

# 单晶硅纳米级磨削过程中磨粒磨损的分子动力学仿真\*

郭晓光<sup>†</sup> 郭东明 康仁科 金洙吉

(大连理工大学精密与特种加工教育部重点实验室, 大连 116023)

**摘要:** 建立了考虑磨粒磨损的三维分子动力学仿真模型, 将固体物理学中的爱因斯坦模型引入到金刚石磨粒原子的温度转换过程中, 设计了分子动力学仿真程序. 研究表明: 在磨削的初期, 磨粒有明显的磨损, 但当磨损到一定阶段后, 磨粒不再磨损, 磨削开始进入稳定的切削状态. 金刚石磨粒的磨损主要发生在磨粒的最底部, 这与表面效应密切相关. 由于表面效应, 磨粒底部表面原子配位不足, 导致磨粒底部结构表面存在许多缺陷, 使磨粒底部表面具有很高的活性, 极不稳定, 根据最小能量原理, 它将自发地向最低能量状态变化, 也就是通过塑性变形、非晶相变等变化释放能量, 使磨粒的表面能减少, 从而发生磨损.

**关键词:** 纳米级加工; 分子动力学仿真; 磨粒磨损

EEACC: 2520

中图分类号: TP311.1

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2008)06-1180-04

## 1 引言

超精密和纳米级磨削是近年来发展起来的最高加工精度、最低表面粗糙度的砂轮磨削方法, 也是加工钢、铁材料和陶瓷、玻璃等硬脆材料的一种重要的理想的加工方法. 超精密和纳米级磨削过程具有特殊性, 例如磨床, 一般磨削精度主要取决于磨床, 不可能加工出比机床精度更高的工件. 另外, 超精密和纳米级磨削是一种极薄切削, 其去除的余量可能与工件所要求的精度数量级相当, 甚至小于公差要求, 因此在加工机理上与一般的磨削加工是不同的. 再者, 超精密和纳米级磨削是一个系统工程, 影响磨削的因素很多, 其中金刚石磨粒几何形状的稳定性的影响就是影响超精密和纳米级加工表面质量的重要因素. 从宏观尺度上讲加工表面是切削刃复印的结果, 刀具几何形状的改变必然引起切削力的波动和表面几何形状的变化, 并最终影响加工表面质量. 磨粒磨损是影响磨粒几何形状稳定的最主要的因素, 在超精密加工中一般认为, 金刚石刀具要经过很长时间才能发生磨损, 但在纳米级加工中, 由于磨粒微刃起主要的切削作用, 而且磨粒的钝圆半径只有数个纳米, 在实际磨削过程中是可能发生磨损的. 但是由于影响超精密和纳米级磨削过程的因素很多很复杂, 并且各因素之间又相互关联, 因此要通过实验的方法来研究磨粒磨损对磨削机理的影响是极其困难的, 所以从理论方面开展磨粒磨损对磨削机理的影响研究非常必要<sup>[1,2]</sup>.

本文将爱因斯坦模型引入到分子动力学仿真 (molecular dynamics simulation, MD) 中, 建立了考虑磨粒磨损的三维单晶硅纳米级磨削过程的分子动力学模型, 从能量演化、磨削力和瞬间原子位置图等方面研究

了磨粒的磨损情况, 解释了磨粒的磨损现象.

## 2 考虑磨粒磨损的分子动力学仿真模型

单晶硅纳米磨削过程的三维分子动力学模型如图 1 所示. 磨粒由金刚石原子组成, 由于要考虑磨粒的受力和变形, 因此将磨粒原子都认为是牛顿原子, 即磨粒原子的运动轨迹按照经典牛顿力学二定律来计算. 工件

