

dr inż. Wojciech MUSIAŁ, email: wmusial@vp.pl
dr inż. Jacek DZIEDZIC, email: jack.eredede@gmail.com;
dr hab. Jarosław RYBICKI Prof. PG, email: ryba@pg.gda.pl;
mgr inż. Marta KORDOWSKA, email: marteczka.kordowska@vp.pl
Politechnika Koszalińska, Politechnika Gdańska,

PROJEKT STANOWISKA BADAWCZEGO DO TESTOWANIA MIKRO- I NANO-SKRAWANIA W WARUNKACH PRÓŻNI I NISKICH TEMPERATUR

Streszczenie: Rozwój informatyki w ostatnich kilku dekadach umożliwił intensyfikację obliczeń komputerowych na poziomie molekularnym. Modelowanie zjawisk fizycznych przy pomocy komputera umożliwiło weryfikację i nowe podejście do wiedzy teoretycznej dotyczącej praw fizyki i umożliwiło ich analizę na poziomie atomowym. Współcześnie symulacje komputerowe używane są nie tylko do sprawdzania i weryfikowania teorii naukowych, ale również aby przewidywać wyniki eksperymentów i umożliwiać opisywanie i identyfikowanie modeli rzeczywistych procesów. Modele molekularne umożliwiają wykorzystywanie symulacji również do analizy skrawania w nanoskali

Słowa kluczowe: modelowanie, symulacje, nanoskala

PROJECT OF THE SERVANT'S INVESTIGATIVE POSITION TO TESTING MIKRO - AND NANO - CUTTING OFF IN CONDITIONS OF VACUUM AND LOW TEMPERATURES

Abstract: The last several decades have witnessed the flourishing and maturing of computer simulation. Modelling physical phenomena by means of a computer has acquired a status of a discipline in its own right, along the age-old theoretical and empirical approaches. Today, simulation is used not only to validate the predictions of theory and the results of experiment, it also has predictive capacity of its own, describing the exact behavior of simplified models of actual systems. Low cost and relative simplicity constitute major advantages of the simulation approach over experimental analysis when nanoscale systems are considered.

Keywords: modeling, simulation, nanoscale.

1. WPROWADZENIE

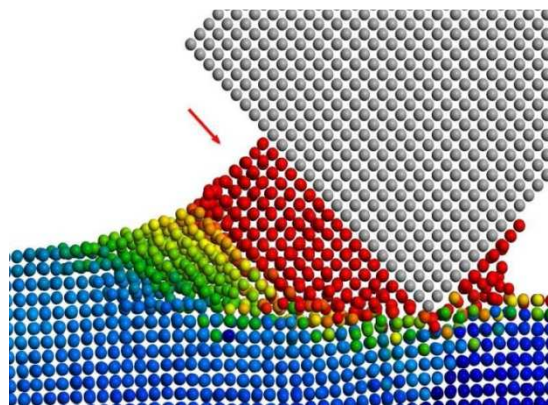
Dzięki wykorzystaniu komputerów dysponujących dużą mocą obliczeniową obecnie coraz częściej wykonywane są symulacje procesów skrawania, w tym pojedynczym ziarnem, zarówno w układzie dwuwymiarowym, jak i trójwymiarowym na poziomie atomowym [5-8]. Celem wykonywanych symulacji procesów obróbkowych w środowisku wirtualnym jest między innymi przeprowadzanie analiz molekularnych inicjowania i ewaluowania wióra w funkcji przejścia ostrza skrawającego względem materiału obrabianego. Celem planowanych badań jest budowa stanowiska badawczego zdolnego do przeprowadzenia eksperymentów umożliwiających porównanie warunków brzegowych symulacji komputerowych oraz rzeczywistych warunków skrawania w skali nanometrycznej.

