

---

## ОСОБЕННОСТИ И МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА НАНОРЕЗАНИЯ

**В.В. Копылов, В.М. Иванова**

Кафедра технологии машиностроения,  
металлорежущих станков и инструментов  
Инженерный факультет  
Российский университет дружбы народов  
*Подольское шоссе, 8/5, Москва, Россия, 113093*

В работе освещены основные вопросы и особенности процесса нанорезания и приведены примеры результатов молекулярно-динамического моделирования наноразмерной обработки.

**Ключевые слова:** обработка в нанометровом диапазоне, алмазное точение, резание, атом, шероховатость, стружка, радиус режущей кромки, моделирование.

Стремительное развитие нанотехнологий во всех сферах жизни привело к переходу от микрометровых размеров к нанометровым в области инновационных технологий. С конца 1990-х гг. ведутся научные исследования механической обработки в нанометровом диапазоне. Достижение предельных показателей качества изделий (шероховатость, размеры и точность формы) и повышение эффективности процесса резания невозможны без изучения процессов в зоне обработки на микро- и наноуровне.

Алмазное точение и сверхтонкое шлифование — два главных метода обработки на наноуровне. Алмазное точение имеет широкое применение при обработке цветных металлов, а алмазное шлифование в основном применяется при обработке хрупких материалов. Кроме того, использование инструментов из сверхтонких зерен твердых металлов и микроинструменты с алмазным покрытием представляют многообещающую альтернативу для микрорезания даже изделий из закаленной стали [2], в частности такие исследования активно проводятся в НИЦ «КП-Алмаз».

Обрабатываемыми материалами при алмазном точении обычно являются:

— при обработке полупроводников — теллурид кадмия, арсенид галлия, германий, ниобат лития, кремний, селенид цинка, сульфид цинка;

— для металлов — алюминий и его сплавы, медь и сплавы, электролитический никель, золото, магний, серебро, цинк;

— для пластмасс — акрил, фторопласты, нейлон, поликарбонат, полиметилметакрилат, пропилен, стирол.

Обрабатываемыми материалами при алмазном шлифовании обычно являются:

— при обработке керамики — окись алюминия, карбид кремния, нитрид кремния, карбид титана, карбид вольфрама, двуокись циркония;

— при обработке стекол — BK7 или эквивалент, SF10 или эквивалент, ULE или эквивалент, ситаллы.

**Сила и энергия резания.** Удельная сила резания увеличивается с увеличением глубины резания. При нанометровой механической обработке радиус режущей кромки играет важную роль, так как глубина резания сходна с ним по своим

масштабам. При одинаковой глубине резания для инструмента с большим радиусом режущей кромки сила резания нужна больше, чем для инструмента с маленьким радиусом. Небольшая удельная сила резания — это результат хороших условий резания, которые уменьшают вибрацию режущей системы и таким образом улучшают стабильность механической обработки, а также приводят к лучшей шероховатости поверхности. Удельная же энергия, наоборот, увеличивается с уменьшением глубины резания. Это связано с зависимостью размера главного переднего угла инструмента от величины удельной энергии: чем больше угол, тем больше энергия, а главный передний угол увеличится с уменьшением глубины резания.

Если припуск на обработку уменьшить до 1 нм, структура материала заготовки в зоне резания может приблизиться к атому и большая часть энергии пойдет на разрыв межатомных связей. Если припуск больше 0,1 мкм, режущие части клина попадают в зону расположения некоторых дефектов, таких как дислокации, трещины и границы зерна, которые уменьшают деформацию материала заготовки и приводят к сравнительно низкой удельной энергии резания.

Как правило, очень сложно измерить силу резания при нанометрической обработке из-за ее маленькой амплитуды по сравнению с шумом (механическим или электронным) [3]. Для измерения силы резания используют пьезометрический динамометр или датчик напряжения из-за их высокой собственной частоты. При нанорезании глубина резания очень маленькая, поэтому следует учитывать еще и сжимающие взаимодействия, которые являются доминирующими при деформации материала заготовки и приводят к увеличению трения между стружкой и инструментом.

