

SiC_p/Al 复合材料超精密车削仿真与试验研究

项俊锋, 解丽静, 胡鑫, 霍石岩, 庞思勤, 王西彬

(北京理工大学, 北京 100081)

摘要: 针对 SiC_p/Al 复合材料因脆性相 SiC 的加入而导致难以形成高质量加工表面等问题, 采用分子动力学模拟和超精密车削试验的方法对 SiC_p/Al 复合材料纳米尺度材料去除过程进行研究, 重点分析了单晶金刚石超精密切削 SiC_p/Al 复合材料中的加工表面形成机理、脆塑性转变以及刀具磨损机理。结果表明: 高压相变是引起 SiC_p/Al 复合材料中 SiC 脆性材料的脆塑性转变的主要原因。随着切削深度的增加, SiC_p/Al 复合材料中 SiC 颗粒加工方式由延性去除, 到脆塑性混合方式去除, 最后演变为纯脆性去除方式。SiC_p/Al 复合材料中 SiC-Al 界面和 Al 基体存在, 影响了 SiC_p/Al 复合材料中 SiC 颗粒去除的脆塑性转变机制。待加工表面上拉应力的存在会诱导微裂纹尖峰, 是切削区域脆性 SiC 材料裂纹萌生的直接诱因。单晶金刚石刀具主要磨损机理为硬质 SiC 颗粒的磨粒磨损和切削诱导的石墨化。

关键词: SiC_p/Al 复合材料; 超精密车削; 分子动力学; 单晶金刚石; 脆塑性转变

中图分类号: TG669; TH164

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2019)05-1687-10

碳化硅颗粒增强铝基复合材料 (SiC_p/Al) 具有高比强度、高比刚度、低热膨胀系数以及可控热力学性能, 在航空航天、汽车、电子、医疗及光学仪器等尖端领域的需求日趋增长^[1,2]。高体积分数 (40%~70%) 的 SiC_p/Al 复合材料可通过改变增强相体积分数、铝基体合金成分以及复合材料的热处理状态实现对复合材料热物理性能和力学性能的再设计^[3]。尽管 SiC_p/Al 复合材料拥有很多优异的物理力学性能, 但在加工高体积分数的 SiC_p/Al 复合材料时, 由于 SiC 高硬度、高耐磨等特性会导致较低的刀具寿命和差的表面质量^[4,5]。

作为卫星轴承/天线、空间激光镜以及非球面玻璃透镜热压成型模具等精密仪器的关重件, 其精密、超精密加工的实现是 SiC_p/Al 复合材料工程应用的基础前提^[6]。此外, 不同于超精密加工 SiC 半导体材料, SiC_p/Al 复合材料的非均质特性对超精密加工的实现提出了更高的要求。超精密加工 SiC_p/Al 复合材料机理的研究对于获得高精度、高质量的 SiC_p/Al 复合材料加工表面是十分重要。由于传统的宏观、介观切削理论是建立在连续介质力学的基础上, 而对于纳米切削机理 (比如脆塑性转变、高压相变、界面及界面损伤、刀具石墨化) 在分子尺度上的揭示, 连续介质力学理论是否继续适用仍存在疑问^[7,8]。特别是本研究涉及到复合材料脆塑性界面对切削机理的影响, 而 Al-SiC 界面动态力学行为的表征需要借助复杂的试验手段或分子动力学方法。因此,

本研究采用分子动力学结合纳米切削试验, 对高体积分数的 SiC_p/Al 复合材料进行超精密切削机理研究。针对 SiC_p/Al 复合材料中 Al 与 SiC 两相力学性质上巨大差异而导致加工表面质量难以控制, 着重分析超精密切削 SiC_p/Al 复合材料中的加工表面形成机理、脆塑性转变以及刀具磨损。

1 分子动力学建模

1.1 势函数选取

类似于有限元中的本构方程, 势函数的准确性同样决定分子动力学模拟的准确性和可靠性, 单点金刚石超精密车削 SiC_p/Al 复合材料分子动力学 (MD) 模拟属于多分子构型系统, 对势函数的准确定义要求严格。而表示 SiC_p/Al 复合材料各组成原子相互作用的势函数主要包括铝原子间相互作用, 碳化硅的相互作用以及两相界面处铝原子和碳化硅之间的相互作用。对于基体金属原子的相互作用, 采用由 Winey 等^[9]开发的公式(1)所示的嵌入原子势(EAM)来模拟铝基体。

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{ij} V(r_{ij}) + \sum F \left[\sum_{j \neq i} \rho_i(r_{ij}) \right] \quad (1)$$

式中, V 为依赖于原子间距 r_{ij} 的铝原子对势, F 为与原子密度函数 $\rho_i(r_{ij})$ 相关的嵌入原子能。

关于碳化硅的相互作用, Erhart 和 Albe^[10]在已开发的 Tersoff 势函数和键级势函数的基础上提出了基

收稿日期: 2018-05-10

基金项目: 国家自然科学基金 (51575051); 国家科技重大专项 (2012ZX04003051-3)

作者简介: 项俊锋, 男, 1987 年生, 博士, 北京理工大学机械与车辆学院, 北京 100081, 电话: 010-68912716, E-mail: xiang_junfeng@126.com

于分析键级势(ABOP)形式的势函数,它具有能描述二体系统和多体系统性质的能力,可准确反映 SiC 原子间共价键作用。此外,由于 ABOP 势函数本质上是一个多体势函数,它允许考虑在切削模拟过程中化学键的形成和断裂,这对于实现金刚石刀具磨损演化预测非常重要。由此, SiC 颗粒、金刚石刀具以及它们之间的相互作用都采用 ABOP 势来模拟 Si-Si, C-C 和 Si-C 原子间作用。

$$\phi(r_{ij}) = \sum_{i>j} f_c(r_{ij}) \left[V_R(r_{ij}) - \frac{b_{ij} + b_{ji}}{2} V_A(r_{ij}) \right] \quad (2)$$

式中, $\phi(r_{ij})$ 是 ABOP 势函数,它表示系统内原子间吸引和排斥作用贡献的势能总和:

$$V_R(r) = \frac{D_0}{S-1} \exp(-\beta\sqrt{2S}(r-r_0)) \quad (3)$$

$$V_A(r) = \frac{SD_0}{S-1} \exp(-\beta\sqrt{2/S}(r-r_0)) \quad (4)$$

式中, D_0 和 r_0 分别是二体势作用的势能和键长,半径 $f_c(r_{ij})$ 由下式给出:

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r < R-D \\ 0, & r < R-D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\pi}{2} \frac{r-R}{D}\right), & |R-r| \leq D \end{cases} \quad (5)$$

式中, R 和 D 分别为截断区域的位置和宽度,键序 b_{ij} 可定义为:

$$b_{ij} = (1 + \chi_{ij})^{-1/2} \quad (6)$$

$$\chi_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_c(r_{ik}) \exp[2\mu(r_{ij} - r_{ik})g(\theta_{ijk})] \quad (7)$$

