

# 因瓦合金纳米抛光材料去除机理的分子动力学模拟<sup>\*</sup>

王 婉<sup>1</sup> 周 青<sup>1</sup> 华东鹏<sup>1</sup> 李 硕<sup>1</sup> 王志军<sup>2</sup> 王海丰<sup>1</sup>

(1. 西北工业大学先进润滑与密封材料研究中心 西安 710072;

2. 西北工业大学凝固技术国家重点实验室 西安 710072)

**摘要:** 因瓦合金作为一种独特的低膨胀材料已广泛用于航空航天等高科技领域,但目前还鲜有对其超精密加工理论和技术的研究,而纳米抛光是因瓦合金超精密加工的一种重要手段。针对纳米抛光过程中因瓦合金的材料去除机理,基于分子动力学模拟研究抛光速度对材料去除效率、亚表面损伤和抛光表面平整度的影响。通过对磨屑、能量、抛光力、位错运动等方面的分析揭示因瓦合金的变形损伤机制。研究表明:材料去除效率随着抛光速度将达到一个临界值,当抛光速度低于 100 m/s 时,磨削热促使位错形核,亚表面损伤厚度增加;当抛光速度高于 100 m/s 时,应变速率急剧增大导致位错运动受限,使得亚表面损伤厚度得以降低。为实现因瓦合金高效率和低损伤加工机制提供理论依据和技术支持。

**关键词:** 因瓦合金; 纳米抛光; 表面形貌; 亚表面损伤; 分子动力学模拟

**中图分类号:** O77;O33

## Molecular Dynamics Simulation on the Material Removal Mechanism in the Nano-polishing Process of Invar Alloy

WANG Wan<sup>1</sup> ZHOU Qing<sup>1</sup> HUA Dongpeng<sup>1</sup> LI Shuo<sup>1</sup> WANG Zhijun<sup>2</sup> WANG Haifeng<sup>1</sup>

(1. Center of Advanced Lubrication and Seal Materials, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China;

2. State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

**Abstract:** As a unique kind of low-expansion materials, Invar alloy has been widely used in high-tech fields, such as aerospace, but few studies are conducted on its ultra-precision machining theory and technology. Among them, nano-polishing is an important method for ultra-precision machining of Invar alloy. Aiming at showing the material removal mechanism of Invar alloy in the nano-polishing process, the influence of polishing speed on the material removal rate, subsurface damage and the smoothness of polished surface is studied based on molecular dynamics simulation. Specifically, through the analysis of polishing chip, energy, polishing force and dislocation movement, the deformation and damage mechanism of Invar alloy is revealed. It is shown that the material removal rate will reach a critical value as the polishing speed increases. When the velocity increases, the grinding heat promotes nucleation of dislocations, and therefore the subsurface damage thickness increases. However, with the velocity over than 100 m/s, the drastically increased strain rate leads to the limitation of dislocation movement, which reduces the thickness of subsurface damage. This paper enriches the theoretical understanding and provides technological references for realizing the high efficiency and low damage machining mechanism of Invar alloy.

**Keywords:** Invar alloy; nano-polishing; surface topography; subsurface damage; molecular dynamics simulation

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金(51801161)和中央高校基本科研业务费专项资金(3102019JC001)资助项目。

Fund: Supported by National Natural Science Foundation of China (51801161) and Fundamental Research Funds for the Central Universities (3102019JC001).

20210826 收到初稿,20210927 收到修改稿

## 0 前言

随着中国制造向中国创造转变,中国智造高质量发展,高端装备制造领域对高精密加工技术的需求日益旺盛。因瓦(Invar)合金<sup>[1-3]</sup>制造的仪器能在不同温度下保持相同的长度。此外,因瓦合金具有优异的延展性和较高的韧性<sup>[4]</sup>,并且在低温环境下具有优异的力学性能和抗疲劳性能。这些优异的性能和制造特性使得 Invar 合金在多个领域的科技发展发挥了很大作用。当前,因瓦合金因其低膨胀特性已广泛用于国防工业、航空航天、测量系统以及科学仪器等高精尖领域<sup>[5-6]</sup>。相应的应用需求同时要求因瓦合金元部件具有极高的加工精度和表面质量<sup>[7]</sup>,因而其精密超精密加工理论和技术成为因瓦合金在相关领域高新科技应用的重要保障。

随着科学技术的不断进步,高端装备对因瓦合金部件加工精度、表面质量和表面粗糙度的要求越来越高。加工过程中因瓦合金表面容易发生塑性变形而积累缺陷,使得服役寿命以及表面低膨胀性能大受影响。为指导开发满足工程需求的加工表面,研究因瓦合金宏观及微观尺度下的表面加工变形损伤机理,建立加工工艺与材料微结构演化之间的关系便显得至关重要。

