FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2004. március 26-27.

ION-EGYKRISTÁLYOK MEGMUNKÁLÁSI FOLYAMATÁNAK MOLEKULÁRIS DINAMIKAI SZIMULÁCIÓJÁHOZ AZ IONSZÁM MEGHATÁROZÁSA

Szabó Ottó* Gurzó József**

Abstract. Calculation of potencial 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 (MDS).

Összefoglalás: Új anyagok fejlesztései alkalmazkodnak a műszaki és gazdasági követelményekhez. A hagyományos anyagokkal kapcsolatos technológiai kutatások a csúcstechnológiai ipari követelményekkel tesznek eleget. A korszerű, új anyagokkal szemben különleges követelményeket támasztanak (pl. hő- és korrózióállóság, nagy szívósság és keménység). Az ultrapontosság igénye a forgácsleválasztás megbízható követését és szabályozását igényli. Az ún. szubmikron pontosságú technológiák (ultraprecíziós forgácsolás, nanotechnológiák) nélkülözhetetlenné váltak. Fémek mellett egyre gyakrabban nem fém anyagokat (pl. üveg, kerámiák) kell megmunkálni. A leválasztott forgács keresztmetszetek μm^2 keresztmetszetűek. A forgácsolási folyamatot végeelem (FEM) módszerével, atom és molekuláris dinamikai szimulációval tudjuk csak szimulálni.

1. Bevezetés

A [3-4] publikációinkban a réz egykristály forgácsolásával kapcsolatos elméleti számításokat és az elvégzett próba-szimulációkat tárgyaltuk. Láthattuk, hogy a molekuláris dinamikai szimuláció (MDS) eredményei a szakirodalomban találhatókkal jó egyezést mutatnak. Általában a kísérleti mikroforgácsolás költségei magasak, ezért a réz egykristályok helyett a viszonylag olcsóbb ionkristályok (pl. NaCl, KCl) beszerzését, illetve azokon végezhető ellenőrző kísérleteket tervezzük, de ehhez alkalmassá kellett tennünk molekuláris dinamikai szimulációs programot. Ezzel kapcsolatos részfeladatok megoldását mutatjuk be. Az [5, 6] publikációkban foglalkoztunk NaCl ion-egykristály potenciális energiájának számításával, így erre itt részletesen nem térünk ki.

2. NaCl Ionkristály minimális ionszámának meghatározása a szimulációhoz

Vizsgáljuk meg, hogy mekkora minimális szomszédszám kell ahhoz, hogy a számítások során kapott potenciális energiák és erőhatások ne változzanak számottevően a szomszédok számának növekedésével. Először a kristály térközepén, majd a kristály lapközepén, a kristály élközepén és végül a kristály sarokpontjában lévő ion potenciális energiáját és a ráható erőt fogjuk vizsgálni a figyelembe vett szomszédok számának növekedése függvényében (L. [5] 1. ábra 316. oldal).

Az NaCl kristály térközepén lévő ion vizsgálatai és a számítógépi futtatások a [6] alapján történtek. Ezek után végezzük el az elemzéseket a vizsgált iontól 75 rácstávnyi távolságon belül lévő ionok figyelembevételével.

Az 1. ábrán a kristály közepén elhelyezkedő és az egyensúlyi helyzetből kissé kimozdított iontól való relatív rácstávolság függvényében az F_x erő van feltüntetve (F_y és F_z erők ugyanilyen lefutásúak). Láthatjuk, hogy kicsiny (0,005; 0,005; 0,005) nm-es (kb. 1/32-ed rácstávolságnyi NaCl egykristály esetében) kimozdításnál a szomszédok számának alakulása függvényében eleinte jelentős ingadozások vannak.

1. ábra. Kristály közepén lévő ion kitérítése

Látható, hogy az egyensúlyi helyzetéből kissé kimozdított iontól kb. 40 rácstávolságon belül lévő szomszédok figyelembevételével viszonylag jó konvergencia tapasztalható, de látható az is, hogy ez a konvergencia igazából a 75 rácstávolságon belül lévő szomszédok figyelembevétele esetén kezd erősen konvergálni. A diagram első részéből látható, hogy túl kevés szomszéd figyelembevétele esetén nem csak a vizsgált ionra ható erők nagysága nem konvergens, de még az erő iránya sem. Ez azt jelenti, hogy ha például nem 2, illetve 4 rácstávolságon belül lévő ionok hatását (-1,84E-09 N), hanem 3 rácstávolságon belül lévő ionok hatását (1,15E-09 N) figyeljük, akkor pontosan ellentétes irányú erők hatnak a vizsgált ionra. Nyilván a negatív erő iránya a jó, hiszen az egyensúlyi helyzetből pozitív x

irányba mozdítottuk ki az iont 0,005 nm-rel, tehát nyilván negatív irányú erőnek kell azt visszajuttatni az eredeti igazi egyensúlyi helyzetébe ($x=0\text{ nm}$). Vagyis, ha úgy gondolnánk, hogy növelni szeretnénk a pontosságot és ezért a szomszédok számát, akkor a legegyszerűbbnek tünne, ha a 2, 4 és 3 rácstávolság között lévő ionok hatását is figyelembe vennénk. Ekkor azonban láthatjuk, hogy nemhogy pontosabbá, hanem még pontatlanabbá tennénk a szimulációs modellt, hiszen pozitív irányba indulna tovább a vizsgált ion, még jobban eltávolodna az egyensúlyi (0;0;0) helyzetétől. Ezért nagyon fontos egy olyan alsó, minimális szomszédszám megtalálása, melynél már biztosan tudjuk, hogy az erő iránya jó és elfogadható nagyságú a konvergenciája.

