

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РЕЗАНИЯ НА АТОМНОМ УРОВНЕ¹

Заводинский В.Г.

*ФГБУН Институт материаловедения Хабаровского научного центра ДВО РАН,
г. Хабаровск, Россия*

РЕЗЮМЕ

С помощью квантово-механического компьютерного подхода (теория функционала плотности и метод псевдопотенциала) исследовано взаимодействие наноразмерных объектов различной природы: W, WC и Al, моделирующее процесс резания. Показано, что медленное резание характеризуется диффузионным перемешиванием, пластической деформацией детали и существенным разрушением резца. При быстром резании перемешивание и пластическая деформация не успевают происходить, резец почти не разрушается, резание идет более гладко. Сила резания с увеличением скорости уменьшается.

Ключевые слова: моделирование из первых принципов; атомный уровень; резание; вольфрам; карбид вольфрама; алюминий

ATOMIC LEVEL SIMULATION OF CUTTING

Zavodinsky V.G.

*Institute of Materials, Khabarovsk Scientific Center, Far-Eastern Branch of the Russian
Academy of Sciences, Khabarovsk, Russia*

SUMMARY

The density functional theory and pseudopotential method are used to study the interaction of nanoscale species of different origins. It has been shown that the low-speed cutting is followed with diffusion intermixing and plastic deformation and leads to the intensive destruction of a cutting instrument. At high-speed cutting intermixing and plastic deformation doesn't manage to happen, a cutter does not destruct, and cutting goes more smoothly. The cutting force decreases with increase of speed.

Key words: first principles simulation; atomic level; cutting; tungsten; tungsten carbide; aluminum

ВВЕДЕНИЕ

С физической точки зрения процесс резания материалов родственен процессам трения и износа и является процессом интенсивного пластического деформирования и разрушения [1]. К настоящему времени имеется большой экспериментальный материал, в том числе уже и на наноуровне [2-4], однако понимания деталей процесса на атомном уровне еще нет. Очевидно, что переход на атомарный уровень, где определяющую роль играет взаимодействие

¹ Работа поддержана грантом Правительства Хабаровского края 2012-2013 гг.

электронных оболочек, сопровождаемое протеканием химических реакций, требует обращения к квантовой механике, что непривычно для специалистов, традиционно работающих в рамках классических представлений о взаимодействии твердых тел. По-видимому, именно этим объясняется определенная задержка прогресса в области нанотрибологии и нанорезания.

Автором накоплен опыт квантово-механического моделирования структуры и свойств различных нанообъектов, их взаимодействий и реакций на механические воздействия [5-9], позволяющий надеяться на то, что развиваемый им подход окажется плодотворным и для изучения процессов резания. Разумеется, результаты квантово-механического моделирования не могут рассматриваться как буквальное описание реального процесса резания, в котором важную роль играют температурные эффекты и взаимодействие резца и детали с окружающей средой, однако автор полагает, что с помощью этого подхода удастся рассмотреть некоторые тонкие детали процесса, понимание которых будет полезно для развития более сложной комплексной теории. Кроме того, есть основания считать, что такие результаты будут напрямую применимы к системам, работающим в специальных условиях: например, в космосе и в вакуумных технологических установках.

В настоящей работе исследовано взаимодействие наноразмерных объектов (выступов и шероховатостей) различной природы (W, WC, Al) с целью изучения их деформации и разрушения в процессе резания.

2. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Процесс резания протекает во времени, однако скорость его протекания, определяемая скоростью смещения атомов в твердом теле, существенно меньше скорости перехода электронов из одного квантового состояния в другое, поэтому при его исследовании можно воспользоваться приближением Оппенгеймера и работать со стационарной квантовой механикой, базирующейся на уравнении Шредингера, рассматривая каждое промежуточное состояния системы как квазистационарное.

Все расчеты, описанные в данной статье, проведены с помощью программного пакета FHI96spin, который является модификацией пакета FHI96md [10], и был ранее успешно использован для изучения механических свойств многих наносистем, в том числе и содержащих W, WC и Al [5,7,9]. Этот пакет основан на спин-поляризованной версии теории функционала плотности [11,12], методе псевдопотенциала [13] и наборе плоских волн. В данной работе использовались псевдопотенциалы углерода и алюминия, построенные с помощью пакета FHI98PP [14] по схеме Труллера-Мартинса [15], однако для вольфрама была применена схема Хаманна [16]. Все эти потенциалы являются сепарабельными, трансферабельными и нормо-сохраняющими. Они проверены на отсутствие так называемых "ложных" состояний (ghost states) и использованы для тестового определения равновесных параметров решетки и объемного модуля упругости. Во всех случаях для учета обменно-корреляционного взаимодействия применялась аппроксимация обобщенных градиентов (generalized gradient approximation) [17] и выполнялась оптимизация атомной геометрии.

