

重复加工对单晶镍表面形貌及亚表面缺陷的影响

任洁^{1,2}, 郝明锐³, 梁国星², 吕明²

(1. 太原工业学院 机械工程系 现代制造研究所, 山西 太原 030008)

(2. 太原理工大学 机械与运载工程学院 精密加工山西省重点实验室, 山西 太原 030024)

(3. 中国煤炭科工集团 太原研究院有限公司, 山西 太原 030006)

摘要: 通过分子动力学模拟对重复纳米加工单晶镍中的表面形貌、亚表面损伤和刀具受力情况进行了分析。并通过纳米划痕实验适当验证了理论分析的结论。对加工中一系列原子的坐标进行追踪, 揭示了重复加工时表面凹槽的形成及变化原因。通过共近邻分析和位错提取技术, 得出在单晶镍纳米加工中, 重复加工一次会对工件亚表面质量有所改善, 而重复加工两遍则基本没有区别。同时, 刀具在第 1 次加工中所受切向力和法向力明显较大, 而后的 2 次重复加工则刀具受力基本相同。采用原子力显微镜对纳米划痕实验后的单晶镍进行表面粗糙度检测, 发现重复一次加工会适当地提高加工后工件表面质量。

关键词: 单晶镍; 分子动力学; 纳米划痕; 多次重复; 表面形貌

中图分类号: TG146.1*5

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2021)08-2897-08

单晶镍由于优良的磁性、光电性和可塑性等, 被广泛地用于航空航天以及磁传感磁记录方面^[1-3]。其使用领域常涉及到超精密加工及纳米加工^[4,5]。然而, 由于实验设备和实验条件的限制, 现有的超精密加工和纳米加工往往难以控制, 对于实验中的现象是体系本质的特征还是由于实验条件和杂质导致的也无法判定^[6]。分子动力学分析已经成为研究纳米加工的一种行之有效的办法。

Eder^[7-9]通过多磨料颗粒对粗糙表面 Fe 的纳米磨削, 提出了一种定量的分子动力学方法, 说明磨料粒度的初始几何类型及其运动学特性对最终表面质量影响很大。

Markopoulos 和 Karkalos^[10-13]采用分子动力学方法, 对金刚石磨料颗粒对铜的磨削进行了模拟。深入研究了切削深度对切屑形成、切削力和工件温度的影响。Shimizu^[14]研究了金刚石磨料超高速磨削铝时磨料磨损过程的分子动力学模拟。仿真结果表明, 当加工速度超过塑性波的材料静态传播速度时, 塑性变形减小, 其机理与普通磨削过程完全不同。实验结果还表明, 当加工速度超过塑性波的材料静态传播速度时, 表面完整性得到改善。房丰州(F. Z. Fang)教授及其团队^[15,16]的研究侧重于对单晶锗、单晶硅和非晶合金等的纳米压痕仿真, 研究了衬底在压痕过程中的变形行为。研究了压痕深度、加载速度、压痕半径、压痕温度和压痕与纳米材料的相互作用对压痕过程的影响。哈尔滨工业大学的梁迎春(Y. C. Liang)团队^[17,18]主要致力于纳米加工过程中的亚表面损伤研究, 通

过分析加工过程中的单原子势能曲线, 得出原子的变形程度, 进而定量计算出亚表面变形层深度。

在以往基于单晶材料纳米加工的分子动力学研究中, 大多数只研究了单次加工下仿真结果, 并未对多次加工进行关注。而实际加工中, 无论是宏观加工还是微纳米加工, 都存在多次走刀, 粗加工到精加工等实现表面质量的情况。而多次加工过程中加工次数、加工方法、每次进给量等都直接影响加工精度。这是本研究的主要目的。

1 仿真模型

多次重复加工的分子动力学仿真模型如图 1 所示。大规模原子分子并行模拟器 LAMMPS^[19]用于分子动力学模拟, 开源工具 OVITO^[20]用于实现原子数据的可视化。为了更加贴近之后的纳米划痕实验, 仿真刀具采用和实验中玻氏压头相同的正三棱锥形状, 棱面与中心线夹角为 65.3°, 底边棱面与深度的比值为 7.53。工件为单晶镍, 根据镍原子的晶胞尺寸, 尺寸设置为 21.2 nm×24.7 nm×10.6 nm 的长方体。从下到上依次分为边界层、恒温层及牛顿层。工件模型晶向为 x -[100]、 y -[010]、 z -[001]取向。在(001)平面上模拟了 [100]方向的重复加工过程。

重复加工过程为: 以刀具按照加工速度 200 m/s, 加工深度为 1 nm, 第 1 遍加工完工件后, 沿着 z 轴正方向抬起, 向 x 正方向运动, 接着沿 $-z$ 方向回到刀具

