X. FIATAL MŰSZAKIAK TUDOMÁNYOS ÜLÉSSZAKA

Kolozsvár, 2005. március 18-19.

ION-EGYKRISTÁLYOK ALAKVÁLTOZÁSÁNAK SZIMULÁCIÓJA MIKROFORGÁCSOLÁSNÁL

Szabó Ottó*, Gurzó József**

Abstract. 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 nm^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 finite element method (FEM), atomic or molecular dynamical models (MDS).

Purpose of the research work: 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.

BEVEZETÉS

Az automatizálás, a számítástechnika, a mechatronika, a lézeripar és egyéb korszerű iparágak egyre több különleges anyagot (pl. tiszta fém kristályok, ion-kristályok (pl. NaCl, KCl), 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) nélkülözhetlenné váltak.

A félvezetőipar, optikai eszközök és lézertechnikai berendezések egyre több különféle, nagytisztaságú ion-egykristályt alkalmaznak. Viszonylag olcsó és könnyen beszerezhető NaCl kristály, ezért ez jó „modell-anyag”, illetve ultrapontos esztergán meg tudtuk munkálni.

1. ELMÉLETI ALAPOK: POTENCIÁLIS ENERGIA SZÁMÍTÁSA

A korábbi publikációinkban, illetve ezen az FMTÜ-n (másik publikációnk) bemutattuk az egykristályok mikroforgácsolásához kidolgozott molekuláris dinamikai szimuláció (MDS) programunkat [3, 4, 5, 6], ami a korábbi munkánk továbbfejlesztésének az eredménye. A NaCl-ionkristály felépítését az 1. ábra szemlélteti.

1. ábra: Az NaCl kristály egyszerű, köbös rácsszerkezete

A [7] publikációkban foglalkoztunk NaCl ion-egykristály potenciális energiájának számításával, így erre itt részletesen nem térünk ki. Elméleti alapok a következők: 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:

$$E_{potij}^* = \frac{1}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_r} \cdot \frac{Q_i \cdot Q_j}{r_{ij}} = \frac{1}{k} \cdot \frac{Q_i \cdot Q_j}{r_{ij}} \quad (1) \text{ és } (2)$$

ahol: ϵ_0 - permittivitás, abszolút dielektromos állandó (pld. NCl ionkristálynál: $8,85416 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}$);

ϵ_r - relatív dielektromos állandó (esetünkben: 1);

Q_i - az i -edik ion töltése (pld.: $Q_i = Q = 1,6021917 \cdot 10^{-19} \text{ C}$);

Q_j - a j -edik ion töltése (pld.: $Q_j = -Q = -1,6021917 \cdot 10^{-19} \text{ C}$);

r_{ij} - az i -edik és j -edik ponttöltések (ionok) közötti távolság (pld.: $2,81 \cdot 10^{-10} \text{ m}$);

k - arányszám (pld.: $1,1126466 \cdot 10^{-10} \text{ As/Vm}$).

A levezetés további lépéseit a [6] közleményünk tartalmazza. Energia és forgácsolósebesség ismeretében a forgácsolóerők és a deformációk számolhatók [7].

2. NaCl-EGYKRISTÁLY DEFORMÁCIÓI

A vizsgálataink eredményét példán keresztül mutatjuk be. A szerszámot tökéletesen merevnek tételezzük fel. A szimulációt egy 1215 iont tartalmazó munkadarab (NaCl) és egy 124 atomot tartalmazó szerszám (gyémánt (C)), tehát összesen 1339 ion és atom segítségével végeztük el. Az alap-szimuláció bemeneti paramétereit és a számított forgácsoló erők (eredő- és összetevők) alakulását – melyhez a további különböző kristálytani irányokból végzett forgácsolás eredményeit fogjuk viszonyítani – a másik FMTÜ előadásunk 1. táblázata tartalmazza [8]. A kiinduló állapotban (0. kezdőlépés) a szerszám és munkadarab kristályszerkezetét a 2. ábra szemlélteti.