其中,键角函数 $g(\theta_{ijk})$ 为:

$$g(\theta_{ijk}) = \lambda \left(1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (h + \cos\theta)^2} \right) \quad (8)$$

表 1 列举了用于描述 Si-Si, C-C, Si-C 原子间作用的 ABOP 势函数参数。

理想情况下,用于表示任一界面的原子间作用力模型都应该包括两体和三体相互作用。在 SiC 与 Al 的界面中,两体相互作用包括 Al-Si 原子和 Al-C 原子之间的相互作用,而三体相互作用涉及 Al-Si-C, Al-C-Si, Al-Si-Al 和 Al-C-Al 等原子间作用。由于缺乏相应的多体势函数,需要对所构建分子动力学模型进行假设,以便允许采用 Al-C 和 Al-Si 的两体对势来描述 SiC 和 Al 原子间作用。假设 1 是 Al-Si-C 和 Al-C-Si 的平衡角设定为 109.47° ,此时三体相互作用可近似为

表 1 ABOP 势函数参数

Parameters	Si-Si	C-C	Si-C
D_0/eV	3.24	6	4.36
r_0/nm	0.2222	0.14276	0.179
S	1.57	2.167	1.847
β/nm^{-1}	14.76	20.099	16.991
r	0.09253	0.11233	0.011877
C	1.13681	181.910	273987
D	0.63397	6.28433	180.314
H	0.335	0.5556	0.68
μ/nm^{-1}	0	0	0
R/nm	0.29	0.2	0.24
D/nm	0.015	0.015	0.02

0; 假设 2 是截断半径的选取必须保证 Al-C-Al 和 Al-Si-Al 的第二近邻相互作用而产生的力也为零^[11]。

本研究采用 Morse 对势近似描述 SiC 和 Al 原子间复杂的界面作用,其 Al-Si 和 Al-C 的 Morse 对势函数详见表 2。

$$V = D_1 \left[e^{-2\alpha(r-r_1)} - e^{-\alpha(r-r_1)} \right] \quad (9)$$

1.2 纳米切削 SiC_p/Al 复合材料分子模型

受制于现有的计算能力,分子动力学所能建模的体系尺寸较小,而实际所加工的 SiC_p/Al 复合材料颗粒尺寸在微米级左右,通常远超分子动力学所适用的尺寸范围,因此难以实现完全意义上的模拟。为合理地模拟金刚石车削 SiC_p/Al 复合材料的过程,采用如图 1 所示的纳米切削 SiC_p/Al 复合材料的分子动力学建模策略,并在其厚度方向采用周期性边界条件,以避免车削过程中材料相关变形机制(如滑移、孪晶、刃型和螺型位错)的抑制^[12]。在室温下,金刚石、SiC 和 Al 的晶胞尺寸分别是 0.3566, 0.436, 0.405 nm。因此,金刚石的晶格常数与 Al 和 SiC 分别有 13.60%、22.32% 的晶格错配。如果在厚度方向武断地选择周期性盒子尺寸将会引起系统在周期性复制过程中产生原

表 2 描述 Al-Si 和 Al-C 界面作用 Morse 对势参数

Table 2 Morse potential parameters for Al-C and Al-Si interface

System	Parameter	Value
Al-C	D_1/eV	0.4691
	α/nm^{-1}	17.38
	r_1/nm	0.2243
Al-Si	D_1/eV	0.4824
	α/nm^{-1}	13.22
	r_1/nm	0.292

子堆叠或过大的间隙, 从而影响系统在弛豫过程中能量的稳定, 同时在系统平衡过程中还会引起大的热振动, 导致模拟体系难以达到平衡状态或弛豫过缓。此外, 在系统能量最小化过程, 由此引起的原子构型变化在很大程度上会导致一些非物理现象的产生, 从而影响变形及加工机理的揭示。基于此, 必须合理地选择模拟盒子尤其是 z 轴方向上的尺寸, 这样在构型能量最小化过程中避免原子位置的重叠及过大的原子间距。为构造接近完美的晶体结构和确保在厚度方向的周期性, 采用文献[13]提出的关于不同晶格材料周期性建模策略, 确定模拟盒子中 Al、SiC 和金刚石分别在厚度方向上构建 14、13 和 16 个晶胞, 3 种晶体材料在厚度方向上的几何尺寸分别为 5.669, 5.668 和 5.705 nm。盒子在厚度方向上几何尺寸取为 5.68 nm, Al、SiC 和金刚石分别与完全周期结构的几何偏差分别为 0.011, 0.0120 和 0.025 nm 的误差, 远小于它们的晶胞尺寸及截断半径, 可确保模拟盒子在厚度方向上的周期性。图 2 为依据上述周期性建模策略建立的沿厚度方向周期性边界的原子构型。

1.3 分子动力学模拟设置

为模拟刀具与工件原子间相互作用, 工件与金刚石刀均模拟为可变形体。如图 1 所示, 原子构型中的工件原子和金刚石刀具的原子均划分为 3 个不同的作用域: 牛顿层原子、控温层原子和边界层原子。在切削仿真过程中, 边界层原子按照其初始晶格位置被固定, 这样可减小边界效应对分子构型的影响并保持晶格的对称性。传统切削过程中, 第一变形区的塑性变形产热以及刀具和工件接触界面的摩擦产热这两部分热能通过以下途径进行耗散: (1) 切屑和冷却液带走部分热量; (2) 热量传导到工件和刀具中耗散部分热量。但在纳米切削模型中, 由于模型极小而不能及时耗散切削热, 需要施加恒温边界条件到控温层区域, 控温层原子的运动通过每时间步重置速度以实现切削

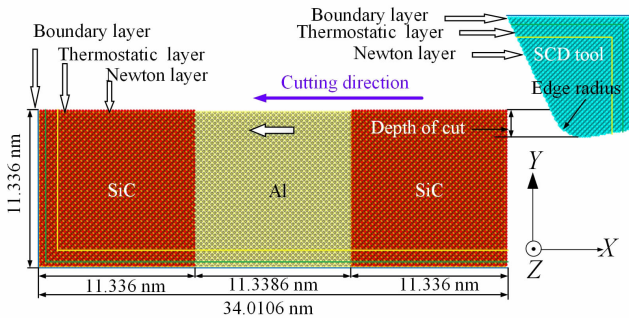


图 1 SiC_p/Al 复合材料超精密车削的分子动力学模型

Fig.1 Molecular dynamics modelling of ultra-precision turning SiC_p/Al composites

