

dr inż. Wojciech Musiał; dr hab. Jarosław Rybicki, dr hab. inż. Michał Białoskórski,
mgr inż. Marta Kordowska

Politechnika Koszalińska, Wydział: Mechanika i Budowa Maszyn;

Tel. kom. 661 201 823

wmusiał@vp.pl

Tytuł: Modelowanie molekularne w procesach mikro i nano obróbki

Streszczenie: *W artykule przedstawiono możliwości realizacji symulacji molekularnych w odniesieniu do procesów nano i mikro wygładzania powierzchni obrabianych. Zaprezentowano również stanowisko badawcze do realizacji weryfikacji procesów skrawania pojedynczym ziarnem ściernym, które wyposażone zostało w zespół dosuwu nanometrycznego, umożliwiającą realizację dosuwu wglębnego na poziomie atomowym.*

Title: Molecular modeling in processes the micro and the nanoprocessing

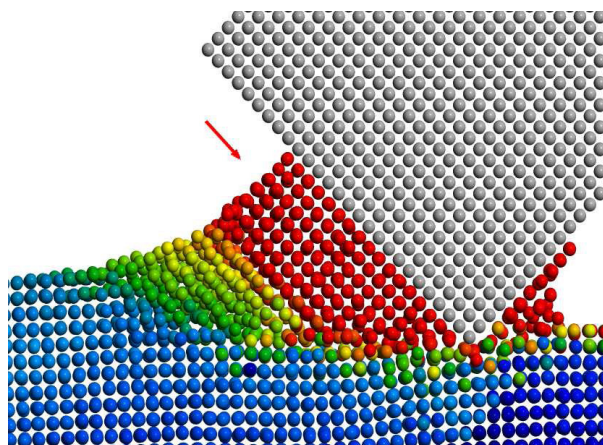
Abstract: *This article presents the possibilities of realization of the molecular simulations in reference to processes the nano and the micropolishing of the worked surfaces. In article was presented also investigative position to realization of verification of cutting off processes with individual abrasive crystallite. This investigative position was equipped in nanometric in-feed set enabling in-feed realization on atomic level.*

Wstęp

W artykule poruszono zagadnienia związane z doбором parametrów obróbkowych dla mikro i nano obróbki ze szczególnym uwzględnieniem procesów wygładzania powierzchni funkcyjnych o zakładanych cechach trybologicznych. Ma to duże znaczenie w przypadku obróbki materiałów trudnoskrawalnych, poczynając od materiałów monokrystalicznych poprzez materiały polimorficzne, a kończąc na syntetycznych materiałach ceramicznych i laminatach. Można przewidywać, że w najbliższym czasie badania naukowe będą zmierzały w kierunku poszukiwania nowych materiałów konstrukcyjnych spełniających wysokie wymagania eksploatacyjne i będących odpowiedzią na poszukiwania, w zakresie wyzwań technologicznych stawianych przez przemysł lotniczy, medyczny, samochodowy. Zastosowanie analiz molekularnych może przyczynić się do szybszego opracowywania modeli jeszcze nie istniejących materiałów oraz ich weryfikacji technologicznej również na poziomie symulacji molekularnych. Dzięki temu możliwe będzie również szybsze opracowywanie narzędzi umożliwiających obróbkę projektowanych materiałów.