纳米抛光是一种可提高因瓦合金工件加工精度、减少损伤的去除技术<sup>[8]</sup>。由于该技术加工过程中材料去除和表面形成均在纳米尺度,故不仅传统的加工理论无法解释纳米抛光过程的现象和本质,现有试验手段也难以实现对其材料变形的有效原位观察<sup>[9]</sup>。分子动力学(Molecular dynamics)模拟可以在原子尺度跟踪空位、位错、层错等缺陷的运动,已经成为探索纳米抛光过程中材料去除机理的重要途径<sup>[8,10]</sup>。当前,众多学者已通过分子动力学模拟对不同材料在加工过程中的亚表面损伤机理进行了研究。但大部分的纳米抛光分子动力学模拟研究集中在 Si<sup>[11-13]</sup>、Cu<sup>[14-16]</sup>、Ni<sup>[17]</sup>、Al<sup>[18]</sup>等单晶材料上,还有少量学者研究了 GaN<sup>[19]</sup>和 SiC<sup>[20-21]</sup>在加工过程的亚表层变形机理。例如,LI J 等<sup>[14]</sup>通过改变磨削速度、切削深度、磨粒半径、晶体取向和铜的加工角度,研究了单晶铜在金刚石刀头纳米级高速磨削下的亚表面损伤和材料去除机理。LI P 等<sup>[11]</sup>研究了不同磨削速度下单晶硅的磨削过程,分析了磨削力和温度的变化、工件表面形貌的形成过程、亚表面损伤层的变化、相变和残余应力的分布,得出了磨削速度越高,温度越高,磨削力越小,产生的磨屑不随速度增加而增加,亚表面损伤层与残余应力有关的结论。

MENG 等<sup>[21]</sup>研究了应变速率和热效应对碳化硅材料去除行为的影响,发现应变速率效应和热软化效应直接影响材料去除量和表面损伤的形式。孟文卿等<sup>[22]</sup>通过分子动力学模拟研究了不同加工因素下铁碳合金的磨粒流加工过程,探讨了加工过程中工件亚表面缺陷结构的形成及演变,从微观角度揭示了不同加工因素下磨粒流加工铁碳合金的作用机制。但是对于纳米抛光过程中因瓦合金的材料去除机理,尤其是变形损伤机制的分子动力学模拟研究亟待填补与完善。

抛光速度是抛光过程中最重要的工艺参数之一,可以在有效控制亚表面损伤层的同时提高工件的加工效率。本文基于分子动力学模拟从抛光速度,从磨削力、温度、势能、表面形貌和亚表面损伤层的影响角度研究抛光工艺对表面质量的影响,旨在通过深入分析因瓦合金变形损伤机理,为因瓦合金的高效、高精度和低损伤加工提供理论依据。

## 1 模拟方法

对因瓦合金纳米抛光的分子动力学模拟通过原子/分子大规模并行模拟器(LAMMPS)实现<sup>[23]</sup>,模拟结果采用 OVITO 进行可视化和晶体结构缺陷分析<sup>[24]</sup>,位错运动由位错提取分析方法(Dislocation extraction analysis, DXA)进行表征<sup>[25-26]</sup>。本文主要研究因瓦合金在相应变形条件下的微观变形行为,实际纳米抛光工艺的多磨粒与缺陷工件表面的作用过程,以及抛光过程中磨粒的滚轧过程很难考虑进去,简化为单磨粒抛光因瓦合金有助于分析其缺陷运动和去除机理。同时,理想的因瓦合金晶粒尺寸与磨粒半径相比足够大<sup>[27]</sup>,在模拟中能等效为磨粒抛光因瓦合金单晶。因此,采用了单磨粒与因瓦合金单晶理想工件表面去除的简化模型。图1为因瓦合金纳米抛光的分子动力学模拟模型,该模型由面心立方的因瓦合金样品和半径为 20 Å 的金刚石磨粒组成。因瓦合金的样品尺寸约为 248.6 Å×106.6 Å×106.6 Å,晶体取向为 X-[100]、Y-[010]和 Z-[001]。金刚石磨粒包含 5 916 个原子,工件包含 252 000 个原子,其中 Fe 原子占 65%,Ni 原子占 35%,Fe 和 Ni 原子在工件中随机分布。如图1所示,样品分为边界层、恒温层和牛顿层三层,分别用黄色、深蓝色和浅蓝色着色。纳米抛光过程中,模型采用恒体积恒能量系综调控体系状态。底部边界层固定以确保样品的稳定性,恒温层对模拟过程中产生的热量进行耗散来保持温度恒定在 300 K,牛顿层原子的运动服从经典的牛顿第二定律。在初始状

态,金刚石磨粒沿  $X$  方向与工件的右端相距  $30 \text{ \AA}$ , 以避免弛豫过程中磨粒与工件之间的相互作用。在  $X$  和  $Z$  方向上设置了非周期性边界条件,而在  $Y$  方向上设置了周期性边界条件以消除边界效应。纳米抛光的模拟过程分别以  $50 \text{ m/s}$ 、 $100 \text{ m/s}$ 、 $150 \text{ m/s}$  和  $200 \text{ m/s}$  的速度在  $(001)$  面上沿  $[100]$  方向进行,其中抛光深度为  $20 \text{ \AA}$ ,抛光距离为  $180 \text{ \AA}$ 。在纳米抛光模拟之前,先将模型在 NPT 系综下弛豫  $500 \text{ ps}$  以调整温度到  $300 \text{ K}$ 。

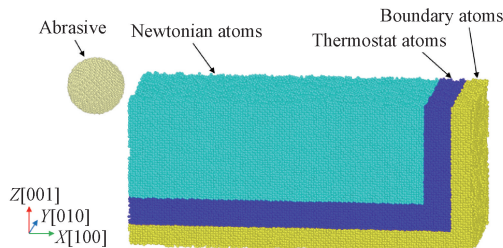


图1 纳米高速抛光的分子动力学仿真模型  
Fig.1 Molecular dynamics simulation model of high-speed nanopolishing

