

单晶 γ -TiAl 合金纳米切削过程的分子动力学模拟

冯瑞成^{1,2}, 乔海洋^{1,2}, 朱宗孝^{1,2}, 李海燕^{1,2}, 闫峰^{1,2}, 宋文渊^{1,2}

(1. 兰州理工大学 机电工程学院, 甘肃 兰州 730050)

(2. 数字制造技术与应用省部共建教育部重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

摘要: 采用分子动力学方法研究单晶 γ -TiAl 合金纳米切削过程, 通过对单晶 γ -TiAl 合金的建模、计算和分析, 讨论了不同切削深度和切削速度对切削过程的影响, 结果发现: 在切削过程中, 随着切削深度的增大, 切屑体积逐渐增大, 切屑中原子排列越来越紧密, 位错密度也会随之增大; 但随着切削速度的增大, 位错密度反而会随之降低。在一定的切削深度和切削速度范围内, 切削过程中刀具前方都会产生“V”型位错环, 工件的温度和势能也都会相应的增大。特别是, 当切削速度为 400 m/s 时, 刀具前方的切削表面上未出现原子错排。

关键词: 单晶 γ -TiAl 合金; 纳米切削; 分子动力学; 位错

中图分类号: TH161; TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2019)05-1559-08

随着社会的快速发展, 纳米技术已经广泛应用于医疗器械、微电子等高科技领域中。微纳米机电元件已经决定了零件的使用性能及寿命^[1], 而宏观和介观上的切削理论将不再适用于微、纳观。分子动力学方法可以揭示传统方法无法观察到的各种现象, 它能够捕获每个原子的位置、速度、应力和能量等演变^[2]。许多学者已针对铜、硅、镍等材料的纳米切削进行了研究, 如: Z. X. Zhu^[3] 等研究了单晶镍纳米加工分子动力学模拟, 结果表明复杂堆垛层错产生是切削力波动的主要原因。Q. Wang^[4] 等研究了单晶铜纳米切削中的表面缺陷结构演化, 结果表明在剪切滑移区的加工表面形成了堆垛层错、空位等缺陷。Y. D. Gong^[5] 等采用分子动力学模拟了单晶镍的纳米切削, 发现切屑原子的非晶态程度及表面下缺陷深度和程度随着加工速度而增加。S. Goel^[6] 等研究了微观结构对硅切削的影响。但对于单晶合金纳米切削机理的研究成果较少。

由于 γ -TiAl 合金具有低密度、良好的高温强度和抗氧化性等优点, 在航空发动机叶片上得到广泛运用^[7,8]。目前 γ -TiAl 合金纳米切削机理方面的研究尚未见文献报道, 为此研究 γ -TiAl 合金的纳米切削具有重要意义。本实验运用分子动力学方法, 研究不同切削深度和切削速度对切削过程中原子结构变化、切屑形成以及位错演化等的影响。本研究成果将为微电子机械、构件等高科技领域制造加工提供理论基础。

1 模型的建立与计算

1.1 模型建立

γ -TiAl 合金具有独特的 $L1_0$ 型面心四方(FCT)晶体结构如图 1 所示, 其晶格常数分别为 $a=b=0.4001$ nm, $c=0.4181$ nm^[9]。纳米切削分子动力学模型如图 2 所示。模型大小为 18 nm \times 11 nm \times 10 nm (X 、 Y 、 Z), 其被切削工件包含 118441 个原子, 金刚石刀具包含 5747 个原子。在模拟过程中整个工件被分为 3 类原子即边界层、恒温层和牛顿层原子。边界层和恒温层原子层的厚度设定为 0.5 nm, 在切削过程中起到固定工件作用; 而恒温层是紧挨着边界层原子, 使温度保持在 293 K; 其余是牛顿层原子, 该原子的运动遵循牛顿第二定律。为了方便研究和计算, 模拟系踪、时间步长分别选取为 NVE 和 1 fs, 此外把金刚石刀具设置为刚性体。

切削速度的选取参考以下文献, 并结合 γ -TiAl 合金的特性进行了拟定。S. U. Hao^[10] 等通过分子动力学模拟铜的加工速度对切屑形成的依赖性, 切削速度选取为 10~2000 m/s; Y. D. Gong^[5] 等研究单晶镍纳米加工分子动力学模拟, 切削速度选取为 100~1200 m/s, 因此, 考虑到模拟计算效率, 本实验切削速度选取为 50, 100, 200 及 400 m/s, 另外切削深度选取为 0.5, 1 及 1.5 nm。

1.2 势函数的选取

分子动力学模拟是否能得到可靠的结果与选取的势函数直接相关, 在模拟过程中需要考虑 Ti-Al、Ti-C、Al-C 之间的相互作用。本研究选取嵌入原子势(EAM)

收稿日期: 2018-05-10

基金项目: 国家自然科学基金 (51665030); 长江学者和创新团队发展计划 (IRT_15R30)