При изучении изменения атомной структуры и энергии исследуемых систем использовались так называемые суперячейки, в которых размещались «резец»

и «деталь». Поясним, что понятие «суперячейка» вводится при моделировании поверхности твердого тела, а также молекул и других нанообъектов, методами, ориентированными на системы, обладающими трансляционной симметрией. При изучении кристаллов в роли суперячейки выступает ячейка кристаллической решетки, которая программным способом повторяется в трехмерном пространстве, описывая бесконечный кристалл. Для моделирования наночастицы размеры суперячейки по всем трем направлениям задаются существенно больше, чем размеры частицы, с тем, чтобы при повторении (трансляции) ячейки в пространстве расстояния между наночастицей и ее виртуальными отображениями (которые программа рассматривает как реальные) было достаточно большим – т.е. обеспечивало пренебрежимо слабое взаимодействие.

В нашем случае, исследуемые системы представляли собой бесконечные стержни с наномасштабными размерами в поперечнике. На рис.1 в качестве примера приведена схема компьютерного эксперимента для системы W-W. В этом случае и «резец» и «деталь» представляют собой одинаковые бесконечные стержни квадратного сечения. Размеры суперячейки по направлениям X и Z составляют 48 и 30 ат.ед., а по направлению Y 8,40 ат.ед., что равно найденному нами равновесному периоду кубической решетки вольфрама. (1 ат.ед. равна 0,0529 нм.) Реальное число атомов, включенных в процесс моделирования, равно 32. Формально в зону резания входят по две атомные плоскости «резца» и «детали», однако на самом деле, в силу малых размеров системы, во взаимодействие оказываются втянутыми все атомы, поэтому мы рассматриваем изменение энергии, приходящейся на один атом.

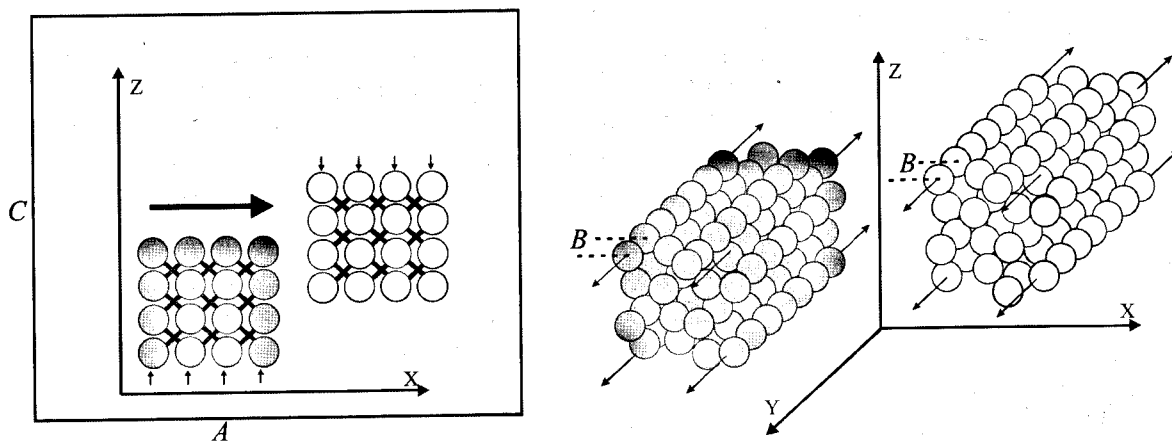


Рис.1. Схема расположения атомов в системе W-W. Серым цветом обозначены атомы «резца», белым – атомы «детали». Слева: вид в плоскости XZ; вертикальными стрелками указаны атомы, фиксируемые в процессе нахождения равновесных позиций остальных атомов; горизонтальная жирная стрелка указывает направление движения «резца»; буквами A и C обозначены стороны суперячейки в направлениях X и Z. Справа: трехмерный вид; буква B обозначает размер стороны суперячейки в направлении Y; стрелки в направлении оси Y указывают на то, что система неограниченно транслируется в этом направлении.

В качестве материала «резца» использовались W и WC, для «детали» брались W и Al. Таким образом, имелась возможность рассмотреть взаимодействие как одинаковых по твердости материалов, так и разных. Форма и атомная структура «резца» и «детали», а также зона перекрытия показаны

в каждом случае на соответствующем рисунке, при этом количество атомных слоев в направлении Y (перпендикулярно рисунку) всегда равно двум. Бесконечность системы в этом направлении задается с помощью периодических граничных условий.

Компьютерный эксперимент состоит в том, что «резец» пошагово приближается к «детали» и на каждом шаге производится квантово-механический расчет, включающий в себя нахождение равновесных позиций атомов и полной энергии системы. Величина шага Δx равна 1 ат.ед. При этом, для имитации того, что рассматриваемые атомы представляют собой нанофрагменты (окончания) макроскопических резцов и обрабатываемых деталей, координаты крайних атомов, обозначенных на рис.1 стрелками, в процессе расчета фиксируются. На рис.1 изображен момент, когда «резец» и «деталь» вошли в начальное соприкосновение. Для данной пары процесс нанорезания фактически аналогичен процессу трения с износом, в котором решающую роль играет взаимодействие наноразмерных шероховатостей (выступов).