在分子动力学模拟中,原子相互作用是影响结果可靠性的关键因素之一。在因瓦合金的纳米抛光过程中,不同原子之间有三类相互作用,分别是工件中的 Fe-Ni 原子、磨粒中的 C-C 原子以及工件和磨粒之间的 Fe-C 原子和 Ni-C 原子间的作用。因瓦合金中 Fe-Ni 原子的相互作用使用 WU 等<sup>[28]</sup>开发的第二近邻修饰的嵌入原子势方法(the second nearest-neighbor modified embedded-atom-methods, 2NN MEAM)势。Fe-C 和 Ni-C 使用 Lennard-Jones (L-J)电势描述:

$$E = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] (r < r_c) \quad (1)$$

式中,  $\varepsilon$  是一个能量参数,决定了 C 原子与工件原子相互作用的强度,  $\sigma$  是距离参数,  $r$  是 C 原子和工件原子之间的距离。根据 Lorentz-Berthelot 混合法则计算了碳原子和工件原子之间的 L-J 势参数:

$$\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \quad (2)$$

$$\sigma_{12} = \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2.0} \quad (3)$$

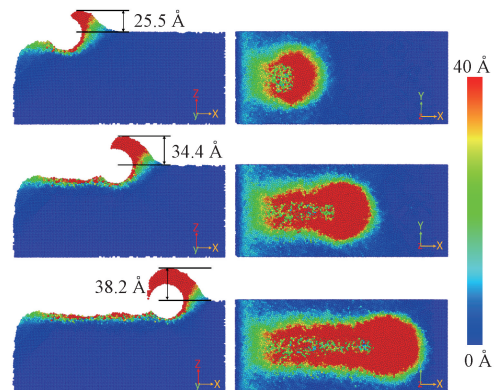
根据文献[29-30]可知,  $\varepsilon_{Fe} = \varepsilon_{Ni} = 0.52 \text{ eV}$ ,  $\varepsilon_c = 0.03 \text{ eV}$ ,  $\sigma_{Fe} = 2.32 \text{ \AA}$ ,  $\sigma_{Ni} = 2.28 \text{ \AA}$ ,  $\sigma_c = 3.1 \text{ \AA}$ 。由此得出的 L-J 势参数如下:对于 C 和 Fe 原子,  $\varepsilon = 0.12 \text{ eV}$ ,  $\sigma = 2.71 \text{ \AA}$ ; 对于 C 和 Ni 原子,  $\varepsilon = 0.12 \text{ eV}$ ,  $\sigma = 2.69 \text{ \AA}$ 。在模拟过程中,由于磨粒被设置为刚体,因此构成磨粒的 C-C 原子之间的相互作

用未被考虑<sup>[11]</sup>。

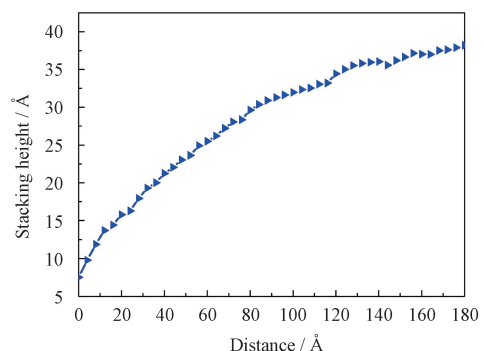
## 2 模拟结果与讨论

### 2.1 去除材料堆积分布

为了更清楚地观测抛光过程中工件表面形貌演化,磨粒被隐藏在图中。图 2a 显示了抛光速度为  $100 \text{ m/s}$ ,抛光距离为  $60 \text{ \AA}$ 、 $120 \text{ \AA}$  和  $180 \text{ \AA}$  时,工件中原子沿  $Z$  方向的位移运动,原子根据其位移量进行着色。可以看出,原子位移量较大的区域主要分布在磨屑及磨粒的前部和底部、沟槽的两侧以及亚表面损伤层中。图 2b 给出抛光速度为  $100 \text{ m/s}$  时,堆积高度随抛光距离的变化曲线。由图可知,随着抛光的进行,堆积高度不断增加,且在抛光后期曲线相对平滑。这是因为在磨粒的推动作用,部分工件原子从工件上分离形成磨屑,且磨屑在磨粒前方的堆积高度随着加工过程的进行越来越高。由于堆积的太高,一些磨屑原子最终掉落在沟槽中,因此在抛光后期,磨屑的堆积高度变化比较平缓。



(a) Displacement changes of the workpiece atoms



(b) Variation curve of stacking height with distance

图2 抛光速度为  $100 \text{ m/s}$  时,在抛光距离为  $60$ 、 $120$ 、 $180 \text{ \AA}$  下工件原子沿  $Z$  方向的位移变化以及堆积高度随距离的变化曲线

Fig.2 Displacement changes of the workpiece atoms along the  $Z$  direction at the polishing distance of  $60$ ,  $120$ , and  $180 \text{ \AA}$ , and variation curve of stacking height with distance at the polishing speed of  $100 \text{ m/s}$



图3显示了不同抛光速度下抛光距离为180 Å时工件的截面形貌和表面形貌,其中原子根据其高度进行着色,磨粒原子被隐藏后在截面形貌中留下了白色的区域。从截面形貌图可以看出,随着抛光速度的增大,白色区域在逐渐缩小,这是因为大量的磨屑原子覆盖在磨粒的后表面。表面堆积形态表现出明显的非对称性,这与纯金属中的典型现象类似<sup>[31-33]</sup>。随着抛光的进行,越来越多的原子被挤出表面,在磨粒的前面和凹槽的两侧均形成了大量的表面堆积。对不同抛光速度下磨屑的堆积范围进行比较可知,随着抛光速度的增大,磨屑的堆积范围变化不明显。