Symulacje Komputerowe metodą dynamiki molekularnej (molecular dynamics, MD [1]) stanowią obecnie bardzo ważne narzędzie w realizacji badań nanomechanicznych wybranych właściwości metali. Rola symulacji komputerowej w wyjaśnieniu zjawisk zachodzących w nanoskali jest tym większa, że badane układy nie poddają się łatwo

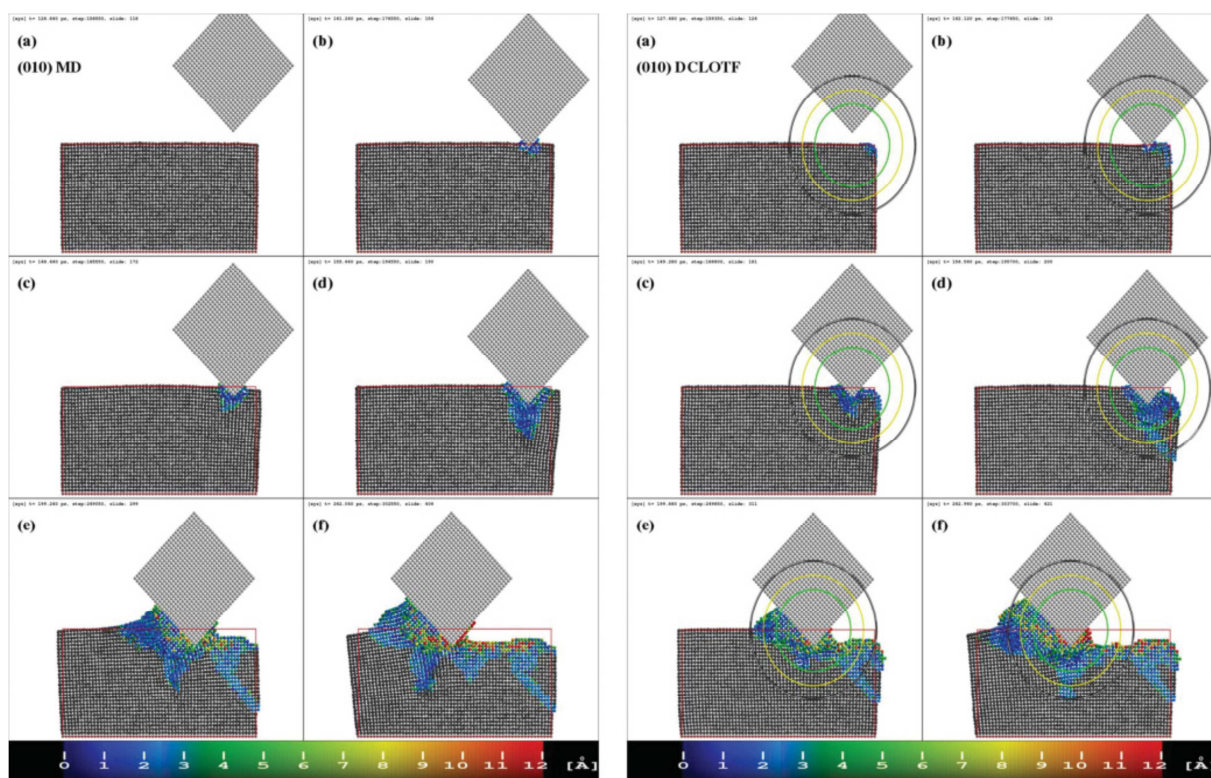
analizie eksperymentalnej, z uwagi na ultra małe obszary oddziaływania ostrza skrawającego na materiał obrabiany. Główne ograniczenia metody MD związane są z empiryczną naturą stosowanych potencjałów, ich postacią funkcyjną oraz z tym, że jest to metoda klasyczna. Nieuwzględnienie efektów elektronowych oraz nieuprawnione stosowanie potencjału dla konfiguracji układu dalekich od tych, dla których potencjał parametryzowano, poddaje w wątpliwość wyniki otrzymywane w sposób klasyczny, przynajmniej dla pewnej grupy analizowanych układów [8].

Z tego względu realizowane badania mogą być z równym powodzeniem wykorzystywane do projektowania jak i weryfikacji specjalnych narzędzi obróbkowych które będą przeznaczone do obróbki ultra precyzyjnej. Podczas weryfikacji procesów technologicznych wydaje się, iż zastosowane metody badawcze mogą przyczynić się również do rozwoju badań nad powinowactwem oraz doбором poszczególnych typów materiałów (przedmiot obrabiany/narzędzie – ziarno ściernie), a także badań interakcji między ziarnem ściernym, spoiwem a przedmiotem obrabianym na poziomie molekularnym.

