

切削深度对单晶 γ -TiAl 合金亚表面缺陷及残余应力的影响

王 麒^{1,2}, 冯瑞成^{1,2,✉}, 樊礼赫^{1,2}, 邵自豪^{1,2}, 董建勇^{1,2}

1 兰州理工大学机电工程学院, 兰州 730050

2 兰州理工大学数字制造技术与应用省部共建教育部重点实验室, 兰州 730050

本工作采用分子动力学方法模拟了单晶 γ -TiAl 合金在不同切削深度下的切削过程, 分析了不同切削深度下微观缺陷演化及稳定切削后的内应力演变, 研究了切削后残余应力和 von Mises 应力等在不同切削深度下的分布规律, 讨论了不同切削深度下位错和层错等微观缺陷演化及内应力演变之间的关系。结果表明: 位错反应及层错演化随着切削深度的增加越来越剧烈, 位错反应对 Lomer-Cottrell 位错的形成影响较大; 刀具挤压工件表面形成的残余压应力受层错演化及位错反应的影响, 位错反应的剧烈程度影响内应力的大小, 且残余压应力存在于亚表面下的一定深度内; 同时发现切削深度的变化对 von Mises 应力的影响较小。

关键词 单晶 γ -TiAl 合金 纳米切削 残余应力 位错反应 堆垛层错

中图分类号: TG501.1; TG146.23 **文献标识码:** A

Effect of Cutting Depth on Subsurface Defects and Residual Stress in Single Crystal γ -TiAl Alloy

WANG Qi^{1,2}, FENG Ruicheng^{1,2,✉}, FAN Lihe^{1,2}, SHAO Zihao^{1,2}, DONG Jianyong^{1,2}

1 School of Mechanical and Electronical Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China

2 Key Laboratory of Digital Manufacturing Technology and Application, Ministry of Education Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China

In this paper, the molecular dynamics method was used to simulate the cutting process of single crystal γ -TiAl alloy under different cutting depths. The evolution of microscopic defects and the evolution of internal stress after stable cutting at different depths of cutting was analyzed, and the distribution of residual stress and von Mises stress at different cutting depths were studied, the relationship between the evolution of microscopic defects and internal stress at different cutting depths was discussed. The results show that the dislocation reaction and the stacking fault evolution increase with the increase of cutting depth, and the dislocation reaction has a great influence on the formation of the Lomer-Cottrell dislocation. The residual compressive stress formed by the surface of the tool extrusion workpiece is affected by the stacking fault evolution and dislocation reaction, and the severity of the dislocation reaction affects the internal stress. The residual compressive stress exists on a certain depth of the subsurface. It is also found that the change of cutting depth had little effect on von Mises stress.

Key words single crystal γ -TiAl alloy, nano-cutting, residual stress, dislocation reaction, stacking fault

0 引言

TiAl 合金在工业运用中优点显著, 特别是在航空航天工业。由于 γ -TiAl 合金具有较高的强度和弹性模量、低密度和良好的抗氧化性等优点, 其在航空发动机应用中备受关注^[1]。但 TiAl 合金具有室温脆性和难变形加工性, 加工过程中易引入残余应力, 致使工件的加工精度、疲劳强度及服役性能受到影响。同时, 工件在服役过程中因疲劳损伤引起的微裂纹扩展也会引入残余应力, 最终导致材料失效。为此, 需要从纳米尺度研究加工过程中残余应力对材料力学性能的影响。

此外, 系统研究纳米加工中材料去除、表面形成及材料的微观结构状态, 需要进行大量纳米级的加工实验。但是受到当前加工和检测设备精度的限制, 对纳米加工过程进行全方位动态观察和检测的难度较大, 并且实验的成本非常昂贵。因此, 通过实验研究纳米加工机理变得比较困难^[2], 而采用计算机模拟的方法可以弥补上述不足。利用量子力学、分子动力学 (MD) 等现代物理学研究成果, 从原子之间相互作用的角度对纳米金属材料的力学性能、缺陷结构、内应力演变及去除机理等方面进行研究具有重要意义。本工作

采用的分子动力学方法是一种基于牛顿力学的计算方法, 其通过对分子运动进行热力学计算, 从而对材料的微观性能进行数值模拟^[3]。该方法能够对材料内部位错形核及扩展、裂纹萌生与生长等微观现象进行观察分析。

已有学者针对纳米尺度下材料加工过程中的微观缺陷演化和力学性能进行了相关研究, 并取得了一些有价值的研究成果。Sharma 等^[4]通过模拟不同晶向对单晶铜切削的影响, 得出结论: 材料变形是由位错引起的, 此位错与晶体取向相关, 不同晶体取向对位错的形核扩展影响不同, 位错主要在 $\langle 110 \rangle$ 滑移方向所在的滑移面演化。Zhang 等^[5]通过对单晶铜进行两次纳米切削以研究其亚表面微观缺陷演化情况, 结果表明: 第二次切削后亚表面空位、空位簇浓度高于第一次切削, 且第二次切削过程中形成的位错一般位于刀具下方, 由于第二次切削受到残余应力和位错的影响, 大部分位错环局限在刀具附近区域。Han 等^[6]通过模拟 $\text{Ti}_2\text{AlN}/\text{TiAl}$ 复合材料的磨削过程, 发现引入 Ti_2AlN 能够产生强化效果, 共格边界能够阻断位错传播, 复合材料产生的位错受磨削速度与温度的影响。Wang 等^[7]通过模拟单晶铜的纳米切削过程, 对亚表面缺陷的结构分布及其演化规律进行分析, 发现在剪切滑移区会产生堆垛层错、位错环和“V”型位错等缺陷,

