

УДК 621.9

Ю.Г. Кабалдин¹, О.В. Кретинин¹, И.Л. Лаптев¹, Е.Е. Власов¹, С.В. Серый²**МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНТАКТНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СТУЖКИ
С ИНСТРУМЕНТОМ НА ОСНОВЕ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ**Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева¹,
Комсомольский-на-Амуре государственный технический университет²

Показано, что постоянство удельной силы трения при резании обусловлено достижением в прирезцовых слоях стружки критической плотности дислокаций и аморфизацией локальных объемов. Формирование квази-аморфного состояния в прирезцовых слоях стружки на участке пластического контакта в широком диапазоне режимов обработки обуславливает инвариантность удельной силы трения к изменениям условий резания. Влияние температуры на коэффициент трения при резании связано со структурными и фазовыми превращениями на участке пластического контакта, вызывающими рост общей длины контакта, и, прежде всего, длины пластического контакта, изменением вследствие этого среднего удельного давления, а следовательно, и коэффициента трения при резании. Проведено квантово-механическое моделирование поверхностной активности ряда обрабатываемых и инструментальных материалов. Показано, что ее может характеризовать энергия дефекта упаковки (ЭДУ) материалов, а также плотность электронных состояний на уровне Ферми металлов, определяющей их химический потенциал.

Ключевые слова: резание, моделирование, функционал электронной плотности, GPU-вычисления, удельная сила трения, коэффициент трения,

При резании процессы контактного взаимодействия стружки с инструментом в значительной степени связаны с особенностями характера нагружения режущей части [1] и локализацией пластической деформации в зоне вторичной деформации.

Разработку механизмов трения при резании необходимо проводить на основе широкого привлечения к анализу результатов исследований современных достижений в других областях: материаловедении, физике и механике твердого тела, тонких методов физико-химического анализа, физического и математического моделирования, рассматривая систему резания как сложную динамическую систему.

В настоящее время при резании сформировались различные взгляды на природу контактного взаимодействия обрабатываемого и инструментального материалов [1-5].

Первые исследования зависимости среднего коэффициента трения μ от скорости резания выполнены Розенбергом А.М. и Ереминым А.Н. Авторы [3] зависимость μ от V связали с температурой резания, причем максимум μ они обнаружили при $T = 550 - 600^\circ\text{C}$.

Зорев Н.Н. [2] убедительно доказал, что максимальное значение μ достигается при $T=300^\circ\text{C}$, так как авторы работы [3] не учли влияния нароста на действительное направление стружки и средний фактический передний угол. Однако физические причины максимума μ при резании Зорев Н.Н. не изучал.

Согласно [2], зависимость среднего коэффициента трения μ от условий резания определяется нормальными давлениями q_N на рабочих поверхностях инструмента. Удельная сила трения q_F инвариантна к условиям резания, температуре и характеризуется в основном свойствами обрабатываемого материала. В связи с изложенным

$$\mu = \frac{q_F}{q_N} = \frac{\text{const}}{q_N}. \quad (1)$$

Большое влияние на средний коэффициент трения оказывает скорость резания V , толщина среза a и передний угол γ инструмента. Инвариантность q_F к условиям резания связывается с температурно-скоростным фактором.

Согласно [2], параметры q_N и q_F являются самостоятельными контактными характери-

стиками, зависящими от разных факторов: удельная сила трения является суммой силы пластического сдвига в контактном слое, а среднее контактное давление есть функция относительной длины контакта.

Для одного обрабатываемого материала удельная сила трения постоянна (инвариантна к условиям резания), поэтому коэффициент трения зависит только от среднего контактного давления. В связи с инвариантностью силы q_F все внешние действующие факторы будут влиять на коэффициент трения лишь постольку, поскольку они изменяют среднее контактное давление q_N . Однако для разных обрабатываемых материалов средний коэффициент трения зависит также от удельной силы трения, что и обуславливает существование отдельной кривой ($\mu=f(q_N)$) для каждого материала.

