FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2003. március 21-22.

IONKRISTÁLYOK POTENCIÁLIS ENERGIAJÁNAK SZÁMÍTÁSA MIKROFORGÁCSOLÁS SZIMULÁCIÓJÁHOZ

Dr. Szabó Ottó*

Gurzó József**

Abstract. Calculation of potential energy in ion-crystals by computer simulation of microcutting. New materials complying with the technical and economical requirements of the modern age — besides the traditional materials - must occur for the continuous technical development of the highly developed industrial countries. These requirements set a hard task to producers, because special physical, chemical, mechanical properties are needed (heat and corrosion resistivity, high tenacity and hardness at the same time, etc). With the application of adequate chip separation theories, ultraprecision machining can be planned with better accuracy, more economically and can be better controlled, respectively. For in some cases it is about machining of submicron accuracy (the separated chip cross sectional area is of μm^2 dimension), therefore, traditional cutting theories that describe the separation of the bigger chip-cross sections are not sufficiently accurate. Creation and implementation of new theories will be needed, such as FEM or finite element method, atomic, molecular dynamical models.

1. Bevezetés

Automatizálás, számítástechnika, mechatronika és egyéb korszerű iparágak egyre több különleges anyagot (pl. tiszta fém kristályok, nem fémes anyagok), igen szigorú makro- és mikrogeometriával rendelkező alkatrész, illetve gyártmány gazdaságos előállítását igénylik. Az ún. szubmikronos pontosságú technológiák (pl. ultraprecíz pontosságú forgácsolás vagy nanotechnológiák) nélkülözhetetlenné váltak. Nagy súlyt kapnak a mikroforgácsolást megvalósító ultrapontos esztergálás, marás, köszörülés, dörzsköszörülés, stb.

A mikroforgácsolás témakörrel kapcsolatos eddigi publikációink során a réz egykristály forgácsolásával kapcsolatos elméleti számításokat és az elvégzett próba-szimulációkat mutattuk be [4]. Láthattuk, hogy a számítási eredmények a kísérleti mérésekkel és a szakirodalomban található adatokkal jó egyezést mutattak. A réz egykristály beszerzési ára igen nagy. Viszonylag könnyen

beszerezhetők megfelelő nagyságú ionkristályok (NaCl, KCl, stb.), de ezekhez az ionkristályok forgácsolásának szimulációjára alkalmassá kell tenni a kidolgozott szimulációs programunkat.

A továbbiakban az ionkristályok potenciális energiájának elméleti számításának rövid összefoglalásával foglalkozunk.

2. Ionkristályoknál ionok elektrosztatikus vonzása

A szilárd kristályokban fellépő energia- és erőviszonyokat a legegyszerűbben az ionkristályok esetében tanulmányozhatjuk. Ezekben a kristályokban a kötést az ellentétes töltésű ionok elektrosztatikus vonzása hozza létre. Az első közelítésben az ionokat pontszerű töltéseknek képzeljük el [1,2].

Két pontszerű Q_i és Q_j nagyságú töltés között fellépő Coulomb-féle vonzóerőt (taszítóerőt) figyelembe véve a kölcsönhatás potenciális energiája:

$$E_{pot\,ij}^* = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_r} \cdot \frac{Q_i \cdot Q_j}{r_{ij}} = \frac{1}{k} \cdot \frac{Q_i \cdot Q_j}{r_{ij}} \tag{1} \text{és} \tag{2}$$

ahol: ϵ_0 - permitti vitás, abszolút dielektromos állandó (pld. NaCl ionkristálynál: $8,85416 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}$);
 ϵ_r - relatív dielektromos állandó (esetünkben: 1);
 Q_i - az/-edik ion töltése (pld.: $Q_i = Q = 1,6021917 \cdot 10^{-19} \text{ C}$);
 Q_j - aj/-edik ion töltése (pld.: $Q_j = -Q = -1,6021917 \cdot 10^{-19} \text{ C}$);
 r_{ij} - az /-edik és y-edik ponttöltések (ionok) közötti távolság (pl.: $2,81 \cdot 10^{-10} \text{ m}$);
 k - arányszám (pld.: $1,126466 \cdot 10^{-10} \text{ As/Vm}$).

A NaCl kristály sematikus felépítését az 1. ábra mutatja. Látható, hogy a NaCl-nak egyszerű köbös rácsa van, ahol az Na és Cl ionok felváltva helyezkednek el.

1. ábra Az NaCl kristály felépítése

3. Taszító, töltéstől független erők

Az ionkristály-rácsban azonban nemcsak a ponttöltésekre vonatkozó vonzó és taszító erők, hanem még plusz taszító (töltéstől független) erők is működnek. Ezek a legegyszerűbben valamilyen hatványfüggvénnyel írhatóak le:

$$E_{pot, taszító_{ij}} = \frac{\lambda}{r_{ij}^n} \quad (3)$$

ahol: λ - kristályszerkezettől függő arányossági tényező; n - kristály merevségére jellemző szám, ami pld. NaCl-ra: $n=9,4$).