基金项目: 国家自然科学基金 (52065036); 长江学者和创新团队发展计划 (IRT_15R30); 兰州理工大学红柳一流学科建设项目

This work was supported by the National Natural Science Foundation of China (52065036), Program for Changjiang Scholars and Innovative Research Team in University of Ministry of Education of China (IRT_15R30) and Hongliu First-class Disciplines Development Program of Lanzhou University of Technology.

并对某些缺陷的形成机理进行了探究。Wang 等^[8]通过模拟单晶硅在不同刀具条件下的切削过程,探索了挤压和剪切去除材料的机理,解释了不同材料去除机理对切屑及亚表面缺陷的影响。冯瑞成等^[9]利用分子动力学方法模拟了单晶 γ -TiAl 合金的纳米切削过程,研究了不同切削深度和切削速度对切屑、位错密度和晶体结构转变的影响。此外,一些学者还研究了残余应力的分布特征及其对工件的影响。Dai 等^[10]通过模拟结构刀具与非结构刀具对单晶硅切削过程的影响,得出非结构刀具切削形成的亚表面原子的平均静水应力大于结构刀具切削形成的亚表面原子的平均静水应力,因为非结构刀具加工会使得更多的切屑产生;且通过模拟残余应力分布场,得出了残余应力对切削过程及工件加工表面性能有影响的结论。Mylvaganam 等^[11]采用分子动力学方法研究了残余应力对金刚石刀具尖纳米划痕引起的 bet-5 相硅稳定性的影响,结果表明:在纳米划痕过程中,切削刀尖下的静水应力分量对 bet-5 相硅的转变起重要作用,要使 bet-5 相硅在划痕后保持稳定,需要 6 ~ 8 GPa 的残余八面体剪切应力。Wang 等^[12]通过模拟单晶硅的纳米切削过程,探究了工件表面及亚表面残余应力的分布特征,得出结论:残余应力分量都是沿表面深度方向从拉伸残余应力变为压缩残余应力,随着切削深度的增加,表面拉伸残余应力减小,而亚表面压缩残余应力增大。Wang 等^[13]通过模拟不同切削角度下单晶硅的纳米切削过程,对切削中产生的静水应力、von Mises 应力进行了探索,得到切削角度为 -25° 时有最高的平均静水应力。综上所述,虽然众多学者针对不同材料加工过程中缺陷演化及内应力演变进行了相关研究,但针对缺陷演化及内应力演变之间关系的研究相对较少,对于残余应力形成机理的

探究还不够完善,因此探索加工对 γ -TiAl 合金缺陷演化、内应力演变关系及残余应力的形成机理尤为重要。本工作利用分子动力学方法模拟单晶 γ -TiAl 合金纳米切削过程,研究单晶 γ -TiAl 合金在不同切削深度下工件中内应力演变与微观缺陷演化之间的关系,分析切削后工件内残余应力的分布。

1 单晶 γ -TiAl 合金切削模型与原子间势

1.1 单晶 γ -TiAl 合金切削模型的建立

本工作建立了单晶 γ -TiAl 合金工件及金刚石刀具的三维仿真模型,如图 1 所示。利用 LAMMPS 进行分子动力学模拟计算,通过 Ovito 进行后处理。为了能够更准确地模拟纳米切削过程中的演化机理,将工件原子分为牛顿层、恒温层及边界层,模拟过程遵循牛顿第二定律。整个系统初始温度保持在 293 K,用恒温层原子来保证系统的热交换,使其更接近真实环境,在弛豫与切削过程中,选择微正则系综(NVE)进行牛顿力学的模拟计算,同时在加工过程中用正则系综(NVT)保证温度的热平衡。金刚石刀具也分为牛顿层、恒温层及边界层。 γ -TiAl 合金纳米切削参数见表 1。

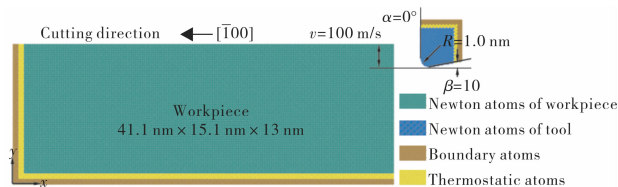


图 1 单晶 γ -TiAl 合金纳米切削模型(电子版为彩图)
Fig. 1 Nanometric cutting model of single crystal γ -TiAl alloy

表 1 γ -TiAl 合金纳米切削模拟参数

Table 1 Modeling parameters of γ -TiAl alloy nanometric cutting

Parameter name	Workpiece	Tool
Material	γ -TiAl	Diamond
The total number of atoms	503424	9 912
Size	41.1 nm x 15.1 nm x 13 nm	/
The rake angle of tool, α	/	0°
The clearance angle of tool, β	/	10°
The edge radius of tool, R	/	1.0 nm
Cutting direction		$[\bar{1}00]$
Cutting speed, v		100 m/s
Time step		0.001 ps
Cutting depth, d		0.5 nm, 1.5 nm, 2.5 nm
Initial temperature		293 K
Potential function		Tersoff (C-C) EAM (Ti-Al) Morse (Ti-C, Al-C)