По мнению Н.Н. Зорева [2], средний коэффициент трения при резании - характеристика производная и не является коэффициентом трения в обычном понимании. Это некоторая усредненная характеристика напряженного состояния в контактной пластической области и внешнего трения. Дело в том, что при вычислении среднего коэффициента трения в расчет принимается вся контактная площадка, а напряженное состояние в пластической зоне контакта и зоне стружкообразования является единым, то средний коэффициент трения является некоторой обобщенной характеристикой напряженного состояния при стружкообразовании и по своему смыслу равнозначен углу действия (хотя однозначно с последним и не связан).

В ряде работ [3, 4] также показано, что q_F не зависит от температуры и является характеристикой только обрабатываемых материалов. М.Ф. Полетика [4] установлена связь силы q_F с действительным сопротивлением разрыву S_K обрабатываемых материалов:

$$q_F = 0,28S_K, \quad (2)$$

Удельные нормальные напряжение q_N однозначно являются функцией относительной длины контакта C/a (C - длина контакта; a - толщина среза).

М.Б. Гордон [5] показал, что при резании (в отсутствие нароста) возникает режим внешнего кинетического трения, в той или иной мере осложненного адгезией. В своих работах М.Б. Гордон, развивая идею Б.В. Дерягина о двучленном законе трения, получил зависимость μ в следующей форме:

$$\mu = \mu_0(N + N_0), \quad (3)$$

где μ_0 - истинный коэффициент трения, когда адгезия равна нулю и зависит только от молекулярно-атомной шероховатости поверхности; $N_0 = \rho_0 S_0$ - равнодействующая сила молекулярного притяжения между обоими телами; ρ_0 - сила молекулярного притяжения, S_0 - площадь контакта.

Г.И. Елифанов [1], исследуя механизм трения при резании, установил, что нормальное давление участвует в формировании силы трения лишь постольку, поскольку оно формирует величину площади контакта при внешнем трении в результате пластической деформации.

На рис. 1 представлена схема, иллюстрирующая процесс взаимодействия стружки с передней поверхностью инструмента, сопровождающийся образованием заторможенных частиц (областей высокого давления – ОВД) вблизи режущего лезвия, и в последствие нароста. При этом следует различать участок пластического $S_{пл}$ и упругого S контактов. Как нами ранее показано [6], образование ОВД происходит за счет реализации вихревой моды деформации в прирезцовых слоях стружки. Они и являются основой для образования динамической диссипативной структуры-нароста на передней поверхности инструмента.

На рис. 2, а представлена микрофотография подошвы нароста. Из рис. 2, а, что по длине подошвы структура деформированных объемов изменяется. В начале подошвы нароста наблюдается структура отпущенного мартенсита-бейнит, далее видна структура стали, с вытянутыми вдоль пластического течения зернами перлита. В конце подошвы нароста формируется область чистого феррита. Анализ показывает, что в процессе вторичной деформации в прирезцовом слое стружки формируется псевдоячеистая (фрагментированная) дисло-

кационная структура, причем фрагменты дислокационной структуры подвергаются дальнейшему деформированию и вытягиваются по направлению пластического течения (рис. 2, б). При этом ее структура не выявляется. На рис. 2, в и 2, г приведены исходные структуры стали 10 при различных увеличениях.

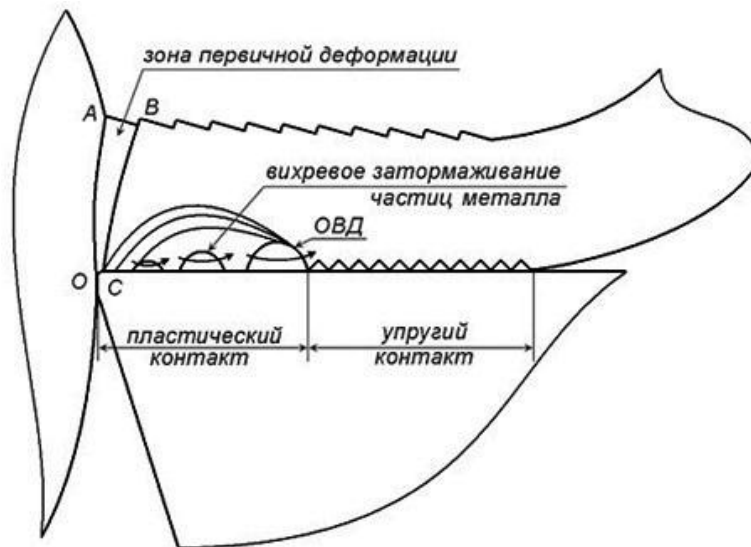


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая процесс трения при резании