图4为不同抛光速度下磨屑的堆积高度和去除原子数。由于堆积高度和去除原子数在抛光过程中还未稳定处于上下波动状态,因此每隔1 000步计算一次堆积高度和去除原子数信息,选取抛光过程中的后五个数据使用误差棒来说明其在不同抛光速度下的变化。图4a给出了抛光距离为180 Å时不同抛光速度下的磨屑堆积高度。随着抛光速度的增加,磨粒前面堆积的最大磨屑高度也相应增加,但是磨屑的堆积高度并没有在一直增加,当抛光速度超过150 m/s时,磨屑堆积高度开始下降。磨屑高度降低的原因主要是磨粒前方的原子更多地流向沟槽的两侧和沟槽中。图4b

为在180 Å抛光距离下不同抛光速度下的总去除原子数,去除原子数包括凹槽两侧的侧流原子和磨屑原子。可以看出,随着抛光速度的增加,工件表面上方去除的原子数量先增加后降低。去除原子数降低的原因主要是抛光过程中,磨粒表面堆积的原子流向了沟槽中,这对工件表面的粗糙度有一定影响。从磨屑的堆积高度和去除原子数的分析可以得知,加工因瓦合金的抛光效率随着抛光速度的增加存在一个临界值,不会无限地随着抛光速度的增大而提高。

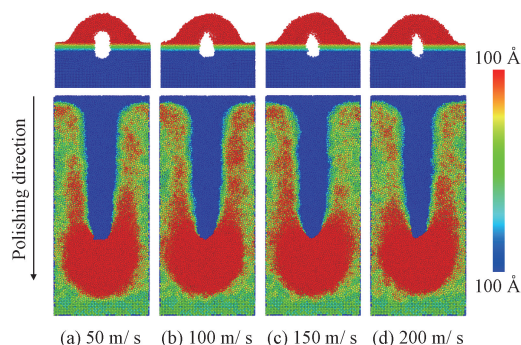


图3 不同抛光速度下抛光距离为180 Å时工件的截面形貌和表面形貌

Fig. 3 Cross-sectional morphology and surface morphology of the workpiece when the polishing distance is 180 Å at different polishing speeds

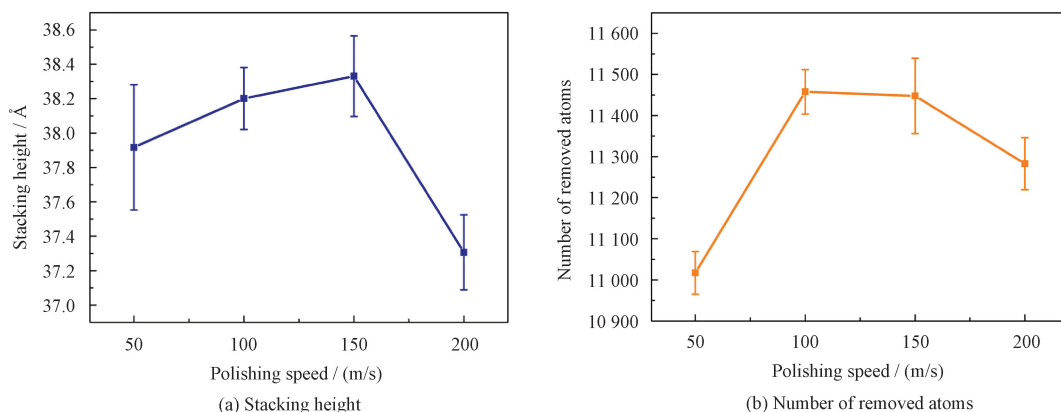


图4 不同抛光速度下抛光距离为180 Å时磨屑的堆积高度和去除原子数

Fig. 4 Stacking height and number of removed atoms when the polishing distance is 180 Å at different polishing speed

## 2.2 抛光力分析

在纳米抛光过程中,磨粒与工件相互作用产生的磨削力对工件表面质量和亚表面损伤厚度有重要影响,磨削速度的变化会导致磨削力的变化。因此,探索磨削速度对磨削力的影响尤为重要。图5a和5b显示了不同抛光速度下横向力( $F_x$ )和法向力( $F_z$ )随抛光距离的变化曲线。在抛光初始阶段,磨

粒与工件的接触面积逐渐增大,横向力和法向力也随之增大。随着加工的进行,当磨粒完全进入工件表面时, $F_x$ 的增速变缓,此时磨粒与工件的接触面积基本保持不变,但是磨粒前方的磨屑持续堆积,导致横向力缓慢增加<sup>[11,34]</sup>。在抛光初期,随着金刚石磨粒与因瓦合金的接触面积逐渐增加, $F_z$ 逐渐增大。随着抛光的进行,只需要较小的法向力就可以

将磨粒保持在恒定的深度<sup>[32]</sup>,因此 $F_z$ 略有下降然后保持稳定。在抛光后期,由于不同速度下磨粒的抛光状态逐渐接近,因此抛光力的差别也越来越小。虽然不同速度下磨粒抛光力存在一定差别,但其整体变化趋势是一致的。在抛光过程中横向力和法向力产生持续波动的现象主要是因为晶格变形所产生的能量不断积累和释放、晶格结构重新构建以及非晶结构的产生。图 5c 为不同抛光速度下的平均横向力和平均法向力,可以看出平均横向力随着抛光