1.2 原子间势

在分子动力学模拟中,为了得到准确的模拟结果,更好地反映材料的力学性能,通常需要选取合适的原子间势^[14-15]。

本工作选取 Tersoff 势来描述 C-C 原子间的相互作用^[16],刀具中 C 原子的相互作用可表示为:

$$E_c = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \quad (1)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij}) [V_r'(r_{ij}) + b_{ij} V_A(r_{ij})] \quad (2)$$

式中: r_{ij} 为两原子间距; $f_c(r_{ij})$ 为原子间相互作用截断函数; $V_A(r_{ij})$ 为吸引项对偶势; $V_r'(r_{ij})$ 为排斥项对偶势; b_{ij} 为调制函数。

选取 EAM 势来描述 Ti 原子与 Al 原子间的相互作用^[17]。原子 i 的总势能为:

$$E = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{ij(i \neq j)} \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (3)$$

$$\rho_i = \sum_{j(j \neq i)} f_j(r_{ij}) \quad (4)$$

式中: $\phi_{ij}(r_{ij})$ 为原子间排斥力; F_i 为将原子 i 嵌入密度为 ρ_i 的电子云的嵌入能; ρ_i 为除第 i 个原子外其他所有原子核外电子在该原子处产生的电子云密度之和; $f_j(r_{ij})$ 为第 j 个原子核外电子在第 i 个原子处贡献的电荷密度; r_{ij} 为两原子间距。

选取 Morse 势来描述 Ti-C、Al-C 原子之间的相互作用。Morse 势的选择尤为重要, 其值对模拟结果的准确性影响显著。通常, 用式(5)计算 Ti-C 和 Al-C 之间的 Morse 势^[18]:

$$\varphi(r_{ij}) = D[\exp(-2\alpha(r_{ij} - r_0)) - 2\exp(-\alpha(r_{ij} - r_0))] \quad (5)$$

式中: $D(D_{Ti-C}, D_{Al-C})$ 表示结合能系数; $\alpha(\alpha_{Ti-C}, \alpha_{Al-C})$ 表示势能曲线梯度系数; $r_0(r_{Ti-C}, r_{Al-C})$ 表示 Ti-C 以及 Al-C 原子之间

$$\sigma_{von} = \sqrt{\frac{1}{2}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{yy})^2]} + 3(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{xz}^2) \quad (6)$$

式中: $\sigma_{ij}(i, j = x, y, z)$ 表示在 i 平面上平行于 j 方向的应力分量。

2 结果与讨论

2.1 不同切削深度下的微观缺陷演化

图 2 为切削过程中刀具刃口处工件受力情况。切屑原子受到刀具挤压, 沿着刀具前角产生向上的力 F , 同时工件表面及亚表面原子也受到刀具挤压进而产生向下的力 $-F$ 。取工件表面面积为 A 的区域, 在此区域内滑移面面积为 $A/\cos\varphi$ (φ 为滑移面法线与中心轴线夹角), F 在滑移方向上的分力为 $F\cos\lambda$, 则滑移方向上的临界分切应力 τ_s 。如式(7)所示:

$$\tau_s = \frac{F}{A} \cos\lambda \cos\varphi = \sigma_s \cos\lambda \cos\varphi \quad (7)$$

式中: σ_s 为屈服强度, $\cos\lambda \cos\varphi$ 为取向因子。从式(7)可知, 当 $\varphi = \lambda = 45^\circ$ 时, σ_s 最小, 取向因子最大, 分切应力达到最大值 τ_{max} 。因此, 在切削方向和法向方向均呈 45° 的滑移面内产生的切应力最大, 堆垛层错便沿着最大切应力方向的 (111)、(111)、(111) 滑移面演化产生。

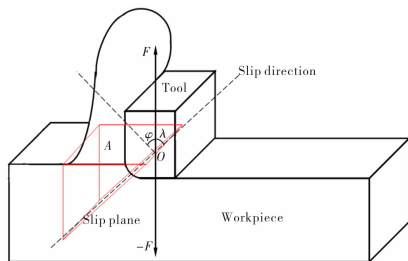


图 2 切削过程中刀具刃口处工件受力情况
Fig. 2 Force of workpiece at tool edge during cutting process

图 3 为不同切削深度下亚表面微观缺陷演化分布, 图 3a、b 和 c 的切削深度分别为 0.5 nm、1.5 nm 和 2.5 nm, 切削距离为 32 nm。利用 Ovito 进行可视化处理, 利用 CNA 技术

的平衡距离; r_{ij} 为两原子间距。得到相应的 D 、 α 、 r_0 等参数, 则可计算得到 Morse 势相关参数, 见表 2^[18-19]。

表 2 所选 Morse 势函数参数

Table 2 Selected parameters in the Morse potential function

	D / eV	α / nm ⁻¹	r_0 / nm
Ti-C	0.982	22.83	0.189 2
Al-C	0.469 1	17.38	0.224 6

1.3 残余应力与 von Mises 应力

在单晶 γ -TiAl 合金纳米切削中, 工件加工后产生的残余应力是由微观缺陷演化引起的。当刀具切削一定距离后, 移除刀具, 对已加工工件进行弛豫处理, 工件内部所剩余应力便定义为残余应力^[12]。