Следовательно, в процессе трения в прирезцовых слоях стружки интенсивно протекает вторичная деформация цементитных пластин, их распад и диффузия углерода в направлении к режущему лезвию. При этом цементитные пластины поворачиваются, дробятся и вытягиваются в направлении сдвиговых напряжений, образуются также области чистого феррита (рис. 2, а). Наличие структур закалки углеродистых сталей и их последующего отпуска свидетельствует о том, что температура в локальных объемах на подошве нароста может превышать температуру фазовых превращений сталей, согласно диаграмме железо-углерод.

Плотность дислокаций вблизи пластин в ферритных зернах достигает критических значений ($\rho = 2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$), формируется ячеистая структура, которая подвергается дальнейшей деформации (рис. 2, б) и вытягивается вблизи режущего лезвия под воздействием высоких удельных давлений.

Образующиеся структуры быстрой закалки неравновесных структур (рис. 2, а) в условиях острой локализации деформации и градиентов температур следует рассматривать как фазовый переход с образованием новых диссипативных структур в прирезцовых слоях с новыми каналами диссипации энергии деформации.

Таким образом, анализ рис. 2, а показывает, что зависимость μ от температуры резания обусловлена фазовыми и структурными превращениями в прирезцовых слоях, вызывающими образование по длине пластического контакта зон с различной структурой и твердостью: формирование структур с высокой пластичностью (областей феррита) ведет к увеличению $C_{ПД}$ и C , в результате q_N удельное давление снижается, а μ растет.

На рис. 3 приведены результаты исследований коэффициента трения и высоты нароста в зависимости от температуры при искусственном подогреве режущей части инструмента, т.е. когда скорость деформации не проявляется. На рис. 3 видно, что как высота нароста H , так и коэффициент трения μ зависят от температуры, причем максимальные их значения находятся около 300°C . Известно [8], что при этой температуре растет подвижность углерода в сталях на межзеренных границах. Как будет показано далее, с использованием квантово-механических расчетов вблизи этой температуры интенсифицируются диффузионные процессы и в кобальтовой связке твердого сплава.

Анализ результатов металлографических исследований (рис. 2, а) показывает, что длину пластического контакта $S_{пл}$ стружки с инструментом при скорости $V > V_H$, т.е. скорости наростообразования, можно разделить на зону скоростной закалки (зону упрочнения) и зону разупрочнения.