Wysoka złożoność obliczeniowa metod o naturze kwantowej, gdzie oddziaływania międzyatomowe opisuje się wychodząc z pierwszych zasad (*ab initio*), uniemożliwia ich bezpośrednie zastosowanie do badania układów większych niż kilkadziesiąt-kilkaset atomów. W ostatniej dekadzie zaobserwować można rosnącą popularność metod hybrydowych (wieloskalowych) [2–4], tj. takich, które traktują najbardziej istotny z punktu widzenia zachodzących zjawisk fragment symulowanego układu metodą kwantową, a pozostałą jego część – metodą klasyczną. Fizycznie spójne połączenie dwóch metodologii (kwantowej i klasycznej) w jednej symulacji stanowi poważne wyzwanie, a gros trudności koncentruje się wokół interfejsu – regionu przejściowego pomiędzy fragmentami układu traktowanymi poszczególnymi metodami [8].

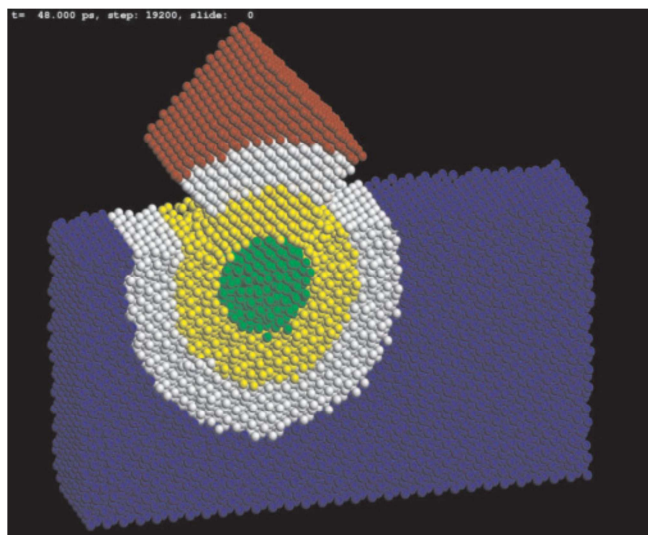


Rys. 1. Proces skrawania pojedynczym ostrzem w układzie 2D [7]



Rys. 2. Wartość wektora poślizgu zaprezentowano w kolorze, (symulacja MD, (DCLOTF) dla orientacji próbki skrawanej (010), dla symulacji (a), (b), (c) i (d), ostrze $y = -2a$, $y = 0$, $y = a$, $y = 2a$, kolejno (e) i (f) ostrze wcinające dotarło do $x = -6a$ i $-12a$ [8]