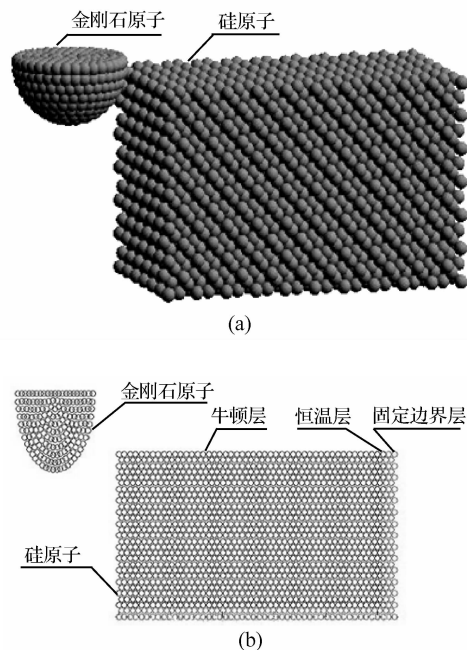


图 1 单晶硅纳米级磨削过程的分子动力学仿真模型 (a) 三维模型; (b) 三维磨削截面效果图

Fig.1 MD modeling of diamond-silicon nanometric grinding (a) 3D modeling; (b) Sketch map of 3D grinding surface

\* 国家自然科学基金重大基金 (批准号: 50390061) 和国家自然科学基金杰出青年基金 (批准号: 50325518) 资助项目

<sup>†</sup> 通信作者. Email: guoxg@dl.cn

2007-09-17 收到, 2008-02-12 定稿

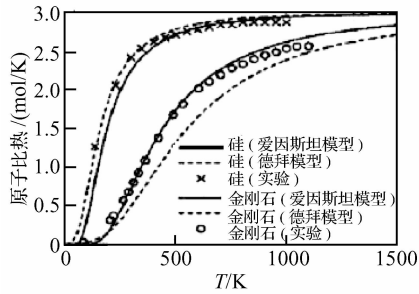
图2 原子比热值理论与实验对比<sup>[4]</sup>

Fig.2 Comparison of theoretical calculation of atomic heat with experimental measurement

由单晶硅原子组成,分为三层:牛顿层、恒温层和固定边界层.牛顿层的原子运动由牛顿方程来描述;恒温层的引入是为了使磨削过程中产生的热量及时传导出去,该层原子速度需要被标度以保持该区域温度恒定;固定边界层的原子始终保持不动,以减小边界效应和保证晶格的对称性,可不参与计算.速度标度因子采用(1)式进行计算:

$$\beta = \left[ \frac{T^* (N - 1)}{16 \sum_i v_i^2} \right] \quad (1)$$

式中  $T^*$ ,  $N$ ,  $v_i$  分别为系统期望温度、总粒子数、粒子速度.

由于磨粒和工件材料都是金刚石型晶体结构,原子间势能计算时应考虑多原子价键之间的相互影响因素,故采用 Tersoff 势函数对单晶 Si—Si 和金刚石 C—C 以及 Si—C 进行原子间势能的计算,具体公式和参数详见参考文献[3].

### 3 磨粒原子温度转换模型

在以往的分子动力学仿真计算中,一般认为磨粒是刚性的,即在磨削过程中不会变形和磨损,而在实际的磨削过程中,由于磨粒与工件的相互作用,磨削区的温度会不断变化,温度变化必然引起磨粒和工件材料性质的变化,因此要研究磨粒磨损就必须考虑磨粒原子在磨削过程中的受力和变形等,其中建立金刚石磨粒的温度与动能的转换模型就至关重要.目前主要有3种温度转换模型:杜隆-伯替模型、德拜模型和爱因斯坦模型. Sinnott 通过对比实验证明(如图2所示):在纳米级加工过程中,德拜模型最适合于硅原子,而爱因斯坦模型适合于金刚石原子<sup>[4]</sup>.因此本文应用德拜模型建立了单晶硅原子的温度转换模型(具体公式请见参考文献[4]),应用爱因斯坦模型建立了金刚石磨粒的温度转换模型.