作者简介: 冯瑞成, 男, 1976 年生, 博士, 副教授, 兰州理工大学机电工程学院, 甘肃 兰州 730050, E-mail: frcl@163.com

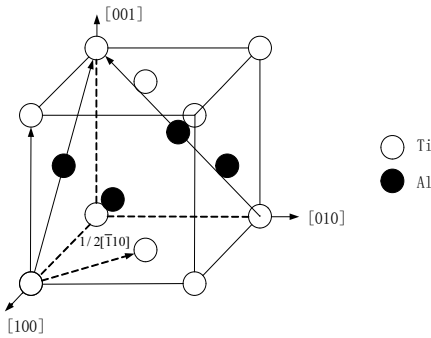


图 1 γ -TiAl 晶格结构

Fig.1 Lattice structure of γ -TiAl

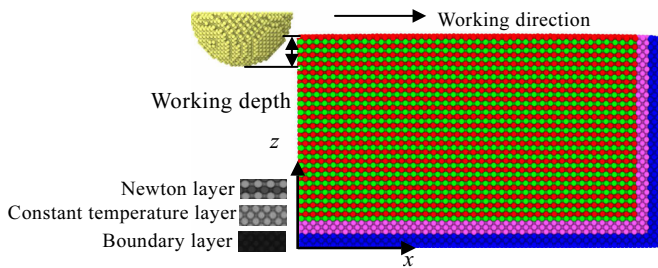


图 2 单晶 γ -TiAl 合金纳米切削分子动力学模型

Fig.2 Nanometric cutting model of single crystal γ -TiAl alloy (Ti atoms are green, Al atoms are red)

描述 Ti-Al 之间的相互作用，其原子的总能量由式(1)给出：

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

式中，等式右边第 1 项 F_i 是原子间电子云密度 ρ_i 的嵌入能函数，其中 ρ_i 是除第 i 个原子以外的所有核外电子在第 i 原子处产生的电子云密度之和，第 2 项 ϕ_{ij} 表示第 i 个原子和第 j 个原子之间的对势作用函数， r_{ij} 是第 i 个原子和第 j 个原子之间的距离^[11]。而 Al-C 和 Ti-C 之间的相互作用采用 Morse 势函数描述，其原子之间的总能量由式(2)给出：

$$E = D[e^{-2\alpha(r_{ij}-r)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r)}] \quad (2)$$

式中， r_{ij} 为第 i 个原子和第 j 个原子之间的距离， D 为结合能， α 为弹性模量系数， r 为平衡态的原子间距。其相关参数为 $D_{Al-C}=0.28$ eV; $\alpha_{Al-C}=27.8$ nm⁻¹; $r_{Al-C}=0.22$ nm; $D_{Ti-C}=0.982$ eV; $\alpha_{Ti-C}=22.83$ nm⁻¹; $r_{Ti-C}=0.1982$ nm^[12]。模拟中采用 Lammmps 软件，而后采用 Ovito 分析和处理模拟结果，对于切削过程中产生的位错等缺陷通过 CSP^[13] (中心对称参数) 技术识别，由式(3)给出：

$$p = \sum_i |R_i + R_{i+6}|^2 \quad (3)$$

式中， R_i 和 R_{i+6} 分别为长度相同、方向相反的两个近邻原子对。

2 结果与讨论

2.1 纳米切削过程分析

图 3 为纳米切削过程中材料去除机理。切削距离为 12 nm，切削速度为 200 m/s，切削深度为 1 nm。可以看出：随着切削距离的增大，工件表面切屑逐渐增大，使切屑原子堆积更加紧密。刀具与工件接触时，工件原子首先发生向前推挤和晶格变形，这是由于随着切削距离的接近，刀具最外层原子和工件最外层原子之间的力由引力逐渐变为斥力，同时工件最外层原子还受工件内部原子的相互作用；随着刀具进一步的移动，刀具与工件之间斥力逐渐增大，在刀具下方的工件原子受到严重的挤压并发生位移变形。随着刀具与工件之间作用力的逐渐增大，工件原子之间结合力较弱，导致与刀具接触的工件原子键断裂，并以原子团形式去除。刀具后方的工件原子发生弹性恢复，形成已加工表面。

众所周知，在没有外力、弹塑性等变化情况下，面心立方晶体结构(fcc)在金属中是稳定相^[14]。但在纳米切削过程中由于刀具的挤压剪切及温度的作用使 fcc 晶体结构转变为 hcp (密排六方)、bcc (体心立方)、dfcc (有缺陷的面心立方)以及 ico (正二十面体)。为了深入研究纳米切削过程中各种晶体结构的转化，对工件表面各种晶体结构的原子数量随切削距离的变化情况进行统计研究。图 4 为工件表面的各种晶体结构数量随切削距离的变化曲线。可以看出：随着切削距离的增大，曲线逐渐呈上升趋势，dfcc 增长最快，原子数最高达 1355；而 ico 增长不明显；因 γ -TiAl 合金中 80%以上都是 fcc，在切削时刀具作用力较大，故产生的 dfcc 数量最多。特别的是，图中 hcp 在切削距离为 9 nm 左右时，原子数量突然下降，在切削距离为 10 nm 时又开始上升，这是由于在切削距离 9 nm 时产生的位错最多，需要消耗能量，因此抑制了 hcp 晶体结构的转变。