收稿日期: 2021-01-26

基金项目: 山西省高等学校科技创新项目 (2019L0926)

作者简介: 任洁, 女, 1985 年生, 博士, 副教授, 太原工业学院, 山西 太原 030008, 电话: 0351-3566033, E-mail: rjll5277@163.com

起始位置,再按照相同速度相同深度重复加工第 2 遍。加工完成后刀具从上述路径接着回到刀具起始位置,完成重复的第 3 遍加工。加工参数如表 1 所示。

2 数据与分析

2.1 表面形貌

重复加工过后工件的表面形貌如图 2 所示。图中每组图形对应一遍重复加工,上图为工件沿刀具中心剖开的切片图,下图为工件俯视图,为了观察直观,去掉了刀具原子,工件根据 z 方向进行着色。

因为 3 次重复加工的深度相同,所以刀具最低处在重复加工中保持不变。但据图 2 可知,刀具经过的已加工表面,第 1 次加工的表面高度要明显高于第 2 次和第 3 次的已加工表面。在刀尖进过的区域,第 1 次加工形成的凹槽不明显,经过第 2 次和第 3 次重复加工过后,凹槽更为明显,如图中矩形框中所示。刀具前方磨屑原子也随着重复加工次数的增多而增多。

在分子动力学模拟重复加工时,刀具是三棱锥,并且棱面向着加工方向。这是完全按照之后的实验来进行的模拟。刀具越靠近尖端,对工件作用的原子越多,作用力越大。工件在经过刀具挤压作用时,由于内能增加,使得一部分原子脱离原来的晶格结构,向刀具前方和两边聚集,形成磨屑和隆起。在刀具经过这一区域后,工件原子在弹性作用下会有一部分恢复到原来的晶格位置。所以会产生图 2a 中矩形框所示情况,即在经过第 1 次加工过后,刀具尖角形成的凹槽被弹性变形恢复的原子覆盖。之后的重复加工会对弹性恢复的原子进行作用,所以第 2 次加工过后形成的槽宽明显大于第 1 次加工,但第 3 次重复加工后槽宽

相对于第 2 次变化不大,这是由于通过 2 次加工过后,多数待加工原子已经形成切屑和隆起,第 3 次加工刀具作用的原子较少。

通过追踪重复加工过程中刀尖下方正对着的工件表层一系列原子在加工过程中的 y 坐标变化,可以很好地再现槽宽变化的原因,如图 3 所示。

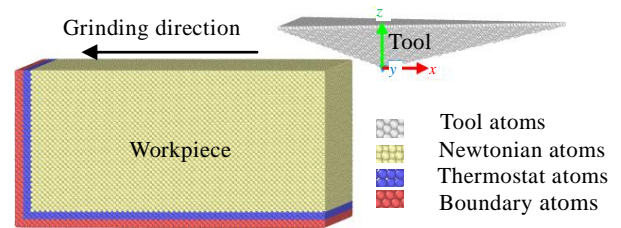


图 1 单晶镍纳米加工的分子动力学模拟模型

Fig.1 Molecular dynamics simulation model of the nanomachining of monocrystalline nickel

表 1 单晶镍纳米加工的分子动力学模拟条件

Table 1 Molecular dynamics simulation conditions of nanomachining of monocrystalline nickel

Factor	Workpiece	Tool
Material type	Monocrystalline nickel	Diamond
Dimension/nm	21.2×24.7×10.6	Positive triangular pyramid
Atom number	508 740	35 382
Initial temperature/K		293
Processing speed/m s ⁻¹		200
Depth of processing/nm		1
Depth of grind/nm		0~18
Time step/fs		1