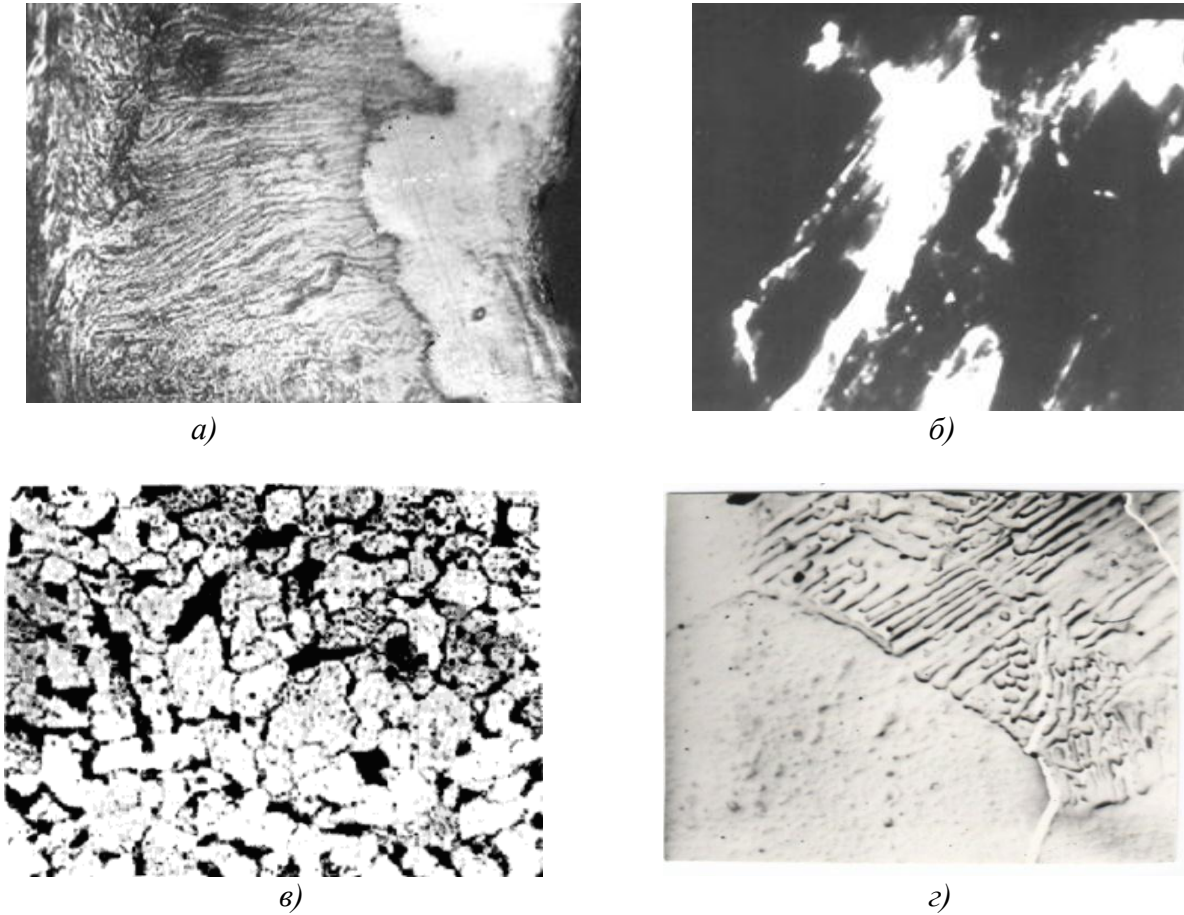


Рис. 2. Микрофотография структуры стали 10:

а – на подошве нароста (x 200) $V = 40$ м/мин; б – дислокационная структура в зоне вторичной деформации (x 15000) $V = 40$ м/мин; в – исходная микроструктура (x 300); г – исходная микроструктура (x 3000)

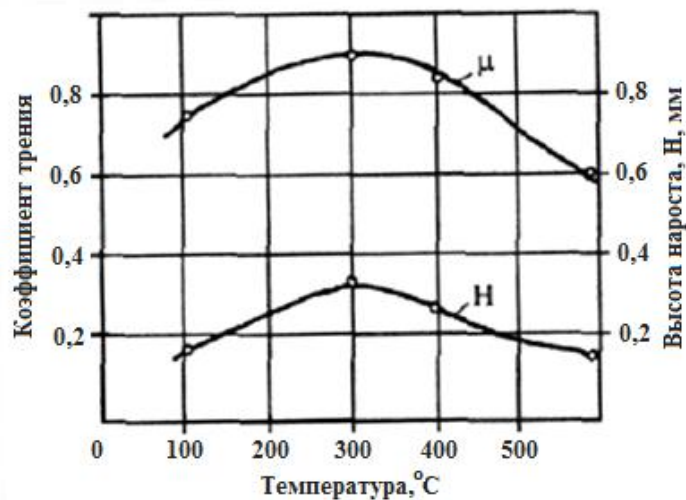


Рис. 3. Зависимость μ и H от температуры подогрева режущей части инструмента:
резец BK8; сталь У8; $V = 0,1$ м/мин; $a = 0,2$ мм; $b = 2$ мм

Исследования структуры подошв наростов (рис. 2, а) показывают, что при низких скоростях ($V = V_H$) зона пластического контакта может состоять и из трех зон. Кроме того, зона с наибольшей твердостью находится в начале пластического контакта. Зона разупрочнения (зона с меньшей твердостью) располагается только в конце подошвы нароста, т.е. там, где температура достигает максимального значения по длине контакта стружки с инструментом [4].