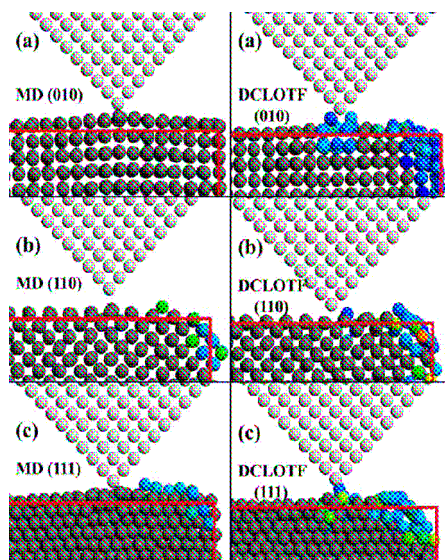
Modelowanie molekularne

Dzięki coraz szybkemu rozwojowi systemów komputerowych i zwiększającej się ich mocy obliczeniowej, możliwe staje się opracowywanie i implementowanie obliczeniowych modeli molekularnych uwzględniające interakcje między poszczególnymi cząsteczkami i atomami zarówno w materiale obrabianym jak i w ostrzu skrawającym. W artykule przedstawiono przykładowe symulacje molekularne odnoszące się do procesu skrawania pojedynczymi ostrzami skrawającymi. Przeprowadzane symulacje kontaktu ostrza skrawającego z przedmiotem obrabianym, pozwalają analizować oddziaływania poszczególnych atomów i cząstek zarówno w układzie 2D (rys. 1,2) jak i coraz częściej w konfiguracji 3D (rys. 3) [1].



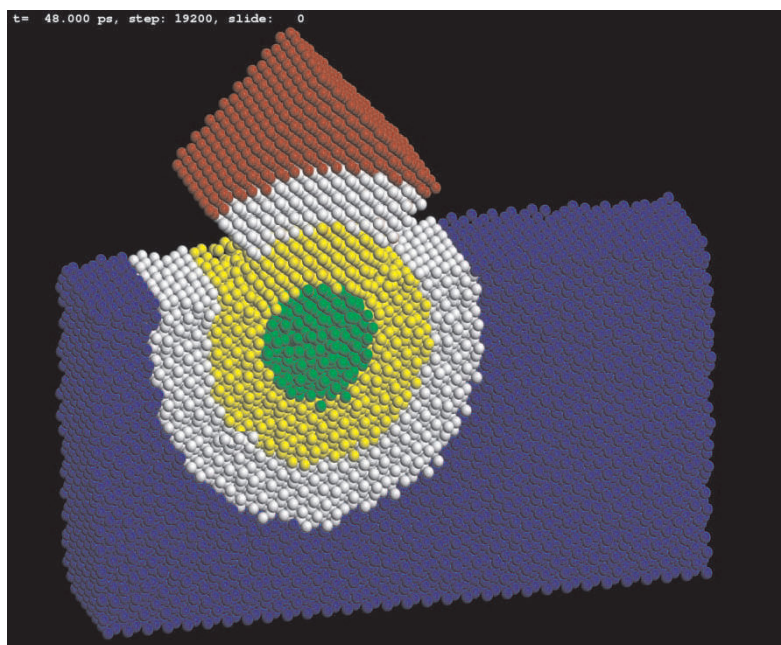
Rys. 1. Proces skrawania pojedynczym ostrzem w układzie 2D

W obliczeniach molekularnych uwzględniających przestrzenne oddziaływanie cząstek na siebie, wzrasta liczba interakcji oddziaływań poszczególnych molekuł wraz z objętością analizowanego obszaru kontaktu narzędzia z przedmiotem obrabianym. Obliczenia 3D w znaczący sposób obciążają system komputerowy, wydaje się jednak, że w niektórych przypadkach są niezbędne w celu prawidłowej analizy zjawisk fizycznych symulowanych molekularnie. W trakcie skrawania materiał oddzielany jest w postaci wiórów, które powstają w określonej objętości materiału obrabianego. Powstające w wyniku obróbki wióry są przestrzenne a proces ich inicjacji zachodzi w warstwie wierzchniej i na powierzchni przedmiotu obrabianego, bezpośrednio przed jak i pod określoną objętością na którą, oddziałuje ostrze skrawające, które również jest zbiorem odpowiednio ułożonych przestrzennie molekuł. Molekularne analizy 2D również stanowią dobre odwzorowanie oddziaływania ostrza skrawającego na przedmiot obrabiany. Pozwalają stosunkowo szybko otrzymywać dane numeryczne z określonego przekroju warstwy skrawanej (rys. 2).



