FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2003. március 21-22.

IONKRISTÁLYOKMIKROFORGÁCSOLÁSÁNAK SZÁMÍTÓGÉPI PRÓBA-SZIMULÁCIÓJA

Dr. Szabó Ottó*

Gurzó József**

Abstract. Computer test-simulation of microcutting of ion-crystals. For machining, ultraprecision machining is increasingly preferred to grinding, for the previous has better productivity, and in certain cases dimension and shape accuracy as well as the strict requirements to the surface quality can more easily be assured. Creation and verification of such a chip separation theory that is able to describe the most important physical, mechanical processes during the ultraprecision machining taking the effect of the tool and workpiece material, texture, type of crystallization, geometry and wear, as well as the effects of the technological conditions into consideration. With the aid of computer simulation to give a statistical estimation of the changes occurring on the workpiece and tool, of the probable mechanical and geometrical properties, of the development of the cutting force, etc.

1. Bevezetés

Mikroforgácsolás energetikai viszonyainak, kialakuló forgácsolóerők, forgácsolási hőmérséklet és felületérdesség előzetes számításához szimulációs modelleket dolgoztunk ki. A modell alapját a potenciális meghatározása jelenti, amit e konferencia másik előadásában foglaltuk össze [1]. A szimulációnál a szerszám és a munkadarab szerkezetéből indulunk ki. A forgácsleválasztás folyamatát atomi szintekről modellezzük. A program folyamatábráját az 1. ábra mutatja be [2].

2. NaCl IONKRISTÁLY PRÓBA-SZIMULÁCIÓJA

A potenciális energia számítására vonatkozó összefüggésekkel kibővítve a szimulációs programot [1] és az időigényes szimulációt elvégezve azt tapasztaltuk, hogy a program indulásakor a generált hibátlan NaCl kristályrács (L. 1.-2. ábra) áll elő. A kiindulási állapotból [1] (2. ábra) látható, hogy 729 db. (9x9x9) ionból áll a munkadarab (L egyenlő oldalú kocka, ill. hatszög). A sötétszürke pontok az Na ionokat jelöli, a világosszürke a Cl ionokat, míg a fekete pontok a gyémánt szerszám ionjait mutatják. A gyémántkést $\alpha=45^\circ$ -os főei-elhelyezési szöggel alakítottuk ki (az ábra jobb alsó sarka). A

szimulációs idő előrehaladásával a kristályrács fokozatosan szétesik még azelőtt, mielőtt a gyémánt szerszám elérné a kristály felületét (3. ábra).

1.-2. ábra Az NaCl kristályrács és a gyémánt szerszám a szimuláció kezdetekor

3. ábra Az NaCl kristályrács 1000 szimulációs lépés után

A 3. ábrából látható, hogy kb. 1000 szimulációs lépés megtétele után (ami hozzávetőleg 0,01 ns-nak felel meg) a kristályrács nem tartja meg eredeti alakját, hanem szétesőben van anélkül, hogy a szerszám a közelébe került vagy behatolt volna. A következő 4. ábra a 3. ábrán ábrázolt helyzetet az YZ síkkal elmetszve és kinagyítva mutatja (A-A metszet).

4. ábra Az NaCl kristály YZ síkkal párhuzamos metszete

A metszeten is láthatjuk, hogy az eredeti egyszerű köbös kristályrács nem marad meg, hanem valamilyen másfajta, szabálytalannak tűnő kristályszerkezetbe megy át. Az eredeti kristályszerkezet valószínűleg a következő okok miatt nem marad meg: (1) Az alkalmazott potenciál függvény nem írja le megfelelően a kristályrács viselkedését; (2) A kristály felületén elhelyezkedő ionok helyzete nem megfelelően stabil; (3) A szimulációhoz kevés iont vettünk figyelembe.

3. Az alkalmazott potenciálfüggvény felülvizsgálata

Az [1] cikkben bemutatott (8) potenciálfüggvény sokféle bővített változatának [2] kipróbálása sem hozott elfogadható eredményt (pl.: befolyásoló paraméterek módosítása, mint az pl. r_0 , vagy a taszítóerők elhanyagolása $\lambda=0$ mellett, stb.). A kristály ionjainak jelentős része (a már eredetileg

rögzített - megfogott - ionok (3. és 4. ábrák) kivételével) továbbra sem tartja meg egyensúlyi rezgésközéppontjának helyét. Feltételezzük tehát, hogy a kristályrács szétesését, átalakulását olyan más tényezők befolyásolják, melyek hatását eddig nem vettük figyelembe.