为了更直观的理解切削过程中系统温度和势能的变化情况，对系统温度和势能进行统计研究，如图 5 和图 6 所示。图 5 为切削过程中工件牛顿层温度的变化曲线。由于温度和动能存在线性关系，因此用式(4)描述牛顿层的相应温度。

$$T = \frac{\sum_{i=1}^N m_i v_i^2}{3Nk_B} \quad (4)$$

式中， N 为原子数量， k_B 为玻尔兹曼常数， m_i 为原子质量， v_i 为原子速度^[15]。

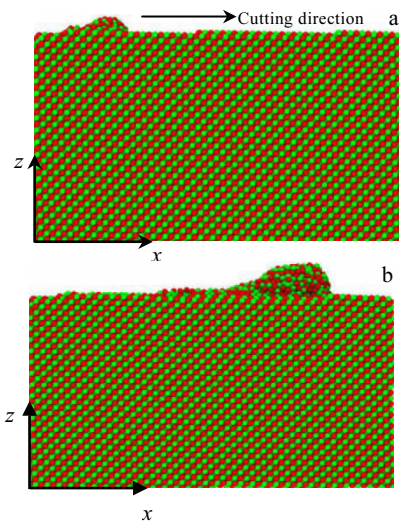


图 3 γ -TiAl 合金纳米切削截面图

Fig.3 Diagram of the cutting process at cutting distances of 3 nm (a) and 12 nm (b)

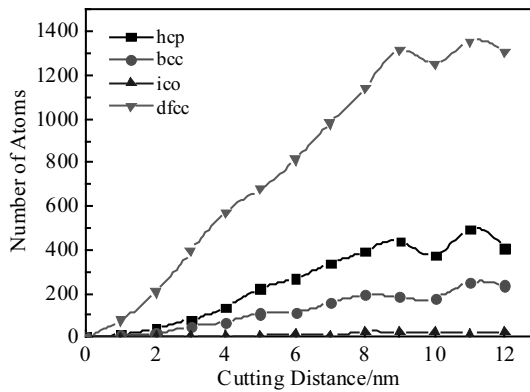


图 4 表面各原子结构数量随切削距离的变化

Fig.4 Number variation of atoms with the cutting distance on the surface

从图 5 可以看出: 切削时温度迅速升高, 这是由于接近刀具的原子受到挤压, 动能增大, γ -TiAl 原子运动剧烈, 从而转换为热能。之后, 随着切削距离的进一步增大, 切削力逐渐增大, 使原子点阵被破坏, 原子键断裂及晶格变形, 从而键能和晶格能被释放, 动能进一步增大, 温度也就随之增大。图 6 为切削过程中势能的变化曲线。可以看出: 随着切削距离的增大, 原子势能逐渐增大, 且增大幅度变的平缓, 这是由于刀具与工件接触逐渐增大, 工件受到刀具挤压、剪切作用, 从而迫使原子发生不规则的挤压变形, 原子键逐渐断裂, 切削刃的耕犁作用以晶格变形能的形式储存在晶格中, 且不断累积, 势能逐渐增大, 与此同时已加工表面的弹性恢复和晶格重构减缓了这种趋势。

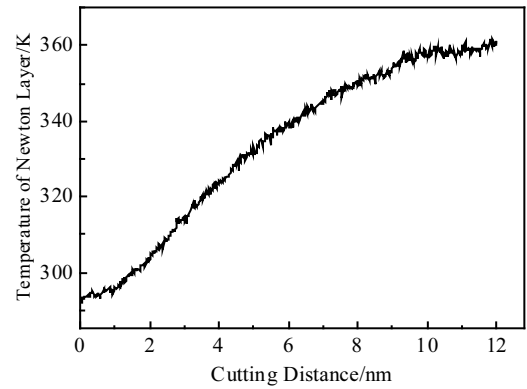


图 5 切削过程中工件牛顿层温度变化曲线

Fig.5 Newtonian layer temperature variation curve of the workpiece in nanometric cutting process

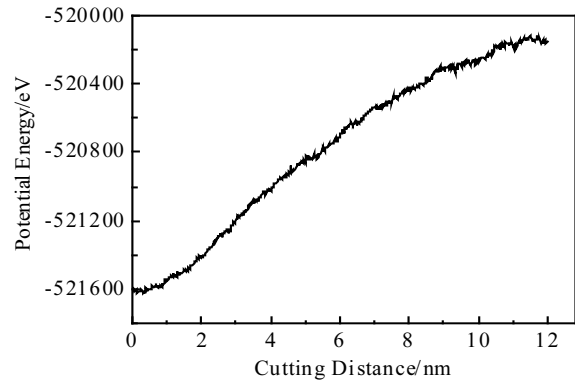


图 6 切削过程中势能变化曲线

Fig.6 Variation curve of system potential energy in nanometric cutting process

为了更好的理解在切削过程中位错的演化情况, 当切削距离为 8 nm 时内部位错如图 7 所示。图中绿色、黄色分别为 Shockley、Hirth 位错。可以看出: 在一定条件下, Shockley 和 Hirth 位错会联结在一起, 形成“交织状”。然而切削时位错一般会产生在刀具前方和下方, 这是由于刀具与工件接触区有很大的高压状态, 使工件受到挤压变形、原子键断裂, 而后形成位错。图中所标记为“V”型位错环, 是由两个 Shockley 不全位错分别向各自的 Burgers 矢量方向滑移运动组成的, 其形成于刀具的前下方。