Следует отметить, что пластическая деформация при трении в противоположность упругой, столь значительна, что вызывает разрыв межатомных связей, которые до деформации были соседями. Пластическая деформация происходит в том случае, когда к разрыву межатомных связей приводит возрастание напряжений во всем деформированном объеме до величины, равной теоретической прочности, т.е. порядка $0,1B$ (B -модуль всестороннего сжатия). Однако в большинстве реальных материалов пластическая деформация имеет место при уровне напряжений более низком, чем теоретическая прочность вследствие наличия в материалах дислокаций.

На рис. 4 приведена упрощенная схема разрыва межатомной связи в кристаллической решетке с учетом приложения внешней касательной силы τ с межатомным расстоянием a в результате движения дислокации. Существование дислокаций в кристалле приводит к появлению областей, где энергия, необходимая для разрыва группы атомных связей, получается за счет восстановления другой группы связей. При скольжении в кристалле в нем перемещается в направлении скольжения и дислокационная линия (на схеме она перпендикулярна плоскости чертежа, ее проекция – точка p); смещение является одинаковым по всему участку плоскости скольжения, где произошел сдвиг, но оно падает до нуля при переходе через дислокационную линию. Нарушение геометрически правильного расположения атомов решетки вблизи дислокационной линии определяется размещением в этом месте слоя материала такой толщины, которая равна толщине сдвига. На рис. 4 плоскость скольжения перпендикулярна плоскости схемы, последовательное развитие скольжения приводит к тому, что в верхней части кристалла должна быть лишняя атомная плоскость. При перемещении полуплоскости с плоскостью скольжения образуется дислокационная линия.

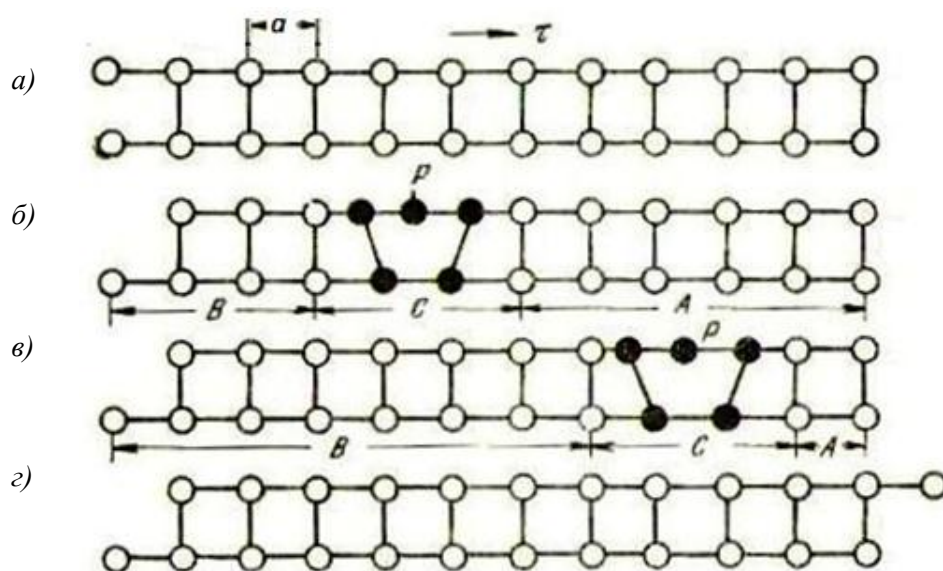


Рис. 4. Схема развития пластического сдвига при касательной нагрузке τ :

a – исходное состояние; *б* и *в* – различные стадии сдвига; *г* – состояние после сдвига;
A – участок, неперетерпевший скольжения; *B* – участок, на котором сдвиг уже прошел;
C – участок максимальных искажений, создаваемый и перемещаемый при последовательном развитии сдвига