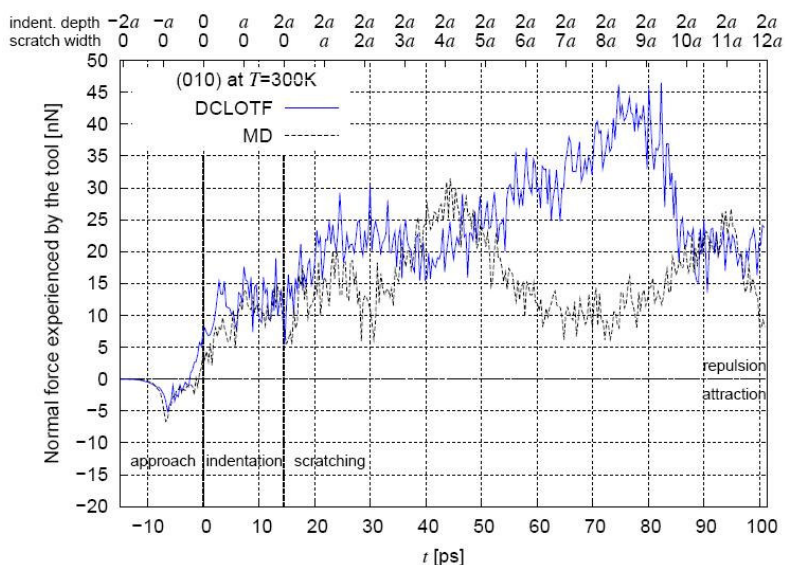
Rys. 2. Analiza oddziaływania ostrza skrawającego na materiał obrabiany

Symulacje przestrzenne pozwalają uzyskać informację pełniejszą już na etapie inicjowania struktury wióra powstałego pod ostrzem skrawającym (rys. 3). Ma to szczególne znaczenie przy wyznaczaniu optymalnych parametrów obróbkowych dla danego typu materiału. Na podstawie kształtu wiórów można wnioskować o przebiegu realizacji procesów w zakresie mikro i nano obróbki. Stosowanie analiz molekularnych może pozwolić śledzić proces tworzenia różnych grup wiórów na poziomie molekularnym od momentu jego inicjacji do pełnego ukształtowania.



Rys. 3. Proces skrawania pojedynczym ostrzem, oddziaływanie ostrza skrawającego na materiał obrabiany z uwzględnieniem objętości materiału obrabianego oraz geometrii przestrzennej ostrza

Na rysunku 4 przedstawiono przykładowe wyniki przebiegu siły (składowa normalna) działającej w funkcji czasu wywołanej działaniem ostrza skrawającego na materiał obrabiany.

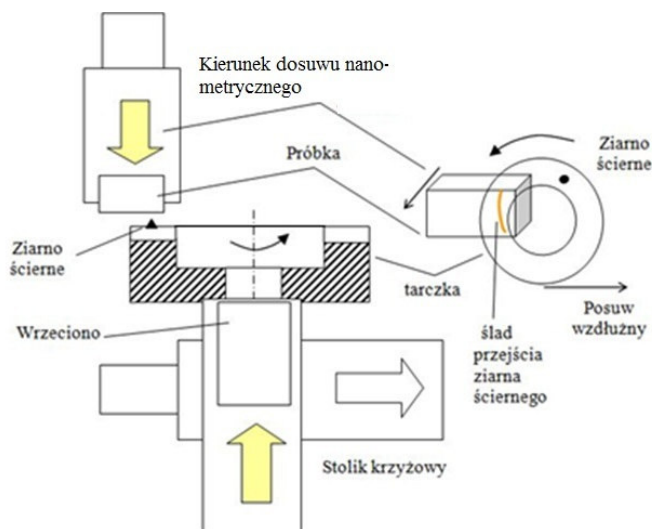


Rys. 4. Analiza oddziaływanie ostrza skrawającego na materiał obrabiany

Do przeprowadzania analiz korelacji rzeczywistych parametrów obróbkowych z parametrami uzyskanymi w wyniku realizacji molekularnej symulacji komputerowej, przewiduje się wykorzystać stanowisko badawcze umożliwiające skrawanie pojedynczym ziarnem ściernym w zakresie od kilku do kilkudziesięciu nanometrów.

