

纳米加工过程中金刚石刀具磨损研究的新进展

梁迎春, 郭永博, 陈明君

(哈尔滨工业大学 精密工程研究所, 黑龙江 哈尔滨 150001)

摘要: 总结和分析了近几年来国内纳米加工过程中金刚石刀具磨损的研究方法, 简要阐述了分子动力学模拟的基本原理及其应用情况, 评述了分子动力学等模拟方法在金刚石刀具的热及化学磨损等方面的最新研究进展, 指出了目前研究过程中存在的一些问题, 以及今后研究中值得注意的几个发展方向。

关键词: 纳米加工; 金刚石刀具; 摩擦磨损; 分子动力学

中图分类号: TH38; TH117.2

文献标识码: A

文章编号: 1004-0595(2008)03-0282-07

金刚石刀具具有优异的机械性能, 作为切削刃, 在加工区域可以形成较大的静水压力, 因此广泛用于纳米加工过程中^[1,2]。采用超精密加工技术所得零件的加工精度已达到几十纳米, 其表面粗糙度可达几个纳米^[3]。2006 年, Zong 等^[4,5]采用基于金刚石晶体的动态微观机械强度, 首次在理论上推导出金刚石刀具刃口的极限锋利度。理论计算结果表明, 前刀面为 (110) 晶面的刀具刃口的极限锋利度可达 1~6 nm, 前刀面为 (100) 晶面的刀具刃口极限锋利度则可达 2~5 nm, 并且开发出可以使刃口钝圆半径刃磨到 2~9 nm 数量级的特殊热-机耦合刃磨新工艺。

航天飞行器中的光学器件要求表面粗糙度达到亚纳米级, 而现今加工高精度的微小器件大多采用研磨和抛光等方法获得, 加工过程费时且成本较高。随着金刚石车削技术的发展, 出现了以塑性模式切削脆性材料工件而获得较高表面质量的新方法, 可使在塑性切削模式条件下切削硅的加工精度达到几纳米。但是, 硅、锗等脆性材料促使塑性模式超精密切削加工过程中的金刚石刀具磨损较快^[6]。因此, 深入探讨纳米加工过程中金刚石刀具的磨损机制对纳米加工工艺的发展具有重要意义。

1 金刚石刀具磨损试验

由于金刚石具有很强的各向异性, 不同晶向的物理性能不同, 因此在实际金刚石加工过程中, 刀具前、后刀面的晶向不同, 其磨损的扩展也不相同。

Sharif 等^[7]研究了采用单晶金刚石刀具以塑性模式切削硅的情况, 探讨了不同晶向金刚石作为前刀面的刀具磨损, 以及在其它参数不变情况下不同切削距离对刀具磨损的影响, 发现刀具的磨损主要在后刀面, 这与 Lucca 等^[8]采用原子力显微镜 (AFM) 的测量结果一致。当前刀面晶向为 (110) 时, 刀具受到的推力较小, 所以前刀面晶向为 (110) 比前刀面晶向为 (100) 和 (111) 面更耐磨、刀具寿命更长。Bouwelen 等^[9]的研究结果表明, 随着切削时间增加, 工件和刀具接触表面的温度升高, 刀具磨损是由于 C 原子发生从金刚石 (sp^3) 结构到石墨 (sp^2) 结构的相变。因此在某些情况下, 采用 (110) 面作为刀具前刀面, (100) 面作为后刀面的刀具抗磨损性能更佳。

Ribeiro 等^[10]采用原位纳米压痕设备研究纳米尺度的磨损, 并从能量角度分析其纳米尺度的磨损机制, 发现沿弹性应力轮廓线形成的空隙是引起磨损的主要原因。这些空隙在滑动应力作用下出现裂纹、位错及局部空隙的扩展, 从而导致材料分离并形成磨损。

Yan 等^[11]通过单晶金刚石刀具车削单晶硅试验来研究刀具的磨损。发现刀具的磨损可分为微碎裂和逐渐磨损 2 类, 且其磨损机制取决于切削厚度。采用脆性模式切削的厚度在微米量级, 最终形成切削刃的微碎裂; 而采用塑性模式切削的厚度为几十纳米, 在前刀面形成月牙坑状磨损, 在后刀面最初形成逐渐磨损, 最终形成粗糙的微槽磨损。图 1 所示为在不同切削模式下, 切削距离分别为 1 270 m 以及