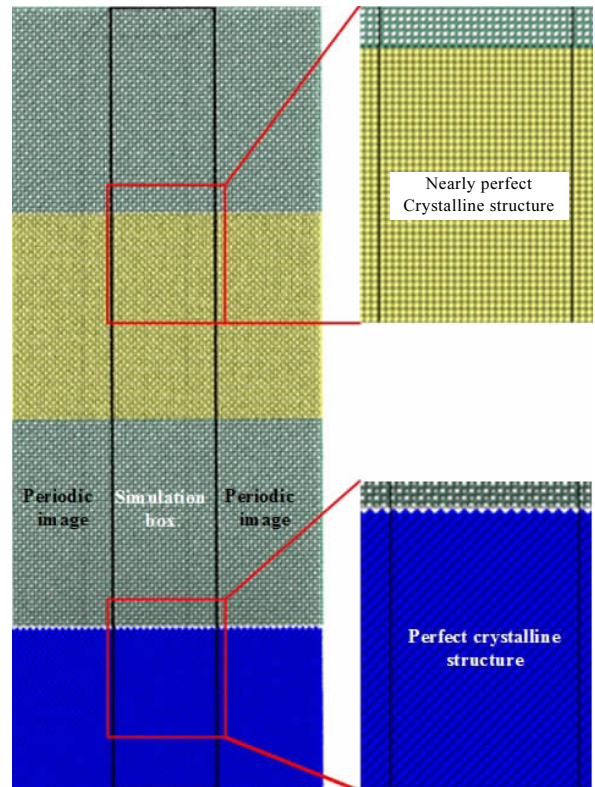


图 2 沿厚度方向周期性边界的原子构型

Fig.2 Atomic configuration of periodic boundary along the thickness direction

诱导的热量传递过程^[14]。在分子动力学的理论计算中, 原子温度可根据原子动能与温度的转化关系进行计算。

$$\sum_i^N m_i v_i^2 / 2 = 3Nk_B T / 2 \quad (10)$$

其中, m_i 和 v_i 分别为第 i 个原子的质量和速度, N 为原子数量, k_B 为玻尔兹曼常数 ($1.380\ 650\ 3 \times 10^{-23}$ J/K), T 为原子温度。

作为超精密切削分子动力学研究的主要区域, 牛顿层原子的运动是根据势能函数和原子间距计算原子间相互作用力, 再通过求解牛顿第二运动定律确定的。

$$a_{ix} = F_{ix} / m_i = d^2 x_i / dt^2 \quad (11)$$

其中, a_{ix} 为第 i 个原子在 x 方向上的加速度, m_i 为第 i 个原子的质量, x_i 为第 i 个原子的沿 x 方向的相对位置坐标。作用于第 i 个原子在 x 方向上的分力 F_{ix} 可表示为:

$$F_{ix} = -dV / dx_i \quad (12)$$

对于周期性边界条件, 在任意多体势作用下的应力张量 σ 可根据位力应力张量计算^[15]:

$$\sigma = \frac{1}{\Omega} \left\langle -\sum_i m_i \bar{v}_i \otimes \bar{v}_i + \frac{1}{2} \sum \bar{r}_{ij} \otimes \bar{f}_{ij} \right\rangle \quad (13)$$

其中, Ω 为系统体积, \bar{r}_{ij} 为原子 j 相对于原子 i 位移矢量, \bar{v}_i 为原子 i 的速度矢量, \otimes 为并矢算符, \bar{f}_{ij} 为原子 j 作用于原子 i 的力矢。

首先利用共轭梯度能量最小化算法对所构建多组分系统进行结构模型优化, 以避免异质原子位置上的重叠。在热浴温度 300 K 的微正则系统下对多组分原子构型进行常温弛豫以松弛内应力, 其中原子的初始速度分布服从 Maxwell-Boltzmann 规则。经过弛豫平衡 SiC_p/Al 复合材料的原子构型如图 3 所示。系统平衡后界面处的不同材料在界面两侧保持接触, 间隔距离约为 0.211 和 0.203 nm, 接近于 Al-Si (0.2445~0.292 nm) 与 Al-C (0.2~0.224 nm) 的平衡键长。图 4 表明在弛豫 8000 fs 以后系统能量收敛。当原子构型平衡稳定后, 执行单晶金刚石切削 SiC_p/Al 复合材料的分子动力学模拟。切削时应用 Berendsen 热浴算法控制控制层原子温度恒为 300 K^[16]。仿真步长缩小到 0.5 fs, 以避免切削过程中工件原子的丢失。表 3 概括了 SCD 超精密加工 SiC_p/Al 复合材料分子动力学模拟中的切削条件。采用大尺度原子/分子并行计算模拟软件 LAMMPS 进行超精密车削 SiC_p/Al 复合材料分子动力学模拟^[17]。

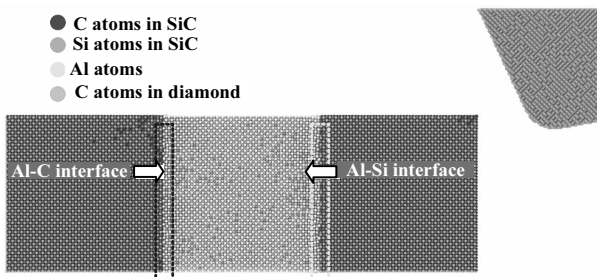


图 3 弛豫平衡后 SiC_p/Al 复合材料的原子模型

Fig.3 Atomic configuration of SiC_p/Al composites after relaxation

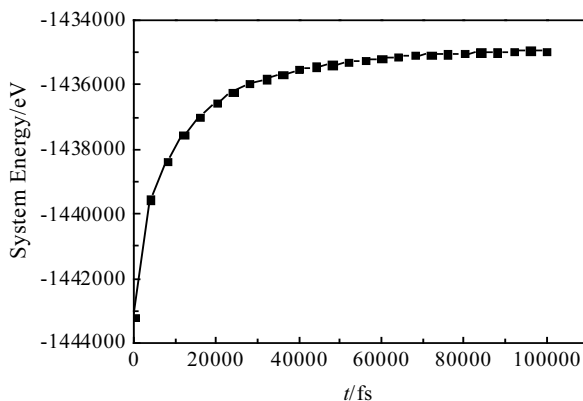


图 4 弛豫过程中能量变化

Fig.4 Energy variation during relaxation

表 3 分子动力学模拟中的切削条件设置

Table 3 Summary of cutting details in the MD simulation

	Items	Contents
Tooling	Tool material	SCD
	Rake angle/(°)	-20
	Flank angle/(°)	10
	Edge radius/nm	2.3
	Number of tool atoms	58384
Workpiece	Workpiece material	SiC _p /Al composites
	Workpiece size/nm ³	34.01×11.34×57.05
	Number of workpiece atoms	184512
Cutting conditions		
Operation	Cutting environment	Dry
	Depth of cut/nm	0.5, 1, 2, 3
	Cutting speed/m·s ⁻¹	100