4. A potenciális energia

Ezzel az j -edik és i -edik ion közötti potenciális energia:

$$E_{pot_{ij}} = E_{pot_{ij}}^* + E_{pot, vonzó_{ij}} = \frac{\lambda}{r_{ij}^n} \pm \frac{1}{k} \cdot \frac{Q^2}{r_{ij}} \quad (4)$$

alakba írható, ahol „-” jel akkor érvényes, ha Q_j -edik ion töltése a Q_i -edik ionéval ellentétes és „+” jel akkor, ha Q_j -edik ion töltése a Q_i -edik ionéval megegyező.

Az z -edik ion potenciális energiáját a következőképpen számíthatjuk:

$$E_{pot_i} = \sum_{j \neq i} E_{pot_{ij}} = \sum_{j \neq i} \left(\frac{\lambda}{r_{ij}^n} \pm \frac{1}{k} \cdot \frac{Q^2}{r_{ij}} \right) \quad \text{és} \quad r_{ij} = p_{ij} \cdot R \quad (5)$$

ahol: R - alapesetben az R_0 rácsállandót jelenti (1. ábra).

Az r_{ij} -t behelyettesítve a (5)-be és átalakítva kapjuk, hogy:

$$E_{pot_i} = \frac{\lambda}{R^n} \cdot A - \frac{1}{k} \cdot \frac{Q^2}{R} \cdot \alpha \quad (6)$$

$$\text{ahol: } A = \sum_{j \neq i} \frac{1}{p_{ij}^n} \quad \text{és} \quad \alpha = \sum_{j \neq i} (\mp) \frac{1}{p_{ij}} \quad (\text{Madelung-állandó NaCl-ra } \alpha = 1,747558). \quad (7)$$

„A” és „ α ” között (a levezetések mellőzése nélkül) a következő kapcsolat áll fenn:

$$\lambda \cdot A = \frac{1}{k} \cdot \frac{Q^2 \cdot \alpha}{n} \cdot R_0^{n-1} \quad (8)$$

A (8)-at visszahelyettesítve (6)-ba kapjuk, hogy:

$$E_{pot_i} \Big|_{R=R_0} = \frac{Q^2 \cdot \alpha \cdot R_0^{-1}}{k} \cdot \left(\frac{1}{n} - 1 \right) \quad (9)$$

Behelyettesítve az ismert állandókat NaCl-ra kapjuk, hogy:

$$E_{pot_i} \Big|_{R=R_0} = -1,28 \cdot 10^{-18} \text{ J} \quad (10)$$

vagyis az NaCl kristályrácsban egy ion potenciális energiája: $-1,28 \cdot 10^{-18} \text{ J}$.

5. Számítás és következtetés

Vizsgáljuk meg az előző képletben felhasznált α konstans (1,747558) számítási módját NaCl-ra. írható, hogy:

$$\alpha = \sum_{j \neq i} \left(\mp \right) \frac{1}{p_{ij}} = \frac{6}{1} - \frac{12}{\sqrt{2}} + \frac{8}{\sqrt{3}} - \frac{6}{2} + \frac{24}{\sqrt{5}} - \frac{24}{\sqrt{6}} + \dots = 6 - 8,485 + 4,62 - 3 + 10,733 - 13,856 + \dots \quad (13)$$

Vagyis: egy vizsgált ionnak a kristályrács **belsejében** egy rácstávolságra 6 vonzó (ellentétes töltésű) szomszédja van, $\sqrt{2}$ rácstávolságra 12 taszító (azonos töltésű) szomszédja van, $\sqrt{3}$ rácstávolságra 8 vonzó szomszédja van, 2 rácstávolságra 6 taszító szomszédja van, stb. Ha a sort tovább folytatjuk az tapasztalható, hogy **a konvergencia igen szegényes**, de létezik határérték. A feladat további része a számítógépi szimuláció, amelyet e konferencia másik cikkében foglaltuk össze [3] és egy lehetséges szimulációt mutat az ott közölt 1.-2. ábra.

A kutatómunkánkat OTKA T030668 és OTKA F019105 (Budapest) támogatással végezzük.

Irodalom

- [1] Kittel Charles: Introduction to Solid States Physics, Second Edition, New York - John Wihltley and Sons, Inc. -London, 1963. pp.70-84.
- [2] Berecz Endre: Fizikai kémia, Második kiadás. Tankönyvkiadó, Budapest, 1988., pp.183-185.
- [3] Szabó O. - Gurzó J.: Ionkristályok mikroforgácsolásának számítógépi próbaszimulációja. VII. Fiatal Műszakiak Tudományos Ülésszaka. Nemzetközi Tudományos Konferencia kiadványa. Kolozsvár, 2003. március 21-22. 4p (E konferencia másik cikke).
- [4] Szabó O. - Gurzó J.: Rechnergestützte Simulation der Mikrozerspannung und Flächen von Zentralen Kristallen. Computer Integrated Manufacturing Conferencze. Zakopane, 7-9. Marc. 2001. WNT Warsawa, 2001. ISBN 83-204-2409-7. pp. 199-208.

* **Dr. Szabó Ottó, C.Sc, PhD.**, egyetemi docens

Miskolci Egyetem Gépgyártástechnológiai Tanszék 3515. Miskolc-Egyetemváros

Telefon: +36-46-565-111/15-21 E-mail: ggytszo@gold.uni-miskolc.hu

** **Gurzó József**, okl. gépészmérnök, Boss GmbH Sárospatak.