4. A kristályrács felületén elhelyezkedő ionok stabilitásának vizsgálata

Vizsgáljuk meg az [1]-ben közölt (6) potenciál függvény felhasználásával és az 1.-2. ábra segítségével az NaCl kristályrács belsejében (21-es ion), egy kristály felületen (7-es ion), egy kristály élen (23-as ion) és egy kristály sarokpontban elhelyezett (11-es ion) ion potenciális energiájának alakulását.

Az 5. ábrán láthatjuk, hogy a 3x3x3-as kristályrács (L. [1] 1. ábra) középpontjában lévő ion (21-es ion) egyensúlyi helyzete megegyezik az elméleti helyzettel ($x=2,81\text{e-}10\text{ m}$; $y=2,81\text{e-}10\text{ m}$; $z=2,81\text{e-}10\text{ m}$). Ez azt jelenti, hogy a szimuláció megindítása után az eredeti helyre generált 21-es ion egyéb erőhatások nélkül (pld. gyémánt szerszám) az egyensúlyi rezgéshely körül fog rezegni. Látható, hogy az egyensúlyi helyzetben $-1,18\cdot10^{-18}\text{ J}$ a vizsgált ion potenciális energiája a megfigyelt kristályrácsban, míg az elméleti úton kapotté $-1,28\cdot10^{-18}\text{ J}$ (12-es ion). A különbség annak tudható be, hogy az 5. ábra eredménye nem végtelen sok ion , hanem „csak” 26 szomszéd figyelembevételével készült (egyébként jó közelítés).

5. ábra Az NaCl kristály belsejében lévő ion potenciális energiája

A 6. ábrán láthatjuk, hogy a 3x3x3-as kristályrács egyik lapján lévő ion (7-es ion) egyensúlyi helyzete **nem** egyezik meg az elméleti helyzettel ($x=5,62\text{e-}10\text{ m}$; $y=2,81\text{e-}10\text{ m}$; $z=2,81\text{e-}10\text{ m}$). Ez azt jelenti, hogy a szimuláció megindítása után az eredeti helyre generált 7-es ion egyéb erőhatások **nélkül is** (pld. gyémánt szerszám) elhagyja az eredetileg generált egyensúlyi rezgéshelyét. Látható, hogy az igazi egyensúlyi helyzetben ($x=6,52\text{e-}10\text{ m}$; $y=2,81\text{e-}10\text{ m}$; $z=2,81\text{e-}10\text{ m}$) $-9,55\cdot10^{-19}\text{ J}$ a vizsgált ion potenciális energiája a megfigyelt kristályrácsban (17 szomszéd figyelembevétele esetén: 2, 3, 5, 6, 8, 11, 12, 13, 15, 17, 18, 20, 21, 23, 24, 26, 27). Ez abszolút értékben kisebb, mint a kristályrács belsejébe lévőé.

6. ábra Az NaCl kristály lapközepén lévő ion potenciális energiája

A kristályrács egyik élén (pld.: 23-as), illetve egyik sarkán lévő (pld.: 11-es) ion vizsgálata a 6. ábrán közölt jelleggörbéhez hasonló függvényt adott.

5. Következtetések

Az előbbiekből már elméleti úton is megállapítható (szimuláció nélkül), hogy a szimuláció kezdetén generált ideális kristályrács egyéb erőhatások nélkül is elkezd a külső felületein tágulni, ami maga után vonja a belső felületek kifelé történő elmozdulását is. Láthatjuk továbbá a figyelembe vett ionszámokból és az elméleti és számítási potenciális energiák különbségből, hogy eltérések tapasztalhatóak. Feltételezésünk szerint a figyelembe vett szomszédok száma nagymértékben befolyásolja az eredményt. Valószínű, hogy ha több szomszédot veszünk figyelembe a számítás során, akkor pontosabb és stabilabb eredményeket kapunk. Ez egy következő publikáció témája lesz.

A kutatást az OTKA F019105 és OTKA T030668 (Budapest) támogatásával végezzük.

Irodalom

- [1] Szabó O. - Gurzó J.: Ionkristályok potenciális energiájának számítása mikroforgácsolás szimulációjához. VII. Fiatal Műszakiak Tudományos Ülésszaka. Nemzetközi Tudományos Konferencia kiadványa. Kolozsvár, 2003. március 21-24. 4p (E konferencia másik cikke).
- [2] Szabó O. - Gurzó J.: Modelling of Microcutting and Dislocations. Gép, Budapest, 2001. LII. 3-4. pp.10-12.
- [3] Berecz Endre: Fizikai kémia, Második kiadás. Tankönyvkiadó, Budapest, 1988., pp.183-185.

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

Miskolci Egyetem Gépágyártástechnológiai Tanszék 3515. Miskolc-Egyetemváros

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

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