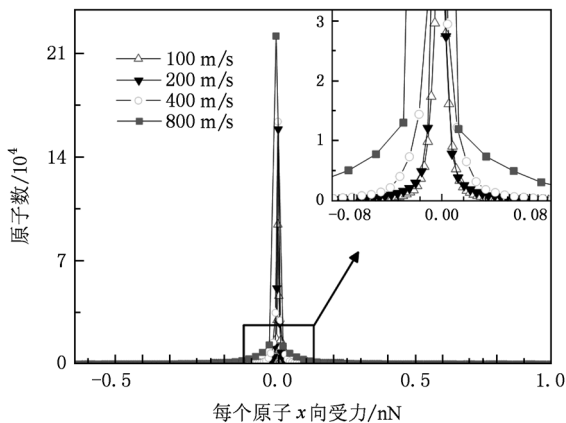


图6 不同切削速度下原子 x 方向受力分布

图6和图7表明工件大部分原子受力约为零,即工件的大部分原子发生弹性变形.且高的切削速度对应最多的原子受力值偏离零值越远,即受力结果偏离零值的原子越多.这表明高切削速度下,受影响的工件原子数增多,这点可以从温度角度来解释.切削速度提高,工件原子的平均速度增加,切削

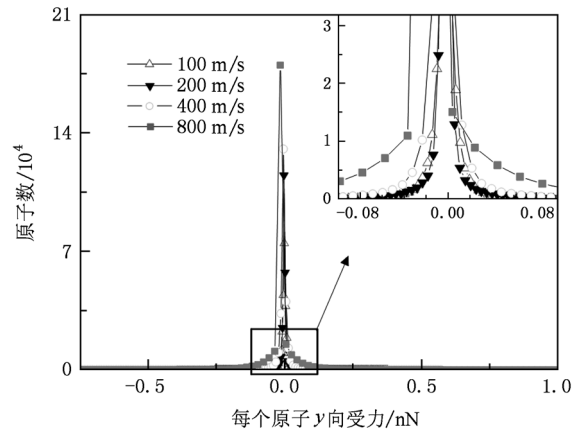


图7 不同切削速度下原子 y 方向受力分布

区域的温度升高,导致原子的活性增强,增加对周围原子的影响.从图中也可看出,高的切削速度对应曲线与横坐标轴所围成的面积较大,即高切削速度下,工件受力原子数增多.这是由于高速切削条件下,切削区的工件原子进行重新排布的时间很短,导致切削区域位错堆积,进而增加该区域工件材料的强度.同时较高切削速下变形系数小,形成的切屑高,对刀具运动的阻碍越大,也导致原子所受力的增加.这同样验证了4.2节的结论:工件原子受力越大,在切削区产生的位错越多.

5. 结 论

本文基于BD理论建立了纳米切削单晶Cu的跨尺度模型,该模型既实现了对纳米切削的原子级模拟,同时扩大了规模,获得了较大空间尺度上的模拟结果.模型减小了边界条件对计算结果的影响,缩短了计算时间.从原子位移角度研究了纳米切削单晶Cu的变形机理,把工件变形分为切屑区、位错形成区和已加工表面区三个区域.研究表明:位错形成区是工件亚表面缺陷的主要形成区域.切削速度远高于材料的塑性波扩展速度时,切屑和已加工表面发生非晶相变.随着切削速度的提高,工件受力原子数增多,工件切屑变形系数减小,工件切削区晶格缺陷和已加工表面变质层厚度增加.