На рис. 5 приведена зависимость удельной силы трения от ЭДУ кристаллических решеток различных материалов. Дефект упаковки обусловлен нарушением чередования плот-

но упакованных атомов [8]. С появлением дефекта упаковки связан избыток энергии, значение которого существенно определяет вид материала и характеризует его энергетическую активность, т.е. чем выше ЭДУ, тем выше поверхностная энергия материала [8] и тем больше его способность к образованию прочных межатомных связей. Из рис. 5 следует – выше ЭДУ, тем больше удельная сила.



Рис. 5. Зависимость удельной силы трения от ЭДУ: режим резания: $V=100$ м/мин; $S=0,157$ мм/об.

На рис. 6 показана зависимость удельной силы трения от теплоты плавления ΔH . Теплота плавления характеризует количество теплоты, которое необходимо сообщить одной единице массы кристаллического вещества, чтобы перевести его из кристаллического состояния в жидкое. Здесь также видно, что чем меньше теплота плавления, тем выше удельная сила трения.

Анализ рис. 5 и рис. 6 позволяет заключить, что в прирезцовых слоях стружки достигается предельное энергетическое состояние и они находятся в квазижидком (аморфном) состоянии с последующей быстрой кристаллизацией. Как уже отмечалось, при трении в условиях высоких степеней деформации в локальных объемах прирезцовых слоев плотность дислокаций достигает критических значений, что сопровождается их аморфизацией.

Зависимость коэффициента трения μ от теплоты плавления, как и зависимость удельной силы трения подчиняется тем же закономерностям: чем меньше теплота плавления, тем больше коэффициент трения.

Следует отметить, что на процессы трения при резании большое влияние оказывает как вид обрабатываемого материала, так и вид инструментального материала, в частности, марка твердого сплава, ее структура.

В этой связи исследовано распределение плотности электронных состояний на поверхности железа карбида вольфрама. Их электронный потенциал формируется как d -электронами, так и s -и p -электронами.

На рис. 7 показана схема модельного кластера для квантово-механических расчетов общей энергии взаимодействия и межатомного взаимодействия между слоями атомов железа и карбида вольфрама с использованием молекулярной динамики, позволяющей определить эти параметры в зависимости от температуры.

Оптимизация межатомного взаимодействия проведена по методу Базина-Хоппинга (Basin-Hopping). Расчеты показывают, что система WC-Fe ведет себя нестабильно выше тем-

ператур 600 до 1000 К при атмосферном давлении. Расстояние между слоями уменьшается, а энергия системы свыше 600 К увеличивается. По-видимому, рост энергии системы связан с фазовыми (полиморфными) превращениями, т.е. переходом α -Co в β -Co. Известно, что кобальт в твердых сплавах представляет β -Co.