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (50675050); 黑龙江省杰出青年基金资助项目 (JC200614)。

收稿日期: 2007-10-26; 修回日期: 2008-03-27 联系人梁迎春, e-mail: gyb0451@sina.com

作者简介: 梁迎春, 男, 1964 年生, 教授, 博士生导师, 目前主要从事超精密加工与纳米加工技术等研究。

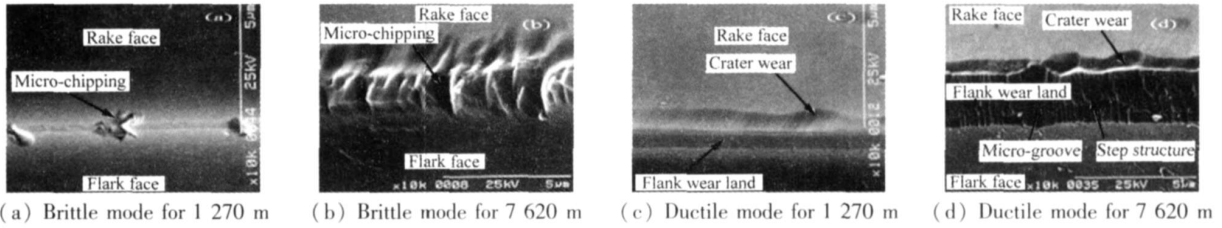


Fig 1 SEM photographs of tool wear at different cutting mode

图 1 不同切削模式下刀具磨损表面形貌的 SEM 照片

7 620 m 时切削刃的磨损表面形貌 SEM 照片^[12],其中图 1(a 和 b)为脆性切削模式,图 1(c 和 d)为塑性切削模式. 刀具磨损对加工表面粗糙度、切屑形状和微切削力影响较大. 当切削距离超过临界值时,切削模式从塑性转变为脆性,加工后表面形成微裂纹,切屑的形状由连续带状转变为丝状、碎片和粉末的混合物. 另外,切削液对塑性方式的切削具有双重效应,切削液能够降低切屑厚度的阈值,但延长了塑性切削模式的距离临界值.

Zhang 等^[13]研究了化学效应对单晶硅纳米刻划磨损变形的影响. 发现在刻划过程中,化学反应对单晶硅纳米磨损的变形起到了重要作用,且在硅样品中发现了非晶层,而非晶层的厚度取决于刻划加载和化学反应的程度. 由于氧原子渗透到非晶层而改变了硅原子的键合形式,降低了发生非晶相变的临界值,从而加速了刀具的磨损.

赵清亮等^[14,15]研究了 AFM 中金刚石针尖的磨损,分析了单晶金刚石车刀在超精密单点切削过程中的磨损. 通过金刚石单点切削试验,考察了对无氧铜、铝合金和单晶硅进行超精密单点切削时金刚石刀具的磨损行为,分析了刀具磨损对被加工材料表面粗糙度的影响,并采用光学显微镜和 AFM 对刀具的不同磨损形态进行了宏观和微观观测. 发现在切削铜时可以使用少氧或者无氧的切削液;在切削铝时可以在刀具表面涂覆润滑剂或隔离膜;在切削单晶硅时需要保证低温和少氧环境,同时采用较小的进给深度和进给量,均可以降低金刚石刀具的磨损.

目前,国内外关于纳米加工过程中刀具磨损的研究大多还局限于刀具磨损的几何特性及其机械特性(如金刚石的各向异性、磨损的表面形貌等),对于纳米尺度下刀具的磨损机制、原子的接触、黏着、磨损现象和能量耗散方式等方面的研究还较少,尤其是对加工过程中刀具的热化学磨损机制还不清楚. 与传统加工相比,纳米加工过程中的材料去除率

非常低,切屑流对刀具磨损的影响较小. 因此,基于连续介质假设的传统理论可能不再有效,需要采用新的理论分析手段.