[1] Li R, Hu Y Z, Wang H, Zhang Y J 2008 *Chin. Phys. B* **17** 4253

[2] Xie H X, Wang C Y, Yu T, Du J P 2009 *Chin. Phys. B* **18** 251

[3] He A M, Shao J L, Wang P, Qin C S 2010 *Acta Phys. Sin.* **59**

- 8836 (in Chinese) [何安民、邵建立、王 裴、秦承森 2010 物理学报 **59** 8836]
- [4] Wang H L, Wang X X, Wang Y, Liang H Y 2007 *Acta Metall. Sin.* **43** 259 (in Chinese) [王海龙、王秀喜、王 宇、梁海弋 2007 金属学报 **43** 259]
- [5] Ikawa N, Shimada S, Tanaka H, Ohmori G 1991 *Ann. CIRP* **40** 551
- [6] Maekawa K, Itoh A 1995 *Wear* **188** 115
- [7] Kim J D, Moon C H 1996 *J. Mater. Process. Technol.* **59** 309
- [8] Komanduri R, Chandrasekaran N, Raff L M 1999 *Ann. CIRP* **48** 67
- [9] Fang F Z, Wu H, Liu Y C 2005 *Int. J. Mach. Tools Manuf.* **45** 1681
- [10] Miller R E, Tadmor E B 2002 *J. Comput. Aided Mater. Des.* **9** 203
- [11] Liu W K, Karpov E G, Zhang S, Park H S 2004 *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **193** 1529
- [12] Zhao X, Li J H, Wang S Q, Zhang C P 2008 *Acta Metall. Sin.* **44** 1455 (in Chinese) [赵 星、李久会、王绍青、张彩曙 2008 金属学报 **44** 1455]
- [13] Jiang W G, Li J W, Su J J, Tang J L 2007 *Acta Mech. Solida Sin.* **28** 375 (in Chinese) [江五贵、黎军顽、苏建君、汤井伦 2007 固体力学学报 **28** 375]
- [14] Wang H T, Qin Z D, Ni Y S, Zhang W 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1057 [王华滔、秦昭栋、倪玉山、张 文 2009 物理学报 **58** 1057]
- [15] Shao Y F, Wang S Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7258 (in Chinese) [邵宇飞、王绍青 2010 物理学报 **59** 7258]
- [16] Xiao S P, Belytschko T 2004 *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **193** 1645
- [17] Tadmor E B, Ortiz M, Phillips R 1996 *Philos. Mag.* **A 73** 1529
- [18] Anciaux G, Coulaud O, Roman J 2006 *Proceedings of ICPP 2006, Columbus, OH, United States* 2006 p473
- [19] Anciaux G <http://libmultiscale.gforge.inria.fr/index.html> [2008]
- [20] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [21] Girifalco L A, Weizer V G 1959 *Phys. Rev.* **114** 687
- [22] Shimizu J, Zhou L B, Eda H 2002 *J. Mater. Process. Technol.* **129** 19

Multiscale simulation of nanometric cutting of single crystal Cu based on bridging domain method*

Liang Ying-Chun Pen Hong-Min[†] Bai Qing-Shun Lu Li-Hua

(School of Mechatronics Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150001, China)

(Received 29 October 2010; revised manuscript received 14 December 2010)

Abstract

One of the significant methods of multiscale simulation named bridging domain method which is a mixed atomistic-continuum formulation is reviewed. The mode related to atomistic/continuum coupling is introduced. The coupled method with the treatment of the overlapping subdomain is discussed, in which different scaling parameters (weigh factors) are adopted to calculate the energy of the system in the overlapping subdomain and to constrain the atomic and the continuum displacements by the Lagrange multiplier method. A bridging domain model is set up to investigate the effect of cutting speed on chip and workpiece atom force distribution in the nanometric cutting of single crystal copper. Simulation results show the cutting deformation coefficient decreases and the workpiece atom force increases with the increase of cutting speed. In addition, the machined surface qualities at different cutting speeds are investigated. The multiscale model and simulation of nanometric cutting are accomplished based on the bridging domain method, which lays a theoretical foundation for exploring the trans-scale simulation of nanometric cutting.

Keywords: bridging domain, nanometric cutting, single crystal copper, cutting speeds

PACS: 02. 60. Cb, 47. 11. Fg, 47. 11. Mn, 81. 20. Wk, 61. 72. Lk

* Project supported by the National Science Fund for Distinguished Young Scholars of China (Grant No. 50925521), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50705023) and the Natural Scientific Research Innovation Foundation in Harbin Institute of Technology (Grant No. HIT.NSRIF.2009012).

[†] Corresponding author. E-mail: hmpen23@126.com