

单晶硅纳米切削中 C---C 键断裂对金刚石刀具磨损的影响

王治国 张鹏 陈家轩 白清顺 梁迎春

Effect of C---C bond breakage on diamond tool wear in nanometric cutting of silicon

Wang Zhi-Guo Zhang Peng Chen Jia-Xuan Bai Qing-Shun Liang Ying-Chu

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 64, 198104 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.198104

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.198104>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I19>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

添加  $\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2$  合成氢掺杂金刚石大单晶及其表征

[Crystal growth and characterization of hydrogen-doped single diamond with  \$\text{Fe}\(\text{C}\_5\text{H}\_5\)\_2\$  additive](#)

高质量高取向 (100) 面金刚石膜的可控性生长

[Preparation of the high-quality highly \(100\) oriented diamond films with controllable growth](#)

物理学报.2015, 64(2): 028101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.028101>

锌添加对大尺寸金刚石生长的影响

[Effect of additive zinc on larger diamond crystal growth](#)

物理学报.2014, 63(24): 248104 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.248104>

高温高压下掺硼宝石级金刚石单晶生长特性的研究

[Studies on synthesis of boron-doped Gem-diamond single crystals under high temperature and high pressure](#)

物理学报.2014, 63(19): 198101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.198101>

氮氢共掺杂金刚石中氢的典型红外特征峰表征

[Characterization of typical infrared characteristic peaks of hydrogen in nitrogen and hydrogen co-doped diamond crystals](#)

物理学报.2014, 63(4): 048101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.048101>

# 单晶硅纳米切削中C—C键断裂对 金刚石刀具磨损的影响\*

王治国 张鹏<sup>†</sup> 陈家轩 白清顺 梁迎春

(哈尔滨工业大学机电工程学院, 哈尔滨 150001)

(2015年4月8日收到; 2015年7月9日收到修改稿)

本文基于分子动力学方法模拟金刚石刀具纳米切削单晶硅, 从刀具的弹塑性变形、C—C键断裂对碳原子结构的影响以及金刚石刀具的石墨化磨损等方面对金刚石刀具的磨损进行分析, 采用配位数法和6元环法表征刀具上的磨损碳原子. 模拟结果表明: 在纳米切削过程中, 金刚石刀具表层C—C键的断裂使其两端碳原子由 $sp^3$ 杂化转变为 $sp^2$ 杂化, 同时, 表面上的杂化结构发生变化的碳原子与其第一近邻的 $sp^2$ 杂化碳原子所构成的区域发生平整, 由金刚石的立体网状结构转变为石墨的平面结构, 导致金刚石刀具发生磨损; 刀具表面低配位数碳原子的重构使其近邻区域产生扭曲变形, C—C键键能随之减弱, 在高温和高剪切应力的作用下, 极易发生断裂; 在切削刃的棱边上, 由于表面碳原子的配位严重不足, 断开较少的C—C键就可以使表面6元环中碳原子的配位数都小于4, 导致金刚石刀具发生石墨化磨损.

**关键词:** 分子动力学, 纳米切削, 金刚石刀具磨损, 6元环法

**PACS:** 81.40.Pq, 81.05.ug, 31.15.at

**DOI:** 10.7498/aps.64.198104

## 1 引言

金刚石凭借其高硬度、高热导率、低摩擦系数、低热膨胀系数以及可以刃磨出极其锋利的切削刃等优良特性, 被认为是最理想的刀具材料之一<sup>[1,2]</sup>. 金刚石刀具被广泛的用于硅、碳化硅等脆性材料的纳米切削, 可以获得无亚表面损伤和极高表面粗糙度的加工表面<sup>[3-5]</sup>. 但是金刚石刀具在切削过程中的高磨损率一直是令人十分头疼的问题<sup>[6-8]</sup>, 严重的磨损会使材料的去除机理由塑性转变为脆性, 导致加工表面的表面完整性大幅下降<sup>[9]</sup>. 因此更好地理解金刚石刀具的磨损机理对于抑制刀具磨损、提高刀具使用寿命具有十分重要的意义.

Zong等<sup>[8]</sup>发现硅片在经过金刚石刀具纳米切削后, 加工表面中出现了碳化硅和类金刚石碳的硬质颗粒. 这两种硬质颗粒的形成都是由刀具表面碳原子扩散进入到加工表面中引起的. 当硬质颗粒形

成后, 它们对刀具表面进行刻划和耕犁, 导致刀具发生严重的沟槽磨损<sup>[6,10]</sup>. Jia等<sup>[11]</sup>使用拉曼光谱发现在切削光学玻璃的金刚石刀具的后刀面上存在着少量的石墨碳, 这说明金刚石刀具在切削过程中发生了石墨化磨损. 在加工表面的剧烈摩擦作用下, 刀具表面的石墨会被去除、扩散进入到工件中, 并在后刀面上留下微沟槽. 另外, 在金刚石刀具的抛光过程中, 刀具表面上不可避免地会形成一层非晶碳<sup>[12]</sup>. 非晶碳的力学性能明显低于单晶金刚石, 在切削过程中极易发生磨损. 因此, Zong等<sup>[13]</sup>针对抛光后的金刚石刀具提出一种热化学处理方法. 使用该方法可以有效地将抛光后刀具表面的非晶碳去除, 刀具的力学性能得到明显的提高.