2 结果与讨论

2.1 加工表面形成机理

图 5 为当切削深度为 1 nm 时, SCD 车削 SiC_p/Al 复合材料的加工表面形成过程。图 5a 和 5b 分别为 SCD 刀具行进 6.4, 10 nm 时的切屑和已加工表面形貌。观察到有连续的切屑形成和相对平整的已加工表面形貌, 这表明 SiC 颗粒的切削属于延性去除, 并且亚表面没有损伤发生。此外, 在刀具剧烈的挤压作用, 由于 Al 基体和 SiC 颗粒弹性模量的巨大差异而导致 SiC 颗粒与 Al 基体界面出现部分脱粘如图 5b 所示。当 SCD 刀具继续切削到 Al 基体与 SiC 颗粒界面时, Al 基体对 SiC 颗粒弱约束作用和界面处非均匀受力导致无法在 SiC 颗粒内部形成足够高的静水压力, 刃口下方 SiC 颗粒某些位置开始形成微裂纹, 最终在 SCD 刀具作用下界面处的 SiC 发生脆性断裂如图 5c 所示。随着 SCD 刀具运动, 脆断的 SiC 颗粒被压入刀具的后刀面, 在刀具的拖曳和推压下对已加工的 Al 基体表面形成二次切削而形成不平整的加工表面 (图 5d)。当切削到第 2 个 Al 基体和 SiC 颗粒界面处如图 5e 所示, 形成的 Al 基体切屑开始与毗邻的 SiC 颗粒接触, 并在高硬度、高刚度 SCD 刀具和 SiC 颗粒的挤压和剪切作用下被切断, 从而形成非连续的切屑形貌。这可能是图 6 所示 SiC_p/Al 复合材料切屑形貌形成的主要机理。与此同时, 被 SiC 碎屑碾压过后的 Al 基体发生弹性回复, 而在 SiC 颗粒脆断的界面处由于 SiC 的拔出而形成孔洞。被切断的一部分切屑由于高温涂覆在刀具表面, 这等效地减小切深和刀具等效前角而形成高的静水压力, 促进 SiC 的延性去除, 如图 5f 所示。

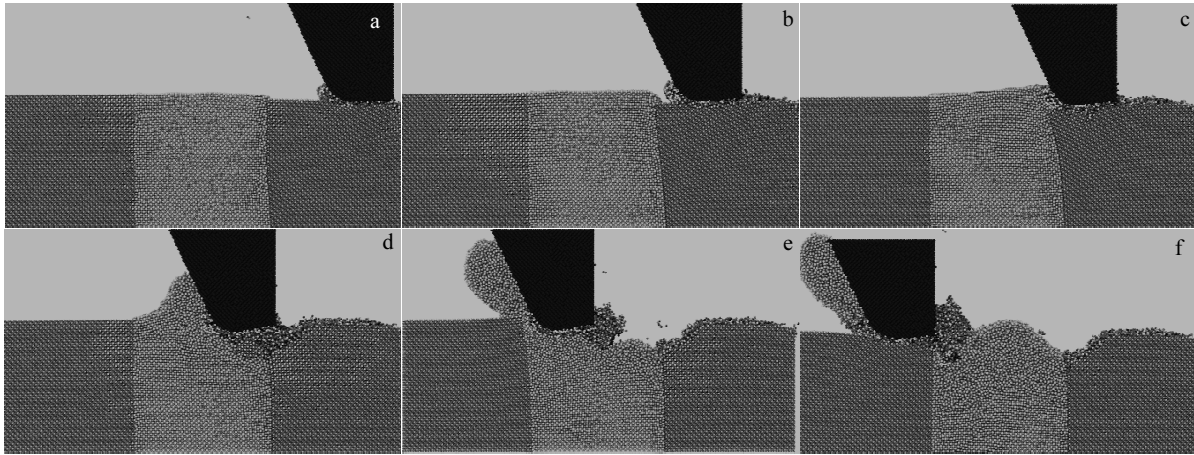


图 5 切削深度为 1 nm 时的加工表面形成过程

Fig.5 Machined surface formation process under cut depth of 1 nm: (a) 2000 fs, (b) 10 000 fs, (c) 18 000 fs, (d) 26 000 fs, (e) 34 000 fs, and (f) 42 000 fs

图 7 为切削深度为 1 nm 时切削诱导的弹性回复高压相变。图 7a 为当切削深度为 1 nm 时已加工表面的弹性回复。从图 7b 发现, SiC 增强相已加工表面和亚表面都比 SiC 原晶格致密地多, 这表明切削脆性 SiC 时发生高压相变。高压相变被认为是纳米切削中脆性材料延性切削的主要原因^[18], 这促进了 SiC 半导体的金属化转变。在刀尖切削的高压相变区域, 没有发现裂纹萌生的尖峰。这与刀具前角和刀尖刃口半径有关: 当刀尖刃口半径大于切削深度, 大的负前角有利于在切削区域形成足够大的压应力。在 Cai 等人采用单点金刚石车削单晶硅的研究中也发现了类似的现象^[19]。

2.2 脆塑性转变机理

图 8 为不同切削深度下 SCD 车削 SiC_p/Al 复合材料分子动力学模拟结果。当切削深度为 0.5 nm (图 8a、8b)、1 nm (图 8c、8d)时, SiC_p/Al 复合材料脆性 SiC 颗粒的去除表现为延性加工, 此时切屑是通过挤压而不是通过剪切方式形成。在切削深度为 0.5 nm 时, 加工出无亚表面损伤的表面。在切削深度为 1 nm 时, 在靠近 Al-SiC 界面的 SiC 一侧出现各向异性的脆性裂纹, 并随着刀具进给进一步向下扩展。随着切削深度增大到 2 nm (图 8e、8f)时, 在切削起始阶段, 在刀具进给前方萌生少量微裂纹, 切削诱导的裂纹没有扩展到已加工表面之下, 这些微断裂损伤区域将在后续切削过程中被去除, 从而实现脆性材料的延性切削, 脆性材料实现延性切削示意图如图 9 所示。但是在切削到 Al-SiC 界面附近时 SiC 颗粒的延性切屑形成和脆性断裂同时被观察到, 当 SCD 靠近 Al-SiC 界面位置附件时, 由于 Al 与 SiC 性质差异, Al 相对较低强度和

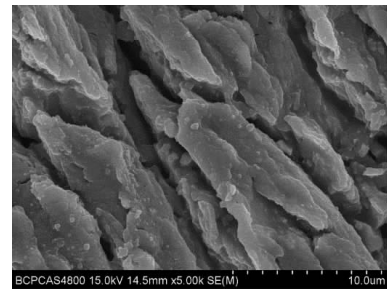


图 6 切削自由表面的 SEM 照片

Fig.6 SEM image of the chip free surface

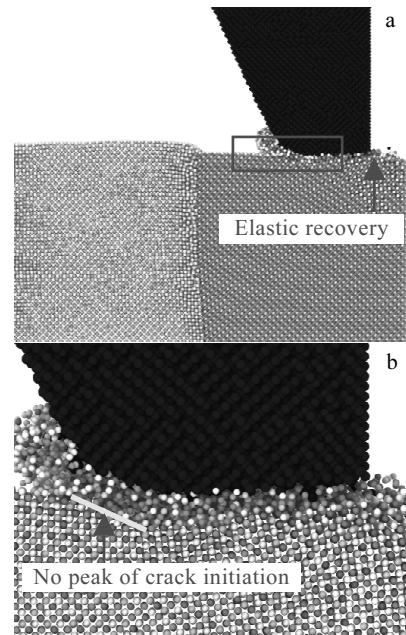


图 7 切削深度为 1 nm 时切削诱导的弹性回复、高压相变
Fig.7 Elastic recovery and high pressure phase transformation under cut depth of 1 nm