В процессе моделирования полная энергия системы E изменяется, из ее изменения ΔE мы можем найти силу, противодействующую движению «резца», т.е. силу резания $F_{cut} = \frac{\Delta E}{\Delta x}$. Поскольку энергия в данной работе измеряется в атомных единицах (1 ат.ед. энергии равна 27,2 эВ), то и сила находится в неких атомных единицах.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. W-W

На рис.2 приведены результаты моделирования для пары «резец» W – «деталь» W для случая, когда элементы пары полностью идентичны. Видно, что в данном случае важную роль играет пластическая деформация. Среднюю часть процесса (15) можно интерпретировать как «схватывание», или холодную сварку. Процесс заканчивается тем, что один из одинаковых элементов пары захватывает выступ второго элемента.

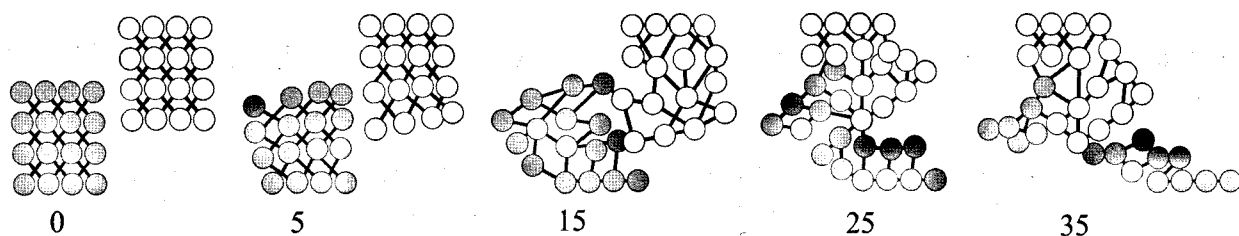


Рис.2. Изменение атомной структуры пары W-W (одинаковые элементы) в процессе компьютерного моделирования. Цифрами указаны величины смещений «резца» (в атомных единицах).

На рис.3 приведены результаты моделирования для случая, когда «резец» заострен.

На рис.4 показано изменение энергии и силы резания в процессе взаимодействия «резца» W с «деталью» W.

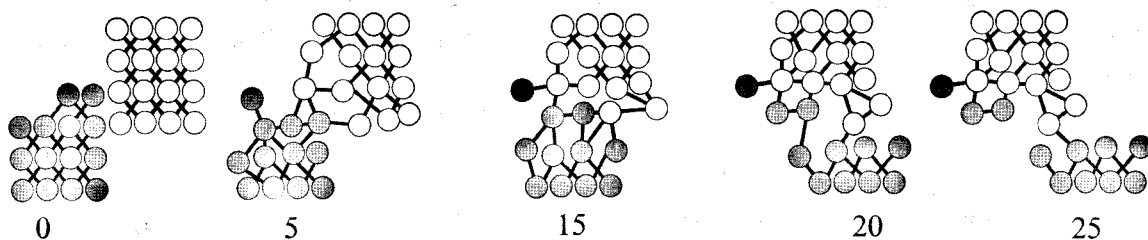


Рис.3. Изменение атомной структуры пары W-W («резец» заострен) в процессе компьютерного моделирования. Цифрами указаны величины смещений «резца» (в атомных единицах). Часть атомов второго слоя на рисунке не видна, они закрыты атомами первого слоя.