受现有观测技术的局限, 目前还无法从原子的角度来揭示金刚石刀具的磨损机理, 只能通过宏观的实验结果对金刚石刀具的磨损进行分析<sup>[6-8,10,11]</sup>. 作为实验研究强有力的补充, 分子动力学仿真方法已经被成功地应用于金刚石刀具磨

\* 中国博士后科学基金 (批准号: 2013M541362) 和黑龙江省自然科学基金 (批准号: E201308) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: zphit@hit.edu.cn

损的研究 [1,9,14-16]. Narulkar 等 [1] 模拟了金刚石刀具纳米切削铁, 首次在纳米切削的 MD 模拟中观察到金刚石刀具的石墨化现象, 验证了金刚石刀具在切削铁时的磨损机理, 即金刚石刀具先发生石墨化, 然后再扩散进入到工件中. Goel 等 [14,15] 模拟了金刚石刀具纳米切削单晶硅和碳化硅的过程, 发现碳化硅的磨粒作用以及切削引起的高温, 会使金刚石刀具上的  $sp^3$  杂化碳原子转变为  $sp^2$  杂化, 导致金刚石刀具的磨损. 通过对碳原子径向分布函数的分析, C—C 键键长在 0.142 nm 处出现拐点, 因此他认为金刚石刀具发生了石墨化磨损, 但并没有给出刀具石墨化的原子结构示意图. 曹等 [16] 发现金刚石刀具在纳米切削单晶硅后, 其切削刃的两侧出现了层状结构的碳原子, 这直接证明金刚石刀具发生了石墨化磨损. 在计算石墨化磨损率时, 他用配位数由 4 变为 3 的碳原子来描述刀具上的石墨化碳原子.

到目前为止, MD 模拟研究刀具磨损的文献 [9, 14, 15] 主要是从扩散磨损的角度来分析金刚石刀具的磨损, 而对于刀具表面形态变化的研究还很少. 因此, 本文借助于分子动力学方法, 模拟金刚石刀具纳米切削单晶硅, 通过分析 C—C 键断裂对刀具表面碳原子的结构变化的影响来研究金刚石刀具的磨损, 并对金刚石刀具表面的石墨化磨损进行初步的分析.

## 2 纳米切削的分子动力学建模

### 2.1 仿真模型

金刚石刀具纳米切削单晶硅的 MD 仿真模型如图 1 所示. 其中, 工件尺寸为  $30 \text{ nm} \times 15 \text{ nm} \times 12 \text{ nm}$  ( $x \times y \times z$ ), 大约  $2.7 \times 10^5$  个硅原子, 刀具尺寸为  $6 \text{ nm} \times 7 \text{ nm} \times 3 \text{ nm}$ , 大约  $2.1 \times 10^4$  个碳原子. 详细的切削参数见表 1. 本文的主要内容是研究金刚石刀具的磨损, 因此刀具与工件一同被设置为可变形体. 刀具与工件被划分为三层: 牛顿层、恒温层和固定层. 固定层的作用是防止工件在切削过程中产生整体刚性移动. 恒温层的作用是通过调整原子速度, 将该层的温度控制在指定的范围内, 将来自于牛顿层的热量吸收, 以免牛顿层的温度过高. 牛顿层和恒温层的原子都满足经典牛顿运动定律. 在模拟过程中, 恒温层的温度始终控制在 293 K.  $z$  方向采用周期性边界条件, 其他方向上的自由表面均采用自由边界条件.

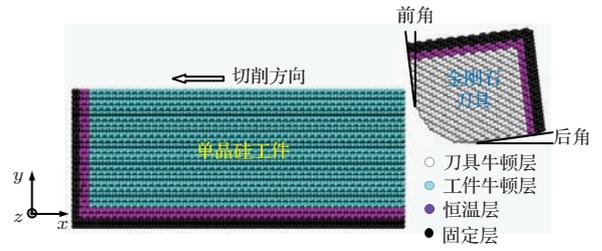


图 1 金刚石刀具纳米切削单晶硅的 MD 仿真模型  
Fig. 1. Model for MD simulation of nanometric cutting of silicon using diamond tool.

表 1 本文使用的切削参数  
Table 1. Cutting parameters using in this paper.

前后刀面的晶向	(111) 和 ( $\bar{1}\bar{1}2$ )
刀具前后角/(°)	-7 和 7
刃口半径/nm	3
背吃刀量/nm	3
切削方向	(111)[ $\bar{1}01$ ]
时间步长/fs	2

本文所使用刀具的前后刀面分别为金刚石的 (111) 面和 ( $\bar{1}\bar{1}2$ ) 面, 刀具的表面形貌如图 2 所示. 从图 2(a) 中可以看出, 尽管后刀面为 ( $\bar{1}\bar{1}2$ ) 面, 但实际上它是由 ( $\bar{1}\bar{1}1$ ) 面的台阶排列而成. 由于受到表面结构缺陷的影响, 刀具表面碳原子的配位数都小于 4, 如图 2(b) 所示. 但 {111} 面实际上是由两层碳原子构成, 最外层 {111} 面上的表面碳原子的配位数为 3, 内层的配位数为 4. 刀具两侧棱边和台阶边界上的碳原子的配位数都为 2. 切削刃刃口部分由金刚石 {100} 面构成, 表面碳原子的配位数为 2. 在单晶硅的纳米切削实验中, 当加工表面为 (111) 面时, 会使金刚石刀具快速地产生磨损 [17], 因此在本文中 choice 单晶硅 (111) 面做为加工表面.