刚度,在 SCD 刀具剧烈的推压下,界面向铝一侧倾斜,倾斜的 Al 一侧无法对靠近界面处 SiC 颗粒提供足够支撑,从而导致在刀具进给前方萌生脆性微裂纹,切削诱导的脆性裂纹沿着向下偏斜 45° 的方向继续扩展。在刀具挤压和裂纹扩展的混合作用下,脆断 SiC 碎块向下滑移,部分压入 Al 基体中,由于向下滑移较短因而在加工表面形成浅坑。当切削深度继续增加到 3 nm (图 8g、8h)时, SiC 颗粒在切削起始阶段就表现的脆性断裂特征和块体切屑形貌揭示了 SiC 纯脆性切削方式,最终形成有深凹坑分布且有大量亚表面损伤的脆性加工表层。在不同切削深度下 SCD 车削 SiC_p/Al 复

合材料分子动力学模拟结果表明:随着切削深度的递增, SiC_p/Al 复合材料中 SiC 颗粒加工方式由延性去除,到脆塑性混合方式去除,最后演变为纯脆性方式。不同于纯 SiC 材料超精密加工, SiC_p/Al 复合材料中 SiC-Al 界面及较柔软 Al 基体存在,在很多程度上影响了 SiC_p/Al 复合材料中 SiC 颗粒去除的脆塑性转变。因此, SiC_p/Al 复合材料中 SiC 颗粒去除的脆塑性转变受切削深度和 Al-SiC 界面的综合影响。随切削深度增加, Al-SiC 界面向 Al 基体一侧偏移越剧烈,由此引起 SiC 脆性断裂区域也越大,在已加工表面产生更深孔洞缺陷和更多的亚表面损伤。

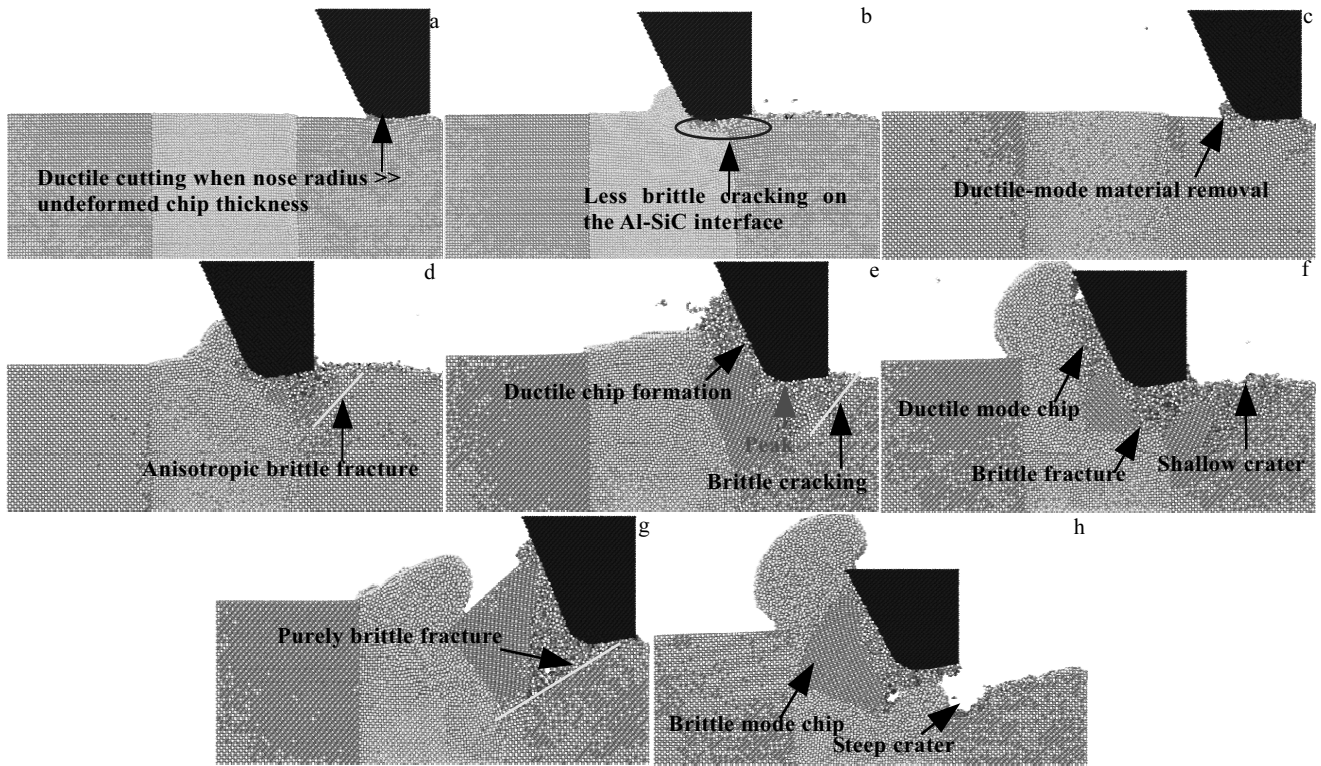


图 8 不同切削深度下 SiC_p/Al 复合材料的脆塑性转变

Fig. 8 Brittle-ductile transition of SiC_p/Al composites under different depths of cut: (a, b) 0.5 nm, (c, d) 1 nm, (e, f) 2 nm, and (g, h) 3 nm

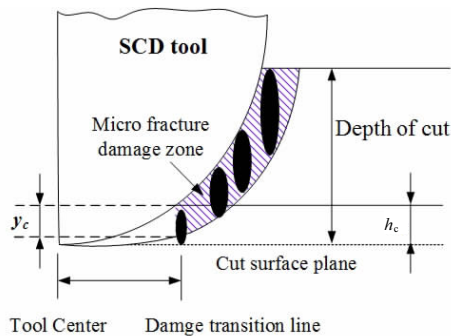


图 9 脆性材料塑性切削模型

Fig. 9 Ductile-regime cutting model for brittle materials

为进一步揭示 SiC_p/Al 复合材料中 SiC 颗粒去除的脆塑性转变机理,对不同切削深度下切削区域的应力分布进行分析。图 10 分别为 0.5, 1, 2, 3 nm 切削深度下切削区域附近沿 x 方向(切削方向)的应力分布。在切削深度为 0.5, 1 nm 下,已加工表面的应力状态均表现为较大的压应力,拉应力作用区域很有限,且分布在刀尖附近待加工表面内。当切削深度增大到 2 nm 时,已加工表面依然有较大的压应力形成,但此时压应力周围分布着较大的拉应力,且刀尖刃口下方作用区域的应力状态有拉应力存在,并伴随有脆性裂纹萌生。随着切削深度进一步增加到 3 nm 时,切削区域的