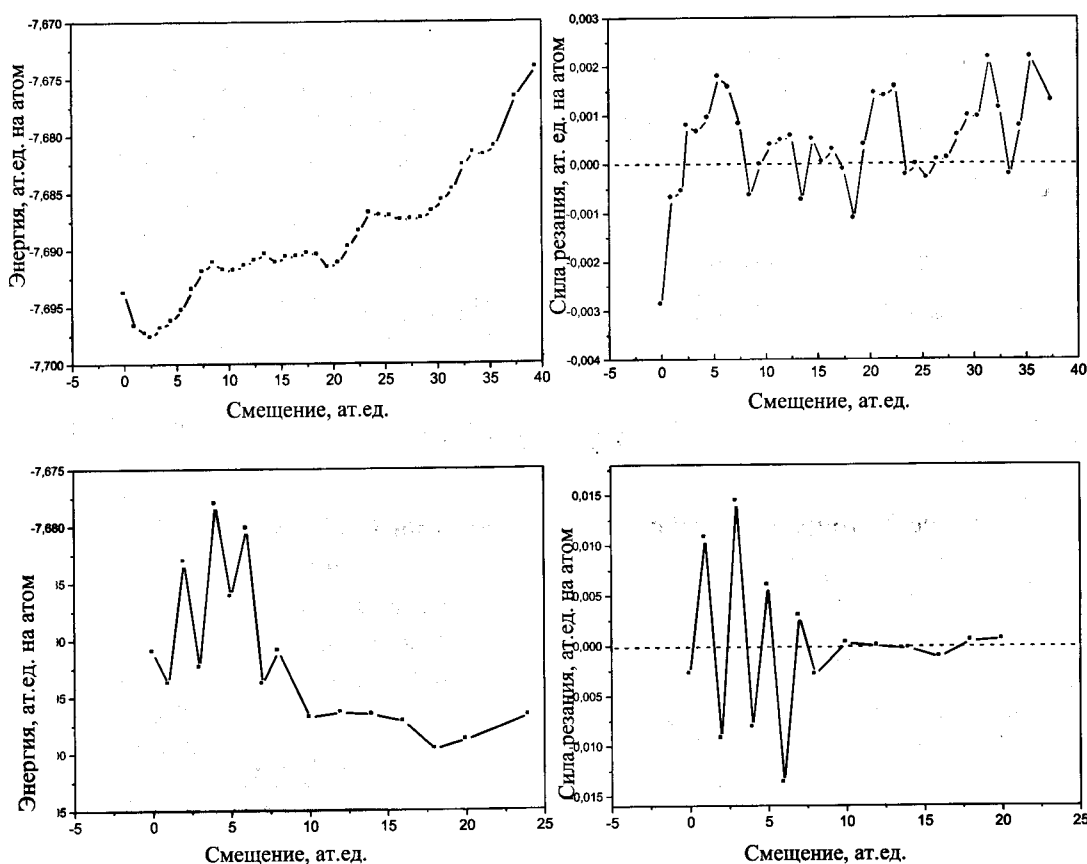


Рис.4. Изменение энергии и силы резания в процессе взаимодействия «резца» W с «деталью» W. Наверху: «резец» и «деталь» идентичны; внизу: «резец» заострен.

Видно, что энергия изменяется немонотонно. На первых шагах она понижается за счет того, что атомы «резца» притягиваются к атомам «детали». Затем (в случае тупого «резца») начинается процесс деформации, который протекает практически симметрично, одинаково в «резце» и «детали»; потом деформация начинает переходить в разрушение, и в итоге происходит разламывание «резца» с быстрым ростом затрачиваемой энергии. То, что в данном случае разрушается именно «резец», можно считать случайностью, артефактом компьютерного эксперимента, элементы пары W-W эквивалентны, поэтому с равной вероятностью может разрушаться и «деталь». Сила «резания» является нестабильной величиной, она многократно и скачкообразно изменяется в процессе резания и во многих

случаях даже становится отрицательной. Положительные значения силы соответствуют разрывам межатомных связей, отрицательные – формированию новых связей.

Фактически, описанное выше взаимодействие соответствует не резанию, а трению шероховатых поверхностей одинаковых материалов, когда размеры выступов на обеих поверхностях примерно одинаковы. Средняя величина силы в этом процессе почти не меняется и равна около 0,001 ат.ед. на атом. Общее число атомов равно 32. При вычислении средней силы мы учитывали только ее положительные значения, усредняя их арифметически.

На нижней панели рис.4 представлены результаты для случая, когда элемент пары, играющий роль «резца», заострен. В данном случае «резец» разрушается закономерно как наиболее тонкий (слабый) элемент пары. Энергия (а с ней и сила резания) изменяется еще более немонотонно, чем в предыдущем случае, однако процесс быстро стабилизируется, и сила стремится к нулю, когда крупный (толстый) выступ срезает мелкий (тонкий). То есть, данный процесс можно назвать реальным резанием. Средняя величина силы для данной системы равна 0,007 ат.ед. на атом. Общее число атомов равно 30.

3.2. WC-W.

Теперь рассмотрим взаимодействие «резца» и «детали», выполненных из разных материалов.

На рис.5 изображены результаты моделирования для пары «резец» WC – «деталь» W. «Резец» заострен вверху, нижние атомы резца зафиксированы в каждом шаге, имитируя закрепление его на массивном движущемся держателе. Верхние атомы «детали» зафиксированы всегда в одном положении. На каждом шаге моделирования атомы «резца» сдвигаются на 1 ат.ед., а атомы «детали» реагируют на эти смещения, сдвигаясь в новые равновесные позиции. Т.е. «резец» нажимает на «деталь», деформируя ее.

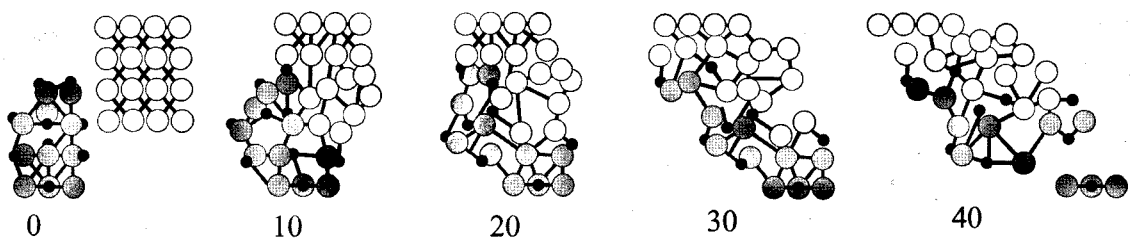


Рис.5. Изменение атомной структуры пары WC-W в процессе компьютерного моделирования (заостренный вертикальный «резец»). Цифрами указаны величины смещений «резца».

Из рис.5 видно, что в «детали» идет процесс пластической деформации, которая захватывает и материал «резца», и процесс заканчивается тем, что оба элемента пары разрушаются. При этом «резец» разрушается полностью, все его атомы (кроме специально фиксируемых атомов нижнего слоя) связываются с материалом «детали».

На рис.6 показано изменение энергии и силы резания в системе WC-W для процесса, изображенного на рис.5. Видно, что энергия изменяется еще более немонотонно, чем в системе W-W. Резкие подъемы сменяются резкими спадами. Это объясняется тем, что в данном случае процесс резания «детали» из вольфрама сопровождается разрушением «резца», сделанного из карбида вольфрама.