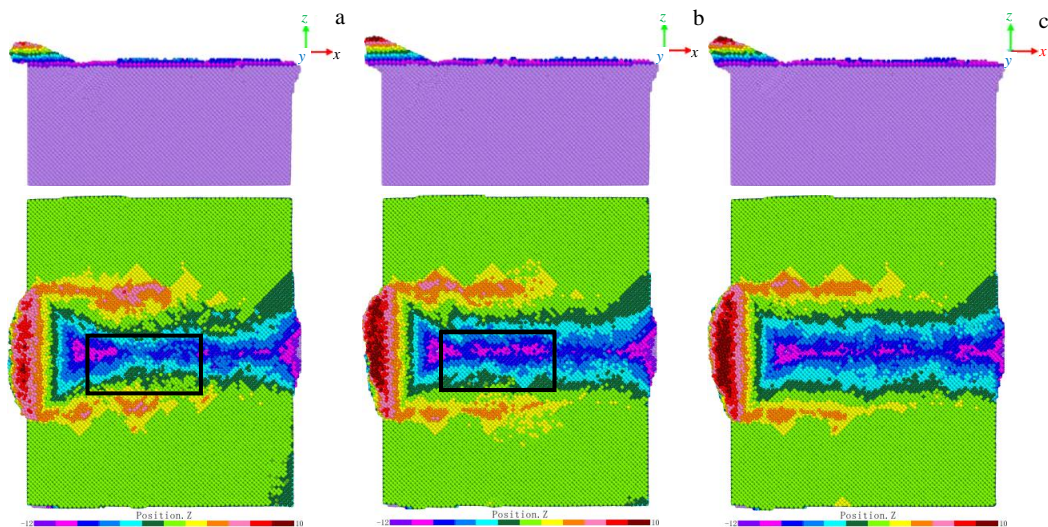


图 2 重复磨削后工件的表面形貌

Fig.2 Surface topographies of the workpiece after repeated grinding: (a) first pass, (b) second pass, and (c) third pass

图 3 所示为研究的众多原子中比较典型的原子的 y 坐标变化。图中 0~202 步为第 1 次加工过程。202~229 步为刀具回归过程，在这期间，工件不受刀具作用。229~428 步为第 2 次加工过程。428~454 步为刀具回归起始点过程。454~654 步为第 3 次加工过程。

从图中可以得知，原子 a、e、f 在第 1 次加工过程中，受刀具的挤压，原子向工件两侧流动，y 坐标偏离原点，绝对值增大。当刀具经过原子以后，特别是在刀具离开工件，回归初始位置的过程中，原子发生不同程度的弹性变形，y 坐标向原点恢复，绝对值减少。其中原子 a 和原子 f 在恢复一段距离后和周围原子形成稳定的晶格结构，y 坐标不再变化，在新的原子晶格中开始第 2 次加工。原子 e 则恢复到了 y 值为 0 的位置，通过对原子 e 的坐标进行追踪，发现原子 e 在第 1 次加工过后 z 值减小，即在刀具的挤压作用下进入下方晶格，形成稳定的亚表面结构，因为原子 z 坐标一直保持在 -1.3 nm，在之后的加工深度为 1 nm 的重复加工中并没有被刀具影响，如图 4 所示。

原子 b 和原子 c 在第 1 次加工过程中，受刀具挤压作用，向刀具两边流动形成隆起，在刀具离开后发生较小的恢复。在第 2 次重复加工时，继续受刀具作用，远离 y 坐标原点，向刀具两侧运动，第 3 次加工呈现同样情形。但相比较第 1 次加工，第 2 次和第 3 次的重复加工 y 坐标绝对值增量不大。

2.2 亚表面损伤

图 5a, 5b, 5c 分别为 3 次加工后的单晶镍内部缺陷情况。每组中有 4 幅图，其中图 5a₁~5c₁、5a₂~5c₂ 小图为根据共邻近分析 CAN 技术提取的磨削深度为 1 nm，磨削速度为 200 m/s 时的单晶镍内部缺陷。为了更清楚

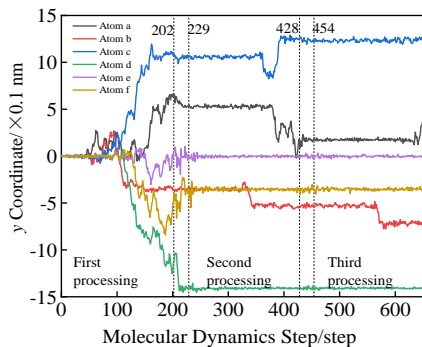


图 3 重复加工过程中部分原子 y 坐标变化

Fig.3 Variation of partial atom y coordinates during repeated machining

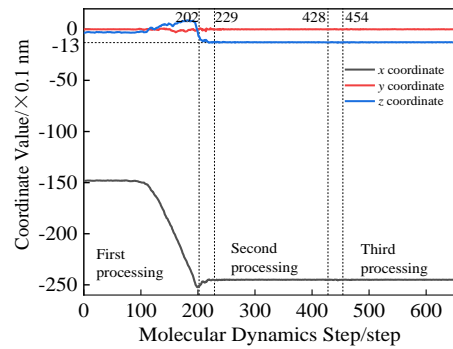


图 4 原子 e 的坐标变化

Fig.4 Coordinate changes of atom e

地展示单晶镍内部缺陷情况，图形中去掉了 fcc 结构的镍原子。剩余红色原子代表 hcp 结构，蓝色原子代表 bcc 结构，灰色原子是其他原子，包括表面原子、位错原子、空位原子。每组图中图 5a₁~5c₁ 为刀具磨削到 20 nm 时的工件内部缺陷，图 5a₂~5c₂ 为驰豫一段时间后的工件内部缺陷。图 5a₃~5c₃、5a₄~5c₄ 所示为根据位错提取 DXA 分析的单晶镍内部缺陷，图 5a₃~5c₃ 为磨削距离为 20 nm 时的内部缺陷，图 5a₄~5c₄ 为驰豫过后的工件内部缺陷。