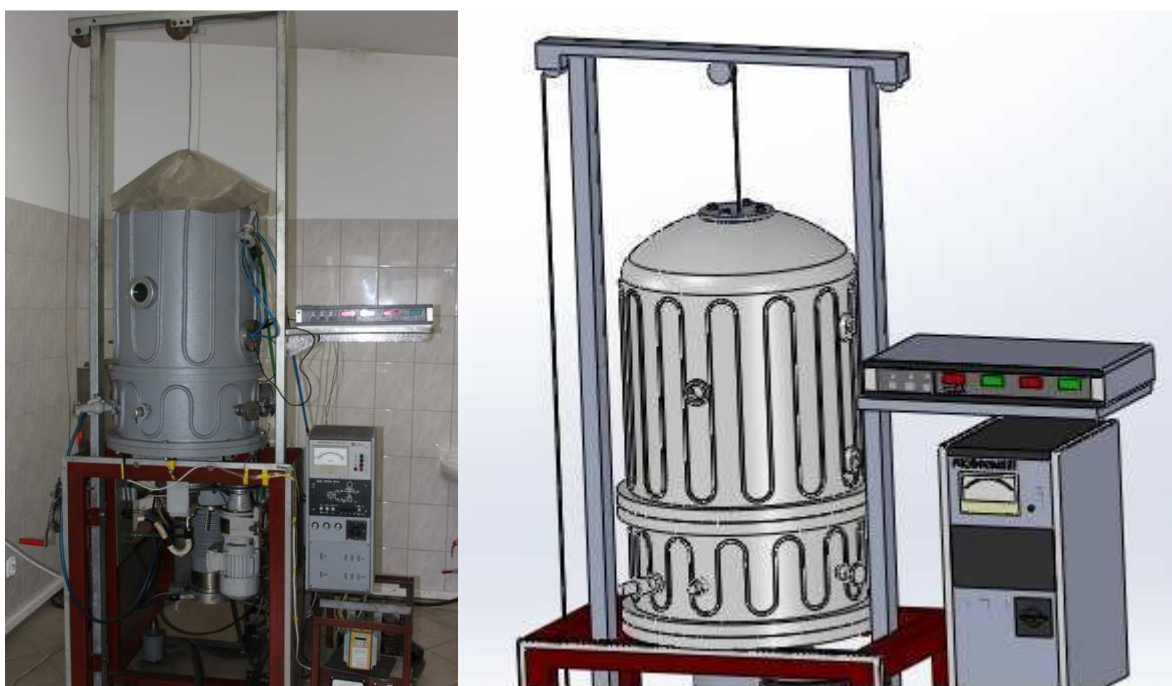
Na rysunku 3 przedstawiono fragment skrawania w układzie przestrzennym.



Rys. 3. Analiza przestrzenna penetracji ostrza w materiale obrabianym [7, 8]