A 2. ábrán a vonzó (x jelek) és taszító (o jelek) szomszédok száma van feltüntetve a vizsgált iontól való adott relatív rácstávolság függvényében. Láthatjuk, hogy 40 rácstávolságon belül lévő szomszédok figyelembevétele esetén 263114 db. szomszéddal kell számolni (vastag vonal), tehát minimálisan ekkora ionszámú ionkristályt kellene modellezni, de a pontosabb 75 rácstávolságon belül lévő szomszédok figyelembevétele esetén már majdnem 1,8 millió ion modellezését kellene elvégezni a kristály belsejében lévő ion esetén.

1. ábra. A relatív rácstávolság és a vizsgált ion szomszédainak száma

3. Következtetések

A térközéppontban lévő ionra ható erők és szomszédszámok elemzéséhez hasonlóan a lapközépen, az élközépen és a sarokpontban lévő ionokra ható erők és szomszédok elemzését elvégezve a következő eredményt kapjuk (1. táblázat):

A szomszédos ionok száma az ion kristályrácsban belüli helyzete szerint 1. táblázat

Ion helyzete	Szomszédos ionszám 40	Szomszédos ion- szám 80
	rácstávolságon belüli szomszédok figye- lembevétele esetén	
Tér közepi	263 114	1 800 000
Felület közepi	138 100	900 000
Él közepi	71 062	450 000
Sarki	35 675	230 000

A táblázatból látható, hogy, ha „csak” a 40 rácstávolságon belüli szomszédok hatását vesszük figyelembe a szimuláció során, akkor is minimum 263 ezer ion mozgásának szimulálását kell elvégezni ahhoz, hogy elfogadható konvergens szimulációhoz juthassunk az ionkristály bármely pontjában elhelyezkedő ion esetén. A sarkokon láthatóan kevesebb szomszéd figyelembevétele is elegendő lenne (~36 ezer ion), de minden ionnak ugyanannyi szomszédját vesszük figyelembe a szimuláció során, ezért a legnagyobb minimálisan szükséges ion-szomszédszámot kell figyelembe venni.

Pillanatnyilag még nem sikerült értékelhető szimulációt végezni a NaCl ionkristályra, ezért a szimulációt igazoló forgácsolási kísérletek elvégzésére sem kerülhet sor. Az eddig elvégzett kutatás eredményei azonban biztató alapot adnak arra, hogy a kutatást tovább folytassuk komolyabb számítógépi kapacitás bevonásával.

A kutatást az F019105 és a T030668 számú OTKA támogatásával végeztük.

IRODALOMJEGYZÉK

- [1] CHARLES, K.: **Introduction to Solid States Physics**, Second Edition, John Wiley & Sons, Inc. New York - London, 1963., 70. oldal - 84. oldal.
- [2] BEREZ, E.: Fizikai kémia, Második kiadás, Tankönyvkiadó, Budapest, 1988., 183. oldal - 185. oldal.
- [3] SZABÓ, O. - GURZÓ, J.: **Variation of Temperatur Due to the Glinding of Atomic Planes**, 9th International Conference on Tools.Proceedings. (IX. Nemzetközi Szerszámkonferencia), Miskolc, 1996., 307-312. oldal.
- [4] DUDÁS, I. - SZABÓ, O. - GURZÓ, J.: **Temperature Variation Due to the Sliding of Atomic Planes at Microcutting**, 4th International Colloquium. Mikro- und Nanotechnologie. Proceedings. Vienna, November 26, 1997. pp. 41-46.
- [5] SZABÓ, O - GURZÓ, J.: **Ionkristályok potenciális energiájának számítása mikroforgácsolás szimulációjához**, Fialat Műszakiak Tudományos Ülésszaka, Kolozsvár, 2003. március 21-22., 315-318. oldal.
- [6] SZABÓ, O - GURZÓ, J.: **Ionkristályok mikroforgácsolásának számítógépi próba-szimulációja**, Fialat Műszakiak Tudományos Ülésszaka, Kolozsvár, 2003. március 21-22., 319 - 322. oldal.

* **Dr. Szabó Ottó, C.Sc, PhD.**, egyetemi docens
Miskolci Egyetem Gépgyártástechnológiai Tanszék.
3515. Miskolc-Egyetemváros
Telefon: (46)565-111/15-21. E-mail: ggyszo@gold.uni-miskolc.hu

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