**Температура резания.** Используя метод молекулярно-динамического (МД) моделирования, можно измерить температуру резания, если предположить, что энергия резания полностью переходит в нагрев и приводит к повышению температуры резания и кинетической энергии системы. Колебания атомов в кристаллической решетке относительно своего равновесного положения в значительной степени отвечают за теплоемкость металлов и кристаллических диэлектриков. Ввиду того, что между частицами существует силовое взаимодействие, энергия каждой частицы при тепловом движении постоянно меняется. Для классических систем применяется теорема о равном распределении кинетической энергии по степеням свободы (у атома их три), которая позволяет определить среднюю кинетическую энергию системы:

$$\bar{E}_k = \frac{3}{2} N k_B T = \sum_i \frac{1}{2} m V_i^2, \quad (1)$$

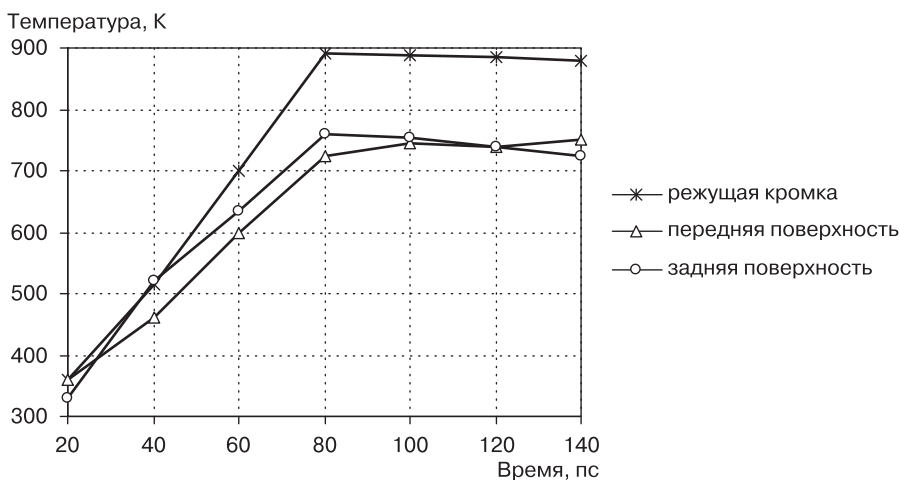
где  $E_k$  — средняя кинетическая энергия в состоянии равновесия;  $k_B$  — константа Больцмана;  $T$  — температура;  $N$  — число атомов;  $m$  — масса;  $V_i$  — скорость атома.

Из этой формулы можно вывести температуру резания:

$$T = \frac{2\bar{E}_k}{3Nk_B}. \quad (2)$$

Что касается распределения температуры по поверхности режущей части резца, то самая высокая температура находится в зоне контакта режущей кромки и заготовки. Температура на задней поверхности резца выше, чем на передней, это вызвано трением между задней поверхностью инструмента и заготовкой, а также выделением энергии в процессе упругого восстановления поверхности, которая тоже способствует повышению температуры. И хотя есть трение также между передней поверхностью инструмента и стружкой, часть температуры удаляется с передней поверхности инструмента вместе со стружкой.

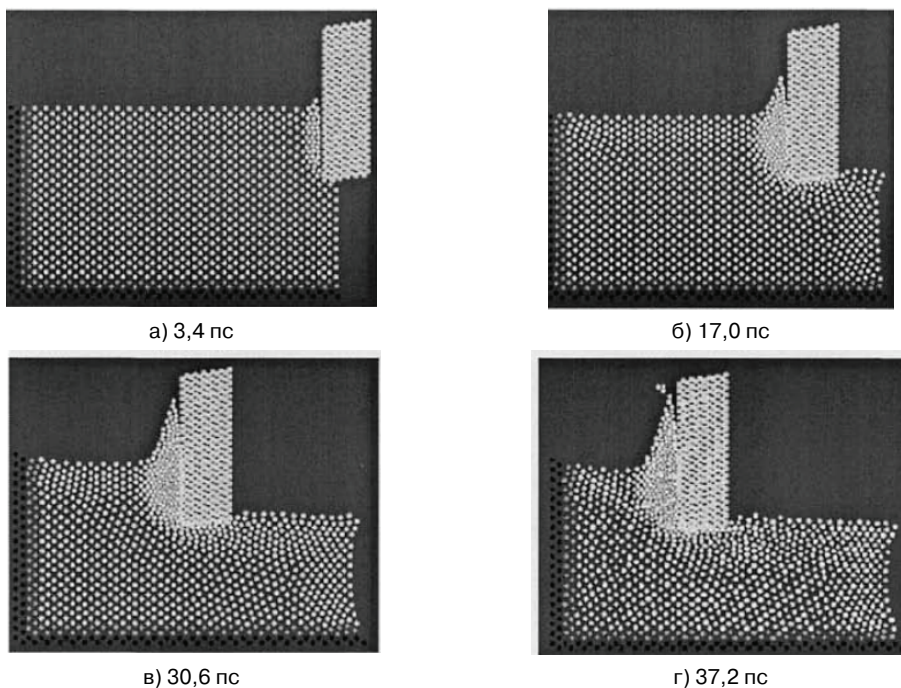
На рисунке 1 показано изменение температуры резания на режущем инструменте при нанорезании монокристалла алюминия в молекулярно-динамическом моделировании.