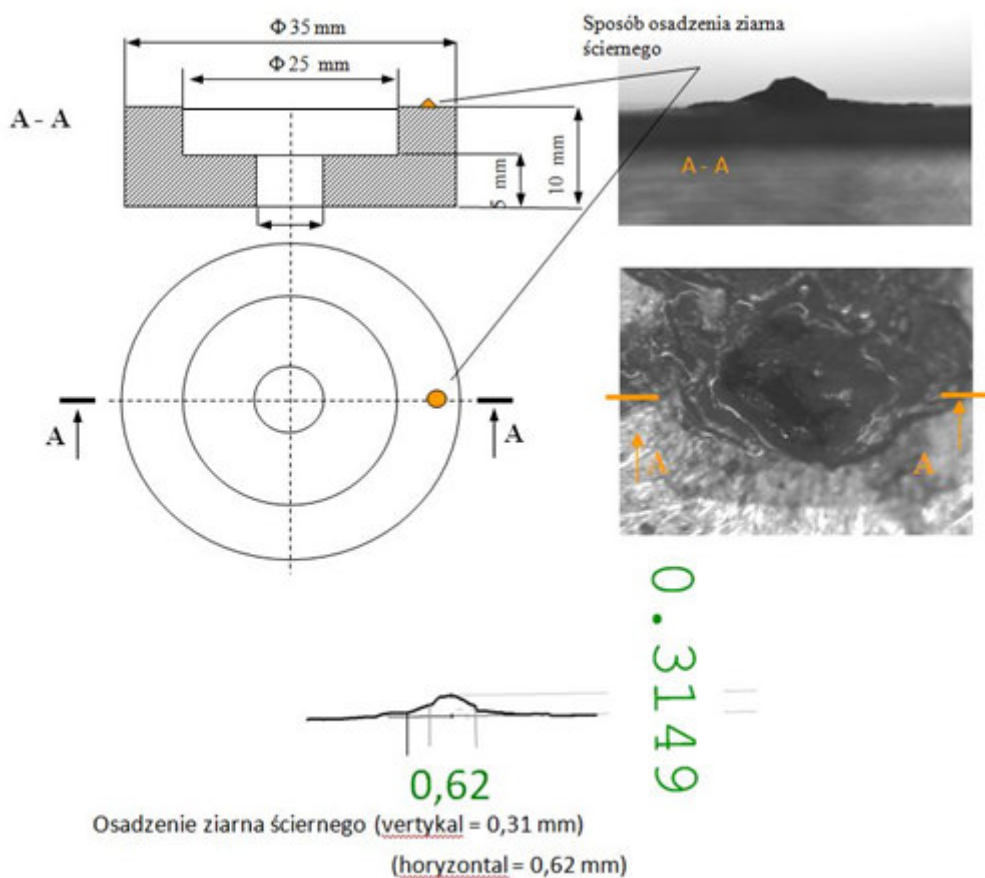
Stanowisko badawcze

Do realizacji procesu skrawania na stanowisku badawczym planuje się wykorzystać zespół dosuwu nanometrycznego umożliwiającego precyzyjne zgłębianie ostrza skrawającego w materiale obrabianym (rys. 5).



Rys. 5. Schemat stanowiska badawczego do realizacji skrawania pojedynczym ziarnem ściernym

Na rysunku 6 przedstawiono praktyczną realizację skrawania pojedynczym ziarnem ściernym na stanowisku badawczym.



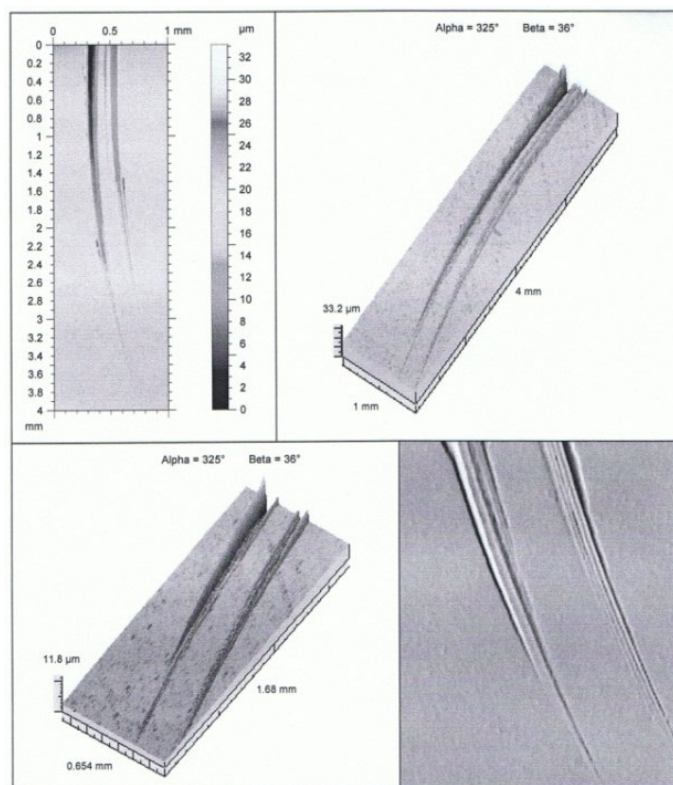
Rys. 6. Mocowanie ziarna ściernego na stanowisku badawczym