在工件切削过程中, 材料受到刀具挤压而发生变形, 工件表面晶体原子通过切削形成非晶原子, 加工表面发生塑性变形, von Mises 应力是描述这一屈服过程的重要参数, 为了观察 von Mises 应力的分布及不同切削深度对 von Mises 应力的影响, 定义 von Mises 应力见式(6)^[20]:

识别原子, 利用 DXA 技术提取位错。图 3 中白色为工件表面原子和非晶原子, 红色为 HCP (Hexagonal close-packed) 原子, 蓝色为 BCC (Body-centered cubic) 原子。在图 3a 中, 由于切削深度较小, 所以在稳定演化阶段, 不会产生大量层错, 只产生少量空位及肖克莱 (Shockley) 不全位错; 当切削深度为 1.5 nm 时, 在亚表面已经产生了大量的空位簇以及明显的层错现象, 如图 3b 所示; 当切削深度继续增加到 2.5 nm 时, 这种现象更加明显, 如图 3c 所示, 这说明刀具对已加工表面原子的挤压和剪切作用随着切削深度的增加而增加, 导致已加工表面的形变变大, 致使亚表面的缺陷演化更显著。

如图 3 所示, 在亚表面缺陷中, 已加工区域的缺陷主要以位错、空位和堆垛层错居多。由于空位是一种热缺陷, 空位浓度与温度成正比^[21], 所以随着切削深度的增加, 剪切区的温度升高, 导致空位浓度增加。堆垛层错总是在刀具前方的加工区域内不断演化, 并伴随着大量 Shockley 不全位错的生成, 加工区域的缺陷演化随着切削深度的增加越来越剧烈。基于以上结论可以得知, 加工过程中材料的塑性变形是由位错的产生及其迁移引起的, 而切削深度的增加势必会导致塑性变形的增加, 说明切削深度对工件亚表面缺陷的产生有很大的影响, 较小的切削深度在很大程度上减小了亚表面损伤层的厚度, 从而降低了已加工表面的粗糙度, 这也从微观角度阐释了宏观切削通过减少切削深度来优化表面质量的根本原因。

图 4 分别为不同切削深度下 Shockley 不全位错线长度及压杆 (Stair-rod) 位错线长度的变化。随着切削深度的增加, 更大的切削能将应以应变能的形式储存在晶格中, 而较大应变能的释放伴随着位错持续形核和迁移, 致使亚表面位错及堆垛层错等缺陷演化越明显, 位错反应越剧烈, 因此位错线长度增加。图 4a 中, 在切削的初始阶段, Shockley 不全位错的发射标志着工件进入塑性变形阶段, 而随着位错的迁移, 有限的应变能释放使分解于位错迁移方向的切应力不再

增多;同时,伴随着刀具的前进,剪切区域新的位错形核还来不及迁移,旧的位错便由于弹性回复作用而湮灭,使得位错线长度减小。当切削进入稳定阶段,局部位错的形核、迁移、湮灭和相互作用导致位错线长度在一定范围内波动,因此 Shockley 不全位错随着切削的进行呈先增再减后波动的趋势。此外,每次新旧滑移系交替都能够产生新的层错,位错线波峰处新滑移系扩展导致层错产生最多,波谷处旧滑移系收缩导致层错产生最少。

在图 4b 中,由于 Shockley 不全位错相互反应产生的压杆位错线长度在 0~15 nm 之间变化较小,对应图 4a 中 0~

15 nm 阶段,可以看出切削还未进入稳定状态,Shockley 不全位错以迁移和湮灭过程为主,而位错之间的交互作用较少,导致只有少量压杆位错产生。伴随着切削进入稳定阶段,缘于新旧滑移系交替引起位错反应不断进行,使更多的 Shockley 不全位错通过交互作用生成压杆位错。此外,压杆位错为纯刃型位错,其柏氏矢量位于(100)滑移平面上,但工件晶体的滑移面为{111},导致该位错不易滑移,只能攀移,因此该位错无法像 Shockley 不全位错那样在易滑移面上迁移,也不易在弹性回复作用下消失。压杆位错的生成也说明局部缺陷的演化在一定程度上向 Lomer-Cottrell 位错方向转变。

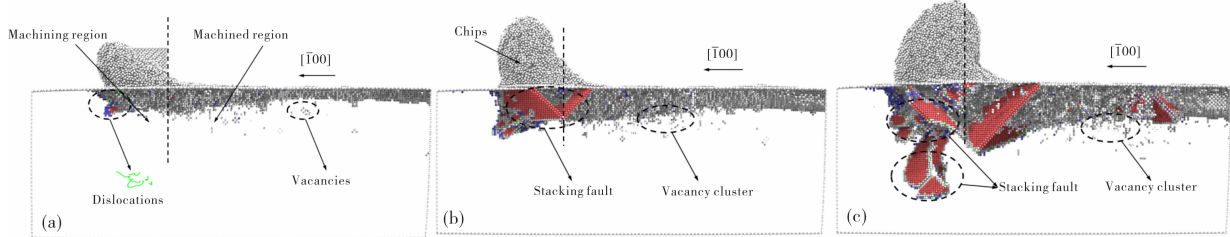


图 3 不同切削深度下工件亚表面的微观缺陷演化:(a)0.5 nm;(b)1.5 nm;(c)2.5 nm
Fig. 3 The evolution of subsurfaces microscopic defects of workpieces at different cutting depths: (a) 0.5 nm; (b) 1.5 nm; (c) 2.5 nm