2 金刚石刀具磨损的计算机模拟

由于纳米加工仅包括加工表面区域几个原子层的范围,很难通过实验观察到加工过程和衡量加工参数,加工现象实质上是断开原子间化学键的结合,实现原子或分子的去除. 当晶粒的特征尺寸在纳米量级范围内时,具有晶粒细小、缺陷密度较高和晶界所占体积分数较大的特点,呈现出许多不同于宏观材料的特性. 比如当晶粒尺寸在 6 ~ 13 nm 范围内时,其屈服强度和流变强度均表现出反常的 Hall-Petch 效应^[16],显然使用传统基于连续介质力学的理论(如有限元法)在纳米尺度分析离散的物理现象已不合适. Shimada 等^[17]通过分子动力学(MD)纳米加工仿真结果与实验结果相比较,发现 MD 方法适用于分析微/纳米切削过程.

分子动力学仿真方法是基于原子和分子角度,通过原子间的相互作用势,求出每个原子所受的力,在选定的时间步长、边界条件、初始位置和初始速度条件下,对有限数目的原子(分子)建立其牛顿运动方程组,得到粒子的经典运动轨迹和速度分布及统计平均,进而得到所需的宏观物理性质. 利用分子动力学能够按照实际晶体结构建立材料模型,改变周围环境条件、切削条件、刀具的几何形状、刀具和工件材料,弥补纳米加工过程中的不足,降低其成本. 因此,分子动力学模拟已成为纳米加工过程中的重要工具.

分子动力学的基本思想是求解各个原子的牛顿力学方程:

$$\ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i(\vec{r}_i) / m_i \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (1)$$

$$\vec{F}_i = -\nabla_i U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) \quad (2)$$

式中: $\vec{F}_i$ 为第 i 个粒子所受到的合力; $\vec{r}_i$ 为第 i 个粒

子的位置坐标; m_i 为第 i 个粒子的质量; U 为势能函数。

为了减少边界效应, 纳米切削分子动力学仿真模拟的规模必须足够大, 但因此也增加了计算量, 所以在垂直于切削横截面方向采用周期性边界条件。分子动力学模拟结果的可信度和精度取决于原子间势函数的选取和势函数参数的准确性。纳米加工过程中常用的势函数有对偶势 Morse 势^[18]和多体势 Tersoff 势^[19]、嵌入原子法 (EAM)^[20]、Tersoff-Brenner 势^[21]和 Brenner II 势^[22]。其中 Brenner II 势考虑了量子效应, 提高了分子内部相互作用的解析函数且扩展了配置数据库, 改善了描述键长、能量和碳氢分子的力常数、弹性特性及金刚石的表面能, 适用于对金刚石刀具的摩擦磨损性能研究。

Cai 等^[23~25]模拟了切削区域温度升高对金刚石刀具硬度的影响。发现在模拟切削速度为 20 m/s 时, 剪切区温度处于 320 ~ 750 K 之间。当切削速度为 200 m/s, 驰豫 33 ps 后, 剪切区温度约为 900 K, 而在高温条件下金刚石的化学稳定性有所下降。在温度约 473 K 时, 一层氧原子吸附在金刚石刀具上, 从 623 K 时开始出现碳氧化物^[26]。嵌入碳氧化物的金刚石表面的硬度比原金刚石的硬度低, 因此在切削过程中金刚石刀具表面的硬度有所下降, 同时由于加工区域的静水压力较高, 导致工件材料发生从单晶到非晶态的相变, 生成硅原子团“硬粒子”, 这些原子团的硬度比单晶硅的硬度高。“硬粒子”在“软化”的金刚石刀具后刀面产生相对运动, 并形成微纳尺度的凹槽, 从而造成了刀具磨损。

Komanduri 等^[27]模拟了单晶铝在非常小的压痕刻划深度 (0 ~ 0.8 nm) 下的摩擦系数变化情况, 以及压痕/刻划深度对工件和刀具硬度的影响。发现纳米加工过程中的摩擦系数较大 (在刀具前角为 90°