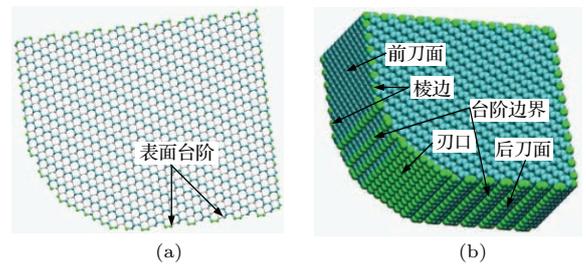


图 2 金刚石刀具的表面形貌 (a) 主视图; (b) 三维视图. 原子根据其配位数字着色, 绿色、青色、白色分别表示配位数为 2, 3, 4 的原子

Fig. 2. Surface morphology of diamond tool: (a) main view; (b) 3D view. Atoms are colored according to their coordination number, green, cyan, white color represent atoms with coordination number 2 and 3 and 4 respectively.

## 2.2 势函数

Tersoff 势<sup>[18]</sup>是典型的三体势,适用于描述以共价键结合的原子间的相互作用,被广泛地用于碳、硅等共价键材料的计算<sup>[1,15]</sup>.因此在模拟过程中,使用 Tersoff 势描述 C—C 和 Si—Si 原子间的相互作用,其表达式如下:

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}, \quad (1)$$

$$V_{ij} = f_C(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})], \quad (2)$$

式中,  $E$  为体系的总能量,  $V_{ij}$  为原子  $i$  与  $j$  之间的成键能量,  $r_{ij}$  为原子  $i$  与  $j$  之间的距离,  $f_A$  和  $f_R$  分别为对势的吸引项和排斥项,  $f_C$  为截断函数,  $b_{ij}$  为吸引势函数.

Morse 势<sup>[19]</sup>虽然为两体势,但其能够比较精确地描述 C—Si 原子间的相互作用,其表达式为

$$U(r_{ij}) = D[e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}], \quad (3)$$

式中,  $D$  和  $\alpha$  分别表示结合能和弹性模量,  $r_0$  表示原子之间的平衡距离.  $D = 0.435$  eV,  $\alpha = 46.487$  nm<sup>-1</sup>,  $r_0 = 0.19475$  nm<sup>[19]</sup>.

本文所使用的分子动力学软件为 LAMMPS(large-scale atomic/molecular massively parallel simulator)<sup>[20]</sup>.在模拟过程中,选择微正则系综(NVE)和 Velocity-Verlet 积分方法.

## 3 仿真结果与分析

图 3 所示为金刚石刀具切削 30 nm 时的弹塑性变形.从图中可以看出,金刚石刀具发生了明显

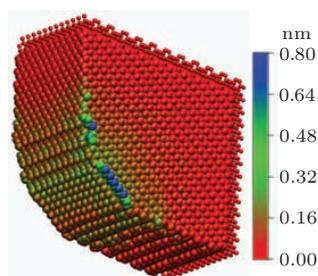


图 3 切削 30 nm 时金刚石刀具的弹塑性变形.原子根据其晶格点的距离着色.小原子表示固定层中的原子,大原子表示牛顿层和恒温层中的原子

Fig. 3. Elastic-plastic deformation of diamond tool at 30 nm cutting distance. Atoms are colored according to the distance between them and their lattice point. Small atoms represent atoms of fixed layer, big atoms represent atoms of newton layer and thermo-static layer.

的变形.其中,变形最严重的部位是切削刃,其余部位的变形相对较轻,而且距离固定层越近,刀具的变形程度越轻.这是因为在单晶硅的纳米切削过程中,切削刃需要提供足够高的静压才能使其周围的单晶硅发生相变,实现单晶硅的塑性域去除<sup>[21]</sup>,同时切削刃也就承受着极高的压力,使其产生严重的变形.由于切削刃两侧棱边的结构缺陷非常严重,在相变硅的挤压作用下,导致棱边上的变形最为严重,该处碳原子的最大移动距离达到 0.8 nm.

### 3.1 配位数法描述的金金刚石刀具磨损

尽管金刚石刀具在切削过程中产生了明显的变形,但是在图 3 中无法直观地将刀具上的弹性变形和塑性变形区分开来.弹性变形是可逆的,当刀具中的应力被释放后,变形就会消失,刀具会恢复到其初始状态,不会影响到刀具的切削性能,而塑性变形是不可逆的,即使应力被释放,刀具也不会恢复到其初始状态,这会对其切削性能产生影响,甚至会改变材料的去除方式.如图 4 所示,本文通过碳原子配位数的变化,即碳原子杂化结构的变化,来描述金刚石刀具的塑性变形.其中,原子 1 和 2 是前刀面表层断裂的 C—C 键两端的碳原子,原子 3—5 是原子 1 在前刀面上的第一近邻原子,原子 6 和 7 是后刀面上的两个重构原子,原子 8 和 9 是重构原子附近断键两端的碳原子.所有断开的 C—C 键都是刀具表层 {111} 面间的 C—C 键.原子 1, 2, 8, 9 在断键之前是 sp<sup>3</sup> 杂化,原子 3—5 是 sp<sup>2</sup> 杂化,原子 6 和 7 是 sp 杂化.