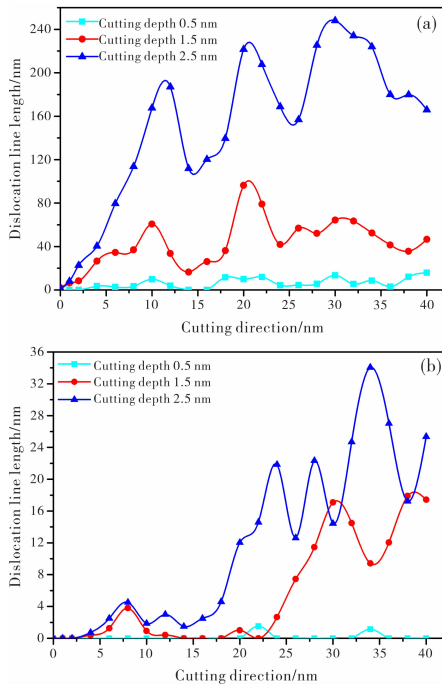


图 4 不同切削深度下位错线长度:(a)肖克莱不全位错线长度;(b)压杆位错线长度
Fig. 4 Dislocation line length at different cutting depths: (a) Shockley incomplete dislocation line length; (b) Stair-rod dislocation line length

图 5 为 Shockley 不全位错生成 Lomer-Cottrell 位错的过程。如图 5a—c 所示,两个不同滑移面上的两个全位错 $\frac{a}{2}[\bar{1}01]$ 和 $\frac{a}{2}[0\bar{1}\bar{1}]$ 发生位错反应,然后在各自的滑移面上分解成不同的扩展位错并互相靠近;从图 5d—f 可知,每个扩展位错中的一个 Shockley 不全位错在滑移面交线靠近相遇时发生位错反应,反应生成一个压杆位错。用汤普森记号来描述整个位错反应过程,如式(8)一式(10)所示:

$$\frac{a}{2}[\bar{1}01] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}\bar{2}] + \frac{a}{6}[\bar{2}11] \quad (8)$$

$$\frac{a}{2}[0\bar{1}\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6}[1\bar{2}\bar{1}] + \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}\bar{2}] \quad (9)$$

$$\frac{a}{6}[\bar{2}11] + \frac{a}{6}[1\bar{2}\bar{1}] \rightarrow \frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}0] \quad (10)$$

图 5f 中压杆位错 $\frac{a}{6}[\bar{1}\bar{1}0]$ 位于两个滑移面的交线处,因此压杆位错与扩展位错中的两个 Shockley 不全位错以及两个层错便形成了一个 Lomer-Cottrell 位错^[22]。

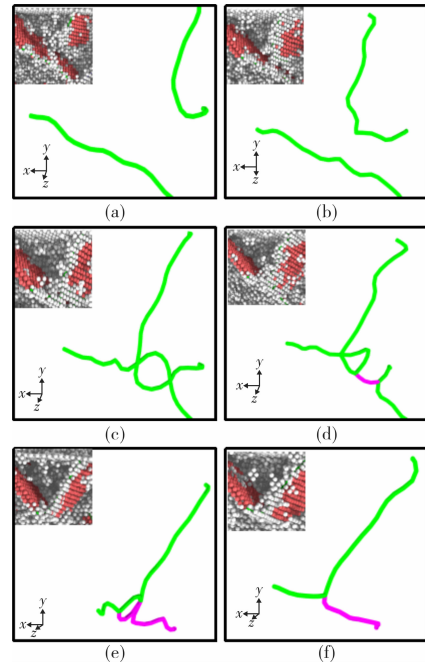


图 5 肖克莱不全位错生成 Lomer-Cottrell 位错的过程(绿色为肖克莱不全位错,紫色为压杆位错):(a)扩展位错形成;(b)肖克莱位错靠近;(c)肖克莱位错相遇;(d)位错反应;(e)压杆位错产生;(f)生成稳定的压杆位错(电子版为彩图)

Fig. 5 Evolution process from Shockley incomplete dislocations to Lomer-Cottrell dislocations (green is Shockley incomplete dislocations, purple is Stair-rod dislocations): (a) extended dislocation generation; (b) Shockley dislocation approaching; (c) Shockley dislocation meets; (d) dislocation reaction; (e) Stair-rod dislocation generation; (f) generate a stable Stair-rod dislocation