2.2 切削深度对切削过程的影响

为了分析切削深度对切削过程的影响, 设定的切削深度分别为 0.5, 1 和 1.5 nm, 切削速度为 200 m/s。

当切削距离为 8 nm 时, 切削深度为 0.5 和 1.5 nm 的切削截面如图 8 所示。可以看出: 随着切削深度

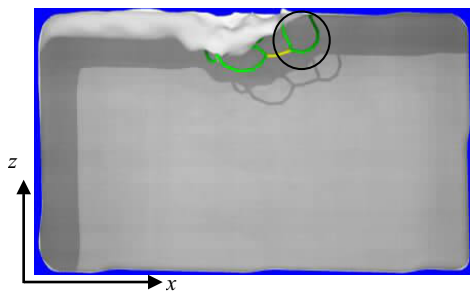


图 7 切削过程中位错

Fig.7 Dislocation in nanometric cutting process

的增大, 刀具与工件接触, 刀具前方切屑都会随之增大。图 8c、8d 中标记的为工件原子错排, 且发生在刀具前方 $\pm 45^\circ$ 左右, 该错排是在切削过程中, 刀具与工件挤压、剪切作用, 使刀具前方工件原子产生一定的滑移形成的。根据 Schmid 法则可知, 在刀具前方 $\pm 45^\circ$ 时, 分解切应力最大, 所以首先在此处发生滑移系滑移。

切削深度不同, 原子结构的变化也不相同, 图 9a、9b、9c 分别为 hcp、bcc、dfcc 原子数量的变化曲线。可以看出: 随着切削距离和切削深度的增大, 晶体结构开始增长较快, 之后变得缓慢, 这是由于刀具与工件的接触、作用力增大, 故晶体结构变形逐渐增大, 随后, 已加工表面弹性恢复及晶格重构又减缓了这种

趋势。当切削深度由 0.5 nm 增大到 1.5 nm 时, hcp 由 57% 增长到 78%, bcc 由 64% 增长到 80%, dfcc 由 61% 增长到 79%, 增长幅度较大, 且这 3 种晶体结构增长相当。

不同切削深度对工件的温度和势能的影响也不相同, 如图 10 和图 11 所示。可以看出: 随着切削深度和切削距离的增大, 曲线开始增长较快, 随后增长变得缓慢, 且温度与势能相对应。这是由于刀具与工件接触面积增大, 挤压变形的原子逐渐增多, 因此 γ -TiAl 合金中原子的动能储存增大, 相对应的势能和温度就随之增大, 但弹性恢复和晶格重构又影响并减缓了这种趋势。

当切削距离为 8 nm 时, 不同切削深度对位错的影响如图 12 所示。12a、12b、12c 是切削深度分别为 0.5, 1 和 1.5 nm 的工件内部位错分布图, 绿色和黄色分别为 Shockley、Hirth 位错。可以看出: 随着切削深度的增大, 位错数量逐渐增多及位错长度逐渐增大。这是由于随着切削深度的增大, 刀具与工件接触、挤压变形及温度逐渐增大, 而室温下 γ -TiAl 属于脆性材料, 随着温度的升高, 材料会有一些的软化现象, 因而位错数量和长度会有一些的增加。图 12a 中位错数量分别为 2 个 Shockley 和 1 个 Hirth 位错, 其长度为 2.788 和 1.628 nm; 图 12b 中位错数量分别为 6 个 Shockley 和一个 Hirth 位错, 其长度为 11.378 和 1.081 nm; 图 12c 中位错数量分别为 5 个 Shockley 和 1 个 Hirth 位错,

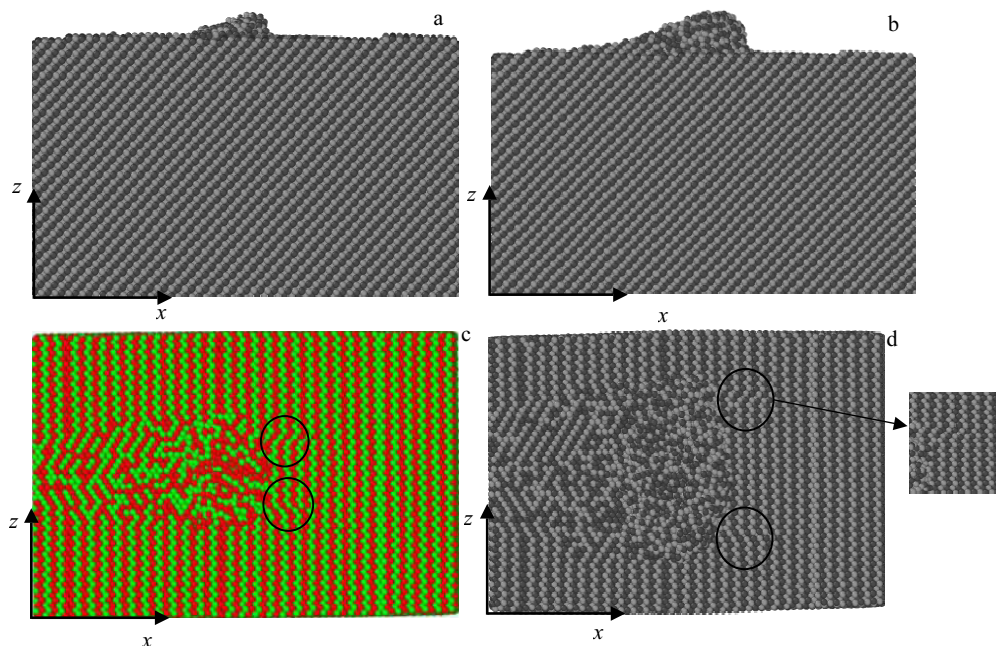


图 8 不同切削深度的切削截面图

Fig.8 Cutting sections of different cutting depths: (a, c) 0.5 nm and (b, d) 1.5 nm