Межатомные связи в материале в карбиде вольфрама весьма прочны, и для их разрыва необходимо накопление большей энергии, чем для разрыва связей W-W. Отрицательные выбросы силы резания, как и на рис.3, соответствуют формированию новых межатомных связей, и их величины существенно больше, чем на рис.3, поскольку в них дают вклад связи W-C. Средняя величина силы резания равна 0,0008 ат.ед. на атом. Общее число атомов равно 38.

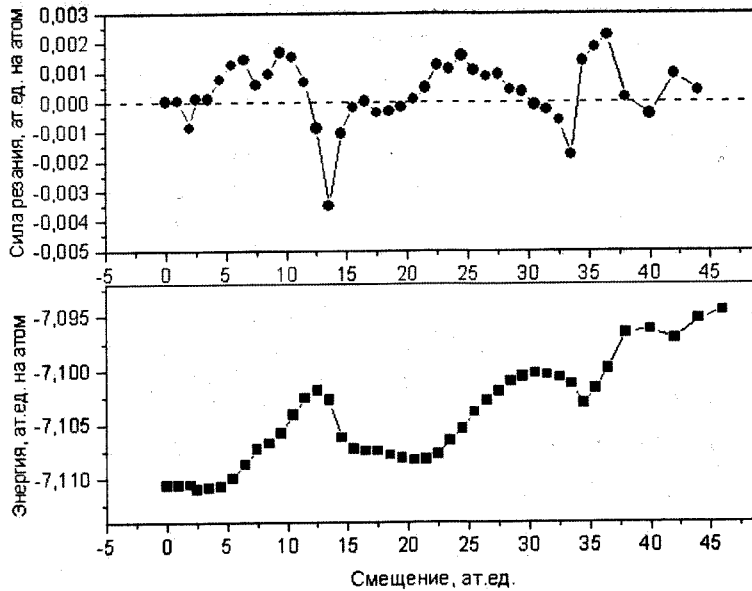


Рис.6. Изменение энергии и силы резания в системе WC-W для процесса, изображенного на рис.5 (заостренный вертикальный «резец»).

Рис.7 демонстрирует процесс резания «детали» из вольфрама горизонтальным «резцом» WC, заостренный конец которого направлен прямо в сторону «детали», а часть атомов закреплена (общее число атомов равно 32). Мы видим, что незакрепленные атомы карбида вольфрама довольно легко сдвигаются и отделяются от закрепленной части «резца». Деформация носит в основном пластический характер, что видно и на рис.8, где показано поведение энергии и силы «резания», средняя сила которой равна 0,0018 ат.ед. на атом.

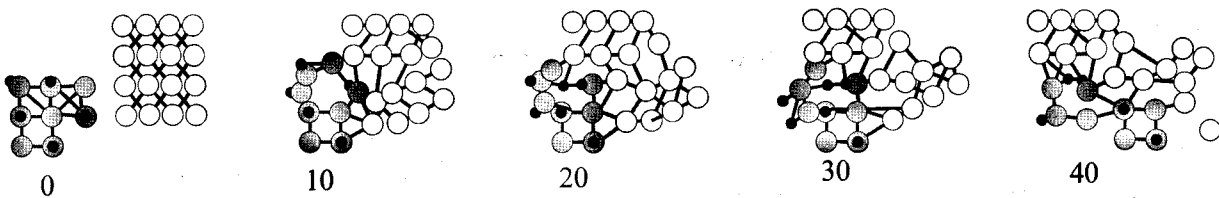


Рис.7. Изменение атомной структуры пары WC – W для острого горизонтального «резца».

Мы исследовали также случай, когда вертикальный «резец» сделан более тупым и «массивным» (общее число атомов равно 40, рис.9). В этом случае процесс идет более монотонно, более гладко, и полного разрушения «резца» не происходит, примерно половина атомов карбида вольфрама остается связанными с «резцом». Энергия системы также изменяется более гладко (рис.10). Сила «резания» в данном случае, как следовало ожидать, больше, чем при вертикальном остром «резце» (поскольку в обоих случаях срезается

и «резец», а острый (тонкий) «резец» срезается легче), ее средняя величина равна 0,0015 ат.ед. на атом, что близко к величине 0,0018 ат.ед. на атом, полученной в предыдущем случае (горизонтальный острый «резец»).

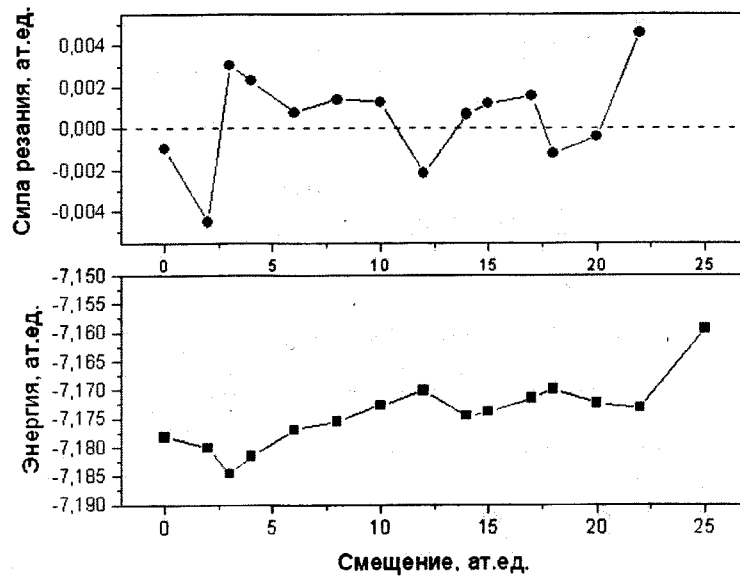


Рис.8. Изменение энергии и силы резания в системе WC-W: острый горизонтальный «резец».