2.2 不同切削深度下的切削力变化

切削产生的切削力是衡量切削过程是否达到稳定状态的重要参数,对于研究材料稳定加工状态下力学性能的准确性有重要意义。

图 6 为不同切削深度下切削力的变化情况。由于切削过程中 F_x 的作用方向与 X 轴正方向相同,因此图中取正值。对比图 6a—c,在 $[100]$ 方向,加工初期随着受到挤压作用的工件原子数量的增多,工件对刀具的抗力迅速增大,致使切削力迅速增大,晶体内部初始位错随着原子储能增大而且形核向外发展,会使切削力产生波动。但是加工初期,工件材料的变形量有限,内部形核的位错数量和长度都较小,所以位错形核和初期发展所引起的波动并不能改变切削力总

体的增大趋势;当切削至 15 nm 之后,随着新旧滑移系稳定交替变化,切削力的变化出现明显波动,其波动的主要原因与加工过程中基体原子晶格的变形以及位错的产生、演化和湮灭有关。一方面,切削力逐渐增大并超过基体原子结合键的临界应力值,但不足以形成位错时,原子晶格被破坏,导致原子键断裂,成为非晶态原子,从而引起切削力的瞬时波动;另一方面,因为位错等缺陷的演化导致基体晶格内应变能的储存和释放,从而引起切削力波动。此外,随着切削深度增加,工件与刀具接触面积增加,导致工件对刀具的摩擦抗力增大,剪切区域的位错反应更剧烈,缺陷演化更复杂,因此刀具所受阻碍作用更大,故切削力也随之增大,这与图 3 现象一致。

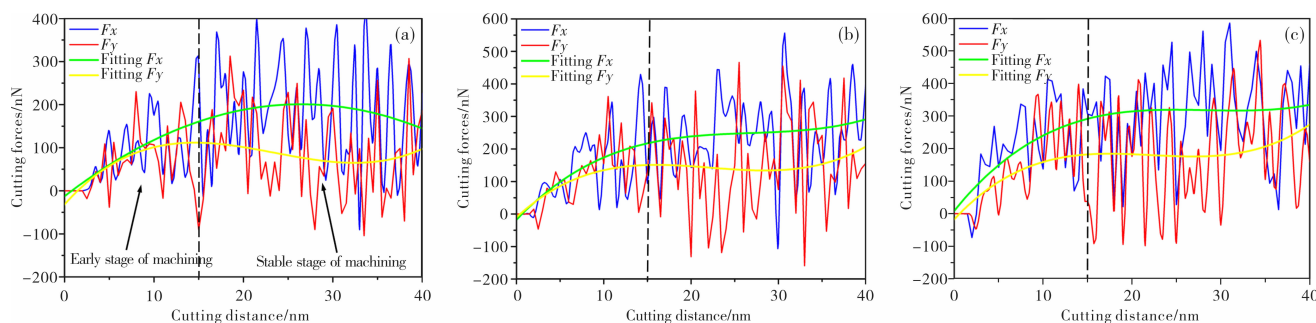


图 6 不同切削深度下切削力的变化:(a) 切削深度为 0.5 nm;(b) 切削深度为 1.5 nm;(c) 切削深度为 2.5 nm(电子版为彩图)
Fig. 6 Change of cutting force at different cutting depths: (a) cutting depth is 0.5 nm; (b) cutting depth is 1.5 nm; (c) cutting depth is 2.5 nm

2.3 不同切削深度下内应力的演变

内应力是影响工件力学性能的一个重要因素。由图 6 可知,当切削到 15 nm 后,切削力进入稳定变化状态,所以研究刀具在 15 nm 后的工件加工过程中的内应力演变,能够比较准确地反映材料纳米加工后的应力分布。

见图 7a,切削深度为 2.5 nm 时,切削后加工表面的内应力分布情况。由于刀具刃口对工件表面的挤压作用,致使已加工表面引入了大量的残余压应力;切削使工件表面部分原子受到刀具挤压作用而发生测流,并沿着切削槽两侧堆积,随着切削的进行,在切削槽两侧形成毛刺。图 7b 为切削后原子在加工表面 $[010]$ 方向的高度变化。可以发现,在工件基体的弹性回复作用下,位错的湮灭过程会在已加工表面两侧形成台阶,导致台阶原子高度高于表面,使工件亚层原子

对台阶原子产生拉应力,从而造成图 7a 中已加工表面两侧引入少量残余压应力。由图 7 可知,单晶 γ -TiAl 合金这一脆性材料加工表面主要形成残余压应力,已加工表面两侧形成的少量残余压应力主要由亚表面层错演化和滑移产生,层错滑移到工件表面边缘的程度与残余压应力的分布相一致。

残余应力是指在没有外力作用的情况下,在物体内部保持平衡而残留的应力,因此选取加工完成进行二次弛豫后的工件来研究不同切削深度下单晶 γ -TiAl 合金内的残余应力。图 8 为不同切削深度下单晶 γ -TiAl 合金亚表面残余压应力在深度方向上的变化。由曲线的变化可知,随着切削深度的增加,残余压应力增大,当切削深度为 0.5 nm、1.5 nm 和 2.5 nm 时,残余压应力最大值分别为 4.214 36 GPa、5.419 57 GPa 和 5.822 24 GPa,这是由于随着切削深度的增加,工件亚表面的缺陷演化越剧烈,从图 3 和图 4 可知,随切削深度增加,位错反应越剧烈,产生的层错越多,对切削阻碍就越大,而且 Shockley 不全位错的交互作用也越剧烈,导致内应力增大。

