

· 成果简介 ·

纳米切削基础理论及相关关键技术研究

房丰洲* 张效栋

(天津大学精密测试技术及仪器国家重点实验室;天津微纳制造工程技术中心,天津,300072)

[关键词] 纳米切削,切削机理,最薄切屑,粒子注入,微刀具

纳米制造是物理、化学、生物、材料、电子、机械等多学科的新型交叉领域,是支撑纳米科技成果走向应用的重要基础。作为纳米精度制造的重要手段,纳米切削是整个先进制造产业发展的核心技术之一。由于纳米切削过程的高速瞬态过程不易表征和材料原子级去除的机制不明确,在世界范围内还没有形成成熟的纳米切削理论,严重影响了纳米切削技术的发展。同时,由于其研究对象的特殊性,纳米切削理论发展需要和其他基础学科的前沿发展成果紧密地结合在一起,形成一门多学科交叉的理论体系,进而指导实际纳米级切削技术。因此,开展纳米切削基础理论及相关新工艺、新方法研究,对于提升我国先进制造水平具有重要意义。

1 基于推挤为主因的纳米切削理论

切削加工领域一直采用剪切理论对材料去除方式进行分析 and 指导。大量研究表明,当纳米切削时由于尺寸效应和刃口效应的存在,剪切理论已不能完全解释纳米级表面的形成过程。项目组于1998年提出了推挤变形为主因的材料去除模型,并于2005、2007年开展了深入研究^[1],有效解释了纳米切削过程中加工表面的产生。通过近年在机理研究、实验分析、加工极限等方面进一步完善了纳米尺度材料去除理论。

分子动力学分析是进行纳观尺度研究的重要手段,但由于分子动力学在仿真过程中存在边界近似处理,造成小范围的仿真误差较大,而大范围的仿真又会带来处理效率低的问题。针对此问题,结合分子动力学和有限元分析的优点,建立了材料纳观迁移多尺度分析模型。通过对纳米压痕过程进行多尺度的方法模拟、较小规模的分子动力学方法模拟及

大规模的分子动力学模拟对比,验证了多尺度模拟与大规模分子动力学仿真具有很好一致性,而小范围的分子动力学分析因忽略了远场弹性变形的影响而存在较大的偏差。由于多尺度分析在计算效率上远远高于大规模分子动力学仿真,有效扩展了仿真分析所能达到的尺度规模,使模拟结果与实际加工更好的相结合^[2]。

借助建立的三维纳米切削仿真平台对典型材料(如单晶硅^[1]、单晶铜^[2]、锗^[3-5]、PMMA^[6]等)进行了纳米切削仿真实验。在纳米切削分析过程中,随着切削距离的增大,工件原子不断在刀具前方堆积从而形成了切屑。刀具两侧也有一些原子出现,从而形成了测流。刀具切过工件之后,刀具后方的工件发生了弹性恢复,验证了推挤变形材料去除机理。同时,通过分析切削过程中的晶态演变,以单晶 Ge 切削为例,切削过程中 4 配位(对应于 α -Ge)的原子数逐渐减少,而 6 配位(对应于 β -Ge)的原子数迅速增大,说明单晶硅纳米切削过程中发生了相变,单晶材料向多晶和非晶状态的转变,从而从本质上揭示了推挤变形的原因^[3]。

为了从实验方面验证和完善推挤变形材料去除机理,采用了斜切实验(Tapper Cutting)对切削不同厚度时的表层/亚表层状态和晶态进行了测试分析。利用拉曼光谱仪实现单晶硅表面的无损探测,并测得单晶硅表面非晶层的厚度与单晶硅表层的残余应力^[7]。通过对斜切后的单晶硅表面进行拉曼光谱测试,发现单晶峰三重简并为明显的三个宽峰,从而证明了加工过程中单晶硅产生相变,并在加工后的单晶硅表面残留一层非晶层,非晶硅与单晶硅层的晶格失配以及单晶硅表面的损伤使得单晶硅表层留有残余应力,并基于该基础对加工过程中的晶向变化