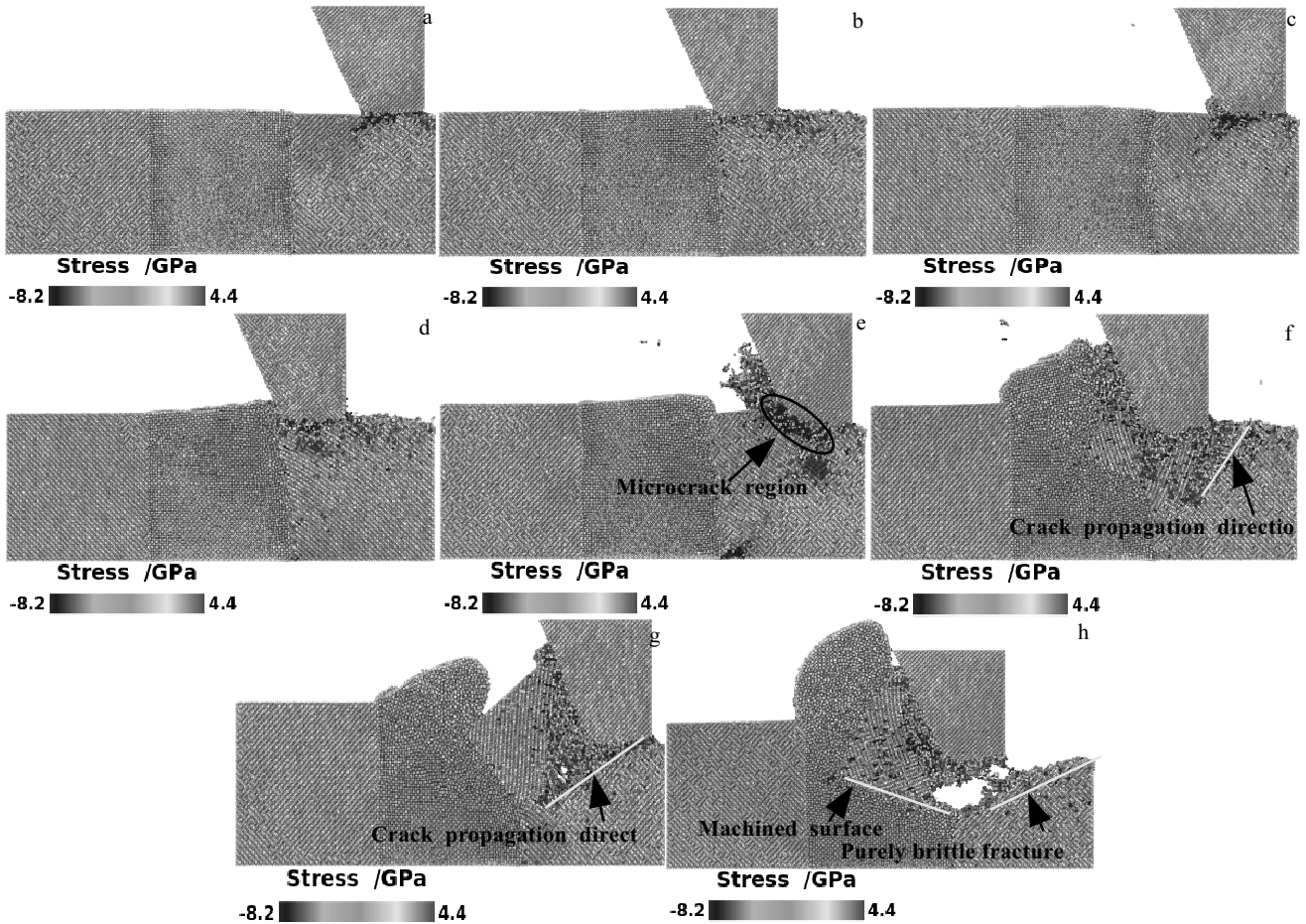


图 10 不同切削深度下切削区域的应力分布云图

Fig. 10 Stress distribution of cutting zone under different depths of cut: (a, b) 0.5 nm, (c, d) 1 nm, (e, f) 2 nm, and (g, h) 3 nm

应力状态以拉应力为主，裂纹萌生扩展迅速，已加工表面表现为纯脆性断裂形貌。随着切削深度的增加，拉应力作用区域随之增大。这表明，当切削深度大于某一临界值后，切削诱导的拉应力超过某一数值时会导致 SiC 的脆性开裂。这一临界切削深度被 Scattergood 和 Blake 证实是存在的^[20]。依据上述脆塑性转变分析结合应力分布可知，待加工表面上拉应力的存在会诱导微裂纹尖峰，是待加工区域脆性 SiC 材料裂纹萌生的直接诱因。这一论点在 Xiao 等人金刚石纳米车削 SiC 的研究中得以证实^[21]。

值得注意的是，即便拉应力对于切削脆性 SiC 时的脆塑性转变有很大影响，但由于切削过程中 SiC_p/Al 复合材料的非均匀性导致复杂的应力状态，裂纹的形核不仅与拉应力的幅值和方向有关，还受到其他因素如剪应力、整体应力状态、晶体取向、刀具前角、增强相（比分、大小、分布）等的影响。鉴于 SiC_p/Al 复合材料自身结构和超精密加工机理的复杂性，本研究是在特定加工条件下建立的分子动力学模拟结果并

不能将所有其他因素一并考虑在内，SiC_p/Al 复合材料深层次的脆塑性转变机制需要更详尽的研究。

2.3 刀具磨损

相比于碳的其他同素异形体，金刚石晶体结构中短的 sp³-sp³ 共价键是其成为最坚硬材料的根本原因。因此，衡量切削过程中金刚石刀具键长的变化对于在原子尺度上深刻理解其磨损机理非常有效^[22]。利用径向分布函数分析切削前后 SCD 刀具的键长变化，如图 11 所示。车削前，SCD 刀具径向分布函数的第 1 峰位于 0.154 nm 附近，这刚好对应金刚石共价键长。而切削后 SCD 刀具的径向分布函数在 0.144 nm 位置附近出现 1 个小峰，而 0.142 nm 是碳的另一个稳定同素异形体—石墨的键长。切削前后径向分布函数表明，在 SCD 车削 SiC_p/Al 复合材料过程中金刚石的石墨化转变发生。在切削诱导的高温高剪切作用下使 SCD 刀具表面的金刚石结构演变为层状的石墨结构。层状结构石墨在硬质 SiC 颗粒的划擦下很容易被磨掉，从而加剧了 SCD 刀具的磨损。