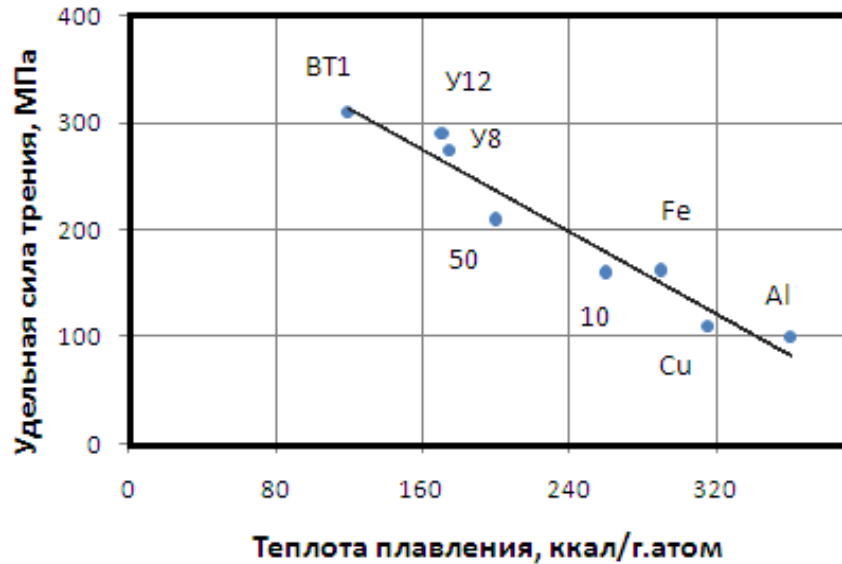


Рис. 6. Зависимость удельной силы трения от теплоты плавления: режим резания: $V=100$ м/мин; $S=0,157$ мм/об.

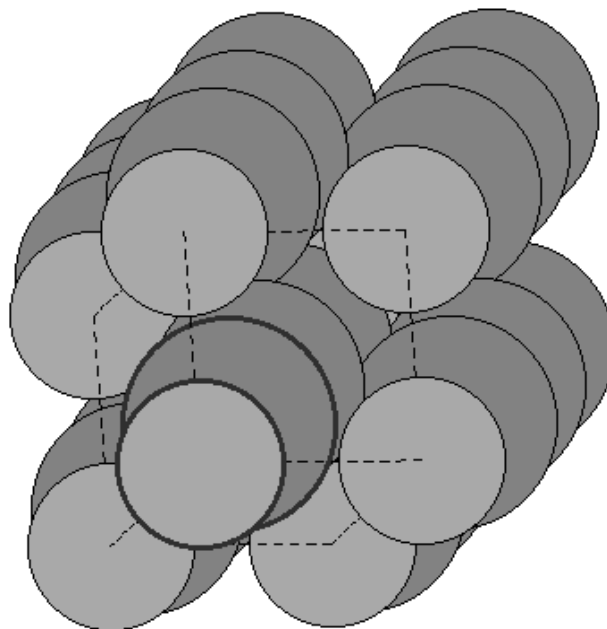


Рис. 7. Модельный кластер для расчета общей энергии систем

Далее были проведены квантово-механические расчеты по определению общей энергии систем, состоящих из различных контактирующих элементов.

Размер кластера обеспечивал необходимую точность воспроизведения для оценки энергии системы и достаточное время расчетов. В качестве рассчитываемых характеристик были выбраны E_{tot} - общая энергия связи в кластере (табл. 1).

Таблица 1

Общая энергия различных систем

Системы	E_{tot} (a.u.)
Co/Al	- 18,848
Co/Fe	- 32,650
Co/Ti	- 39,240
WC/Al	–
WC/Fe	- 15,670
WC/Ti	- 19,160
TiC/Fe	- 18,320
TiC/Ti	- 34,404

Энергия связи кластера, взятая с обратным знаком, представляет собой энергию, которую нужно затратить на разрыв всех межатомных связей в кластере, т.е. разделить его на отдельные атомы. Энергия связи, приходящаяся на один атом, равна $E_a = E_{tot}/n$, где n – число атомов в кластере. При этом расстояния между атомами должно стремиться к значениям, характерным для кристаллической решетки, определенной экспериментально. Изложенное позволяет заключить, что размер кластера составлял 30 атомов.

Квантово-механические расчеты общей энергии показали (табл. 1), что наибольшей энергией обладают системы из взаимодействующих элементов: карбид титана - титан и кобальт - титан, а также кобальт - железо. Система WC-Al показала несходимость результатов расчетов.

На основе анализа приведенных квантово-механических расчетов электронных плотностей кобальта и карбида вольфрама выявлено, что кобальт имеет более высокий уровень Ферми, чем WC, что объясняет взаимодействие частиц покрытия с кобальтом, а не с карбидом вольфрама. Таким образом, прочность сцепления нанопокрывтия с твердосплавной основой определяется межатомными связями элементов покрытия с кобальтом и зависит от их электронной структуры [8]. В частности, на прочность межатомных связей в переходных металлах большое влияние оказывают d- и s-электроны. Прочные металлические связи устанавливаются за счет перекрытия валентных электронов d и s-орбиталей, в результате ядра атомов стягиваются. В связи с этим титан является наиболее активным химическим элементом.