由图 5a₁ 可知，当经过第 1 次加工时，工件内部呈现多种缺陷结构，有层错、正四面体堆垛层错 (SFT)、空位和原子团簇等。但由图 5a₃ 可知，层错边缘为肖克利不全位错，这种不全位错极易在滑移系上移动，使层错扩大与缩小。因此，在驰豫一段时间后，从图 5a₂ 中可以看出，层错随着不全位错的移动已经消失，但一些稳定的内部缺陷，如空位和 SFT 还存在于工件内部。

当工件进行第 2 遍重复加工时，因为所作用的原子相对第 1 遍加工时明显减少，所以内部缺陷变化不大，但还是有一些缺陷比如 SFT 结构发生了变化。SFT 结构在第 2 遍加工时，由于受力使得结构发生了破坏，原子进行了重组。同时还有一些空位的数量和位置发生了变化。对比图 5a₂ 和 5b₂ 可知，重复一遍加工时，亚表面缺陷略有所改善。

当工件进行第 3 遍重复加工，虽然在刚刚加工完成时，亚表面缺陷看起来不同，但驰豫一段时间后，对比图 5b₂ 和 5c₂ 可知，亚表面缺陷基本完全相同。所以可以认为，重复第 3 遍加工时，工件内部结构基本不发生变化。

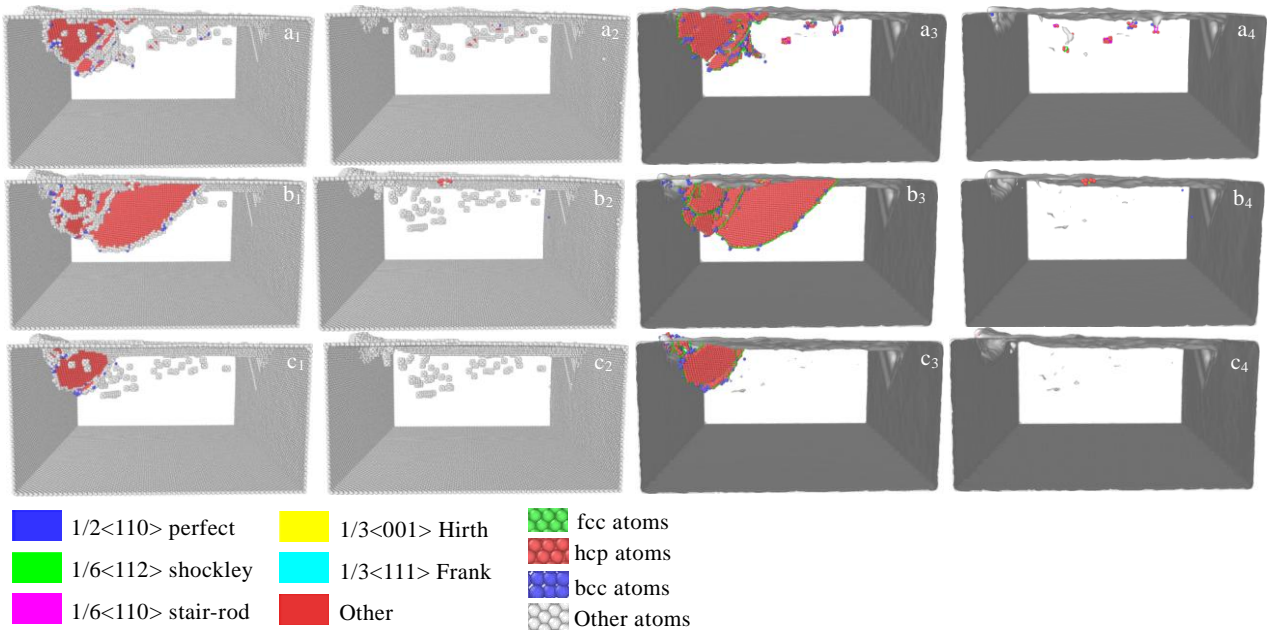


图 5 3 次重复加工后的亚表面损伤情况

Fig.5 Subsurface damage after three repeated processing: (a) first pass, (b) second pass, and (c) third pass