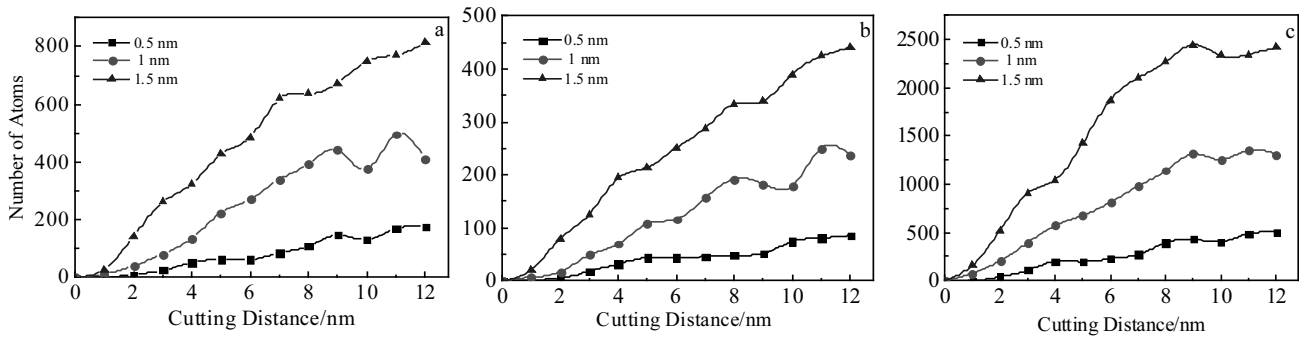


图 9 不同切削深度时晶体结构的变化曲线

Fig.9 Variation curves of crystal structure at different cutting depths: (a) hcp, (b) bcc, and (c) dfcc

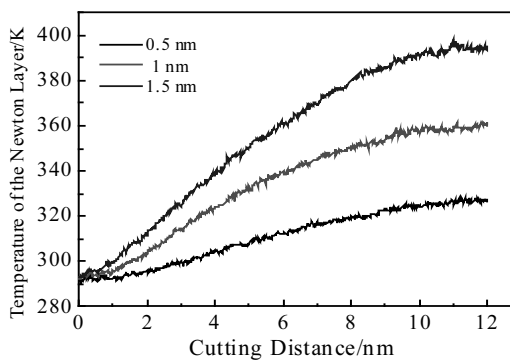


图 10 不同切削深度时温度的变化曲线

Fig.10 Variation curves of the temperature at different cutting depths

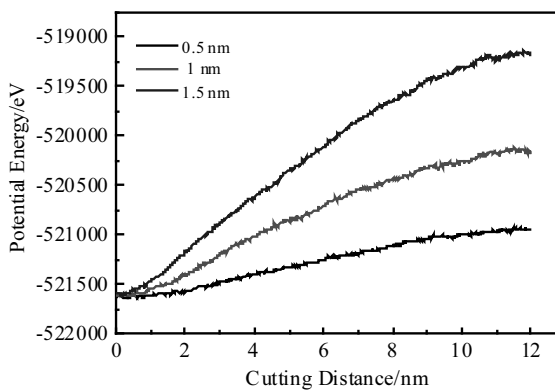


图 11 不同切削深度时势能的变化曲线

Fig.11 Variation curves of the potential energy at different cutting depths

其长度为 10.217 和 2.635 nm。由位错理论可知: 位错密度为单位体积中位错线总长度, 由式(6)给出:

$$\rho = \frac{\sum L}{V} \quad (6)$$

式中: ρ 为位错密度(nm^{-2}), $\sum L$ 为位错线总长度(nm),

V 为体积(nm^3)^[16]。计算出不同切削深度的位错密度分别为 0.236%、0.667%和 0.687%, 由此可见在切削过程中, 位错在一定条件下几乎会达到饱和状态。另外, 在切削过程中, 这 3 种切削深度都会形成“V”型位错环, 即图中标记, 且“V”型位错环的长度随着切削深度而相应的增大。

2.3 切削速度对切削过程的影响

为了分析切削速度对切削过程的影响, 设定的切削速度分别为 50, 100, 200 和 400 m/s, 切削深度为 1 nm。

当切削距离为 8 nm 时, 切削速度为 50 m/s 到 400 m/s 的切削截面如图 13 所示。可以看出: 随着切削速度的增大, 刀具前方切屑原子堆积更加紧密。从模拟步数可看出, 切屑速度从 50 到 400 m/s 加工效率提高了数倍, 且加工表面质量也相应提高, 图 13c 所标记为工件原子错排, 而图 13d 中标记没有发生原子错排, 这是由于随着切削速度的增大, 刀具与工件作用力增大到一定程度反而会减小, 这与常规高速切削保持一致。