2. ábra: A szerszám és munkadarab kristály szerkezete

A 2. ábra a 43. iterációs lépéshez tartozik. Ez az a pillanat, amikor a szerszám belép az anyagba. A „hatásvonal” végigkövetésekor látható, hogy a szerszám homlokfelülete előtt kb. 4,5 rácsávolságyira már érződik a forgácsolás hatása. Ugyancsak látható, hogy bár a fogásmélység csak kb. 1 rácsávolság, addig a megzavart kristályréteg vastagsága kb. 2 rácsávolságra tehető.

3. ábra: A kristályszerkezet alakváltozása (43. lépés)

A 4. ábrán a további kristály alakváltozások és forgácsoló erők láthatók (290. iterációs lépés). A 4.a ábra a 4.b ábrán bejelölt helyről vett metszetet mutatja [8].

A 4.a ábrából látható, hogy a:

- forgácstőben
- a szerszám homlokfelülete és a forgács között hogyan változnak az erők, illetve
- a kristály alakváltozások folyamata.

4.b ábra: A kristályszerkezet változásai (230. lépés)

3. KÖVETKEZTETÉSEK

Az eddigiekből is látható, hogy sikerült az ionkristályok forgácsolásához megfelelően módosítani a korábbi szimulációs programot. Ezek az adatok kísérleti eredményeket jól közelítik. A kutatás következő szakaszában folytatjuk a különböző kristálytani irányokból, különböző szerszámgeometriával, különböző technológiai paraméterekkel végzett forgácsoló erő-, forgácsolási hő és kristály-deformációk szimulációját.

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

IRODALOMJEGYZÉK

- [1] CHARLES, K.: **Introduction to Solid States Physics**, Second Edition, John Wiley & Sons, Inc. New York – London, 1963, 70 – 84. oldal.
- [2] BERECS, E.: **Fizikai kémia**, Második kiadás, Tankönyvkiadó, Budapest, 1988. 183 – 185. oldal.
- [3] SZABÓ, O. - GURZÓ, J.: **Variation of Temperatur Due to the Glinding of Atomic Planes**, Miskolc, IX. International Conference on Tools. 1996., 307 – 312. oldal.
- [4] SZABÓ, O. - Dudás, I. - GURZÓ, J.: **Weggleiten von Atomschichten infolge der Temperaturänderung während der Mikrozerspannung**, Gdansk, Technologia Obróbki Wykanczajacej, 1998. szeptember 25., 48 – 55. oldal.
- [5] GURZÓ, J. - SZABÓ, O.: **Mikroforgácsolás atomi modellezése és a forgácsoló erő számítása**, Kolozsvár, Fiatal Műszakiak Tudományos Ülésszaka, 2000. március 24-25., 141 – 144. oldal.
- [6] GURZÓ, J. - SZABÓ, O.: **Ion-egy kristályok megmunkálási folyamatának számítógépes szimulációja**, Miskolc-Egyetemváros, Doktoranduszok Fóruma, 2003. november 6., Kiadvány, 6 oldal.
- [7] SZABÓ, O. - GURZÓ, J.: **Ion-egy kristályok megmunkálási folyamatának molekuláris dinamikai szimulációjához az ionszám meghatározása**, Kolozsvár, Fiatal Műszakiak Tudományos Ülésszaka, 2004. március, Kiadvány, 4 oldal.
- [8] SZABÓ, O. - GURZÓ J.: **A forgácsolóerők szimulációja ion-egy kristály mikroforgácsolásánál**. FMTÜ-2005. Kiadvány, 4 oldal.

* Dr. Szabó Ottó, CSc, PhD, egyetemi docens, tudományos vezető, Miskolci Egyetem Gépgyártástechnológiai Tanszék, 3515. Miskolc-Egyetemváros. Tel.: (46) 565-111/15-21., e-mail: ggytso@gold.uni-miskolc.hu

** Gurzó József, okl. gépészmérn., doktorandusz, Sárospataki Precíziós-Szerszámgyártó Bt., 3950. Sárospatak.