**Рис. 1.** Распределение температуры по поверхности режущей части резца (скорость резания = 20 м/с, глубина резания = 1,5 нм, радиус режущей кромки = 1,57 нм) [4]

Температура резания при алмазной обработке достаточно низкая по сравнению с обычным резанием из-за небольшого количества энергии и высокой теплопроводности алмаза и материала заготовки. В молекулярно-динамическом моделировании температура резания воздействует на изнашивание алмазного резца [4]. Необходимо больше всесторонних экспериментальных и теоретических исследований, чтобы узнать количественные отношения между температурой резания и изнашиванием инструмента, хотя уже есть подтверждение химического повреждения на алмазе, в котором температура играет существенную роль [3].

**Образование стружки и формирование поверхности.** Процесс образования стружки и формирование поверхности можно смоделировать в МД-моделировании. На рисунке 2 приведен пример моделирования нанорезания монокристалла алюминия. На рисунке 2 а) показано начало врезания режущей кромки инструмента; видно, что в зоне резания атомы заготовки сжаты вдоль передней поверхности резца и режущей кромки инструмента. Нарушение кристаллической решетки заготовки и появление дислокаций показано на рис. 2 б). Из рисунка 2 в) видно, что дислокации образовались до появления стружки. На рисунке 2 г) показано, как стружка удаляется вместе с частицей атомной группы.



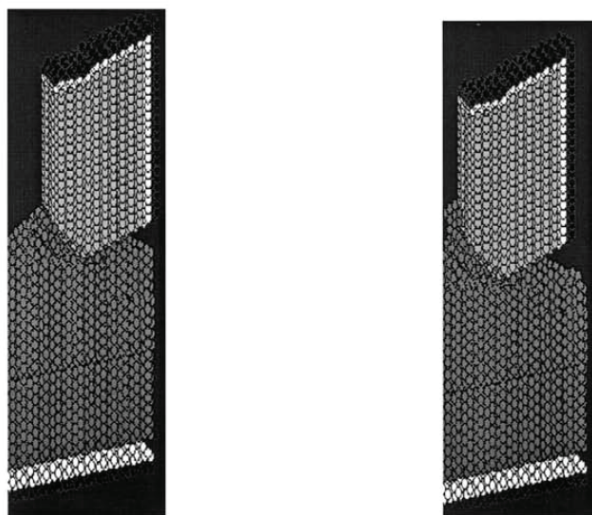
**Рис. 2.** Молекулярно-динамическое моделирование процесса нанорезания (скорость резания = 20 м/с, глубина резания = 1,4 нм, радиус режущей кромки = 0,35 нм) [4]

Объяснить механизм образования стружки и формирования поверхности при нанорезании можно следующим образом. Вследствие врезания режущей кромки силы притяжения между атомами заготовки и атомами алмазного резца меняются на силы отталкивания. Кристаллическая решетка заготовки сжимается, поскольку у атомов алмаза энергия сопротивления внешним силам намного больше, чем у атомов алюминия. Когда энергия напряжения в сжатой кристаллической решетке превышает определенный уровень, атомы, для того чтобы выпустить энергию напряжения, начинают перестраиваться. Если энергия недостаточна для того, чтобы выполнить перестановку, образуются дислокации. Силы отталкивания между сжатыми атомами в верхнем слое и атомами в более нижнем слое увеличиваются; верхние атомы движутся вдоль режущей кромки, и в то же время силы отталкивания атомов инструмента препятствуют нажатию поднимающегося витка стружки на атомы под линией резания. С движением режущей кромки некоторые дислокации перемещаются вверх и исчезают с открытой поверхности. Это явление относится к процессу формирования стружки. Стружка удаляется в результате последовательного образования и исчезновения дислокаций. По сравнению с нанорезанием при обычном резании дислокации начинают образовываться из-за существующих дефектов между зернами кристаллической решетки, которые ослабляют движение дислокации и приводят к меньшим удельным силам резания.