切削速度不同, 原子的结构变化也不相同, 如图 14 所示。14a、14b、14c 分别为 hcp、bcc、dfcc 原子数量的变化曲线。可以看出: 随着切削距离和切削速度的增大, 晶体结构的原子数量逐渐增大, 其中图 14c 的晶体结构转变数量最多, 而图 14b 的晶体结构转变数量最少; 当切削速度由 50 m/s 增大到 200 m/s 时, 3 种晶体结构转变数量逐渐增大, hcp 和 bcc 增长幅度较大, 而 dfcc 增长幅度较小, 当切削速度由 200 m/s 增大到 400 m/s 时, 晶体结构转变数量反而会降低, 这是由于切削速度超过一定的数值后, 刀具与工件之间的作用力会减弱, 因此会抑制晶体结构的转变; 随着切削距离的增大, 晶体结构数量波动变大, 这是由于切削过程中产生的位错逐渐增多及位错环逐渐增大, 之后位错又开始演化、湮灭, 继而循环往复, 且在切削过程中还有晶格重构, 因此这两者对晶体结构的转变起到主要抑制作用。

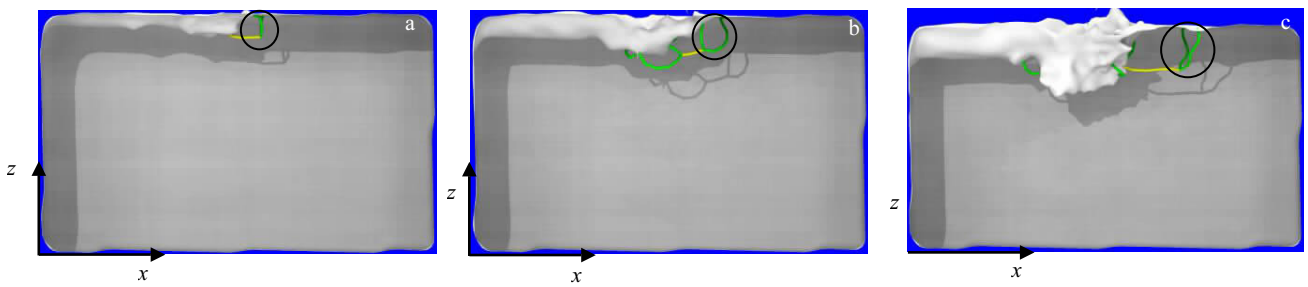


图 12 不同切削深度对位错的影响

Fig.12 Effect of different cutting depths on dislocation: (a) 0.5 nm, (b) 1 nm, and (c) 1.5 nm

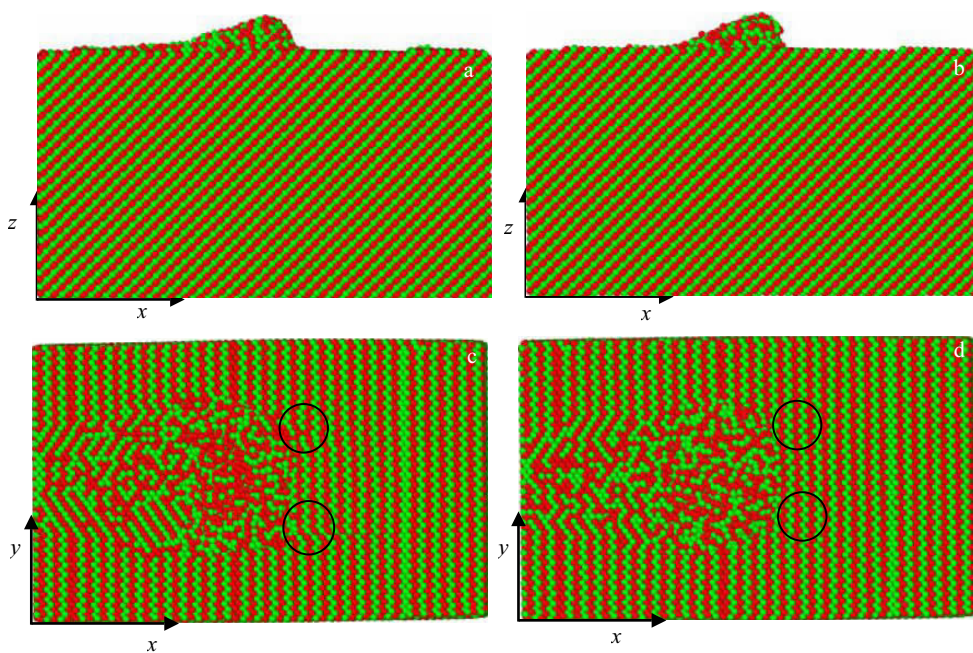


图 13 不同切削速度的切削截面图

Fig.13 Cutting sections of different cutting speeds: (a) 50 m/s, (b) 100 m/s, (c) 200 m/s, and (d) 400 m/s