对比图 3 和图 4 发现,尽管切削刃的两侧棱边上产生了严重的变形,但以弹性变形为主,只有少量的碳原子因为严重的弹性变形而导致其杂化结构发生变化.从图 4 中可以看出,金刚石刀具上发生杂化结构变化的碳原子共有两种:一是, C—C 键断裂引起碳原子由 sp<sup>3</sup> 杂化转变为 sp<sup>2</sup> 杂化(sp<sup>3</sup>—sp<sup>2</sup> 转变),配位数由 4 减为 3;二是,低配位数碳原子重构引起碳原子由 sp 杂化转变为 sp<sup>2</sup> 杂化,配位数由 2 增至 3.其中,碳原子发生 sp<sup>3</sup>—sp<sup>2</sup> 的转变会使金刚石刀具产生磨损<sup>[14,15]</sup>,而发生 sp—sp<sup>2</sup> 的转变会使低配位数的碳原子更稳定,因此,前者才是刀具磨损中的主要研究对象.发生 sp<sup>3</sup>—sp<sup>2</sup> 转变的碳原子都分布在刀具的两侧棱边上以及后刀面的重构原子附近.在刀具的两侧棱边上,由于其结构强度较低, C—C 键键能随之减弱,在高温<sup>[9,22]</sup>和剪切应力<sup>[23,24]</sup>的作用下极易断裂,使断键两端碳原子的杂化结构发生变化.

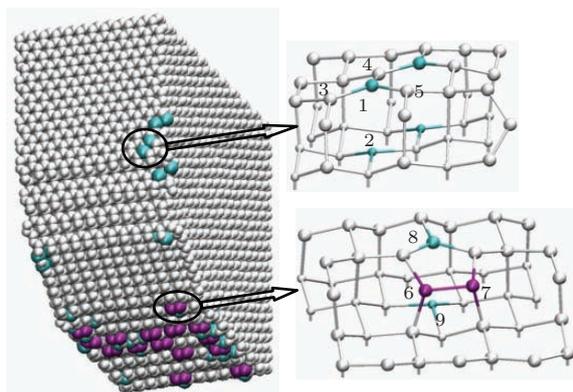


图4 配位数法描述的金刚石刀具的塑性变形. 右侧两个插图分别为刀具前后刀面上发生断键区域的放大图, 大、小原子分别表示刀具表面和刀具内部原子, 青色、紫色和白色分别表示配位数减少、增加和不变的碳原子

Fig. 4. Plastic deformation of diamond tool described by coordination number method. Two inserts represent enlarged views of regions with C—C bonds broken in surface layer of rake and flank face, big and small atoms indicate atoms of surface and internal of tool respectively, cyan and purple and white color represent atoms with increasing and decreasing and constant coordination number respectively.

从图4的局部放大视图中可以看出, C—C键断裂不仅使其两端碳原子的杂化结构发生变化, 还会使其近邻的表面区域的空间结构也发生变化, 趋近于平面. 图5给出了图4中原子1与其近邻原子间的距离和键角随切削距离的变化曲线,  $r_{12}$ 为原子1和2之间的距离,  $\bar{r}_{1-1}$ 为原子1与其第1近邻原子3—5之间的3个C—C键键长的平均值,  $\bar{\theta}_{1-1}$ 为原子1和原子3—5构成的3个键角的平均值.

在驰豫前, 金刚石的C—C键键长为0.154 nm、键角为109.46°. 而在0—6 nm的初始切削阶段,  $r_{12}$ 增大, 在0.162 nm处波动,  $\bar{r}_{1-1}$ 缩小, 在0.15 nm处波动,  $\bar{\theta}_{1-1}$ 随着切削距离大幅上升, 最终达到118.5°. 驰豫后刀具表层碳原子间的键长和键角的变化说明金刚石刀具的表面形貌在驰豫过程中发生了轻微的变化, 这与Liu等使用密度泛函计算的结果基本一致<sup>[25]</sup>. 在6—20 nm的切削阶段,  $r_{12}$ 大幅下降, 在0.158 nm处剧烈波动, 最大波动幅度达到0.015 nm,  $\bar{r}_{1-1}$ 小幅下降, 在0.148 nm处轻微波动,  $\bar{\theta}_{1-1}$ 也小幅回落, 在116°附近剧烈波动. 此时刀具进入稳定的切削阶段, 其承受的压力增加, 使 $r_{12}$ 大幅减小, 说明刀具处于压缩状态. 在共价键材料中, C—C键键能对键长和键角的变化十分敏感, 键长和键角的剧烈波动会使C—C键键能减弱<sup>[26]</sup>, 当外部提供的能量超过C—C键的键能时, 就会导致其断裂. 当切削距离超过20 nm时,  $r_{12}$ 迅速从

0.154 nm上升到0.22 nm. Tersoff势定义的C—C键键长的极限值为0.21 nm<sup>[20]</sup>, 说明此时原子1和2之间的C—C键已经断裂.