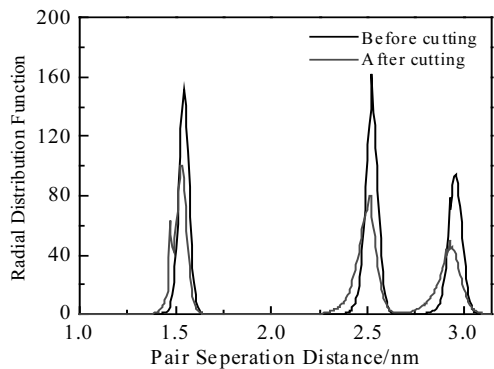


图 11 切削前后 SCD 刀具的径向分布函数

Fig.11 Radial distribution function of SCD tool before/ after cutting

图 12b、12c、12d 分别是 SCD 车削第 1 层 SiC、Al 基体、第 2 层 SiC 后的刀具磨损形貌。由图可见，SCD 刀具磨损主要发生在切削 SiC 过程中，磨损主要集中在刀具后刀面和刀尖圆弧处，而刀具前刀面磨损较小。因此，SCD 车削 SiC_p/Al 复合材料主要磨损机理为硬质 SiC 颗粒的磨粒磨损和切削诱导的石墨化。

3 试验验证

采用美国 Precitech 公司研制的 Nanoform X 超精密机床进行超精密车削体积分数为 45% 的 SiC_p/Al 复合材料试验。切削试验参数如下：主轴转速为 3000 r/min，进给量为 0.6 mm/min，切削深度为 22~25 nm（图 13 为工件横截面上切削深度示意图）。

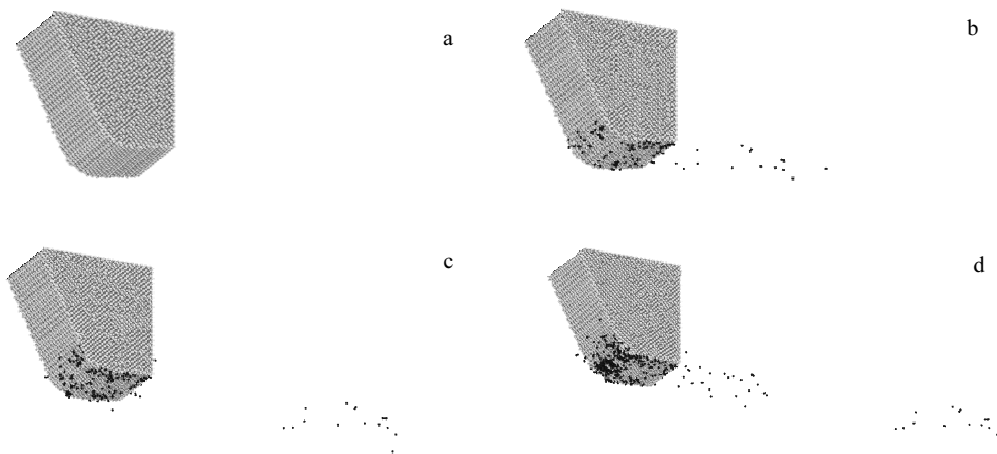


图 12 切削过程中 SCD 刀具磨损形貌

Fig. 12 Wear morphologies of SCD tool during cutting: (a) 0 fs, (b) 10 000 fs, (c) 18 000 fs, and (d) 45 000 fs

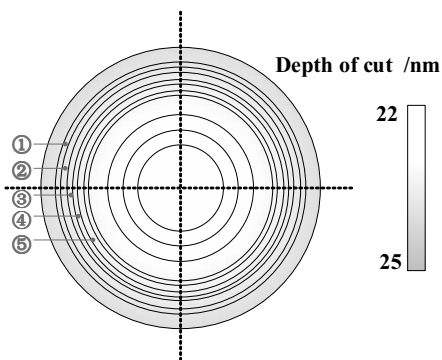


图 13 工件横截面上切削深度示意图

Fig.13 Schematic of depth of cut in the workpiece cross section

图 14a 为在不同切削深度下 SCD 车削 SiC_p/Al 复合材料加工表面形貌。由图 14b 表面形貌高度分布可见，随着表面高度的减小，亦即随切削深度的增加，加工表面质量越加恶化。在切削深度较大处，SiC 颗粒及其附近区域有 SiC 脆性断裂形成的浅坑、坑洞缺陷，拔出的 SiC 块体对周围基体刮擦形成划痕；而采用较小切削深度形成了缺陷较小的光滑加工表面。因此，SiC 颗粒的去除形式关系到 SiC_p/Al 复合材料加工表面质量好坏。SCD 车削 SiC_p/Al 复合材料试验很好地印证了上述的分子动力学模拟结果。

图 15 为车削前后 SCD 刀具微观磨损形貌。除少量 Al 基体粘着外，SCD 刀具前刀面几乎没有任何磨损。相比于前刀面，SCD 刀尖圆弧和后刀面位置处发生剧烈磨损，特别是刀具圆弧处磨出一个小平台。这

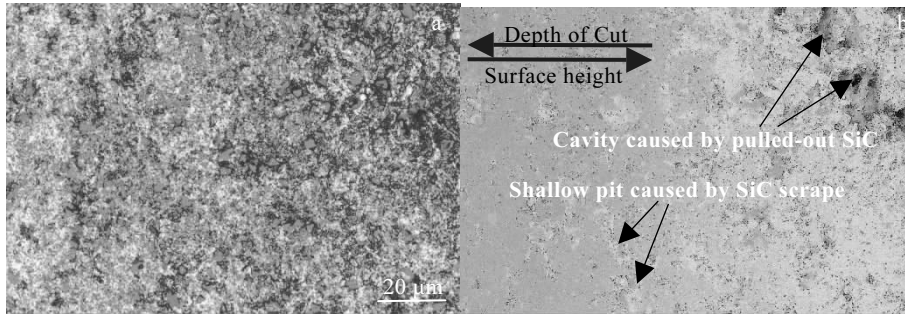


图 14 不同切削深度下加工表面形貌及其高度分布

Fig.14 Surface morphology (a) and surface height distribution (b) under different depths of cut

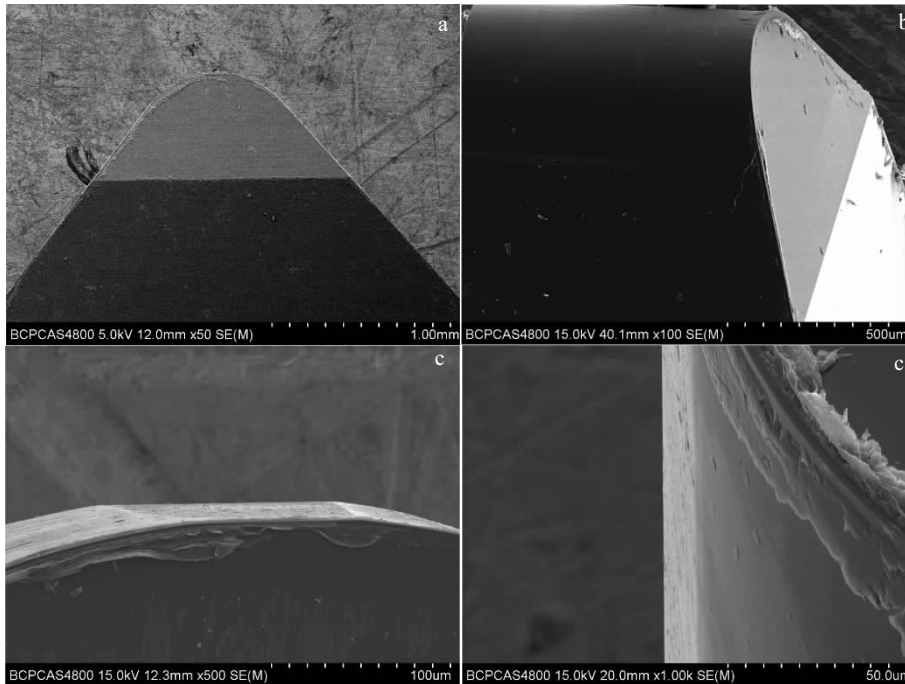


图 15 切削前后 SCD 刀具微观磨损形貌

Fig.15 Wear morphology of SCD tool: (a) rake face and (b) flank face before cutting; (c) rake face and (d) flank face after cutting