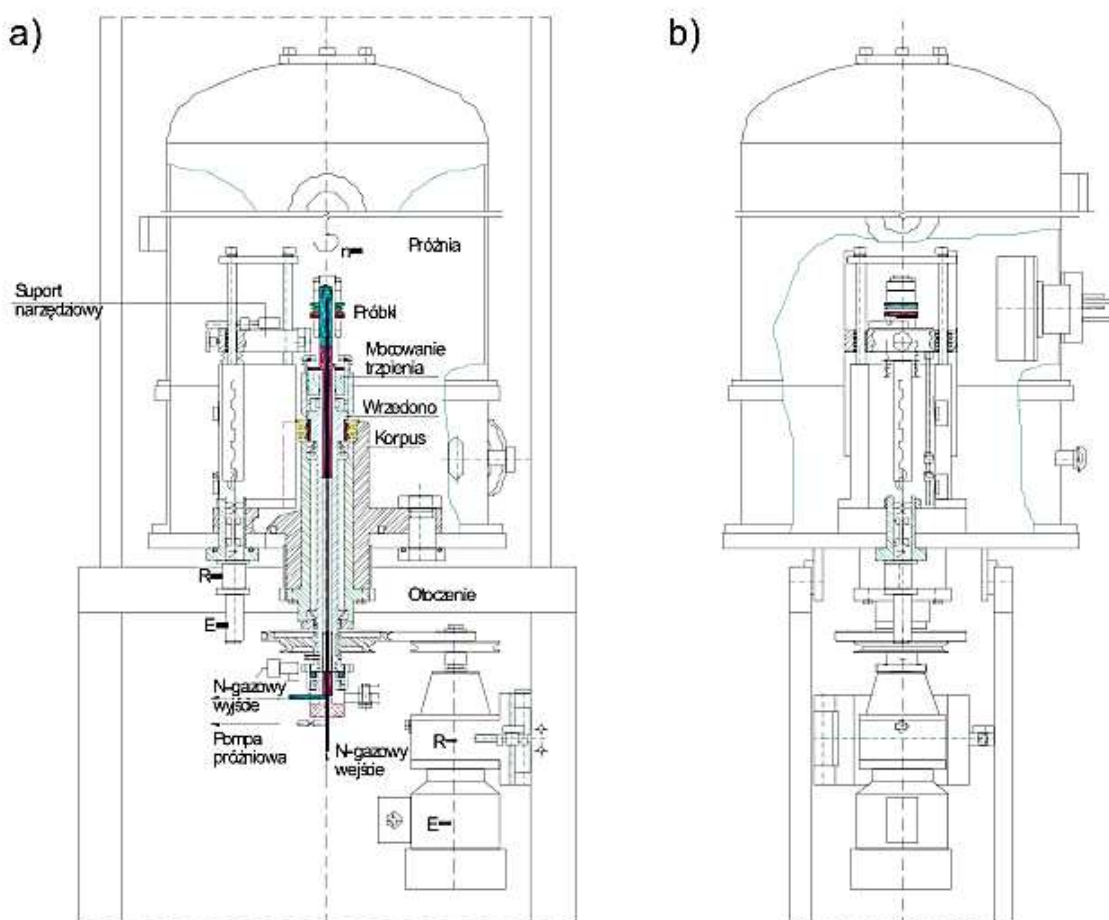
2. STANOWISKO BADAWCZE

W celu zrealizowania eksperymentu odtwarzającego przeprowadzone symulacje komputerowe, przygotowano stanowisko badawcze, którego głównym zadaniem będzie uzyskanie warunków umożliwiających przeprowadzenie badań przy zbliżonych parametrach analizy komputerowej. Stanowisko obecnie jest modyfikowane do zadania nanoskrawania w warunkach próżni i niskich temperatur (rys. 4, 5). Zastosowanie próżni i niskich temperatur umożliwi zbliżenie się do warunków implementowanych jako warunki brzegowe w symulacjach komputerowych, gdzie nie modeluje się wpływu powietrza a termiczne oddziaływanie cząstek jest bliskie zera bezwzględnego.



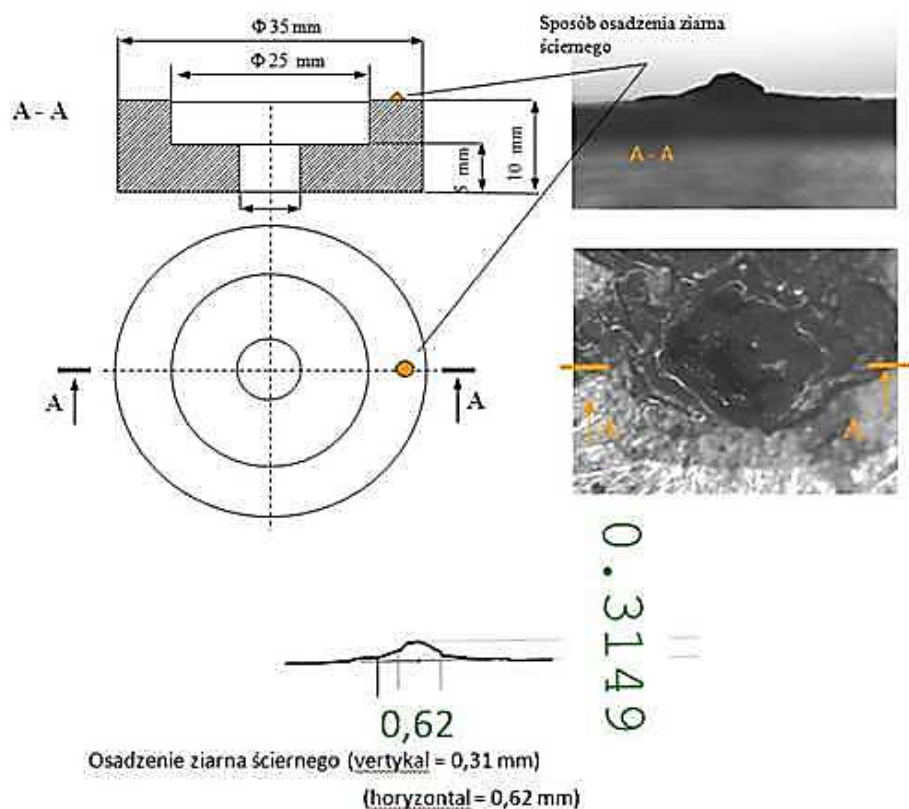
Rys. 4. Komora próżniowa (widok rzeczywisty) oraz model komputerowy

Podczas weryfikacji procesów technologicznych wydaje się, iż zastosowane metody badawcze mogą przyczynić się do rozwoju badań nad powinowactwem oraz doboru poszczególnych typów materiałów (przedmiot obrabiany/narzędzie – ziarno ściernie), a także badań interakcji między ziarnem ściernym, spoiwem a przedmiotem obrabianym na poziomie molekularnym.