用量子理论求比热容时,关键在于角频率的分布函数  $\rho(\omega)$  的确定,但对于具体的晶体,  $\rho(\omega)$  的计算是非常复杂的.爱因斯坦提出了简化的晶格振动模型,具体假设是:

(1)晶体中的原子只能在点阵点上作简谐振动,热容完全由振动能随温度的变化决定;(2)这些原子的振动是独立的、互不相干的;(3)各原子的谐振频率相同,

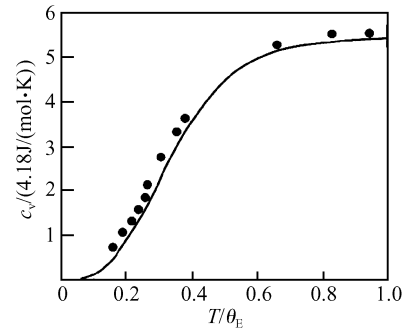


图3 金刚石比热容理论曲线和实验数据的比较

Fig.3 Comparison of theoretical calculation of diamond specific heat with experimental measurement

均为  $\omega$ ,称为爱因斯坦频率.

这样就可以将  $N$  个原子视为  $N$  个频率相同的独立的三维谐振子,或  $3N$  个频率相同的单维谐振子.所有原子都具有同一频率  $\omega$ .这样,考虑到每个原子可以沿3个方向振动,共有  $3N$  个频率为  $\omega$  的振动,由此可得到热容公式:

$$c_v = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = 3Nk_B \left( \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} \quad (2)$$

在固体物理学中,常用爱因斯坦温度  $\Theta_E$  代替  $\omega$ ,其定义为:

$$\hbar \omega = k_B \Theta_E \quad (3)$$

将(3)式代入(2)式,则得:

$$c_v = 3Nk_B \left( \frac{\Theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\Theta_E / T}}{(e^{\Theta_E / T} - 1)^2} \quad (4)$$

爱因斯坦温度  $\Theta_E$  的确定,通常采用下述方法:在比热容显著改变的较大温度范围内,选取合适的  $\Theta_E$  值,使得理论计算的结果和实验结果很好地符合.对于大多数的固体而言,  $\Theta_E$  一般在  $100 \sim 300\text{K}$  之间,但对于金刚石来说  $\Theta_E = 1320\text{K}$  时,理论曲线和实验数据符合得很好,如图3所示<sup>[5,6]</sup>.

### 4 仿真条件

文中对单晶硅的磨削过程进行了三维分子动力学仿真,具体的仿真条件见表1.表中  $a$  是单晶硅的晶格常数,为  $0.357\text{nm}$ .

### 5 磨粒磨损机理

通过分子动力学仿真,发现所得到的磨削力和硅原

表1 磨削过程仿真实验参数

Table 1 Parameters used in MD simulation of silicon nanometric grinding

仿真图形	3D 图形显示
仿真温度	293K
磨削速度	100m/s
时间步长	10fs
磨削深度	1.0a
积分算法	Velocity Verlet 法
硅原子温度转换模型	Debye 模型

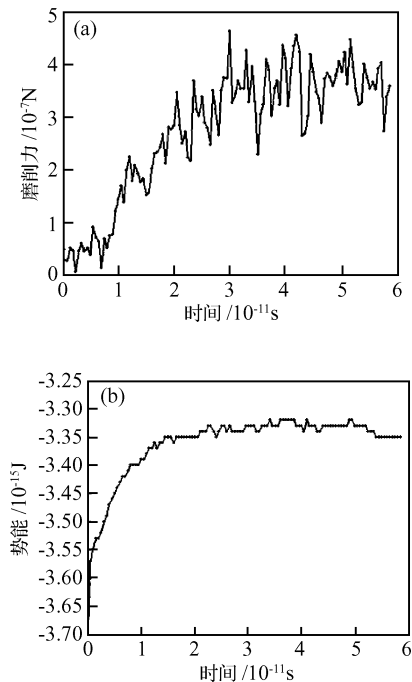


图 4 磨削过程中磨削力和硅原子间势能的变化 (a) 磨削力; (b) 硅原子间势能

Fig. 4 Variance of grinding force (a) and potential energy between silicon atoms (b) in the grinding