因此，仅从亚表面缺陷角度考虑，重复 1 遍加工可以适当地提高亚表面质量，而重复 2 遍加工则对亚表面没有影响，反而会降低加工效率。

2.3 刀具受力分析

刀具所受的力主要取决于作用的工件原子数量的多少。由图 6 重复加工中的刀具受力分析可知，在第 1 遍加工时，刀具切向力和法向力均大于之后的重复加工，这是由于第 1 次加工所作用的工件原子数最多，到第 2 次加工时，有一部分原子已经在切屑和亚表层等一些位置形成稳定的晶体结构，不参与之后的重复加工。第 2 次重复加工刀具所受的力虽然在一部分阶段高于第 3 次重复加工所受的力，但高出幅度很小并且持续距离短，这是因为在第 2 次加工过后，由于弹性变形恢复的原子数量已经非常小。因此从加工效率考虑，进行一次重复加工可以适当改善表面质量和亚表面质量，而大于一次的重复加工没有必要。

在加工距离到达最末时，重复第 2 次加工和第 3 次加工的切削力急剧增大，这是由于在加工到最末时，刀具与滞留在工件表面的切屑相接触，进而产生急剧增大的力。

3 纳米划痕实验

3.1 实验准备

实验材料为单晶镍，尺寸为 $(10 \pm 0.1) \text{ mm} \times (10 \pm 0.1) \text{ mm}$ ，厚度为 $(1.0 \pm 0.05) \text{ mm}$ 。洁净度约 1000 级，表面

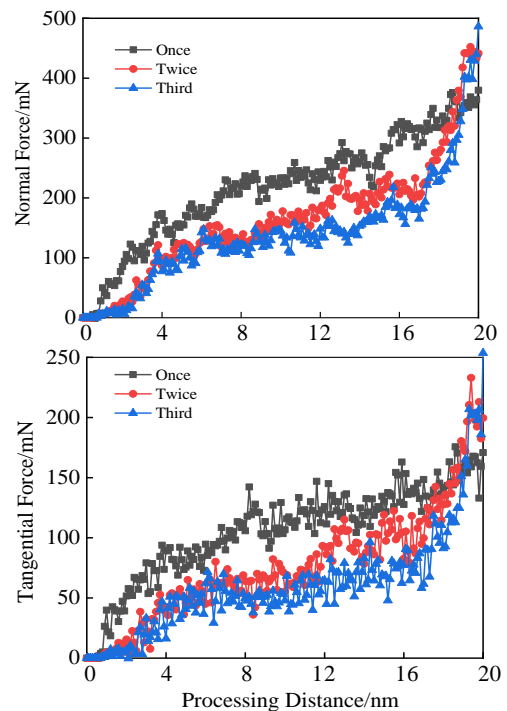


图 6 3 次重复加工中的刀具受力分析

Fig.6 Analysis of tool force in three-pass repeated machining

粗糙度小于等于 10 nm。根据实验需要，单晶镍采购自合肥科晶材料技术有限公司，如图 7 所示。3 块单晶镍分别为 $\langle 100 \rangle^{\pm 3^\circ}$ ， $\langle 110 \rangle^{\pm 3^\circ}$ ， $\langle 111 \rangle^{\pm 3^\circ}$ 3 种晶面。

实验中使用到的仪器主要有: 纳米力学测量系统, 来自于清华大学仪器共享中心。采用了其中的标准模块, 即最大载荷为 500 mN。原子力显微镜, 来自于太原理工大学新材料界面国家实验中心。

3.2 实验设计

由于实验设备的限制, 纳米级别的加工在现阶段实验中很难呈现。本实验中采用纳米划痕的方式表示单晶镍的材料去除过程。

根据 ISO14577 标注中规定, 纳米划痕深度要大于工件表面粗糙度的 20 倍, 根据单晶镍材料的表面粗糙度计

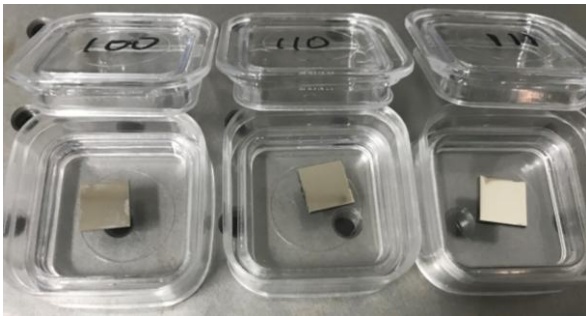


图 7 单晶镍实验材料

Fig.7 Monocrystalline nickel experimental material

算可得划痕深度要大于 200 nm。并且要求划痕之间距离是最大直径的 5 倍以上, 所以划痕间距要大于 1 mm。

由于进行纳米划痕的纳米力学测量系统, 只能使用玻氏压头进行划痕, 玻氏压头尖端半径为 20 nm, 由于长期使用的磨损, 压头半径会大于这个出厂值。进而也导致了划痕宽度增加, 要求的划痕间距扩大。