时, 摩擦系数约为 0.6), 且摩擦系数取决于刀具前角的变化情况, 而与压头的法向力和加工深度无关; 压痕/刻划的硬度随着加工深度的减小而增大, 显示出明显的尺寸效应。

Maekawa 等^[28]采用基于 Nose-Hoover 的有限区域分子动力学 (ARMD) 方法模拟了纳米加工过程中刀具的磨损情况。发现金刚石刀具的磨损主要是由于切削过程中工件原子和刀具原子间的相互扩散, 以及由于碳原子间强烈的吸引力, 磨损的碳原子重新附着于前刀面或后刀面。部分工件原子渗入刀具表层原子中, 使得渗入处刀具原子的化学键强度减弱, 加速了刀具的磨损。

Tang 等^[29]研究了纳米压痕过程中水对单晶硅变形的影响。发现在压头和工件之间加入水可以减轻金刚石压头和工件之间的黏附作用, 且在完全卸载后可以改变残余变形区的结构。Rentsch 等^[30]模拟了在纳米切削加工过程中加入切削液对切削热和切削应力分布的影响。发现加入切削液可以克服在真空环境中刀具磨损的缺陷。同时, 建立了更加完善的加工过程的热平衡, 提供了研究表面吸附以及更加切合实际加工的摩擦条件。模拟结果表明, 加入切削液后减少了刀具的磨损, 提高了加工表面的质量。

Mylvaganam 等^[31]研究了纳米压痕过程中 O_2 的作用。研究结果表明, 在压痕过程中金刚石压头下方工件的原子结构发生了非晶相变, O_2 分子在适当的位置晶向分解为氧原子, 渗透至工件表层 (非晶层) 的氧原子与硅原子形成化学键而桥接于表层与亚表层之间, 导致表层原子无序化, 改变了发生非晶相变的阈值, 加速了磨损。

Liu 等^[32]采用 Tersoff 势模拟大气分子吸附在工件表面对纳米加工的影响, 建立了如图 2 所示的仿真模型, 采用斜角循环切削和刻划 2 种方式研究

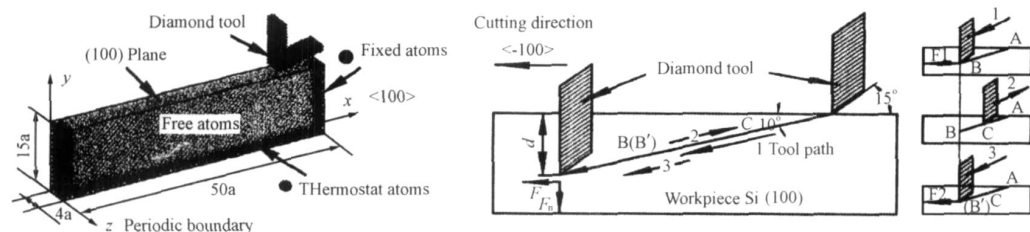


Fig 2 Cutting MD model and schematic of cutting mode

图 2 切削仿真模型和切削方式示意图

一次性切削和二次切削中大气分子的作用。斜角循环切削方式为从 A 点切削至 B 点再将刀具原路退回至 C 点, 使前刀面和切屑的后表面与大气充分接

触, 然后再从 C 点切削至 D 点, 刻划方式为从 A 点一次性切削至 D 点。将大气中的模拟结果与真空中的模拟结果对比发现: 在刻划切削方式条件下, 大气

中的主切削力比真空中小,但法向切削力基本不变;而在斜角循环切削方式下,大气中的主切削力比在刻划方式下的降幅显著,相当于夹杂在前刀面和切屑之间的大气分子起到了润滑作用,降低了刀具磨损,并且在斜角循环切削方式下刀具的振动向前,在一定程度上破坏了刀具前方工件的晶格结构,使材料更易切削。