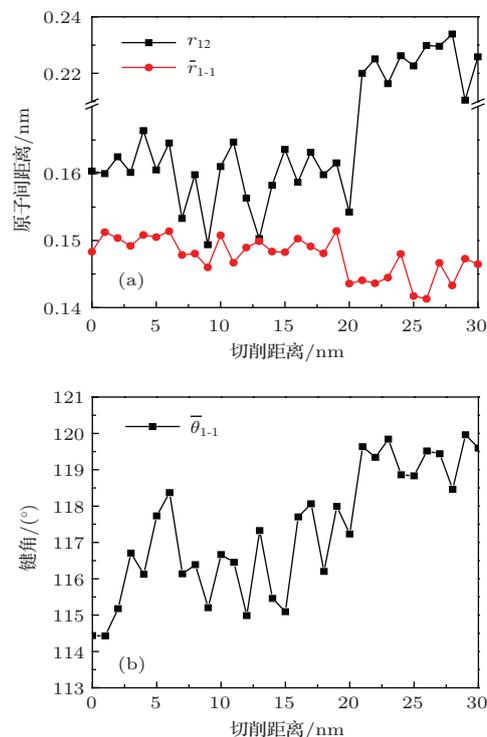


图5 图4中原子1与其近邻原子间的距离和键角随切削距离的变化曲线

Fig. 5. Distance and bond angle between atom 1 and its neighboring atoms in Fig. 4. with cutting distance.

在20—30 nm的切削阶段,  $r_{12}$ 在0.224 nm处波动,  $\bar{r}_{1-1}$ 在0.144 nm处波动,  $\bar{\theta}_{1-1}$ 在119.3°处波动,  $r_{12}$ 和 $\bar{\theta}_{1-1}$ 的波动幅度都明显减弱. 在原子1和2间的C—C键断裂前, 尽管原子3—5都是 $sp^2$ 杂化, 但是由于受到近邻的 $sp^3$ 杂化原子的影响, 它们构成的空间结构仍然是金刚石的立体网状结构. 而在断键后, 原子1发生了 $sp^3$ — $sp^2$ 的转变, 它与原子3—5的杂化结构都为 $sp^2$ 杂化, 与石墨碳原子的杂化结构相同, 同时,  $\bar{r}_{1-1}$ 减小至0.144 nm,  $\bar{\theta}_{1-1}$ 增大至119.3°, 它们构成的空间结构也与石墨的平面结构(键长和键角分别为0.142 nm和120°)非常接近, 说明由原子1和原子3—5构成的表面区域已经局部的石墨化, 使得金刚石刀具发生磨损.

图6给出了图4中原子8与其近邻原子间的距离和键角随切削距离的变化曲线,  $r_{67}$ 为原子6和7之间的距离,  $r_{89}$ 为原子8和9之间的距离,  $\bar{\theta}_{8-1}$ 为原子8与其在后刀面上的3个第一近邻原子构成的键角的平均值. 在0—6 nm的切削阶段,  $r_{67}$ 在0.256 nm处波动,  $r_{89}$ 在0.158 nm处波动,  $\bar{\theta}_{8-1}$

在113.3°处波动,此时原子6和7没有发生重构,原子8和9之间的C—C键也没有断裂.在6—14 nm的切削阶段,  $r_{67}$  迅速下降到0.161 nm,  $r_{89}$  上升至0.164 nm,  $\bar{\theta}_{8-1}$  也上升至115.7°,并且都伴随着剧烈的波动.  $r_{67}$  的下降说明原子6和7发生重构,使  $r_{89}$  和  $\bar{\theta}_{8-1}$  都明显增大,键长和键角的增大以及它们的剧烈波动使原子8和9之间的C—C键键能减弱.当切削距离超过14 nm时,  $r_{89}$  迅速从0.166 nm增至0.228 nm,表明原子8和9之间的C—C键断裂.以上说明低配位数碳原子的重构虽然可以使它们更稳定,但会在其近邻区域内产生严重的扭曲变形,C—C键键能随之减弱,极易发生断裂.

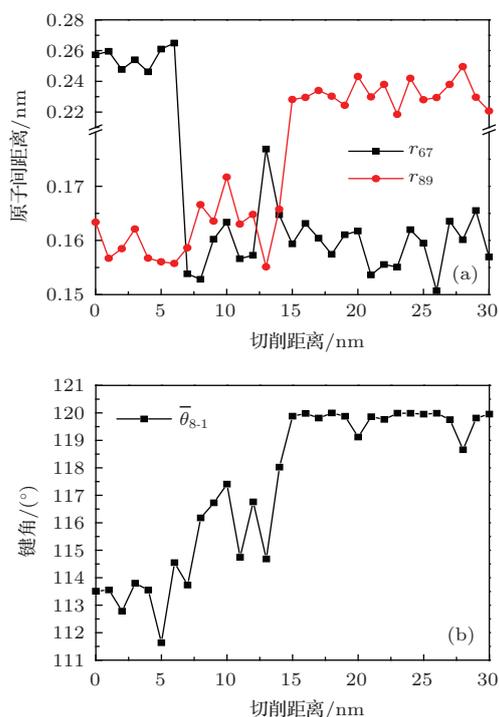


图6 图4中原子8与其近邻原子间的距离和键角随切削距离的变化曲线

Fig. 6. Distance and bond angle between atom 8 and its neighbor atoms in Fig. 4. with cutting distance.