由此可知, 受材料制备时表面粗糙度和纳米划痕仪器的限制, 纳米划痕实验的数量级在几百纳米甚至微米之间。而分子动力学仿真, 由于计算机水平的限制, 一般仿真级别在几百纳米级别, 因此用纳米划痕实验模拟纳米加工中材料的去除有一定的近似性, 但是是现阶段模拟纳米加工接近的方法之一。

根据分子动力学对单晶镍纳米加工的仿真模拟, 结合实际实验条件, 设计纳米划痕实验方案如表 2 所示。

因为纳米力学测量系统不能按照深度控制压头, 只能根据载荷控制压头下降位移, 所以在进行划痕实验前先进行了纳米压痕实验。通过纳米压痕实验, 得出了压头在(100)晶面下压入单晶镍 500 mN 需要的载荷 N 。通过纳米压痕实验得出: $N=7.5$ mN 为了实验说明的清晰明了, 划痕的名称用表中序号代替, 在序号后加划痕重复次数以说明。

表 2 实验方案设计

Table 2 Design of experimental scheme

Scratch No.	Crystal plane	Loading method	Load, N	Speed/ $\mu\text{m min}^{-1}$	Scratch length/ μm	Remarks
1	(100)	Constant	-	300	500	
21	(100)	Constant	-	300	500	
22	(100)	Constant	-	300	500	Repeated processing

3.3 多次重复划痕对表面完整性的影响

划痕 1 和划痕 2 为恒定式加载, 加载载荷为 7.5 mN, 划痕速度为 500 $\mu\text{m}/\text{min}$ 。不同的是, 划痕 2 在以上述参数进行一遍划擦以后, 压头空载返回起始位置, 再以相同的载荷和速度进行了第 2 次重复划擦。只进行第 2 次划擦而不进行 3 次或以上划擦, 是因为在文中 2.2 节中得出, 重复 1 遍加工可以适当地提高表面质量, 改善亚表面缺陷, 但重复 2 遍加工对亚表面基本没有影响。

由实验数据可以得出图 8 所示 2 次重复划痕中的压头深度变化图。虽然重复加工 2 次的载荷相同, 但由于第 1 次压头作用的单晶镍原子较多, 所以相同载荷下, 压头深入工件距离较少。在第 2 次重复加工时, 压头作用的原子多为第 1 次加工过后因弹性变形恢复位置的原子, 数量较第 1 次加工明显减少, 所以压头在相同载荷的情况下, 压入工件距离增大。这一实验现象与分子动力学模拟得出结论相同。

对纳米划痕过后的单晶镍工件, 采用原子力显微镜 (AFM) 进行了表面粗糙度测量。粗糙度的选取与测量原理如图 9 所示。由于划痕长度为 500 μm , 超出了 AFM 量程, 所以图 9 示意图中划痕整体图片由仪