速度的增加而增加,这是因为较高的抛光速度导致位错从抛光区域移开的时间变短。位错在抛光区域中堆积并增强了此部分的材料,从而导致较高的变形抗力<sup>[14,35]</sup>。平均法向力在 200 m/s 时有些下降,这是因为有部分堆积原子流向了沟槽两侧和沟槽中。与法向力相比,横向力较大,这种现象归因于磨粒处于高速状态,需要较大的横向力才能保持磨粒前方大量磨屑的高速运动,这与 LI 等对单晶铜的纳米加工过程中的现象一致<sup>[14]</sup>。

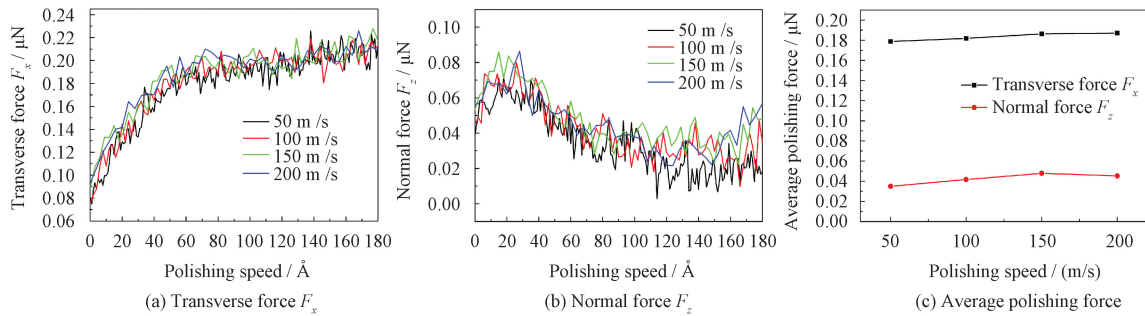


图 5 不同抛光速度下横向力和法向力随抛光距离的变化关系

Fig. 5 Relationship between the transverse force and the normal force with the polishing distance at different polishing speed

### 2.3 势能、温度和散热率分析

图 6a 显示了抛光速度变化时工件的势能变化。从图中可以看出,工件势能随着抛光距离的增加而增大,抛光速度越高,势能越大。通过对抛光力变化的分析可知,在抛光初期,磨粒的初始抛光力表现为磨粒原子与因瓦合金工件原子之间斥力的集合。原子间的斥力导致靠近磨粒区域的工件原子开始受到挤压,工件材料局部晶格结构受力发生变形。同时,从图 2 的位移变化图可知,抛光初期有少量工件原子出现微小位移,由此产生的应变能在晶格内不断积累使得原子势能增大,因此在抛光初期不同抛光速度下的原子势能之间并没有太大差别<sup>[22]</sup>。随着抛光的进行,抛光速度越大的工件原子产生的位移量越大,且抛光过程中晶格变形产生的应变能及位

错能也要大于低速磨粒。因此工件原子势能随着抛光速度的增加出现了明显的增大现象。

图 6b 显示了抛光速度变化时工件牛顿层的平均温度变化。如图 6b 所示,工件温度的变化趋势和势能一致,即工件温度的变化与抛光速度的变化成正比。在模拟中,由于金刚石的热导率比工件的热导率高得多,所以没有考虑金刚石引起的磨粒温度变化。在初始抛光阶段,磨粒引起的挤压和剪切导致温度明显升高。抛光产生的一部分能量转化为动能,这增加了原子的热量,促使温度升高<sup>[33]</sup>。在较低抛光速度下,例如在图中 50 m/s 和 100 m/s 的情况下,温度将很快达到稳定状态。在较高的抛光速度下,由于位错的堆积和强化,原子间的挤压和摩擦变得更加剧烈。变形晶格释放的摩擦和应变能将转化

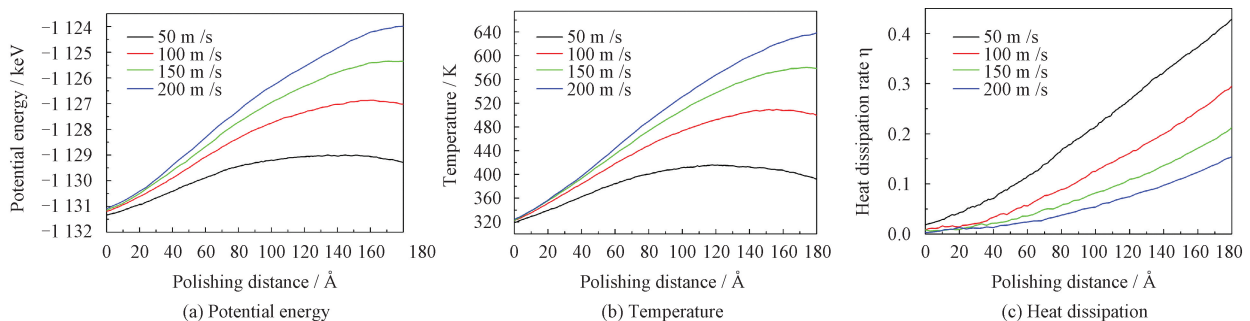


图 6 不同抛光速度下势能、温度和散热率随抛光距离的变化关系

Fig. 6 Relationship between potential energy, temperature and heat dissipation rate with polishing distance at different polishing speed