罗熙淳^[33]研究表明,刀具的磨损是由于在切削开始时温度急剧升高,刀具原子与工件原子之间相互作用的结果。随着刀具的移动,刀具的部分原子离开其初始位置(相对于刀具),工件中部分原子渗入刀具中,削弱了刀具原子间的作用力。随着切屑的形成,刀具原子与工件原子间的相互扩散作用加剧,刀具中更多原子离开初始位置而造成刀具磨损。Cheng等^[34]通过模拟 AFM 针尖切削、计算金刚石刀尖的温度和应力来探讨金刚石刀具的磨损机制。结果表明,纳米切削工件硅时金刚石刀尖的最高温度为 813 K,位于距离刀尖右前方 1.43 nm 处。随着温度升高,C原子和 Si原子的升华能降低,但 C原子的升华能降幅更快。由于升华能的下降和工件原子的扩散使得 C-C键的结合力减弱而易断裂,金刚石刀尖所产生的凹坑是由于原子扩散和积聚的高温使得 C-C键断裂的缘故,而热化学磨损是金刚石刀具的主要磨损机制。

由此可见,分子动力学是模拟纳米加工过程中金刚石刀具磨损的有效仿真手段。当材料切削厚度达到几个原子层时,切削实验变得困难且耗时,而通过分子动力学仿真纳米加工过程,不仅能够深入了解材料的去除机制,而且简单易行。

到目前为止,虽然进行了大量纳米加工刀具磨损的分子动力学模拟计算,但其结果并不统一,甚至相差很大,其原因主要是由于所用的势函数较简单,不能真实反映原子间的相互作用,且所建立的模型粒子数太少,产生强烈的边界效应,使得模拟的结果与实际加工有偏离。由于传统仿真的时间尺度为飞秒级,空间尺度为纳米级,为了节省仿真时间,目前在模拟纳米加工过程中设定的切削速度远大于实际切削速度。为此,迫切需要扩大仿真规模,提高仿真速度。基于并行算法的分子动力学和基于连续介质力学的多尺度方法近年来受到普遍重视。

哈尔滨工业大学从上世纪 80年代初至今,在该研究领域进行了系统研究。例如,采用分子动力学理论揭示了不同材料和不同变形区域内原子势能的变化规律,提出了纳米加工过程中刀具刃口“临界钝

圆半径”的概念和纳米加工过程中能否产生切屑的新判据^[35,36],即当纳米加工过程中的法向切削力与主切削力之比大于 0.92时可以产生切屑。并在此基础上实现了 3~5 nm 切削厚度的极薄切削,确定了纳米切削时极薄切削厚度与刀具钝圆半径间的关系为 $a_{\min} = (1/3-1/6)\rho$,其中 $a_{\min}$ 为最小切削厚度, ρ 为刀具钝圆半径,这与 Ikawa^[37]的推测相符。

另外,利用分子动力学的并行算法,开发出了单晶硅纳米切削的三维分子动力学并行化软件^[38]。图 3所示为采用空间区域分解并行算法搭建基于消

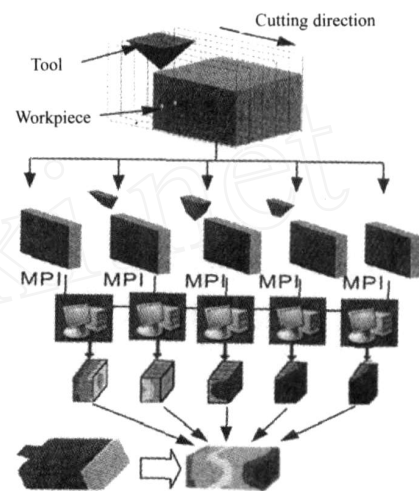


Fig 3 Schematic of nanometric machining based on parallel molecular dynamics

图 3 并行分子动力学纳米切削仿真

息传递接口 (MPI) 的单晶硅纳米切削示意图,其中并行机群由 1台工作站和 5台 PC机组成,仿真规模可达 12~50万,可以解决分子动力学仿真规模和纳米切削实验规模相差太大的问题,仿真系统中的原子数可扩大 20 倍以上^[39]。图 4所示为采用并行算法的模拟结果与常规串行算法模拟结果的比较,从而验证了并行算法模拟的准确性。

同时,利用网格化分子动力学算法分别对纳米压痕和纳米切削加工过程进行仿真计算,以提高分子动力学计算规模。采用多尺度方法将在 MD 中离散原子描述与基于连续介质力学的有限元相结合,在加工区域主要采用分子动力学分析塑性变形,而在加工区域周围的变形均匀区采用连续介质力学计算剩余的弹性变形。