Параметры чистоты поверхности могут также быть вычислены по результатам моделирования. Для того чтобы измерить шероховатость поверхности, используют 2D МД-моделирование параметра  $R_a$ . Остаточные напряжения обработанной поверхности можно рассчитать исходя из среднего значения сил, действующих на атомы в единичной области верхнего слоя обработанной поверхности.

Молекулярно-динамическое моделирование, как было доказано, является полезным инструментом для теоретического исследования наноразмерной обработки [5]. В настоящее время исследования МД-моделирования нанообработки ограничены размером вычислительной памяти и скоростью компьютера. Поэтому трудно увеличить измерение текущей МД-модели на персональном компьютере. Фактически топография обработанной поверхности получается в результате копирования профиля инструмента на поверхности заготовки, которая движется в определенном направлении относительно инструмента. Управлять степенью поверхностной шероховатости можно движением инструмента на станке (или относительным движением между инструментом и заготовкой) и характером передачи профиля инструмента заготовке [3].

**Минимальное сечение среза** — важный вопрос при обработке с нанометровой точностью, так как оно оказывает непосредственное влияние на окончательную точность обработки. Обычно минимальное сечение среза определяется минимальным межатомным расстоянием внутри заготовки. Однако в методах ультрапрецизионной обработки это очень зависит от точности алмазного режущего инструмента, способности ультрапрецизионного станка и операционной среды механической обработки. Эксперименты по алмазному точению цветных металлов, выполненные в Ливерморской национальной лаборатории им. Лоуренса (LLNL), показывают, что минимальное сечение среза, вплоть до 1 нм, достижимо со специально подготовленным алмазным режущим инструментом на очень надежном ультрапрецизионном станке [1]. Рисунок 3 показывает формирование стружки монокристалла алюминия с ультрасовременным радиусом инструмента 1,57 нм. Из рисунка 3 видно, что стадия образования стружки начинается, когда сечение среза составляет 0,26 нм. На образование стружки при нанорезании главным образом оказывают силы резания, так как глубина резания является очень маленькой величиной, а если еще конкретнее, то тангенциальная сила резания.



а) сечение среза = 0,25 нм

б) сечение среза = 0,25 нм

**Рис. 3.** Исследование минимального сечения среза МД моделированием [4]

В теории стружка образуется при условии, что соотношение тангенциальной силы резания к нормальной будет больше, чем 0,92. Связь между минимальным сечением среза, радиусом режущей кромки и силой резания изучается с помощью МД-моделирования. Результаты наглядно видны в табл. 1. Данные показывают, что минимальное сечение среза равно от  $\frac{1}{3}$  до  $\frac{1}{6}$  радиуса резания.

Таблица 1

**Связь между минимальным сечением среза, радиусом режущей кромки и силой резания [4]**

| Показатель  | Радиус режущей кромки, нм |       |       |       |       |       |
|---|---------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|
|   | 1,57                      | 1,89  | 2,31  | 2,51  | 2,83  | 3,14  |
| Минимальное сечение среза, нм   | 0,26                      | 0,33  | 0,42  | 0,52  | 0,73  | 0,97  |
| Отношение минимального сечения среза к радиусу режущей кромки инструмента | 0,17                      | 0,175 | 0,191 | 0,207 | 0,258 | 0,309 |
| Отношение тангенциальной к нормальной силе резания                        | 0,92                      | 0,93  | 0,92  | 0,92  | 0,94  | 0,93  |

**Критический радиус режущей кромки.** Широко распространено мнение, что острота режущей кромки алмазного режущего инструмента напрямую влияет на качество обработанной поверхности. Проведенное МД-моделирование показало, что чем острее режущая кромка, тем более гладкая обработанная поверхность, однако при этом не учитывался износ инструмента. Чтобы понять влияние радиуса режущей кромки, МД-моделирование нанорезания монокристалла алюминия производилось с использованием инструмента с износом [5].

При моделировании радиус режущей кромки алмазного режущего инструмента изменяется от 1,57 нм до 3,14 нм с глубиной резания 1,5, 2,2 и 3,1 нм соответственно. Среднеквадратичное отклонение обработанной поверхности и среднее напряжение на режущей кромке показано в табл. 2.