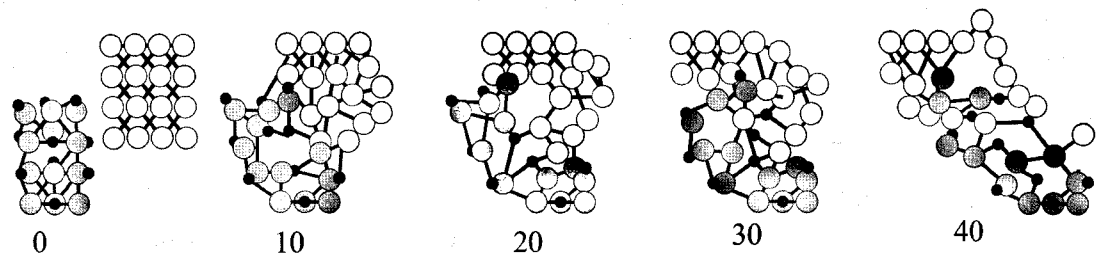


Рис.9. Изменение атомной структуры пары WC – W для тупого вертикального «резца».

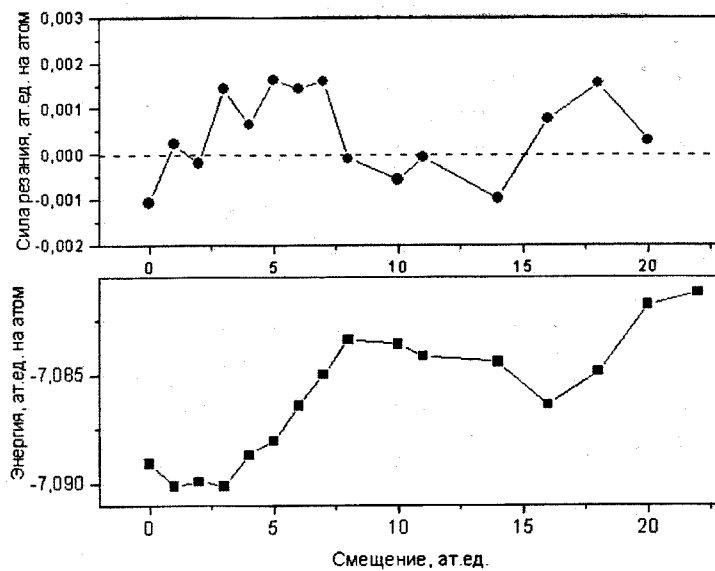


Рис.10. Изменение энергии и силы резания в системе WC-W: тупой вертикальный «резец».

Эти случаи объединяет одинаковый горизонтальный размер «резца» в зоне резания, что, по-видимому, и объясняет близость величин средней силы «резания».

3.3. WC-Al.

Теперь рассмотрим резание такого мягкого, пластичного материала, как алюминий, обратив специальное внимание на сравнение медленного и быстрого режимов резания. При этом под медленным резанием мы будем понимать процесс, в котором скорость движения «резца» мала настолько, что при каждом шаге моделирования атомы «детали» успевают (за счет пластической и упругой деформации) сместиться в равновесные позиции. При быстром резании ближайшие к «резцу» атомы «детали» смещаются синхронно со смещениями атомов «резца», т.е. возникает механизм хрупкого разрушения «детали».

На рис.11 изображены результаты моделирования для пары «резец» WC – «деталь» Al для медленного резания, а на рис.12 – быстрого. Из сопоставления этих результатов видно, что при медленном резании происходит заметное разрушение резца из карбида вольфрама. При быстром резании разрушения «резца» почти не происходит, резание идет более чисто. В обоих случаях полное число атомов равно 38.

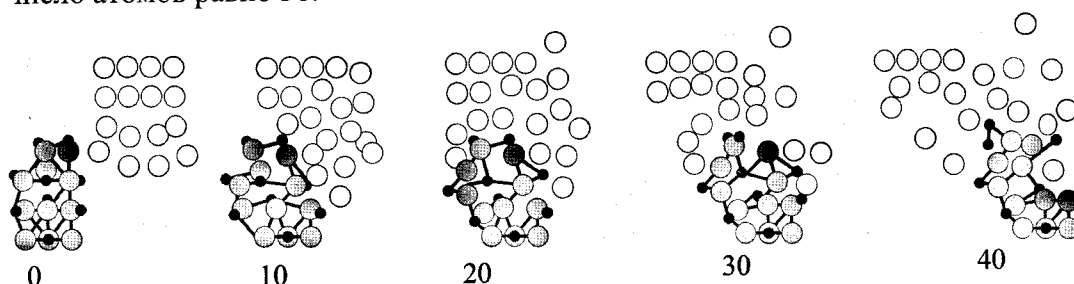


Рис.11. Изменение атомной структуры пары WC-Al: медленное резание.