综上所述,金刚石刀具中C—C键的断裂不仅会使其两端碳原子的杂化结构发生变化,还会使该表面区域的空间结构也发生变化.虽然刀具表面碳原子的结构变化(杂化结构和空间结构)不会使刀具立即发生扩散磨损,但是其热力学性能的下降[13,27]会对该区域的磨损产生明显的影响,因此应该将受断键影响发生结构变化的碳原子都定义为磨损原子.但使用配位数法只能得到杂化结构变化的碳原子,却无法将其近邻的空间结构发生变化的碳原子提取出来,因此需要一种新的方法能够将结构变化碳原子都提取出来.

### 3.2 6元环法描述的金刚石刀具磨损

金刚石和石墨都是由6元环(6个原子构成的最小封闭结构)构成,金刚石中的6元环是波纹状的[28],而石墨中的是平面的.其中金刚石结构的碳原子被12个6元环所共有,而石墨结构的碳原子只被3个6元环共有,它们所含的6元环数相差悬殊,因此在本文中采用一种新的表征碳原子结构的方法——6元环法.6元环法描述的金刚石刀具磨损如图7所示.

图7(a)中的磨损碳原子为刀具上6元环数发生变化的碳原子,与图4对比发现,使用6元环法可以将刀具中受断键影响的结构变化碳原子都提取出来,但仍无法辨别金刚石刀具是否发生石墨化磨损.而从图7(b)椭圆所示的区域中可以看出,此时的金刚石刀具已经发生了轻微的石墨化磨损,一共有两处,都位于切削刃的左侧棱边上,上面的椭圆区域内有2个石墨6元环,下面有1个,共16个石墨碳原子.石墨结构的提取方法如下:使用6元环法将配位小于4的碳原子中能够连接成6元环的碳原子提取出来.这样获得的6元环中的碳原子配位数都小于4,即石墨结构.

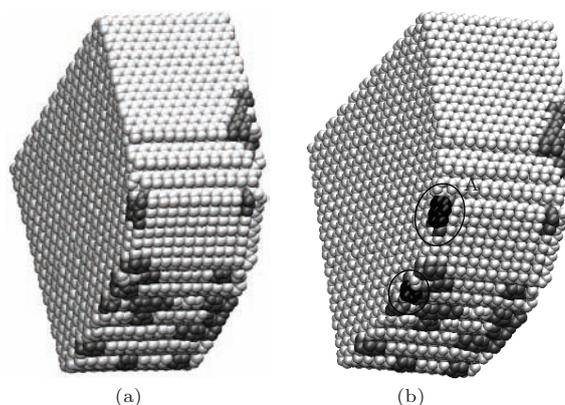


图7 6元环法描述的金刚石刀具磨损 (a) 6元环法; (b) 配位数法和6元环法.灰色表示磨损碳原子,黑色表示石墨碳原子

Fig. 7. Diamond tool wear described by 6-ring method: (a) 6-ring method; (b) coordination number and 6-ring method. Grey color represents wear carbon atoms, black color represents graphitized carbon atoms.

图8所示为图7(b) A区中金刚石的石墨化过程,原子1—4是发生 $sp^3-sp^2$ 转变的碳原子.从图8(a)中可以看出,切削刃的棱边是由只有一个6元环宽的{111}面台阶构成,发生石墨化的2个金刚石结构的6元环就位于台阶的表面上.其中,

有2个碳原子是 $sp^3$ 杂化, 6个是 $sp^2$ 杂化, 2个是 $sp$ 杂化, 而对于前刀面上的2个6元环, 它们所包含的 $sp^3$ 和 $sp^2$ 杂化的碳原子数各为5个. 这说明切削刃棱边上的碳原子的配位严重不足, 特别是 $sp^3$ 杂化碳原子较少, 导致切削刃棱边处的结构强度非常低, C—C键键能也非常弱. 另外, 切削刃刀口处为 $\{100\}$ 面, 切屑沿着其 $\langle 011 \rangle$ 晶向向上运动, 这个晶向的表面微结构是宽0.252 nm、深0.178 nm的原子级微沟槽. 在切削过程中, 硅原子可以嵌入到沟槽较深的位置, 对切削刃棱边上的台阶施加较高的剪切应力. 在高温<sup>[9,22]</sup>和剪切应力<sup>[23,24]</sup>的作用下, 切削刃棱边上的两个 $\{111\}$ 面间C—C键1—2和3—4发生断裂, 使得6元环中的每个碳原子的配位数都小于4, 说明金刚石6元环直接转变成石墨, 导致金刚石刀具的石墨化磨损, 如图8(b)所示. 这与Narulkar等<sup>[1]</sup>得到的模拟结果一致, 进一步验证了Kuznetsov等<sup>[22]</sup>提出的金刚石(111)面直接转变成石墨的理论模型. 但是由于 $\{111\}$ 面间的C—C键没有完全断裂, 形成的石墨片断并不光滑, 有明显的褶皱<sup>[29]</sup>.

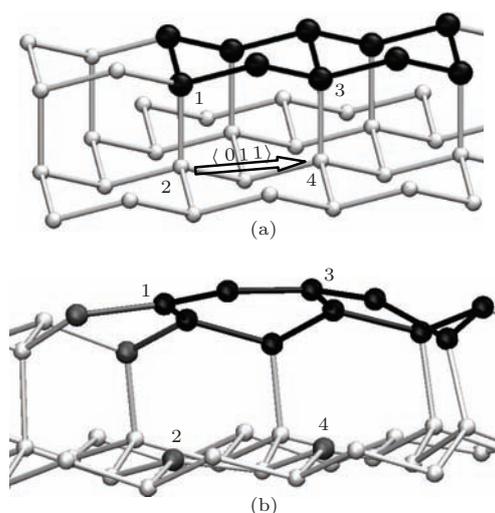


图8 图7(b)中A区的石墨化磨损过程 (a) 弛豫前; (b) 切削后

Fig. 8. Graphitization wear process of A region in Fig. 7(b): (a) before relaxation; (b) after cutting.