子间势能的变化(如图 4 所示).从图 4(a),我们可以看出磨削力一直往复波动,有些地方波动很剧烈,力的这种波动与晶格的变形、晶格重构和非晶相变有密切关系.当磨削力增大并超过原子之间结合力临界值且不足以形成位错时,原子点阵被破坏,导致原子键断裂,成为非晶态原子,此时磨削力会出现陡降至一个较低水平的波动,而且这种作用力的波动在整个磨削过程中不断重复,因此可以认为这是由于非晶相变而产生的作用力波动现象.晶格变形和重构也是压应力、剪切力和磨削力波动的原因.波动现象产生的另一个主要原因是由于切屑的产生,磨粒给切屑一个向上的力,使其脱离加工表面.这种向上的力与磨粒给工件原子的磨削力反向,抵消了一部分磨削力,也导致了磨削力的波动.图 4(b)表明:随着磨削过程的进行,硅原子间的势能不断增加,增加到一定值后开始稳定,这也是因为磨粒进入工件后磨削过程逐渐趋于稳定,磨削的整个过程中硅原子间势能伴有一定的往复波动.硅原子间势能的增加和波动的原因与磨削力增加和波动的原因类似,这里不再赘述.

通过与不考虑磨粒磨损的磨削过程的磨削力和势能对比,发现它们的变化势非常相似,说明考虑磨粒磨损后对磨削过程的加工机理影响不大,具体请见参考文献[7].

图 5 为不同瞬间金刚石磨粒的位置图,由图可知在磨削的初期,磨粒有明显的磨损,但当磨损到一定阶段后,磨损停止,磨削进入稳定的切削状态.金刚石磨粒的磨损主要发生在磨粒的最底部,这主要是由于磨粒底部表面原子数相对其他部位多一些,即原子配位不足,这必然导致磨粒底部结构表面存在许多缺陷,使磨粒底部

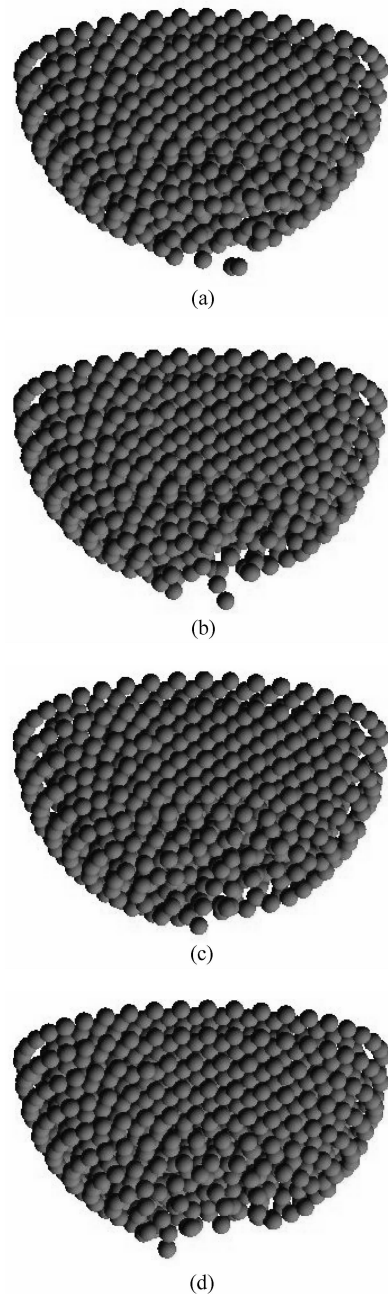


图 5 磨粒磨损过程的三维分子动力学仿真结果 (a)  $t = 5\text{ps}$ ; (b)  $t = 10\text{ps}$ ; (c)  $t = 20\text{ps}$ ; (d)  $t = 40\text{ps}$

Fig. 5 3D MD simulation results of abrasive wear process (a)  $t = 5\text{ps}$ ; (b)  $t = 10\text{ps}$ ; (c)  $t = 20\text{ps}$ ; (d)  $t = 40\text{ps}$

表面具有很高的活性,极不稳定.根据最小能量原理,它将自发地向最低能量状态变化,也就是通过塑性变形、非晶相变等变化释放能量使磨粒的表面能减少,即是我们所观察到的磨损现象.

## 6 结论

应用爱因斯坦模型建立了金刚石原子的温度转换模型,借助于分子动力学三维仿真研究了单晶硅纳米级磨削过程中金刚石磨粒的磨损情况.研究表明:在磨削的初期,磨粒有明显的磨损,但当磨损到一定阶段