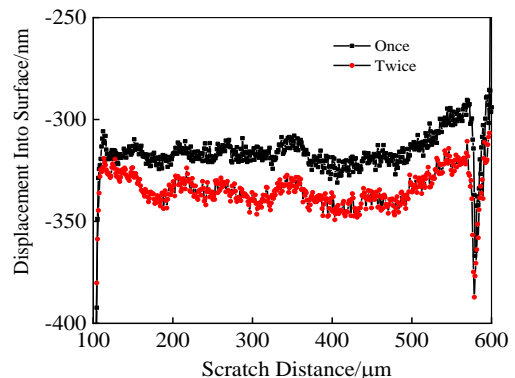


图 8 2 次重复划痕中压头深度变化

Fig.8 Indenter depth change in secondary repeating scratches

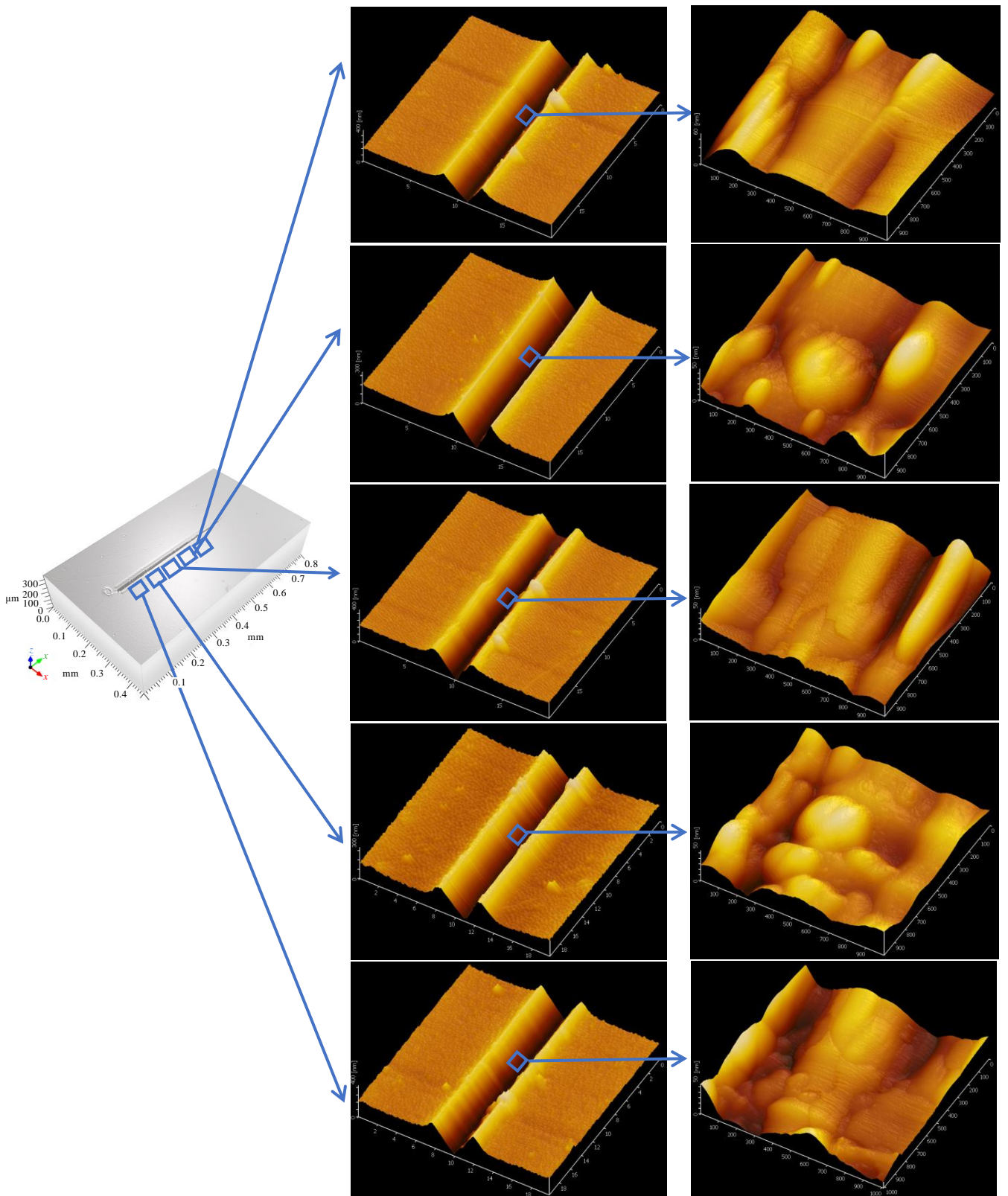


图 9 粗糙度的选取与测量原理图

Fig.9 Schematic diagram of roughness selection and measurement

器三维轮廓仪拍摄。从整条划痕中选取 5 个部分, 每部分大小为 $20\ \mu\text{m} \times 20\ \mu\text{m}$ 。如图中中间一列图片, 从图中可以看出, 由于划痕深度较深, AFM 扫描划痕后, 在划痕两侧隆起后会有拖尾, 因此对划痕最深处显示不清。故再从 5 部分中选取划痕最低点的 $1\ \mu\text{m} \times 1\ \mu\text{m}$ 大小的范围进行扫描, 根据每部分得出的表面粗糙度进行整理, 得出图 10 单次划痕与重复 1 次划痕表面粗糙度的比较。

从图 10 可以得知, 对比划痕 1 与划痕 22, 重复 1 次划痕后, 压头尖端对应的划痕底部表面粗糙度值减小, 即表面质量有所改善。这也验证了分子动力学关于重复加工模拟中得出的结论。

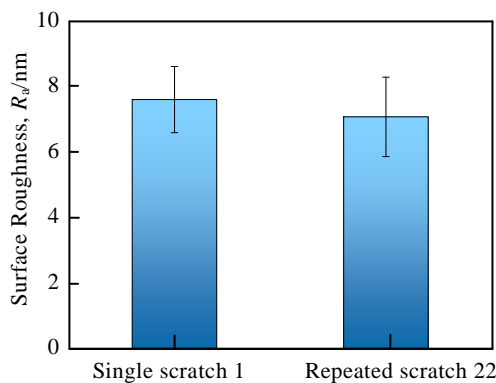


图 10 单次划痕与重复 1 次划痕的表面粗糙度比较

Fig.10 Comparison of surface roughness between single scratch and repeated scratch

4 结 论

1) 通过对纳米重复加工过程中, 单个原子坐标变化的追踪, 揭示了重复加工中表面凹槽的形成机理, 以及多次加工时凹槽形貌的变化原因。说明纳米加工中材料的去除是通过原子之间原子间的断裂和重组完成的。