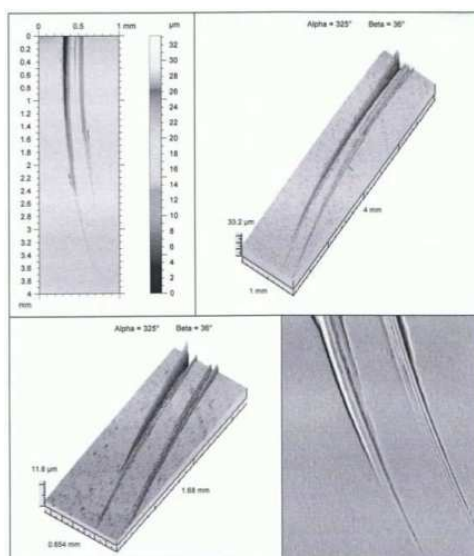
Rys. 5. Komora próżniowa (schemat) rzut z przodu a), z boku b)

Do realizacji wstępnych badań planowane jest wykorzystanie ziaren diamentowych osadzonych na tarczkach aluminiowych (rys. 6).



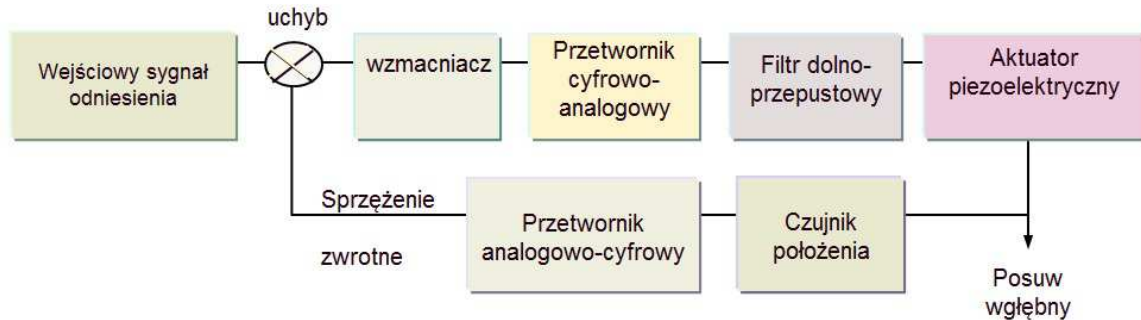
Rys. 6. Schemat osadzenia pojedynczego ziarna ściernego

Próbki materiału skrawanego ukształtowane w postaci prostopadłościanów będą zamocowane w uchwycie umieszczonym na stole krzyżowym, który wykonywać będzie ruch dosuwowy wzdłuż tworzącej tarczki (rys. 7).



Rys. 7. Przykładowe ślady skrawania uzyskane w podobnej kinematyce ruchu

Wewnątrz komory próżniowej zastosowane zostaną specjalne zespoły dosuwu nanometrycznego umożliwiające realizację ultra-precyzyjnego dosuwu w celu realizacji mikro- i nano-skrawania charakteryzującego się możliwością precyzyjnego sterowania w zamkniętej pętli sprzężenia zwrotnego (rys. 8). Zastosowanie komory próżniowej pozwoli uzyskać warunki zbliżone do zakładanych w trakcie wykonywanych obliczeń molekularnych. Istnieje również na stanowisku badawczym możliwość schładzania strefy obróbki ciekłym azotem w taki sposób, aby minimalizować temperatury w strefie obróbki i odnosić je do zakładanych w obliczeniach komputerowych warunków skrawania.



Rys. 8. Schemat systemu sterowania zespołem dosuwu nanometrycznego

Realizowany projekt badawczy tworzy podstawy nowej metody precyzyjnej weryfikacji modeli molekularnych procesu mikro- i nano-obróbki. Przy wykorzystaniu modeli procesu wnikania ziarna ściernego na poziomie molekularnym, będzie możliwa analiza powstawania i ewaluowania wióra materiału obrabianego na poziomie atomowym. Budowa stanowisk badawczych umożliwi weryfikację tego procesu.