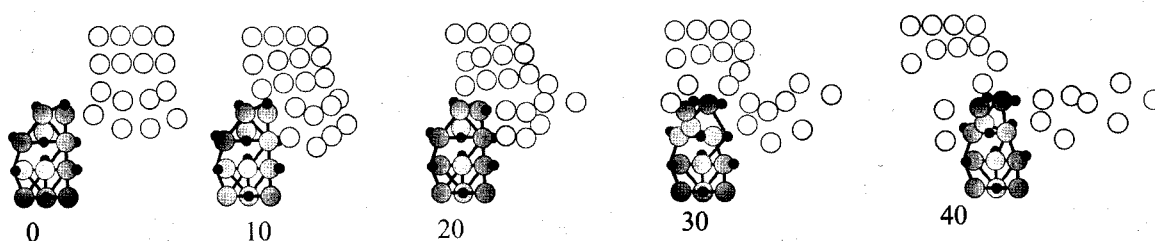


Рис.12. Изменение атомной структуры пары WC-Al: быстрое резание.

На рис.13 и 14 показано изменение энергии и силы резания системы в системе WC-Al. И в том, и в другом случае энергия и сила меняются немонотонно, но характер изменения отличается. При медленном резании движение «резца» долгое время (примерно 2/3 всего времени процесса) сопровождается пластической деформацией «детали» и «резца», при которой энергия системы медленно понижается за счет связывания атомов алюминия с атомами W и C, и только на последней стадии происходит резкий рост энергии и скачок силы. Быстрое же резание характеризуется тем, что сила «резания» возникает сразу, но изменяется скачкообразно. При этом средняя сила «резания» при быстром резании (0,0005 а.е.) заметно меньше, чем при медленном (0,001 а.е. на атом), что согласуется с представлениями о том, что при быстром

резании основную роль играет хрупкое разрушение, требующее меньших затрат энергии.

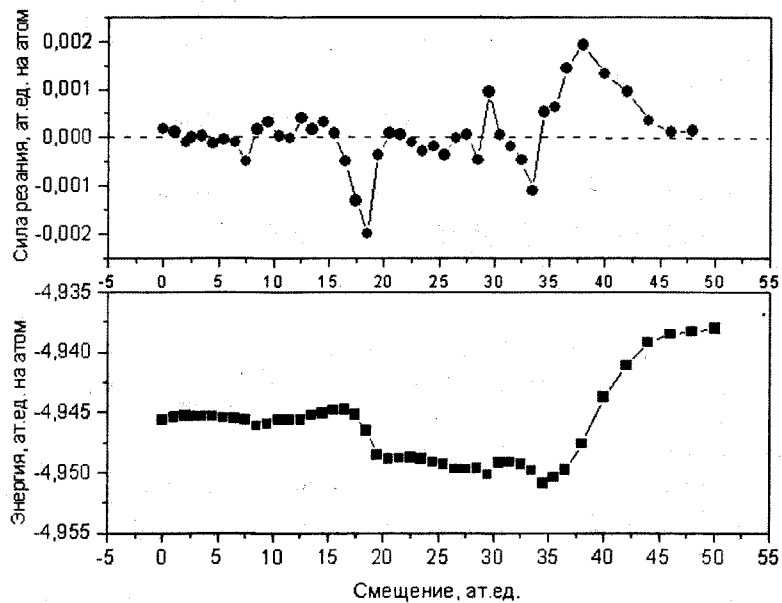


Рис.13. Изменение энергии и силы в системе WC- Al: медленное резание.

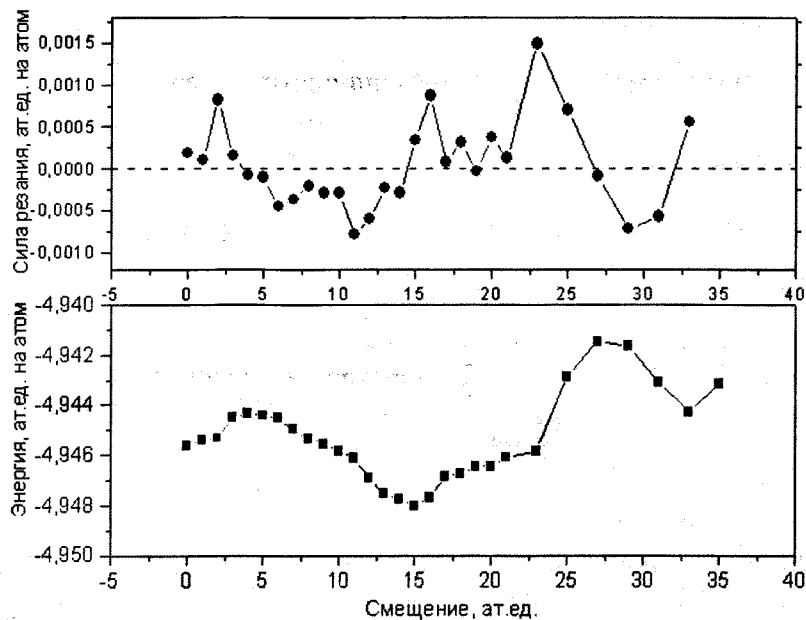


Рис.14. Изменение энергии и силы в системе WC- Al: быстрое резание.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Квантово-механическое моделирование позволяет проследить за процессом резания на атомарном уровне. Проведенные расчеты позволяют сделать следующие общие выводы:

1. Энергия системы «резец-деталь» изменяется немонотонно. На первых шагах она, как правило, слегка понижается за счет того, что атомы «резца» притягиваются к атомам «детали»; затем начинается процесс деформации

(упругой и пластической), переходящий в разрушение. При этом, при медленных режимах резания «резец» зачастую разрушается не меньше, чем деталь.

2. Сила резания является нестабильной величиной, она многократно и скачкообразно изменяется в процессе резания и во многих случаях даже становится отрицательной. Положительные значения силы соответствуют разрывам межатомных связей, отрицательные – формированию новых связей. Величина силы резания определяется материалом «детали» и «резца», геометрией системы, скоростью резания.

3. Медленное резание характеризуется диффузионным перемешиванием, пластической деформацией «детали» и существенным разрушением «резца». При быстром резании перемешивание и пластическая деформация не успевают происходить; «резец» почти не разрушается; резание идет более гладко; средняя сила резания уменьшается.

4. При медленном резании заостренные «резцы» заметно разрушаются даже тогда, когда они выполнены из твердого материала (карбид вольфрама), а «деталь» – из мягкого алюминия.

5. На атомарном уровне процесс трения шероховатых поверхностей может рассматриваться как процесс нано резания.

Полученные результаты и сделанные из них выводы носят качественный характер и являются лишь первой попыткой взглянуть на процессы резания и трения с атомарной, квантово-механической точки зрения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Вульф А.М. Резание металлов. – Л.: «Машиностроение», 1973. – 496 с.
2. Щипачев А.Н., Зеленугин С.А. Численное моделирование процессов высокоскоростного ортогонального резания металлов // Математика и механика. – 2009. – Т.6. – №2. – С.109-115.
3. Назаров Ю.Ф. Нанотехнология в производстве машин и приборов. – М.: Сатурн-С, 2003. – 180 с.
4. Ярославцев В.М. Нанопроцессы при обработке резанием // Наука и образование. – 2011. – №9. – С.1-9.
5. Заводинский В.Г. Квантово-механическое исследование упругих свойств наночастиц и процессов их агломерации // Российские нанотехнологии. – 2008. – Т.2. – №11-12. – С.58-62.
6. Заводинский В.Г. Карбид вольфрама на субнаноуровне: атомная структура, электронные состояния, механические свойства // Российские нанотехнологии. – 2010. – Т.5. – №11-12. – С.120-125.
7. Zavadinsky V.G. Small tungsten carbide nanoparticles: Simulation of structure, energetics, and tensile strength // Int. J. Refract. Metals and Hard Mater. – 2010. – Vol.28. – P.446-450.
8. Заводинский В.Г., Чибисов А.Н., Гниденко А.А., Алейникова М.А. Теоретическое исследование упругих свойств малых наночастиц с различными типами межатомных связей // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2005. – Т.11. – №3. – С.337-346.
9. Заводинский В.Г. Механические характеристики наноразмерных прослоек кобальта в твердых сплавах WC/CO // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2011. – Т.17. – №2. – С.177-183.

10. Beckstedte M., Kley A., Neugebauer J., Scheffler M. Density functional theory calculations for poly-atomic systems: electronic structure, static and elastic properties and ab initio molecular dynamics // *Comp. Phys. Commun.* – 1997. – Vol.107. – P.187-205.
11. Hohenberg H., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // *Phys. Rev.* – 1964. – Vol.136. – P.B864-B871.
12. Kohn W., Sham J.L. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Phys. Rev.* – 1965. – Vol.140. – P.A1133-A1138.
13. Cohen M.L., Heine V. Pseudopotential theory of cohesion and structure / In: *Solid State Physics*. – New York: Academic Press, 1970. – Vol.24. – P.250.
14. Fuchs M., Scheffler M. Ab initio pseudopotentials for electronic structure calculations of poly-atomic systems using density functional theory // *Comp. Phys. Commun.* – 1999. – Vol.119. – P.67-165.
15. Troullier N., Martins J.L. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations // *Phys. Rev. B.* – 1991. – Vol.43. – P.1993-2006.
16. Hamann D.R. General norm-conserving pseudopotentials // *Phys. Rev. B.* – 1989. – Vol.40. – P.2980-2991.
17. Perdew J.P., Wang Y. Accurate and simple density functional for the electronic exchange energy: Generalized gradient approximation // *Phys. Rev. B.* – 1986. – Vol.33. – P.8800-8802.

Поступила в редакцию 19 апреля 2013 года.

Сведения об авторе:

Заводинский Виктор Григорьевич, д.ф.-м.н., проф., дир., ФГБУН Институт материаловедения Хабаровского научного центра ДВО РАН, г. Хабаровск, Россия, e-mail: vzavod@mail.ru