而从目前情况来看,由于分子动力学仿真规模较小,晶格变形和位错扩展受到模拟边界的反射和抑制,且仿真条件单一(如真空环境),与实际纳米

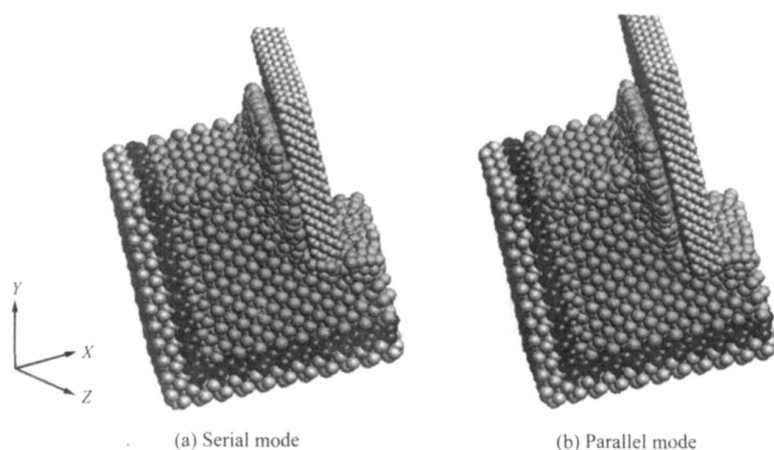


Fig 4 Snapshots by the serial and parallel computation of monocrystalline silicon

图 4 单晶硅串、并行模拟切削瞬时原子位置图

加工还存在差距。

3 结束语

在纳米尺度范围内研究刀具的磨损是以加工区域原子或分子的运动为对象,借助仪器(如 AFM、SEM)和分子动力学仿真等手段,并与近代物理、化学及材料科学等学科研究成果相结合,建立纳米加工过程中刀具磨损的理论体系。今后,对纳米加工过程中刀具磨损的研究应注意以下几个方面:

a 有关纳米加工过程中的热化学特性(如热应力、化学相变)对刀具磨损微观机制的影响以及与刀具磨损原子结构相关性的深入研究;

b 结合纳米加工实验,研究纳米加工过程中的机械振动、材料缺陷以及多场耦合效应对刀具磨损的影响;

c 建立完善的刀具磨损仿真模型,加强纳米加工过程中摩擦界面的黏附效应、材料转移规律和能量耗散机制;

d 加强刀具磨损微观效应的分子动力学模拟,将传统的 MD 模型与弹性连续介质力学,如 FEM 和耗散粒子动力学(DPD)等模拟方法相结合,利用并行计算技术进一步扩大仿真规模,研究刀具加工表面变形和固液界面间相互作用时刀具磨损情况。

总之,纳米加工过程中刀具的磨损涉及到纳米摩擦学、纳米材料学以及纳米化学等交叉学科,纳米加工过程中刀具磨损的研究也将促进纳米加工技术以及其他相关学科的发展。

参考文献:

[1] Yan J, Syoji K, Kuriyagawa T, *et al* Ductile regime turning at

large tool feed[J]. *J Mater Process Tech*, 2002, 121: 363-372.

[2] Yan J, Yoshino M, Kuriyagawa T. On the ductile machining of silicon for micro electro-mechanical systems (MEMS), opto-electronic and optical applications[J]. *Mater Sci Eng*, 2001, 297 (1/2): 230-234.

[3] Yuan Z J, Zhou M, Dong S. Effect of diamond tool sharpness on minimum cutting thickness and cutting surface integrity in ultraprecision machining[J]. *J Mater Process Tech*, 1996, 62: 327-320.

[4] Zong W J, Cheng K, Li D, *et al* The ultimate sharpness of single-crystal diamond cutting tools Part I: Theoretical analyses and predictions[J]. *Int J Machine Tools & Manufacture*, 2007, 47: 852-863.