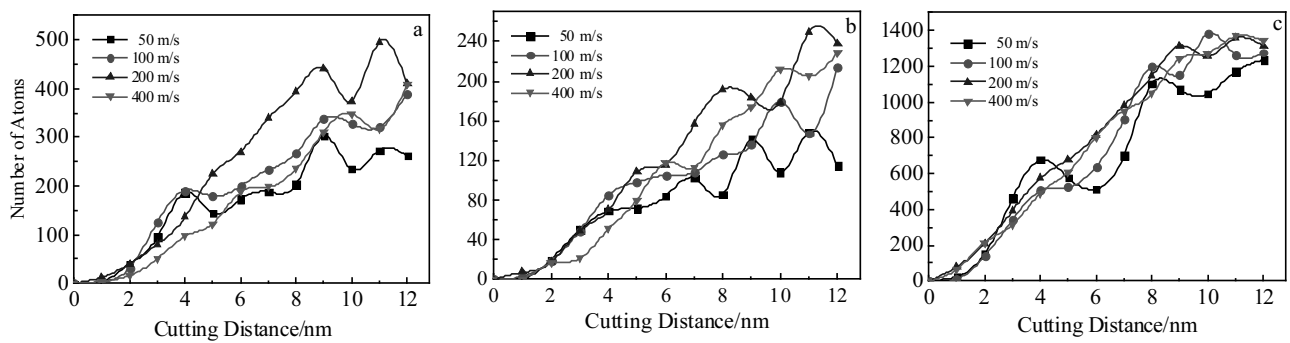


图 14 不同切削速度时晶体结构的变化曲线

Fig.14 Variation curves of crystal structure at different cutting speeds: (a) hcp, (b) bcc, and (c) dfcc

不同的切削速度对工件的温度和势能的影响也不相同, 如图 15 和图 16 所示。可以看出: 随着切削距离和切削速度的增大, 温度和势能曲线逐渐增大, 且温度与势能相对应。切削速度越高, 温度与势能越难趋于稳定。这是由于切削速度越高, 弹性恢复和晶格重构原子相对减少, γ -TiAl 原子之间温度和势能相对较大。

当切削距离为 8 nm 时, 不同切削速度对位错的影响如图 17 所示。17a、17b、17c、17d 是切削速度分别为 400, 200, 100 和 50 m/s 的工件内部位错分布图, 绿色、黄色和红色分别为 Shockley、Hirth 和 Other 位错, 图 17d 所标记为 Frank 不全位错。可以看出: 随着切削速度的增大, 位错数量及位错长度逐渐减少, 这是由于切削速度太快, 位错演化、反应等还未来得及扩展就以切屑形式去除, 但最终都在刀具前面形成大小不同的“V”型位错环即图中标记。图 17a 中位错数量分别为 2 个 Shockley 和 1 个 Other 位错, 其长度为 2.349 和 1.187 nm; 图 17b 中位错数量分别为 6 个 Shockley 和 1 个 Hirth 位错, 其长度为 11.318 和 1.049 nm; 图 17c 中位错数量分别为 11 个 Shockley 和 1 个 Hirth 位错, 其长度为 15.21 和 2.457 nm; 图 17d 中位错数量分别为 11 个 Shockley、1 个 Hirth、1 个 Frank 以及 3 个 Other 位错, 其长度分别为 13.342, 3.013, 0.742 和 3.786 nm。计算出切削速度为 50, 100, 200 和 400 m/s 的位错密度分别为 1.117%, 0.944%, 0.661%和 0.189%, 由此可见, 随着切削速度的增大, 位错密度逐渐降低, 这与 Y. B. Guo 等研究相一致^[17]。