3. PODSUMOWANIE

Budowa stanowiska badawczego i przeprowadzone na nim badania mogą przyczynić się do zintensyfikowania prac nad analizą powstawania mechanizmu skrawania na poziomie atomowym oraz umożliwić rozwój badań nad fizycznie spójnym połączeniem dwóch metodologii (kwantowej i klasycznej) w jednej symulacji, którego realizacja stanowi obecnie poważne wyzwanie, a gros trudności z implementacją koncentruje się wokół interfejsu – regionu przejściowego, pomiędzy fragmentami układu traktowanymi poszczególnymi metodami. Wspomniany interfejs najłatwiej jest zaprojektować dla układów kowalencyjnych, gdzie wiązania zerwane na skutek izolacji regionu traktowanego kwantowo łatwiej jest wysycić odpowiednio dobranymi wirtualnymi atomami. W układach metalicznych, z uwagi na delokalizację elektronową, to tradycyjne podejście jest niemożliwe do zastosowania.

W prezentowanym stanowisku badawczym planuje się wykonywać badania odnoszące się do specjalnie przygotowanych symulacji, w których jednym z głównych celów realizacji jest opracowanie spójnej fizycznie i wystarczająco wydajnej obliczeniowo metody, która pozwoliłaby na osadzenie wyników przeprowadzanych lokalnie obliczeń *ab initio* wewnątrz symulacji metodą dynamiki molekularnej, dla układów opisywanych wielociałowym potencjałem Suttona-Chena [5], używanym do opisu zachowania metali *fcc*. Drugi z celów zakłada zaimplementowanie opracowanej metody w postaci kodu komputerowego, który umożliwiłby przeprowadzanie obliczeń hybrydowych. Kolejny, trzeci cel polega na

wykonaniu szeregu hybrydowych symulacji nanoindentacji podłoża miedzianego sztywnym ostrzem i porównaniu otrzymanych wyników z metodologią klasyczną (na podstawie przeprowadzonych symulacji referencyjnych oraz wyników literaturowych). Ostatni etap to weryfikacja eksperymentalna na zaprezentowanym stanowisku badawczym. Przygotowywane stanowisko badawcze może pozwolić na dokonanie weryfikacji doświadczalnej przeprowadzonych symulacji odnoszących się do identyfikacji mechanizmu inicjacji wióra na poziomie molekularnym a także patrząc na problem szerzej w procesie mikro i nano-obróbki.

LITERATURA

- [1] RAPAPORT D. C. 1995 *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge.
- [2] BROUGHTON J. Q., ABRAHAM F. F., BERNSTEIN N. i KAXIRAS E. 1999 *Phys. Rev. B* 60 2391.
- [3] OGATA S., SHIMOJO F., KALIA R. K., NAKANO A. i VASHISTA P. 2002 *Comp. Phys. Comm.* 149
- [4] BERNSTEIN N., KERMODE J. R. i CS`ANYI G. 2009 *Rep. Prog. Phys.* 72 026501.
- [5] SUTTON A. P. i CHEN J. 1990 *Phil. Mag. Lett* 61 139.
- [6] MEHL M. i PAPACONSTANTOPOULOS D. 1998, *Tight-binding parametrization of first-principles results*, Topics in Computational Materials Science, pod redakcją Fong C. Y. (World Scientific, Singapore, 1998), Ch. V, pp. 169-213.
- [7] BIALOSKORSKI M. i RYBICKI J. 2001 *Mechanical properties of carbon nanotubes: simulation program and exemplary results*, Proc. of the 8-th Workshop of PTSK Gdansk-Sobieszewo 8.
- [8] Jacek DZIEDZICZAK: Klasyczno-Kwantowe obliczenia nanomechanicznych właściwości metali. Praca doktorska pod kierunkiem dr. hab. Jarosława Rybickiego, prof. PG. Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechnika Gdańska. Gdańsk 2009