[5] Zong W J, Li D, Sun T, *et al* The ultimate sharpness of single-crystal diamond cutting tools Part II: A novel efficient lapping process[J]. *Int J Machine Tools & Manufacture*, 2007, 47: 864-871.

[6] Hamada H. Diamond tools for ultra-precision machining[J]. *J Jpn Soc Precis Eng*, 1985, 51 (9): 9-13.

[7] Sharif Uddin M, Seah K H W, Li X P, *et al* Effect of crystallographic orientation on wear of diamond tools for nano-scale ductile cutting of silicon[J]. *Wear*, 2004, 257: 751-759.

[8] Lucca D A, Seo Y W, Rhorer R L. Aspects of surface generation in orthogonal ultraprecision machining[J]. *Annals of the CIRP*, 1994, 43 (1): 43-45.

[9] Bouwelen F M van, Field J E, Brown L M. Electron microscopy analysis of debris produced during diamond polishing[J]. *Phil Mag*, 2003, 83: 839-855.

[10] Ribeiro R, Shan Z, Minor A M, *et al* In situ observations of nano-abrasive wear[J]. *Wear*, 2007, 263: 1556-1559.

[11] Yan J, Syoji K, Kuriyagawa T. Fabrication of large-diameter single-crystal silicon aspheric lens by straight-line enveloping diamond-turning method[J]. *J Jpn Soc Precis Eng*, 2002, 68 (4): 1561-1565.

[12] Yan Jiwang, Katsuo Syoji, Jun 'ichi Tanaki. Some observations on the wear of diamond tools in ultra-precision cutting of single-