Далее проведен расчет пространственных конфигураций, параметров решетки, модулей упругости и полной энергии, приходящейся на атом, для перечисленных соединений, а также проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными. Кроме того, оценено увеличение коэффициента производительности при GPU-вычислениях на основе технологии NVidia CUDA. Все расчеты проводились на программном обеспечении GPAW и Abinit, и их GPU-версий. Анализ показывает, что использование ПО на основе технологии NVidia CUDA позволяет повысить скорость расчетов в 1,5–2 раза.

Библиографический список

1. **Клушин, М.И.** Резание металлов / М.И. Клушин. – М.: Машгиз. 1956. – 363с.
2. **Зорев, Н.Н.** Вопросы механики процесса резания / Н.Н. Зорев. – М.: Машгиз, 1956. – 365 с.
3. **Розенберг, А.М.** К теории процесса резания металлов / А.М. Розенберг, А.Н. Еремин // Станки и инструмент, 1949. №10. С. 4–11.
4. **Полетика, М.Ф.** Контактные нагрузки на режущих поверхностях инструмента / М.Ф. Полетика. – М.: Машиностроение, 1969. – 148 с.
5. **Гордон, М.Б.** Трение и смазка при резании металлов // Исследование трения и смазки при тении / М.Б. Гордон. – Чебоксары: ЧГУ им. И.Н. Ульянова, 1972. – 138 с.

6. Кабалдин, Ю.Г. Структура, прочность и износостойкость композиционных материалов / Ю.Г. Кабалдин. – Владивосток: Дальнаука, 1996. – 183 с.
7. Кабалдин, Ю.Г. Структурно-энергетический подход к процессу изнашивания твердых сплавов // Изв. вузов. Машиностроение. 1986. № 4. С. 127–131.
8. Трефилов, В.И. Дисперсные частицы в тугоплавких металлах / В.И. Трефилов, В.Ф. Моисеев – Киев.: Наукова думка, 1975. – 240 с.
9. Золотухин, И.Б. Нанокристаллические металлические материалы // Соровский образовательный журнал. 1998. № 1. С. 103–106.
10. Смирнов, В.Ф. Физика фрактальных кластеров / В.Ф. Смирнов. – М.: Наука, 1998. – 256 с.
11. Кабалдин, Ю.Г. Оптимизация составов и функциональных свойств наноструктурных покрытий для режущего инструмента методом функционала электронной плотности / Ю.Г. Кабалдин, С.В. Серый // Вестник машиностроения. 2011. № 5. С. 32–36.
12. Кабалдин, Ю.Г. Повышение работоспособности режущего инструмента осаждением наноструктурных покрытий / Ю.Г. Кабалдин [и др.]// Вестник машиностроения. 2010. №3. С. 41–48.

*Дата поступления
в редакцию: 08.04.2014*

Yu.G. Kabaldin¹, O.V. Kretinin¹, I.L. Laptev¹, E.E. Vlasov¹, S.V. Sery²

CONTACT INTERACTION SIMULATION TOOL CHIP BASED ON QUANTUM-MECHANICAL CALCULATION

Nizhny Novgorod state technical university n.a. R.E. Alexeev¹,
Komsomolsk-on-Amur state technical university²

Objective: To study the reasons for the dependence of the friction when cutting and constancy of the specific friction force on the treatment conditions

Methods: electron microscopic study of structural transformations and quantum- mechanical calculations of the interatomic interaction material chips and particles of the tool material

Research results: was shown that the cause of the temperature dependence of the coefficient of friction when cutting is the structural transformations in the near-contact layers of chips , and the constancy of the specific friction force when cutting associated with achievement in local volumes prizeztsovogo layer chip limiting density of dislocations and their amorphization.

Key words: cutting, specific friction force, friction coefficient, modeling, functional electron.