石墨化是金刚石刀具的一种常见的磨损方式<sup>[11,30,31]</sup>. 在单晶硅的纳米切削过程中, 虽然石墨化不会使金刚石刀具产生快速磨损, 但是由它引起的扩散磨损会在工件中形成类金刚石碳、碳化硅等硬质颗粒, 最终导致刀具产生严重的沟槽磨损<sup>[8,31]</sup>. 引起金刚石石墨化磨损的主要因素是温度<sup>[9,22]</sup>和剪切应力<sup>[23,24]</sup>. 在纳米切削过程中, 切削速度、背吃刀量和刀具后角等切削参数会对刀具

的温度分布和应力状态产生影响, 那么它们对金刚石刀具的石墨化磨损也会产生不同程度地影响. 切削速度和背吃刀量的增加使刀具的温度升高, 当温度超过金刚石的石墨化温度<sup>[32]</sup>时, 金刚石刀具开始发生石墨化磨损. 当温度继续升高时, 会加剧金刚石刀具的石墨化磨损. 而刀具后角的减小加剧了后刀面与加工表面间的摩擦<sup>[31]</sup>, 刀具的温度和所承受的剪切应力都随之升高. 高剪切应力的出现使金刚石刀具在较低的温度条件下就会发生石墨化磨损<sup>[23]</sup>. 因此, 选取合适的切削参数可以有效的抑制金刚石刀具的石墨化磨损, 有利于延长刀具的使用寿命.

## 4 结 论

本文基于分子动力学方法模拟金刚石刀具纳米切削单晶硅, 从刀具的弹性变形、C—C键断裂对碳原子结构的影响以及金刚石刀具的石墨化磨损等方面研究金刚石刀具的磨损. 研究表明:

1) 金刚石刀具表层 $\{111\}$ 面间的C—C键断裂使其两端的碳原子发生 $sp^3$ — $sp^2$ 的转变, 刀具表面杂化结构发生变化的碳原子与其近邻的3个 $sp^2$ 杂化碳原子之间的键长降至0.144 nm、键角增至 $119.3^\circ$ , 其结构与石墨的平面结构非常接近, 说明刀具表面碳原子的杂化结构和空间结构随着C—C键的断裂发生变化.

2) 刀具表面低配位数碳原子的重构使其近邻的表面区域产生扭曲变形,  $\{111\}$ 面间的C—C键键长和表面平均键角都随之大幅上升, 并且发生十分剧烈波动, 导致 $\{111\}$ 面间的C—C键键能随之减弱, 在高温和高剪切应力的作用下, 极易发生断裂.

3) 采用配位数法可以描述杂化结构发生变化的碳原子, 但无法获取空间结构发生变化的碳原子, 因此在本文中采用一种新的表征碳原子结构的方法——6元环法. 采用6元环法不但能将刀具表面受断键影响的结构变化碳原子提取起来, 而且与配位数法一起使用还可以表征刀具表面的石墨结构, 识别金刚石刀具是否发生石墨化磨损.

4) 切削刃棱边上的碳原子配位严重不足, 导致其结构缺陷严重, C—C键键能随之减弱, 使表层 $\{111\}$ 面间的C—C键在纳米切削过程中容易发生断裂. 并且只需断开较少的C—C键就可以使表面6元环中碳原子的配位数都小于4, 使6元环由金刚

石结构转变为石墨结构, 导致金刚石刀具发生石墨化磨损.