为磨削热,这导致更高的变形力和更多的热能<sup>[36]</sup>。

为了更好解释抛光过程中温度的变化,图6c给出了不同抛光速度下散热率与抛光距离的关系图。在实际中,恒温层原子的散热率是影响牛顿层原子的温度和行为的重要因素。恒温原子的散热率定义为 $\eta = (T_1 - T_2)/T_1$ ,其中 $T_1$ 是在没有使用速度重新标度法的情况下工件的平均温度, $T_2$ 是用速度重新标度法测量工件的平均温度<sup>[14]</sup>。从图6c可以看出,散热率随着抛光距离的增加呈现出先缓慢增加再急剧增大的趋势,这是因为牛顿层原子的温度在抛光初期很少传递到恒温层原子的区域。随着抛光的进行,牛顿层原子的大量扩散导致散热率的急剧增加。同时,较高的抛光速度导致完成相同抛光距离所需的时间更短,并减少了散热时间。因此,较低的抛光速度有更大的散热率<sup>[14]</sup>。

## 2.4 亚表面损伤分析

加工过程中造成的亚表面损伤对材料性能有很大影响,亚表层损伤是衡量加工质量的重要参数之一。因瓦合金的纳米抛光过程是在原子水平上实现材料去除,同时导致亚表面存在残余塑性变形甚至Fe-Ni间原子键的断裂。当金属键断裂时,会在加工表面和工件内部形成缺陷结构。抛光过程中,一部分原子被磨粒向上推到磨屑中,由于磨粒的剪切挤压产生的高温,其晶体结构被严重破坏。相比之下,一部分原子受磨粒向下挤压形成加工表面,影响工件的内部结构,导致位错形核和亚表面损伤的形成。图7显示了不同抛光速度下位错线长度随抛光距离的变化关系,可以看出,随着抛光的进行,位错线长度呈现先增大后减小最后达到稳定的趋势,这是因为在抛光初期,温度的上升促使位错开始成核,位错密度增大。在抛光后期,温度的急剧增大促使位错发生回复,位错密度减小。同时,当速度从

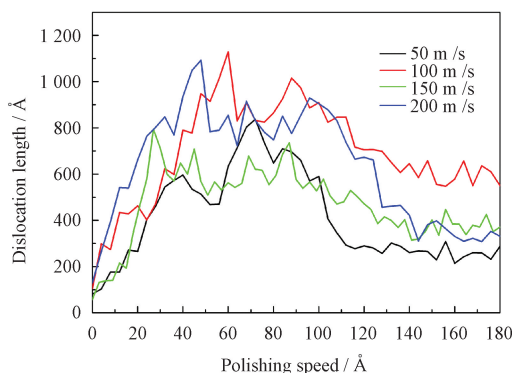


图7 不同抛光速度下位错线长度随抛光距离的变化关系  
Fig. 7 Relationship between the length of the dislocation line and the polishing distance at different polishing speed

50 m/s 增大到 100 m/s 时,位错线长度随着速度的增加而增加,而速度从 100 m/s 增大到 200 m/s 时,位错线长度随着速度的增加而减少。当速度从 50 m/s 提高到 100 m/s 时,工件内部温度升高,导致原子运动加剧,从而降低了位错成核和原子相变所需的能量,进而使位错密度和相变原子数目略有增加。随着速度继续增加到大于 100 m/s 时,与温度促使位错成核的效果相比,抛光时间的大量缩短对亚表面损伤具有更明显的影响,这导致一些位错没有足够的时间成核,并且由于没有持续的力和能量驱动,成核位错难以扩展,导致位错密度降低<sup>[19]</sup>。

为了更深入探索不同抛光速度对位错的影响,图8给出了在不同速度下稳定抛光期间位错的瞬时分布图像。如图所示,在不同的抛光速度下,Burgers矢量 $\mathbf{b} = 1/6\langle 112 \rangle$ 的不全位错仍然是主要位错(图8中的绿线),同时还存在少量的压杆位错(图8中的紫红线)。从图8中可以看出,不同的抛光速度对亚表层中的位错类型有一定影响。压杆位错的数量随着抛光速度的增加而减小,在抛光速度为 200 m/s 时,未观察到压杆位错。

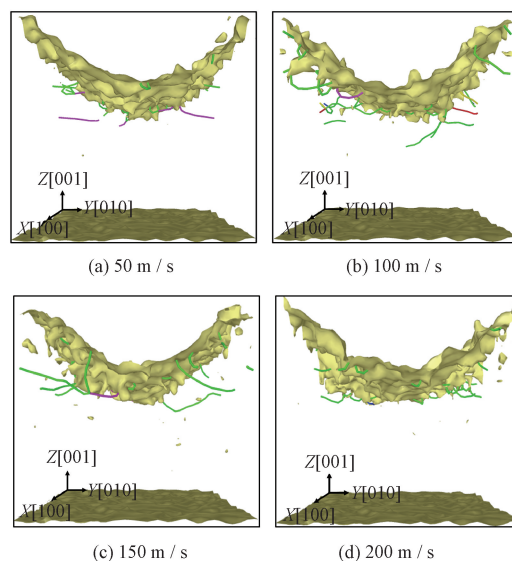


图8 不同抛光速度下的位错分布

Fig. 8 Dislocation distribution at different polishing speed

图9显示出了在不同速度下抛光距离为 180 Å 时的亚表面损伤层的厚度。亚表面损伤层厚度为从因瓦合金工件表面到位错线最低点之间的距离<sup>[37]</sup>。如图所示,抛光速度为 50 m/s、100 m/s、150 m/s 和 200 m/s 时因瓦合金亚表层损伤厚度分别为 42 Å、61.2 Å、49.7 Å 和 42.7 Å。在 50~100 m/s 范围内,位错密度增加,导致厚度增加,亚表面质量变差。同时,在此速度范围内,加工表面的抛光力也略有增