Stanowisko badawcze zostało wykonane na bazie precyzyjnej szlifierki do obróbki materiałów ceramicznych w warunkach plastycznego płynięcia w strefie szlifowania (rys. 7).



Rys. 7. Widok ogólny stanowiska badawczego

W wyniku przeprowadzonych eksperymentów uzyskano ślady przejścia ostrza skrawającego względem przedmiotu skrawanego (rys. 8).



Rys. 8. Przykładowa realizacja procesu skrawania na prezentowanym stanowisku badawczym

Do realizacji procesu skrawania pojedynczym ziarnem ściernym, niezbędne jest odpowiednie przygotowanie powierzchni badanych próbek w celu usunięcia nierówności na ich powierzchni. Najlepsze efekty można uzyskać realizując proces polerowania, dzięki temu analiza śladu skrawania pojedynczym ziarnem ściernym może pozwolić uzyskać dane o minimalnych głębokościach wnikania wierzchołka ostrza skrawającego (rys. 8).

Wnioski

Planowana realizacja badań w zakresie przeprowadzenia molekularnych symulacji komputerowych procesu skrawania pojedynczym ziarnem ściernym ma na celu sprawdzenie korelacji między przyjętymi parametrami symulacyjnymi a rzeczywistym badaniem zrealizowanym na stanowisku badawczym. Przeprowadzone do tej pory badania pozwalają wyciągnąć wniosek, że równoległa analiza modelowania procesu szlifowania i doświadczalna analiza skrawania pojedynczym ziarnem ściernym może dać informację odnośnie kształtowania się wiórow na poziomie atomowym a co za tym idzie pozwoli wnioskować o sposobie realizacji obróbki. Przeprowadzone badania mogą być w przyszłości wykorzystane do poszukiwania nowych materiałów ściernych i ich analizy oddziaływania względem materiału obrabianego, a także umożliwić świadome modyfikowanie tych materiałów na poziomie molekularnym w taki sposób, aby w strefie obróbki zachodziły zjawiska sprzyjające procesom obróbkowym (na przykład zmniejszenie adhezji materiałów względem siebie), zmniejszenie stopnia zalepień powierzchni czynnej narzędzi wygładzających, a także niekorzystne zjawiska gromadzenia się materiału obrabianego, na precyzyjnych geometrycznie zdefiniowanych ostrzach skrawających.

BIBLIOGRAFIA

1. Białogórski M., Rychcik-Leyk M., Rybicki J., Bergmański G. Symulacje dynamiczno-molekularne ultraprecyzyjnego skrawania metali. IX Warsztaty Naukowe PTSK. Symulacje w badaniach i rozwoju. Koszalin-Osieki, 28-31 sierpnia 2002r.
2. Dąbrowski L. i in.: Niekonwencjonalne procesy obróbki ściernej. Materiały XXV Naukowej Szkoły Obróbki Ściernej, Wrocław – Duszniki Zdrój 2002, s. 33-54
3. Nowicki B., Pracki M.: Badanie efektów niekonwencjonalnego gładzenia narzędziami diamentowymi. Mat. XXIII Naukowej Szkoły Obróbki Ściernej
4. Raffi-Tabar H 2000 Phys. Rep. 325-239