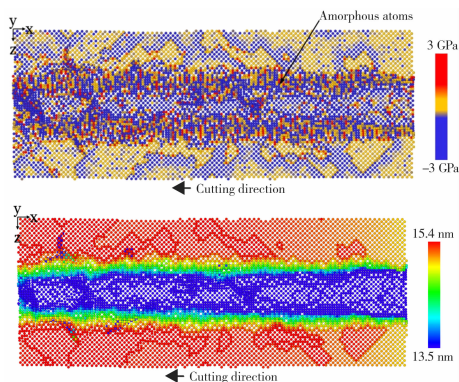


图 7 残余应力在加工表面的分布:(a) 切削后在加工表面的残余应力分布;(b) 切削后原子在加工表面 $[010]$ 方向的高度变化(电子版为彩图)
Fig. 7 Distribution of residual stress on machining surface: (a) distribution of residual stress on machined surface after cutting; (b) the height change of atoms on the machined surface along $[010]$ after cutting

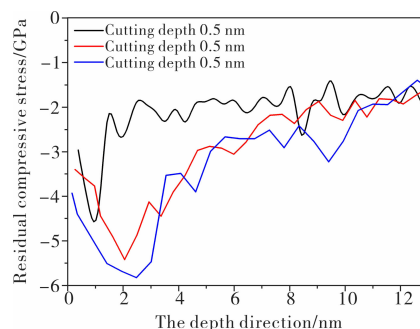


图 8 不同切削深度下残余压应力在深度方向上的变化曲线
Fig. 8 Variation of residual compressive stress in depth direction at different cutting depths

同时残余压应力对一定范围内的亚表面影响较大,随着工件深度的增加,残余压应力增大,随后这种趋势减小,这是由于刀具对加工表面的挤压作用随着工件深度的增加而减小,且亚表面层错演化及位错反应主要在加工表面下方一定深度范围内反应剧烈,随着工件深度的继续增加,缺陷演化程度不再明显,以致内应力减小。

综上所述,内应力演变影响加工后残余应力的大小及分布,而内应力演变则受缺陷演化的影响。切削过程中亚表面不断发生位错形核及扩展,由于位错反应是能量降低的过程,所释放的能量残留于工件内部,同时层错演化对切削过程产生阻碍作用,致使所需外力增大,而外力与位错反应释放大能相互作用,形成了内应力。

2.4 不同切削深度下的 von Mises 应力

图 9a 为切削深度 2.5 nm, 切削距离 32 nm 时的 von Mises 应力分布云图。von Mises 应力沿着 $[\bar{1}00]$ 方向主要分布在工件亚表面的一定范围内,随着工件深度的增加而减小,当切削至 32 nm 时,切削使刀具附近产生了高应力,高应力引诱晶体原子发生相变形成非晶原子,从而使工件屈服发生塑性变形,导致 von Mises 应力在刀具下方增大。图 9b 为不同切削深度下,切削距离为 32 nm 时 von Mises 应力在 $[\bar{1}00]$ 方向上的变化曲线。由于 von Mises 应力衡量的是工件形状变化的剪切变形^[23],在不同切削深度下,刀具刃口半径及切削角度不变,刀具去除材料的方式相同,因此 von Mises 应力在已加工亚表面的应力值均在 22 MPa 附近波动,当切削至 32 nm 时,刀具下方应力最大且最大应力值均在 340 MPa 附近波动,说明切削深度的变化对 von Mises 应力没有明显影响。

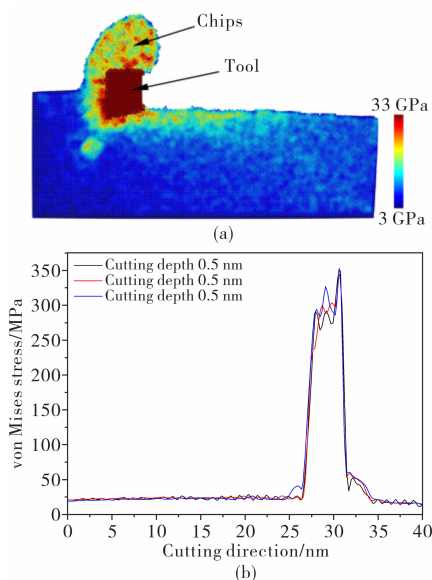


图 9 von Mises 应力分布情况:(a) von Mises 应力分布云图;(b)不同切削深度下 von Mises 应力沿 $[\bar{1}00]$ 方向的分布(电子版为彩图)

Fig. 9 von Mises stress distribution: (a) von Mises stress distribution nephogram; (b) distribution of von Mises stress along $[\bar{1}00]$ at different cutting depths

3 结论

(1) 切削过程中产生的堆垛层错与切削方向 $[\bar{1}00]$ 和法

向方向 $[010]$ 均呈 45° ; 随着切削深度增加,工件亚表面产生的层错演化越明显,位错反应也越来越剧烈;部分 Shockley 不全位错沿着不同 $\{111\}$ 滑移面滑移而发生位错反应生成压杆位错,最终形成 Lomer-Cottrell 位错。