加。然而,随着速度的不断提高,位错密度降低,因此损伤厚度减小,亚表面质量提高。

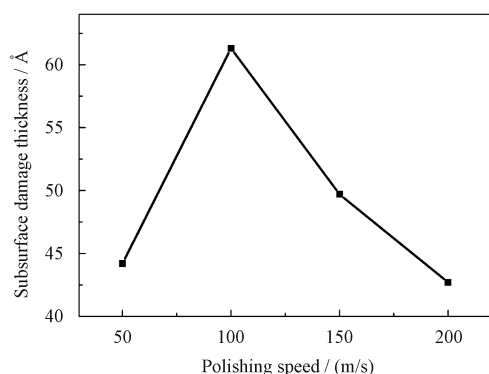


图9 不同抛光速度下的亚表面损伤厚度

Fig. 9 Subsurface damage thickness at different polishing speed

### 3 结论

(1) 从原子尺度研究了因瓦合金纳米抛光材料去除机理,可以看出抛光速度对纳米抛光过程有显著影响。较高的磨削速度会导致更多的磨屑体积,但是随着抛光速度的提高,材料的抛光效率达到一个临界值。

(2) 不同抛光速度下的亚表层损伤厚度取决于抛光温度和位错成核时间之间的竞争机制。当抛光速度增加到大于 100 m/s 时,与温度增加促进位错成核的效果相比,抛光时间的大量减少导致一些位错没有足够的时间成核,位错密度降低,在一定程度上减小亚表面损伤厚度。

(3) 由于分子动力学模拟中未考虑实际抛光过程中抛光液及其与工件之间的化学反应等其他因素的影响。因此该研究只能为实现因瓦合金的高效率和低损伤提供理论依据。

### 参 考 文 献

[1] GUILLAUME C E. Invar and its applications [J]. Nature, 1904, 71(1832): 134-139.

[2] SAHOO A, MEDICHERLA V R R. Fe-Ni Invar alloys: A review [J]. Materials Today: Proceedings, 2021, 43: 2242-2244.

[3] SCHILFGAARDE V M, ABRIKOSOV I A, JOHANSSON B. Origin of the Invar effect in iron-nickel alloys[J]. Nature, 1999, 400(6739): 46-49.

[4] ZHAN X, LIU X, WEI Y, et al. Microstructure and property characteristics of thick Invar alloy plate joints using weave bead welding[J]. Journal of Materials Processing Technology, 2017, 244: 97-105.

[5] HAUSCHWITZ P, STOKLASA B, KUCHARIK J, et al. Micromachining of Invar with 784 Beams Using 1.3 ps Laser

Source at 515 nm[J]. Materials, 2020, 13(13): 2962.

[6] LI A, ZHU Z, LIU Y, et al. Ultrasound-assisted electrodeposition of Fe-Ni film for OLED mask [J]. Materials Research Bulletin, 2020, 127: 110845.

[7] KHANNA N, MISTRY S, RASHID R A R, et al. Investigations on density and surface roughness characteristics during selective laser sintering of Invar-36 alloy[J]. Materials Research Express, 2019, 6: 086541.

[8] WANG G, FENG Z, ZHENG Q, et al. Molecular dynamics simulation of nano-polishing of single crystal silicon on non-continuous surface [J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2020, 118: 105168.

[9] WANG G, FENG Z, HU Y, et al. Effects of anisotropy on single crystal silicon in polishing non-continuous surface [J]. Micromachines, 2020, 11(8): 742.

[10] 梁迎春, 陈家轩, 郭永博. 微纳米加工仿真技术[M]. 哈尔滨: 哈工业大学出版社, 2013.

LIANG Y C, CHEN J X, GUO Y B. Micro and nano processing simulation technology [M]. Harbin: Harbin Institute of Technology Press, 2013. (in Chinese)

[11] LI P, GUO X, YUAN S, et al. Effects of grinding speeds on the subsurface damage of single crystal silicon based on molecular dynamics simulations[J]. Applied Surface Science, 2021, 554: 149668.

[12] GOEL S, LUO X, REUBEN R L, et al. Influence of temperature and crystal orientation on tool wear during single point diamond turning of silicon[J]. Wear, 2012, 284-285: 65-72.

[13] LI J, FANG Q, ZHANG L, et al. Subsurface damage mechanism of high speed grinding process in single crystal silicon revealed by atomistic simulations[J]. Applied Surface Science, 2015, 324: 464-474.

[14] LI J, FANG Q, LIU Y, et al. A molecular dynamics investigation into the mechanisms of subsurface damage and material removal of monocrystalline copper subjected to nanoscale high speed grinding[J]. Applied Surface Science, 2014, 303: 331-343.

[15] ZHANG J, WEI Y, SUN T, et al. Twin boundary spacing-dependent friction in nanotwinned copper[J]. Physical Review B, 2012, 85(5): 054109.

[16] LI J, FANG Q, ZHANG L, et al. The effect of rough surface on nanoscale high speed grinding by a molecular dynamics simulation [J]. Computational Materials Science, 2015, 98: 252-262.