2) 从亚表面缺陷角度考虑, 重复 1 遍加工可以适当减少亚表面缺陷, 提高亚表面质量, 而重复 2 遍加工则对亚表面质量基本没有影响。

3) 在本研究参数下, 纳米划痕实验证明重复划痕 1 次单晶镍会略微提高划痕后的表面质量。

参考文献 References

- [1] Ling L, Han Y, Zhou W. *Metall Mater Trans A*[J], 2015, 46(1): 354
- [2] Jiang Fang(蒋 放), Liao WengMing(廖文敏). *Found Technol* (铸造技术)[J], 2017, 38(8): 1822
- [3] Cheng Zhida(程志达), Zhu Jing(朱 静), Sun Tieyu(孙铁昱). *Acta Phys Sin*(物理学报)[J], 2011, 60(3): 037 504
- [4] Maekawa K, Itoh A. *Wear*[J], 1995, 188: 115
- [5] Zhang W W, Guo G, Huang Y *et al.* *Adv Mater Res*[J], 2011, 154-155: 1336
- [6] Jing Zhuji(金洙吉), Xie Fei(谢 飞), Guo Xiao(郭 晓). *Nanotechnology and Precision Engineering*(纳米技术与精密工程)[J], 2016, 14(6): 410
- [7] Eder S, Bianchi D, Cihak-Bayr U *et al.* *Computer Physics Communications*[J], 2014, 185: 2456
- [8] Eder S, Feldbauer G, Bianchi D *et al.* *Physical Review Letters*[J], 2015, 115: 025 502
- [9] Eder S, Cihak-Bayr U, Pauschitz A. *Wear*[J], 2015, 340: 25
- [10] Markopoulos A P, Savvopoulos I K, Karkalos N E *et al.* *Frontiers of Mechanical Engineering*[J], 2015, 10: 168
- [11] Karkalos N E, Markopoulos P A. *Current Nanoscience*[J], 2017, 13(1): 3
- [12] Karkalos N E, Kundrák J, Markopoulos A P. *Int J Artif Intell*[J], 2017, 15(1): 55
- [13] Markopoulos A P, Karkalos N E, Papazoglou E L. *Archives of Computational Methods in Engineering*[J], 2019(1): 1
- [14] Shimizu J, Zhou L, Muroya A *et al.* *Journal of Materials Processing Technology*[J], 2002(1): 19
- [15] Zhu P Z, Qiu C, Fang F Z *et al.* *Applied Surface Science*[J], 2014, 317: 432
- [16] Wang J, Fang F Z, Zhang X. *Nanoscale Research Letters*[J], 2017, 12(1): 41
- [17] Liang Y C, Wang Z G, Chen M J *et al.* *Advanced Materials Research. Trans Tech Publications*[J], 2011, 239: 3236
- [18] Pen H M, Liang Y C, Luo X C *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2011, 50(12): 3431
- [19] Plimpton S. *J Comput Phys*[J], 1995, 117: 1
- [20] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18: 01 501

Influence of Repeated Processing on Surface Morphology and Sub-surface Damage of Monocrystalline Nickel

Ren Jie^{1,2}, Hao Mingrui³, Liang Guoxing², Lv Ming²

(1. Institute of modern Manufacturing, Department of Mechanical Engineering, Taiyuan Institute of Technology, Taiyuan 030008, China)

(2. Shanxi Key Laboratory of Precision Machining, College of Mechanical Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

(3. Taiyuan Research Institute, China Coal Technology and Engineering Group, Taiyuan 030006, China)

Abstract: The research on the surface morphology, sub-surface damage and tool force in the repeated nanofabrication of monocrystalline nickel was conducted via molecular dynamics. And the conclusion of the theoretical analysis was properly verified by the nano-scratch experiment. The coordinates of a series of atoms during processing was traced, and the formation of grooves on the surface and the reasons for the changes during repeated processing were revealed. Through CAN analysis and DXA technology, it is concluded that in monocrystalline nickel nano-processing, repeated processing once will improve the sub-surface quality of the workpiece, but there is basically no difference between repeated processing twice. At the same time, the tangential force and the normal force of the tool in the first machining are obviously larger, and the force of the tool is basically the same in the subsequent two repeated machining. The surface roughness of the single crystal nickel after the nano-scratch experiment was detected by an atomic force microscope, and it is found that repeated processing once would appropriately improve the surface quality of the processed workpiece.

Key words: monocrystalline nickel; molecular dynamics; nanofabrication; repeated; surface roughness

Corresponding author: Lv Ming, Ph. D., Professor, College of Mechanical Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, P. R. China, E-mail: lvming@tyut.edu.cn