* E-mail: fzfang@tju.edu.cn

本文于2014年7月2日收到。

进行相应的观察,这些结果与多尺度分析结果吻合。并搭建了拉曼光谱在线测量,对切削过程中的相变信息,应力与温度引起的峰的位移进行相应的获取。

2 稳定可控最薄切屑的探索

纳米切削的核心是实现可控的稳定去除加工,因此,稳定可控最薄切屑的研究是纳米切削的重要研究领域。在纳米加工中,由于刀具刃口半径相对于切削深度已不能忽略,当切削深度到达某个阈值时,并没有切屑产生,而只有材料凸起(pile-up),此时的切削深度阈值称为最小切深。当切削深度继续减小至某值时,甚至材料凸起都不能明显地观察到。因此,提出了新的切屑产生判断标准,即被加工材料原子刀具进给方向位移分布构型,开展纳米切削最小去除量的研究^[8]。通过实验分析和理论推导,单晶铜纳米切削过程中产生切屑的临界负前角为 $-60^{\circ}\sim-65^{\circ}$ 之间。即产生切屑的最小切削深度与刀具刃口半径之比在 $0.094\sim 0.134$ 之间。当负前角小于 -70° 时,只有凸起和耕犁现象产生而没有切屑。当负前角小于 -80° 时,由于工件表面与刀具之间空间的限制,甚至连凸起都几乎不会产生。基于分子动力学切削研究结果,提出了刀具刃口半径最小可为 10 nm ,再小已无实际意义。

对纳观迁移机理进行实验验证,需要具有纳米级刃口刀具。为了获得具有精确特征尺寸、锋利刃口半径及各种形状的微细切削刀具,搭建了微刀具实验平台,利用聚焦粒子束(FIB)的无掩模、灵活性和精度高等特点来实现纳米刃口刀具的制备^[9]。并开展了聚焦粒子束加工工艺及加工质量因素的系统研究,如材料深度方向存在粒子注入所引起的侧向损伤,粒子注入过程中在加工材料表面产生的沟道效应等。同时,借助AFM和SEM结合的方法实现了纳米刃口刀具刃口半径的精确测量,为纳米刃口微刀具制备提供了质量保证。并通过聚焦粒子束技术制备纳米刃口的微刀具,实现了切屑最薄为 6 nm 的稳定切削。

3 脆性材料纳米切削新方法

由于硬脆材料具有脆性大、断裂强度和屈服强度比较接近的特点,被加工表面易产生裂纹和崩碎等缺陷,硬脆材料的高效切削加工一直是超精密加工领域的难题。基于推挤变形材料去除理论,提出了粒子注入辅助纳米加工(Nanometric machining

of ion implanted materials-NiIM)新方法^[10,11],通过粒子注入辅助方式改变要加工的工件材料表层性能,从而实现高效的纳米切削。重点研究了粒子注入表面的材料、机械和光学特性变化,研究粒子注入过程对材料机械性能影响和纳米去除过程中材料晶格变化、应力应变及刀具摩擦磨损等基础理论。结合透射电镜、扫描电镜、纳米压痕、原子力显微镜等测试对加工表面相变、机械性能改变等进行有效表征和分析。采用分子动力学模拟对粒子注入后的单晶硅材料切削机理进行研究。粒子注入在材料内部形成缺陷,在切削过程中,以这些缺陷为核心,吸收刀具引入的能量,并阻止刀具对材料产生的位错和滑移。当进入平稳切削过程后,内部缺陷在自身弛豫作用下实现恢复,切削过程与正常切削相同。

通过实验发现粒子注入有利于改善硬脆材料的可加工性,经过粒子注入后单晶硅的脆塑转变深度增加约四倍(脆塑转变深度由 236 nm 增加到 923 nm),成功实现了平面和自由曲面硅镜的纳米切削^[10]。进行了大量光学晶体材料粒子注入纳米切削实验,光学晶体材料的脆塑转变深度均有不同程度的提高,部分材料甚至提高了十几倍,从而验证了新方法的普适性。成功应用于GaP晶体微棱锥抗反射层的加工,所产生的THz波输出效率提高了 16% ^[12]。

4 黑色金属材料纳米切削新方法

以钢铁材料为代表的黑色金属是用途最为广泛的工程材料之一,由于其生产技术成熟、成本低廉、功能多样化而成为加工领域常见的被加工材料之一。研究表明,在切削黑色金属时金刚石刀具会发生严重的化学磨损,一般认为黑色金属材料不适用于超精密切削。但是,广阔的应用需求和制造能力的矛盾使得研究者们迫切需要深入探索黑色金属在金刚石刀具纳米切削中的磨损内在机制,以求扩展黑色金属的超精密加工手段,进而带来巨大的社会效益。

金刚石切削钢铁材料易于产生机械磨损和化学磨损。由于金刚石是现已知物质中最硬的,所以机械磨损在金刚石的总磨损量中只占很小部分。严重影响金刚石刀具寿命和加工精度的因素就是化学磨损,主要在于温度升高引起的石墨化,碳原子向钢铁材料中扩散,以及氧化和生成碳化物结构等方面。围绕这一制造难题,各国研究者从加工工艺、刀具、材料等多方面探索改善金刚石刀具加工黑色金属时的磨损。主要方法包括保护气氛切削、低温切削、超