与图 12 通过分子动力学模拟 SCD 刀具发生严重磨损位置相一致。

4 结 论

1) SiC_p/Al 复合材料中 SiC 增强相已加工表面和亚表面都比 SiC 原晶格致密地多, 表明切削脆性 SiC 时发生高压相变。高压相变被认为是纳米切削中脆性材料延性切削的主要原因, 促进了 SiC 半导体的金属化转变。在刀尖切削的高压相变区域, 没有发现裂纹萌生的尖峰。这与刀具前角、切削深度和刀尖刃口半径有关: 当刀尖刃口半径大于切削深度, 大负前角有利于在切削区域形成足够大的压应力。

2) 随着切削深度的增加, SiC_p/Al 复合材料中 SiC 颗粒加工方式由延性去除, 到脆塑性混合方式去除, 最后演变为纯脆性去除方式。不同于纯 SiC 材料超精密加工, SiC_p/Al 复合材料中 SiC-Al 界面及 Al 基体存在, 影响 SiC_p/Al 复合材料中 SiC 颗粒去除的脆塑性转变。随切削深度增加, Al-SiC 界面向 Al 基体一侧偏移越剧烈, SiC 脆性断裂区域越大, 在已加工表面形成更深孔洞和更多的亚表面损伤。

3) 待加工表面上拉应力的存在会诱导微裂纹尖峰, 是待加工区域脆性 SiC 材料裂纹萌生的直接诱因。当切削深度大于某一临界值后, 切削诱导的拉应力超过某一数值时会导致 SiC 的脆性开裂。

4) SCD 刀具磨损主要在后刀面和刀尖圆弧处, 前刀面磨损较小。SCD 车削 SiC_p/Al 复合材料主要磨损机理为硬质 SiC 颗粒的磨粒磨损和切削诱导的石墨化。

参考文献 References

- [1] Wang B, Zhao S, Ojima F *et al.* *Ceram Int*[J], 2016, 43(2): 2867
- [2] Pugacheva N B, Michurov N S, Bykova T M. *Phys Met Metallogr*[J], 2016, 117(6): 634
- [3] Teng F, Kun Y U, Luo J *et al.* *T Nonferr Metal Soc*[J], 2016, 26(10): 2647
- [4] Xiang J F, Xie L J, Gao F N *et al.* *Ceram Int*[J], 2018, 44(5): 5341
- [5] Xiang J F, Pang S Q, Xie L J *et al.* *Materials*[J], 2018, 11(2): 252
- [6] Ge Y, Xu J, Yang H. *Wear*[J], 2010, 269(11-12): 699
- [7] Xiang J F, Xie L J, Gao F N *et al.* *Materials*[J], 2018, 11(1): 97
- [8] Narulkar R, Bukkapatnam S, Raff L M *et al.* *Comp Mater Sci*[J], 2009, 45(2): 358
- [9] Winey J M, Kubota A, Gupta Y M. *Model Simul Mater Sc*[J], 2009, 17(5): 055 004
- [10] Erhart P, Albe K. *Phys Rev B*[J], 2005, 71: 035211
- [11] Zhao H, Chen N. *Inverse Probl*[J], 2008, 24(3): 035 019
- [12] Dandekar C R, Shin Y C. *Compos Part A-Appl S*[J], 2011, 42(4): 355
- [13] Xiang J F, Xie L J, Meguid S A *et al.* *Comp Mater Sci*[J], 2017, 128: 359
- [14] Goel S, Luo X, Reuben R L. *Tribol Int*[J], 2013, 57: 272
- [15] Thompson A P, Plimpton S J, Mattson W. *J Chem Phys*[J], 2009, 131(15): 154 107
- [16] Berendsen H J C, Postma J P M, Gunsteren W F V *et al.* *J Chem Phys*[J], 1984, 81(8): 3684
- [17] Plimpton S. *J Comput Phys*[J], 1995, 117(1): 1
- [18] Goel S, Luo X, Reuben R L. *Comp Mater Sci*[J], 2012, 51(1): 402
- [19] Cai M B, Li X P, Rahman M. *Int J Mach Tool Manu*[J], 2007, 47(1): 75
- [20] Blake P N, Scattergood R O. *J Am Ceram Soc*[J], 1990, 73(4): 949
- [21] Xiao G, To S, Zhang G. *Int J Mach Tool Manu*[J], 2015, 88: 214
- [22] Zhu Ying(朱 瑛), Zhang Yincheng (张银成), Qi Shunhe(齐顺河) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2016, 45(4): 897

Simulation and Experimental Research on Ultra-precision Turning of SiC_p/Al Composites

Xiang Junfeng, Xie Lijing, Hu Xin, Huo Shiyan, Pang Siqin, Wang Xibin
(Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: Aimed at the difficulty in producing high-quality machined surface due to the existence of brittle-phase SiC in SiC_p/Al composites, this paper used the molecular dynamics simulation and ultra-precision turning test to investigate the material removal process of SiC_p/Al composites at nanoscale, and focused on the machined surface formation mechanism, brittle-ductile transition and tool wear mechanism in single crystal diamond ultra-precision turning of SiC_p/Al composites. The results indicate that high-pressure phase transition is the main reason for the brittle-ductile transition of brittle-phase SiC in SiC_p/Al composites. With the increase of cutting depth, the removal of SiC particles in SiC_p/Al composites experienced from ductile cutting mode to hybrid brittle-ductile cutting mode and finally to purely brittle cutting mode. The SiC-Al interface and soft Al matrix in SiC_p/Al composites considerably affects the brittle-ductile cutting mode transition mechanism when machining SiC particles in SiC_p/Al composites. The existence of tensile stress on the uncut chip could induce the peak of brittle SiC crack initiation in the cutting zone. The primary wear mechanisms of SCD tools are abrasive wear originated from hard SiC particles' scrape and machining induced graphitization.

Key words: SiC_p/Al composites; ultra-precision turning; molecular dynamics; single crystal diamond; brittle-plastic transition

Corresponding author: Xie Lijing, Ph. D., Professor, School of Mechanical Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, P. R. China, Tel: 0086-10-68912716, E-mail: rita_xie2004@163.com