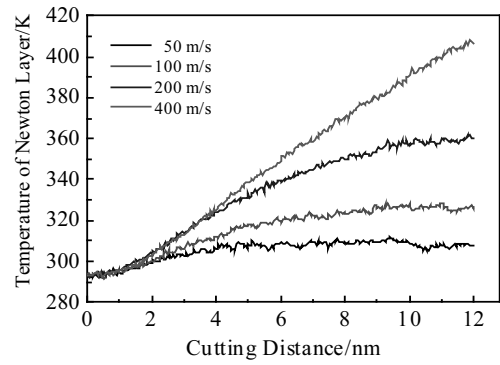


图 15 不同切削速度时温度的变化曲线

Fig.15 Variation curves of temperature at different cutting speeds

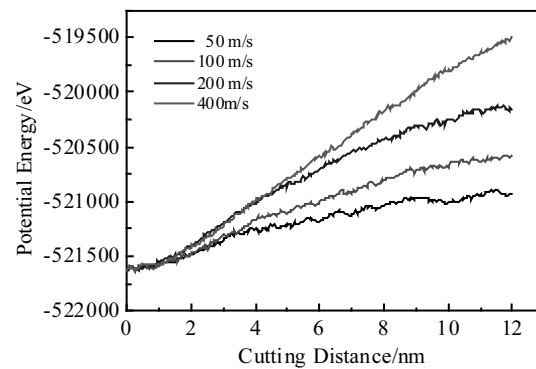


图 16 不同切削速度时势能的变化曲线

Fig.16 Variation curves of potential energy at different cutting speeds

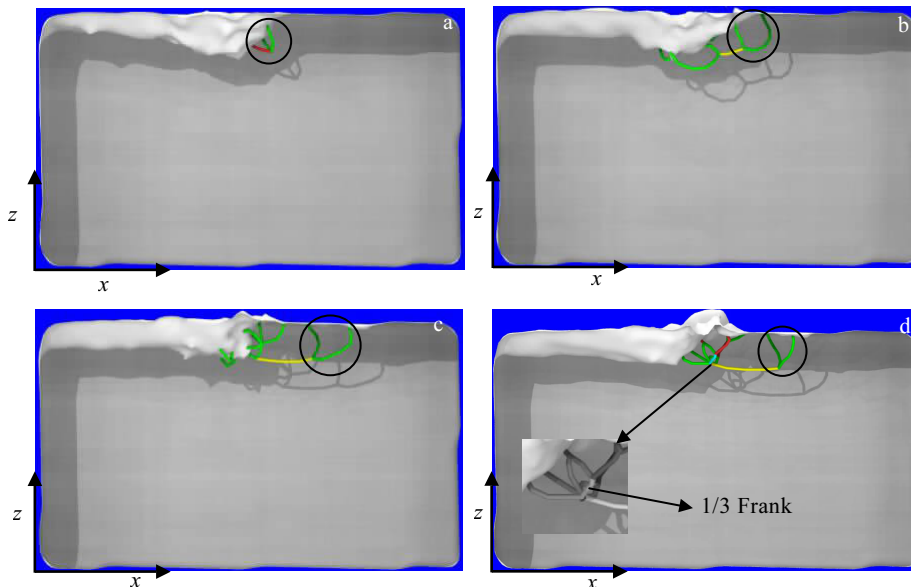


图 17 不同切削速度对位错的影响

Fig.17 Effect of different cutting speeds on dislocation: (a) 400 m/s, (b) 200 m/s, (c) 100 m/s, and (d) 50 m/s

3 结 论

1) 随着切削深度和切削速度的增大, 刀具前方切屑逐渐增大, 在一定的切削深度范围内, 刀具前方表面都会产生原子错排, 而切削速度为 400 m/s 时却没有产生原子错排。

2) 随着切削深度和切削速度的增大, hcp、bcc、dfcc 晶体结构的转变数量随之增大, 其中切削速度为 200 m/s 时, 晶体结构转变数量最大; 工件温度和势能都会相应的增大, 当切削速度为 400 m/s 时成线性增长。

3) 随着切削深度的增大, 位错数量、位错长度及位错密度都会相应的增大, 而随着切削速度的增大, 位错数量、位错长度及位错密度都会相应的降低, 在一定的切削深度和切削速度范围内, 切削过程中都会产生“V”型位错环。

参考文献 References

- [1] Chen M J, Xiao G B. *Scientia Sinica Technologica*[J], 2010, 53(12): 3161
- [2] Wang Y, Shi J, Ji C. *Applied Physics A*[J], 2014, 115(4): 1263
- [3] Zhu Z X, Gong Y D, Zhou Y G et al. *Scientia Sinica Technologica*[J], 2016, 59(6): 867
- [4] Wang Q, Bai Q, Chen J et al. *Applied Surface Science*[J], 2015, 344: 38
- [5] Gong Y D, Zhu Z X, Zhou Y G et al. *Scientia Sinica Technologica*[J], 2016, 59(12): 1
- [6] Goel S, Kovalchenko A, Stukowski A et al. *Acta Materialia*[J], 2016, 105: 464
- [7] Appel F, Clemens H, Fischer F D. *Progress in Materials Science*[J], 2016, 81: 55
- [8] Schwaighofer E, Rashkova B, Clemens H et al. *Intermetallics*[J], 2014, 46: 173
- [9] Tang F L, Cai H M, Bao H W et al. *Computational Materials Science*[J], 2014, 84: 232
- [10] Hao S U, Tang Q H. *Scientia Sinica Technologica*[J], 2014, 57(12): 2426
- [11] Zope R R, Mishin Y. *Physical Review B*[J], 2003, 68(2): 366
- [12] Zhu Ying(朱 瑛), Zhang Yincheng(张银成), Qi Shunhe(齐顺河) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2016, 45(4): 897
- [13] Kelchner C L, Plimpton S J, Hamilton J C. *Physical Review B*[J], 1998, 58(17): 11 085
- [14] Rao S I, Varvenne C, Woodward C et al. *Acta Materialia*[J], 2017, 125: 311
- [15] Goel S, Luo X, Agrawal A et al. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*[J], 2015, 88: 131
- [16] Hull D, Bacon D J. *Introduction to Dislocations, Fifth Edition*[M]. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2011
- [17] Guo Y B, Liang Y C. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*[J], 2012, 22(11): 2762

Molecular Dynamics Simulations of Single Crystal γ -TiAl Alloy in Nanometric Cutting Process

Feng Ruicheng^{1,2}, Qiao Haiyang^{1,2}, Zhu Zongxiao^{1,2}, Li Haiyan^{1,2}, Yan Feng^{1,2}, Song Wenyan^{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 730050, China)

Abstract: Molecular dynamics simulations were employed to study the nanometric machining process of single crystal γ -TiAl alloy. The influences of different cutting speeds and cutting depths on nanometric cutting process of single crystal γ -TiAl alloy were discussed by molecular dynamics modeling, calculation and analysis. The results show that the accumulated volume of chips increases with the cutting depth increasing in nano-cutting process; at the same time the atoms in the chip stack are tighter and the dislocation density is increased. However, the dislocation density is decreased with the cutting speed increasing. In a certain range of cutting depth and speed, in front of the tool will produce “V”-type dislocation ring of the cutting process, and the temperature and potential energy of the workpiece will increase correspondingly. When the cutting speed is 400 m/s, in particular, there is no atomic misalignment on the cutting surface in front of the tool.

Key words: single crystal γ -TiAl alloy; nanometric cutting; molecular dynamics; dislocation

Corresponding author: Qiao Haiyang, Candidate for Master, School of Mechanical and Electronical Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, P. R. China, E-mail: 244294726@qq.com