声振动辅助切削、刀具改善以及工件表面改性等。

研究组主要在超声振动辅助切削和工件材料表面改性方面开展了相关研究,并开发了相关切削装置,成功实现了碳钢材料的超精密切削。采用开发的装置可直接切削 Nak80 及 Stavax 模具钢,并使表面粗糙度 $Ra < 8\text{nm}^{[13]}$ 。同时,还研究了表面改性方法抑制金刚石刀具磨损,提出了整体单相可控氮化铁粉末冶金钢这一新型模具材料,初步切削实验已经证明了其具有较好的金刚石可切削性^[14],此新材料的研制有望进一步突破黑色金属无法超精密加工的瓶颈。

5 小结

目前,纳米切削基础理论研究仍面临着挑战,需要在今后的工作中深入开展以下三方面工作:

(1) 更多地结合其他新的基础学科(例如晶体学、纳米力学、原子物理、量子力学等),深入探索原子尺度下量子效应对切削机理的影响;

(2) 结合纳米精度器件在光学领域的应用,研究复杂曲面及微纳结构纳米切削加工机理及使用性能分析;

(3) 探索更多纳米切削加工质量表征技术,开发更精密稳定的切削加工设备,为纳米切削理论体系建立提供更强大的实验支持。

致谢 感谢朱朋哲、徐宗伟、宫虎、赖敏、陈耘辉、兀伟、李占杰、徐飞飞、王金石对本研究工作的贡献。感谢国家自然科学基金委员会重大研究计划重点项目支持(90923038)。

参 考 文 献

- [1] Fang FZ, Wu H, Zhou W, et al. A study on mechanism of nano-cutting single crystal silicon. *Journal of Materials Processing Technology*, 2007, 184(1-3): 407—210
- [2] Zhu P Z, Hu Y Z, Fang F Z, et al. Multiscale simulations of nanoindentation and nanoscratch of single crystal copper. *Applied Surface Science*, 2012, 258(10): 4624—4631
- [3] Zhu PZ, Fang F Z. Molecular dynamics simulations of nanoindentation of monocrystalline germanium. *Applied Physics A*, 2012, 108(2): 415—421
- [4] Lai M, Zhang X D, Fang FZ, et al. Study on nanometric cutting of germanium by molecular dynamics simulation. *Nanoscale research letters*, 2013, 8: 13
- [5] Lai M, Zhang X D, Fang FZ. Nanoindentation-induced phase transformation and structural deformation of monocrystalline germanium: a molecular dynamics simulation investigation. *Nanoscale research letters*, 2013, 8: 353
- [6] Yuan DD, Zhu PZ, Fang FZ, et al. Study of nanoscratching of polymers using molecular dynamics simulations. *Science China-Physics Mechanics & Astronomy*, 2013, 56(9): 1760—1769
- [7] Xu FF, Zhang XD, Fang FZ. Characterization of single point diamond machined single-crystal silicon. *Nanotechnology and Precision Engineering*, 2013(11): 485—491 (in Chinese)
- [8] Lai M, Zhang XD, Fang FZ. Study on critical rake angle in nanometric cutting. *Applied Physics A: Materials Science & Processing*, 2012, 108(4): 809—818
- [9] Xu ZW, Fang FZ, Zhang SJ, et al. Fabrication of micro DOE using micro tools shaped with focused ion beam. *Optics Express*, 2010, 18(8): 8025—8032
- [10] Fang FZ, Chen YH, Zhang XD, et al. Nanometric cutting of single crystal silicon surfaces modified by ion implantation. *CIRP Annals-Manufacturing Technology*, 2011, 60(1): 527—530
- [11] Chen YH, Fang FZ, Xu ZW, et al. Surface modification for brittle monocrystalline materials by MeV ions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2012, 272: 433—436
- [12] Hu XK, Li Y F, Fang FZ, et al. Enhancement of terahertz radiation from GaP emitters by subwavelength antireflective micropylamid structures. *Optics Letters*, 2013, 38: 2053—2055
- [13] Li ZJ, Fang FZ, Gong H, et al. Review of diamond-cutting ferrous metals. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2013, 68(5—8): 1717—1731
- [14] Li ZJ, Fang FZ, Gong H, et al. Effects of surface modifications on steel's machinability in single-point diamond turning. *International Journal of Precision Technology*, 2013, 3(2): 105—116
- [15] Fang FZ, Zhang XD, Weckenmann A, et al. Manufacturing and measurement of freeform optics. *CIRP Annals-Manufacturing Technology*, 2013, 62(2): 823—846

Fundamental Study and Progress of Nano Cutting

Fang Fengzhou Zhang Xiaodong

(State Key Laboratory of Precision Measuring Technology and Instruments, Centre of MicroNano Manufacturing Technology (MNMT), Tianjin University, 300072, China)

Key words Nano cutting; Cutting mechanism; Minimum chip thickness; Ion implantation; NiIM; Micro tools