Таблица 2

**Взаимосвязь между радиусом режущей кромки и качеством обработанной поверхности (нм) [4]**

| Глубина резания                            | Радиус режущей кромки |      |       |       |       |       |
|--|-----------------------|------|-------|-------|-------|-------|
|  | 1,57                  | 1,89 | 2,31  | 2,51  | 2,83  | 3,14  |
| 1,5  | 0,89                  | 0,92 | 0,78  | 0,86  | 0,98  | 1,06  |
| 2,2  | 0,95                  | 0,91 | 0,77  | 0,88  | 0,96  | 1,07  |
| 3,1  | 0,97                  | 0,93 | 0,79  | 0,87  | 0,99  | 1,08  |
| Среднее напряжение на режущей кромке (ГПа) | 0,91                  | 0,92 | -0,24 | -0,31 | -0,38 | -0,44 |

На рисунке 4 показаны моделируемые данные, и четко видно, что если радиус режущей кромки меньше, чем 2,31 нм, то с уменьшением радиуса увеличивается шероховатость поверхности [4]. Эта тенденция, очевидно, вызвана быстрым изнашиванием инструмента, когда используется инструмент с маленьким радиусом режущей кромки. Но если режущая кромка больше, чем 2,31 нм, она находится под сжимающим напряжением и инструмент не изнашивается.

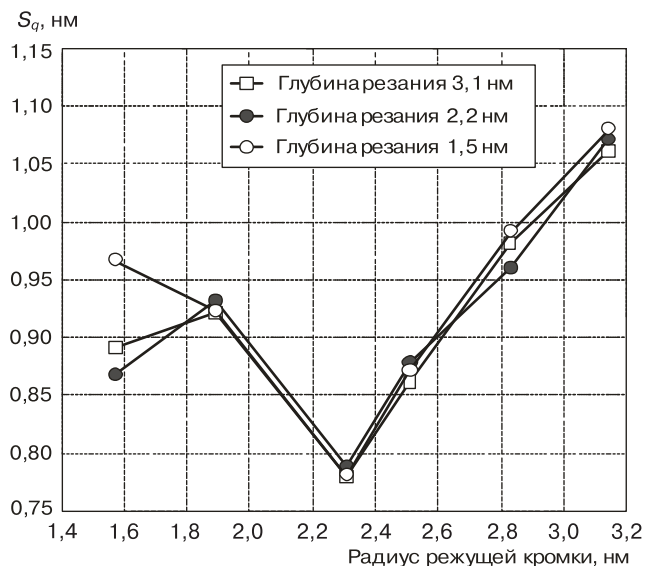


Рис. 4. Зависимость качества поверхности от радиуса режущей кромки [4]

Таким образом, острота режущей кромки инструмента не всегда влияет на качество обработанной поверхности, а для каждого материала существует критический минимальный радиус режущей кромки, при превышении которого не происходит износа инструмента и достигается требуемое качество обработанной поверхности.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Donaldson R., Syn C., Taylor J., Ikawa N., Shimada S. Minimum thickness of cut in diamond turning of electroplated copper. UCRL-97606 1987.
- [2] Diamond milling processes for the generation of complex optical mold inserts, <http://www.lfm.uni-bremen.de/html/res/res001/resl08.html> (accessed July 2006).
- [3] Ikawa N., Donaldson R., Komanduri R., Konig W., Mckeown P.A., Moriwaki T., Stowers I. Ultraprecision metal cutting — the past, the present and the future // *Annals of the CIRP*. — 1991. — 40(2). — P. 587—594.
- [4] Cheng K., Luo X., Ward R., Holt R. Modelling and simulation of the tool wear in nanometric cutting // *Wear*. — 2003. — 255. — P. 1427—1432.
- [5] Shimada S. Molecular dynamics simulation of the atomic processes in microcutting. In McGeough J., eds. *Micromachining of Engineering Materials*. — New York: Marcel Dekker, 2002. — P. 63—84.

## **FEATURES AND SIMULATIONS OF NANOMACHINING**

**V.V. Kopylov, V.M. Ivanova**

Department of Mechanical Engineering,  
Machine Tools and Tooling  
Faculty of Engineering  
Peoples' Friendship University of Russia  
*Podolskoe shosse, 8/5, Moscow, Russia, 113093*

The main points and features of nanomachining were covered in this article. Some examples of Molecular Dynamics simulations in nanometric machining were given as well.

**Key words:** nanometric machining, diamond turning, cutting, atom, roughness, chip, cutting edge radius, simulations.