## 参考文献

- [1] Narulkar R, Bukkapatnam S, Raff L M, Komanduri R 2009 *Comp. Mater. Sci.* **45** 358
- [2] Hu M H, Bi N, Li S S, Su T C, Zhou A G, Hu Q, Jia X P, Ma H A 2015 *Chin. Phys. B* **24** 038101
- [3] Fang F Z, Zhang G X 2003 *Int. J. Adv. Manuf. Technol.* **22** 703
- [4] Yan J W, Asami T, Harada H, Kuriyagawa T 2012 *Ann. CIRP* **61** 131
- [5] Yan J W, Zhang Z Y, Kuriyagawa T 2009 *Int. J. Mach. Tool Manu.* **49** 366
- [6] Yan J W, Syoji K, Tamaki J 2003 *Wear* **255** 1380
- [7] Uddin M S, Seah K H W, Li X P, Rahman M, Liu K 2004 *Wear* **257** 751
- [8] Zong W J, Sun T, Li D, Cheng K, Liang Y C 2008 *Int. J. Mach. Tool Manu.* **48** 1678
- [9] Cheng K, Luo X, Ward R, Holt R 2003 *Wear* **255** 1427
- [10] Li X P, He T, Rahman M 2005 *Wear* **259** 1207
- [11] Jia P, Zhou M 2012 *Chin. J. Mech. Eng-En.* **25** 1224
- [12] Yang N, Zong W J, Li Z Q, Sun T 2015 *Int. J. Adv. Manuf. Technol.* **77** 1029
- [13] Zong W J, Zhang J J, Liu Y, Sun T 2014 *Appl. Surf. Sci.* **316** 617
- [14] Goel S, Luo X C, Reuben R L 2011 *Comp. Mater. Sci.* **51** 402
- [15] Goel S, Luo X C, Reuben R L 2013 *Tribol. Int.* **57** 272
- [16] Cao S Y 2013 *M. S. Thesis* (Qinghuangdao: Yanshan University) (in Chinese) [曹思宇 2013 硕士学位论文 (秦皇岛: 燕山大学)]
- [17] Zong W J, Li Z Q, Sun T, Li D, Cheng K 2010 *J. Mater. Process. Tech.* **210** 858
- [18] Tersoff J 1988 *Phys. Rev. B* **37** 6991
- [19] Cai M B, Li X P, Rahman M 2007 *Wear* **263** 1459
- [20] <http://lammps.sandia.gov> [2014]
- [21] Yan J W, Asami T, Harada H, Kuriyagawa T 2009 *Precis. Eng.* **33** 378
- [22] Kuznetsov V L, Zilberberg I L, Butenko Y V, Chuvilin A L, Segall B 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 863
- [23] Gogotsi Y G, Kailer A, Nickel K G 1999 *Nature* **401** 663
- [24] Chacham H, Kleinman L 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 4904
- [25] Liu F B, Wang J D, Chen D R, Zhao M, He G P 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 6556 (in Chinese) [刘峰斌, 汪家道, 陈大融, 赵明, 何广平 2010 物理学报 **59** 6556]
- [26] Gilman J J 1995 *Czech. J. Phys.* **45** 913
- [27] Shamsa M, Liu W L, Balandin A A, Casiraghi C, Milne W I, Ferrari A C 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 161921
- [28] Li L S, Zhao X 2011 *J. Chem. Phys.* **134** 044711
- [29] Qin Y H, Tang C, Zhang C X, Meng L J, Zhong J X 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 016804 (in Chinese) [覃业宏, 唐超, 张春小, 孟利军, 钟键新 2015 物理学报 **64** 016804]
- [30] Ge Y F, Xu J H, Yang H 2010 *Wear* **269** 699
- [31] Zhang J G 2010 *M. S. Thesis* (Harbin: Harbin Institute of Technology) (in Chinese) [张建国 2010 硕士学位论文 (哈尔滨: 哈尔滨工业大学)]
- [32] Gippius A A, Khmel'nitsky R A, Dravin V A, Khomich A V 2001 *Physica B* **308-310** 573

# Effect of C—C bond breakage on diamond tool wear in nanometric cutting of silicon\*

Wang Zhi-Guo Zhang Peng<sup>†</sup> Chen Jia-Xuan Bai Qing-Shun Liang Ying-Chu

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

( Received 8 April 2015; revised manuscript received 9 July 2015 )

## Abstract

It is well known that diamond is one of the most ideal cutting tool for materials, but the rapid tool wear can make surface integrity of the machined surface decline sharply during the nanometric cutting process for a single crystal silicon. Thus, a research on the wear mechanism of the diamond tool is of tremendous importance for selecting measures to reduce tool wear so as to extend service life of the tool. In this paper, the molecular dynamics simulation is applied to investigating the wear of the diamond tool during nanometric cutting for the single crystal silicon. Tersoff potential is used to describe the C—C and Si—Si interactions, and also the Morse potential for the C—Si interaction. The rake and flank faces are diamond (111) and ( $\bar{1}\bar{1}2$ ) planes respectively. A new method, by the name of 6-ring, is proposed to describe the bond change of carbon atoms. This new method can extract, all the worn carbon atoms in diamond tool, whose accuracy is higher than the conventional coordination number method. Moreover, the graphitized carbon atoms in the diamond tool also can be extracted by the combination of these two methods. Results show that during the cutting process, the C—C bond's breaking in the surface layer of the diamond tool leads to the transformation of hybrid structure of the carbon atoms at both ends of the broken bond, from  $sp^3$  to  $sp^2$ . Following to the bond breaking, the bond angle between the surface carbon atoms increases to  $119.3^\circ$  whose hybrid structure has changed, and the length between nearest neighboring atoms quickly decreases to 0.144 nm, indicating that the space structure formed by these carbon atoms has changed from 3D net structure of diamond to plane structure of graphite. Hence, the carbon atoms in the tool surface whose space structure has changed due to bond breaking should be defined as worn carbon atoms, but not only the carbon atoms whose hybrid structure has changed. The structure defects at both edges of the diamond tool are much more serious, which make the energy of C—C bonds at the edges weakened with the enhancement of defects. The bonds with lower energy are broken under the effect of high temperature and shear stress, which also produces the tool wear. The graphitization occurs at the tool of the cutting tool because the structure defects there are the most serious. The reconstruction of the carbon atoms with lower coordination number causes its neighboring region to produce serious distortion, which leads to easy breaking of C—C bonds in this region.

**Keywords:** molecular dynamics, nanometric cutting, diamond tool wear, 6-ring method

**PACS:** 81.40.Pq, 81.05.ug, 31.15.at

**DOI:** 10.7498/aps.64.198104

\* Project supported by the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 2013M541362) and the Natural Science Foundation of Heilongjiang Province, China (Grant No. E201308).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [zphit@hit.edu.cn](mailto:zphit@hit.edu.cn)