- crystal silicon[J]. *Wear*, 2003, 255: 1 380-1 387.
- [13] Zhang L C, Irena Zanudi An understanding of the chemical effect on the nano-wear deformation in mono-crystalline silicon components[J]. *Wear*, 1999, 225: 669-677.
- [14] 赵清亮,梁迎春,董申. 微加工中原子力显微镜金刚石针尖的磨损研究[J]. *摩擦学学报*, 1998, 21(3): 176-181.
Zhao Q L, Liang Y C, Dong S Investigation of the diamond tip wear of an atomic force microscope in micro-machining[J]. *Tribology*, 1998, 21(3): 176-181.
- [15] 赵清亮,陈明君,梁迎春,等. 单晶金刚石车刀在超精密单点切削中的磨损分析[J]. *摩擦学学报*, 2002, 22(5): 321-327.
Zhao Q L, Chen M J, Liang Y C, *et al* Wear of diamond cutting tool in ultra-precision single point turning[J]. *Tribology*, 2002, 22(5): 321-327.
- [16] Schiøtz J, Francesco D, Di Tolla, *et al* Softening of nanocrystalline metals at very small grain size[J]. *Nature*, 1998, 391: 561-563.
- [17] Shimada S, Ikawa N, Ohmori G, *et al* Molecular dynamics analysis as compared with experimental result of micromachining[J]. *Annals of the CIRP*, 1992, 41(1): 117-120.
- [18] Girifalco L A, Weizer V G Application of the morse potential function to cubic metals[J]. *Phys Rev B*, 1959, 114(3): 687-693.
- [19] Tersoff J. Modeling solid state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems[J]. *Phys Rev B*, 1989, 39(8): 5 566-5 568.
- [20] Daw M S, Baskes M I Embedded atom method derivation and application to impurities surface and other defects in metals[J]. *Phys Rev B*, 1984, 29(12): 8 486-8 495.
- [21] Brenner D W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films[J]. *Phys Rev B*, 1990, 42: 9458.
- [22] Brenner D W, Shenderova O A, Harrison, *et al* A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons[J]. *J Phys Condens Matter*, 2002, 14: 783-802.
- [23] Cai M B, Li X P, Rahman M. Study of the mechanism of groove wear of the diamond tool in nanoscale ductile mode cutting of monocrystalline silicon[J]. *J Manuf Sci Eng*, 2007, 129: 281-286.
- [24] Cai M B, Li X P, Rahman M. Study of the temperature and stress in nanoscale ductile mode cutting of silicon using molecular dynamics simulation[J]. *J Mater Process Tech*, 2007, 192: 607-612.
- [25] Cai M B, Li X P, Rahman M. Characteristics of "dynamic hard particles" in nanoscale ductile mode cutting of monocrystalline silicon with diamond tools in relation to tool groove wear[J]. *Wear*, 2007, 263: 1 459-1 466.
- [26] Bakon A, Szymanski A. Practical uses of diamond[M]. New York: Ellis Horwood, 1992. 30.
- [27] Komanduri R, Chandrasekaran N. Molecular dynamics simulation of atomic-scale friction[J]. *Phys Rev B*, 2000, 61: 14 007-14 019.
- [28] Maekawa K, Itoh A. Friction and tool wear in nano-scale machining-a molecular dynamics approach[J]. *Wear*, 1995, 188: 115-122.
- [29] Tang C Y, Zhang L C. Amolecular dynamics analysis of the mechanical effect of water on the deformation of silicon monocrystals subjected to nano-indentation[J]. *Nanotechnology*, 2005, 16: 15-20.
- [30] Rentsch R, Inasaki I Effects of fluids on the surface generation in material removal processes-molecular dynamics simulation[J]. *Annals of the CIRP*, 2006, 55: 4-8.
- [31] Mylvaganam Kausala, Zhang L C. Effect of oxygen penetration in silicon due to nano-indentation[J]. *Nanotechnology*, 2002, 13: 623-626.
- [32] Liu Y, Inamura T. Molecular dynamics simulation of ultra-micro cutting of monocrystalline silicon with effect of air[J]. *J SME*, 2006, 49: 70-75.
- [33] 罗熙淳. 基于分子动力学的微纳米加工表面形成机理研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2002.
Luo X C. Research on generation mechanism of micro/nano machined surfaces based on molecular dynamics[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2002.
- [34] Cheng K, Luo X, Ward R, *et al* Modeling and simulation of the tool wear in nanometric cutting[J]. *Wear*, 2003, 255: 1 427-1 432.
- [35] Luo X, Liang Y, Dong S, *et al* Atomic analysis of nanometric cutting process by a new md simulation approach including thermal cutting effects[C]. *Proceeding of the 1 st Euspen International Conference*, Copenhagen, 2000: 161-168.
- [36] Liang Y, Luo X, Dong S MD study of the effects of micro-vibrations of the diamond tool on the nanometric machined surface roughness[C]. *Proceeding of the 2 nd Euspen International Conference* Turin, 2001: 692-695.
- [37] Ikawa N, Shimada S, Tanaka H. Minimum thickness of cutting in micromachining[J]. *Nanotechnology*, 1992, 3(1): 6-9.
- [38] 唐玉兰. 基于分子动力学单晶材料纳米切削机理的研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2004.
Tang Y L. Research on cutting process and related technology of crystalline material based on molecular dynamics[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2004.
- [39] 白清顺,梁迎春,李德刚,等. 纳米加工过程的分子动力学模拟技术研究[J]. *微细加工技术*, 2006, 4: 57-62.
Bai Q S, Liang Y C, Li D G, *et al* Molecular dynamics simulation of nanometric machining[J]. *Microfabrication Technology*, 2006, 4: 57-62.

New Progress of Research in Diamond Tool Wear of Nanometric Machining

L ANG Ying-chun, GUO Yong-bo, CHEN Ming-jun

(Harbin Institute of Technology, Precision Research Engineering Institute, Harbin 150001, China)

Abstract: Tool wear is a significant factor affecting the quality of machined surface. Advanced methods about experiment of diamond tool wear in recent years for nanometric machining are summarized comprehensively and analyzed in detail. Fundamental and application of molecular dynamics are elucidated briefly, the latest research development about the effect of heat and chemical on the diamond tool wear with the aid of molecular dynamics simulation method are reviewed. The existent problems in present investigation are pointed out for the state-of-art of tool wear in nanometric cutting process, some suggestion to which should be paid attention in future for further study on tool wear are commented.

Key words: nanometric machining, diamond tool, friction and wear, molecular dynamics

Author: L ANG Ying-chun, male, born in 1964, Ph. D., Professor, e-mail: ycliang@hit.edu.cn

www.cnki.net