[17] GAO Y, LU C, HUYNH N N, et al. Molecular dynamics simulation of effect of indenter shape on nanoscratch of Ni[J]. Wear, 2009, 267(11): 1998-2002.

[18] JUN S, LEE Y, KIM S Y, et al. Large-scale molecular dynamics simulations of Al(111) nanoscratching [J]. Nanotechnology, 2004, 15(9): 1169-1174.

[19] ZHANG C, DONG Z, YUAN S, et al. Study on subsurface damage mechanism of gallium nitride in nano-grinding [J]. Materials Science in Semiconductor Processing, 2021, 128: 105760.

[20] 张广辉. 金刚石纳米抛光碳化硅的分子动力学数值模拟研究

- [D]. 天津:天津理工大学, 2019.
- ZHANG G H. Molecular dynamics numerical simulation of diamond nano-polished silicon carbide [D]. Tianjin: Tianjin University of Technology, 2019. (in Chinese)
- [21] MENG B, YUAN D, XU S. Study on strain rate and heat effect on the removal mechanism of SiC during nano-scratching process by molecular dynamics simulation [J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2019, 151: 724-732.
- [22] 孟文卿. 基于分子动力学的磨粒流加工铁碳合金的数值模拟研究[D]. 长春: 长春理工大学, 2019.
- MENG W Q. Numerical simulation of abrasive flow machining of iron-carbon alloys based on molecular dynamics [D]. Changchun: Changchun University of Science and Technology, 2019. (in Chinese)
- [23] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1): 1-19.
- [24] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2009, 18(1): 015012.
- [25] STUKOWSKI A, ALBE K. Extracting dislocations and non-dislocation crystal defects from atomistic simulation data [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2010, 18(8): 085001.
- [26] STUKOWSKI A, BULATOV V V, ARSENLIS A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2012, 20(8): 085007.
- [27] LIU Y, LIU L, WU Z, et al. Grain growth and grain size effects on the thermal expansion properties of an electrodeposited Fe-Ni invar alloy [J]. Scripta Materialia, 2010, 63: 359-362.
- [28] WU C, LEE B, SU X. Modified embedded-atom interatomic potential for Fe-Ni, Cr-Ni and Fe-Cr-Ni systems [J]. CALPHAD: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry, 2017, 57: 98-106.
- [29] QIU C, ZHU P, FANG F, et al. Study of nanoindentation behavior of amorphous alloy using molecular dynamics [J]. Applied Surface Science, 2014, 305: 101-110.
- [30] 刘捷, 甄琦, 赵灿军, 等. 铁在液态铅铋合金中腐蚀的分子动力学研究 [J]. 工程热物理学报, 2017, 38: 107-111.
- LIU J, ZHEN Q, ZHAO C J, et al. Molecular dynamics study of iron corrosion in liquid lead-bismuth alloy [J]. Journal of Engineering Thermophysics, 2017, 38: 107-111. (in Chinese)
- [31] GAO Y, BRODYANSKI A, KOPNARSKI M, et al. Nanoscratching of iron: A molecular dynamics study of the influence of surface orientation and scratching direction [J]. Computational Materials Science, 2015, 103: 77-89.
- [32] GAO Y, URBASSEK H M. Scratching of nanocrystalline metals: A molecular dynamics study of Fe [J]. Applied Surface Science, 2016, 389: 688-695.
- [33] REN J, HAO M, LV M, et al. Molecular dynamics research on ultra-high-speed grinding mechanism of monocrystalline nickel [J]. Applied Surface Science, 2018, 455: 629-634.
- [34] ZHANG J, SUN T, YAN Y, et al. Molecular dynamics study of scratching velocity dependency in AFM-based nanometric scratching process [J]. Materials Science and Engineering: A, 2009, 505(1): 65-69.
- [35] PEI Q X, LU C, LEE H P. Large scale molecular dynamics study of nanometric machining of copper [J]. Computational Materials Science, 2007, 41(2): 177-185.
- [36] GUO Y, LIANG Y, CHEN M, et al. Molecular dynamics simulations of thermal effects in nanometric cutting process [J]. Science China Technological Sciences, 2010, 53(3): 870-874.
- [37] ZHOU P, ZHU N, XU C, et al. Mechanical removal of SiC by multi-abrasive particles in fixed abrasive polishing using molecular dynamics simulation [J]. Computational Materials Science, 2021, 191: 110311.

作者简介: 王婉,女,1998年出生,硕士研究生。主要研究方向为金属材料摩擦学行为分子动力学模拟。

E-mail:wangwan@mail.nwpu.edu.cn

周青,男,1988年出生,博士,副教授,博士研究生导师。主要研究方向为材料强韧化及摩擦学表面防护。

E-mail:zhouqing@nwpu.edu.cn

华东鹏,男,1996年出生,博士研究生。主要研究方向为金属基复合材料材料摩擦学行为分子动力学模拟。

E-mail:hdp@mail.nwpu.edu.cn

李硕,男,1989年出生,博士。主要研究方向为金属基复合材料摩擦学行为分子动力学模拟。

E-mail:shuoli2020@mail.nwpu.edu.cn

王志军,男,1984年出生,博士,教授,博士研究生导师。主要研究方向为金属材料设计、制备及性能调控。

E-mail:zhjwang@nwpu.edu.cn

王海丰(通信作者),男,1981年出生,博士,教授,博士研究生导师。主要研究方向为材料磨损与防护。

E-mail:haifengw81@nwpu.edu.cn