(2) 在切削加工中,切削力受原子晶格变形和亚表面缺陷演化的影响,先迅速增大随后进入稳定阶段,随着切削深度增加,切削力随新旧滑移系交替变化及缺陷演化程度的增大而增大。

(3) 切削过程中刀具刃口对工件表面及亚表面原子产生挤压作用,当内应力演变稳定后,工件内引入的残余压应力在切削方向上的分布受缺陷演化影响,且随着切削深度的增加,加工过程中引入的残余压应力增大。同时随着工件深度的增加,残余压应力在亚表面深度方向呈先增大后减小的趋势,这种趋势与微观缺陷沿深度方向的演化相一致。

(4) von Mises 应力沿着 $[\bar{1}00]$ 方向主要分布在工件亚表面一定范围内,并且会随着工件深度的增加而减小,在刀具下方达到最大值,不同切削深度下最大值均在 340 MPa 附近波动,切削深度对 von Mises 应力无明显影响。

参考文献

- 1 Yao C F, Lin J N, Wu D X, et al. *Chinese Journal of Aeronautics*, 2018, 31(4), 826.
- 2 Liu B, Xu Z, Chen C, et al. *Computational Materials Science*, 2019, 163, 127.
- 3 Fang F Z, Wu H, Zhou W, et al. *Journal of Materials Processing Technology*, 2007, 184(1-3), 407.
- 4 Sharma A, Datta D, Balasubramaniam R. *Computational Materials Science*, 2018, 153, 241.
- 5 Zhang L, Zhao H W, Dai L, et al. *RSC Advances*, 2015, 5(17), 12678.
- 6 Han X L, Liu P, Sun D L, et al. *Tribology International*, 2019, 137, 340.
- 7 Wang Q L, Bai Q S, Chen J X, et al. *Applied Surface Science*, 2015, 344, 38.
- 8 Wang J S, Zhang X D, Fang F Z, et al. *Applied Surface Science*, 2018, 455, 608.
- 9 Feng R C, Qiao H Y, Zhu Z X, et al. *Rare Metal Materials & Engineering*, 2019, 48(5), 1559 (in Chinese).
冯瑞成, 乔海洋, 朱宗孝, 等. *稀有金属材料与工程*, 2019, 48(5), 1559.
- 10 Dai H F, Chen G Y, Zhou C, et al. *Applied Surface Science*, 2017, 393, 405.
- 11 Mylvaganam K, Zhang L. *Computational Materials Science*, 2014, 81(2), 10.
- 12 Wang Y C, Shi J, Ji C H. *Applied Physics A*, 2014, 115(4), 1263.
- 13 Wang M H, You S Y, Wang F N, et al. *Applied Physics*, 2019, 125(3), 176.
- 14 Song H Y, Zha X W. *Rare Metal Materials & Engineering*, 2008, 37(7), 1217 (in Chinese).
宋海洋, 查新未. *稀有金属材料与工程*, 2008, 37(7), 1217.
- 15 Zhang L, Zhao H W, Yang Y H, et al. *Applied Physics A*, 2014, 116(1), 141.
- 16 Gu H Q. Study of crystal aluminum nona cutting mechanism based on molecular dynamics. Master's Thesis, Kunming University of Science and Technology, China, 2015 (in Chinese).
谷汉卿. 基于分子动力学单晶铝纳米切削机理研究. 硕士学位论文, 昆明理工大学, 2015.
- 17 Qi S H. The molecular dynamics study of metallic titanium nanofabrication. Master's Thesis, Shenyang Aerospace University, China, 2013 (in Chinese).
齐顺河. 金属钛纳米加工的分子动力学研究. 硕士学位论文, 沈阳航空航天大学, 2013.

- 18 Zhu Y, Zhang Y C, Qi S H, et al. *Rare Metal Materials & Engineering*, 2016, 45(4), 897.
- 19 Dandekar C R, Shin Y C. *Composites: Part A*, 2011, 42(4), 355.
- 20 Uezaki K, Shimizu J, Zhou L. *Precision Engineering*, 2014, 38(2), 371.
- 21 Tao H J, Sun S P, Zhang C C, et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 2014(11), 2789(in Chinese).
陶辉锦, 孙顺平, 张铨铨, 等. *中国有色金属学报*, 2014(11), 2789.
- 22 Gong Y D, Zhu Z X, Zhou Y G, et al. *Science China (Technological Sciences)*, 2016, 59(12), 1837.
- 23 Graham L W Cross. *Nature Nanotechnology*, 2011, 6(8), 467.
(责任编辑 向秀泚)



Qi Wang, postgraduate, studies at School of Mechanical and Electrical Engineering, Lanzhou University of Technology. His research interests is cutting surface integrity and evaluation methods.

王麒,兰州理工大学机电工程学院硕士研究生,主要从事切削加工表面完整性及评价方法的研究。



Ruicheng Feng, Ph. D., professor, now works at School of Mechanical and Electrical Engineering, Lanzhou University of Technology. His research interests are mechanical system dynamic performance testing and control technology, cutting surface integrity and evaluation methods, and mechanical strength theory.

冯瑞成,工学博士,教授。现在兰州理工大学机电工程学院工作,主要从事切削加工表面完整性及评价方法和机械强度理论等方面的研究。

欢迎投稿、订阅及刊登广告