

单晶 γ -TiAl 合金纳米切削过程声发射响应的原子模拟

姚永军¹, 冯瑞成^{1,2}, 张 隽¹, 曹 卉^{1,2}, 李海燕^{1,2}, 雷春丽^{1,2}

(1. 兰州理工大学 机电工程学院, 甘肃 兰州 730050)

(2. 兰州理工大学 数字制造技术与应用教育部重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

摘 要: 本工作采用分子动力学方法研究了单晶 γ -TiAl 合金纳米切削过程的声发射响应。从原子尺度阐述了单晶 γ -TiAl 合金切削过程中裂纹形成机理。研究发现: 切削初期随着切削力持续增大, 剪切区域产生周期性的剪切带; 与此同时, 在高压应力和弹性应力波共同作用下, 类晶粒晶界的非晶原子带的产生阻碍了剪切带的持续发射, 使主剪切区的应力无法及时通过剪切带释放, 产生局部应力集中现象, 导致裂纹萌生并扩展; 通过对采集的声发射信号分析, 压应力会导致切削过程中声发射功率下降。在时域上, 通过对微观缺陷演化和声发射功率-频率对比分析, 阐述了纳米切削过程中晶格振动、剪切带以及裂纹萌生与扩展的声发射响应特征, 并通过聚类分析得到了损伤的功率和频率特性。

关键词: 纳米切削; 声发射; 单晶 γ -TiAl 合金; 分子动力学

中图分类号: TH161

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2022)07-2467-08

γ -TiAl 合金具有低密度、高弹性模量和抗高温氧化等优点, 近年来得到越来越广泛的应用^[1]。目前已在航空航天领域、汽车进/排气阀和涡轮增压器转子、压气机高压叶片等领域得到初步应用^[2-4]。然而, 由于 γ -TiAl 合金具有室温脆性和难加工性, 在切削加工中易产生残余拉应力、裂纹、各向异性^[5]等问题, 其中裂纹直接影响产品的疲劳特性和服役性能。目前, 对脆性材料加工过程中缺陷与裂纹检测常采用声发射检测技术。声发射检测技术作为一种实时的无损检测手段, 在现代各个领域已经得到了广泛应用。声发射 (acoustic emission, AE) 是指材料中局域源快速释放能量产生瞬态弹性波的现象, 有时也称为应力波发射^[6]。此种应力波可以反映材料内部的物理特性、结构损伤及材料在应力作用下的变形与裂纹的萌生扩展等, 这种与损伤直接相关的源被称为声发射源^[7], 不同的声发射源具有不同的时频特征。

近年来对声发射源的研究表明, 声发射源主要包括位错滑移、形变孪生、晶界滑移、裂纹萌生等^[8,9]。Bohlen 等人^[10]研究了镁合金的变形行为, 声发射正是来源于材料的不可逆结构变化造成的短暂弹性变形波, 通过实验发现主要的声发射来源是滑移孪生。同时, Vinogradov 等人^[11]通过实验推测声发射的大部分能量

来源于位错的减少, 其中包括: 符号相反的位错相遇、位错遇到位错环而湮灭和位错进入自由界面并湮灭; 并且在实验中观察到大量的声发射只出现在小的变形中, 而大量符号相反的位错相遇只有在大的变形中发生。

然而, 受到纳米加工技术的局限, 使用现有的实验手段难以达到理想结果。在这种情况下, 分子动力学 (MD) 模拟已被证明在纳米切削领域是一种有效的方法^[12,13]。现阶段通过 MD 模拟纳米切削的对象主要是塑性材料和脆性材料, 如铜^[14]和碳化硅^[15], 纳米切削主要针对的是切削机理^[16,17]和表面完整性的研究^[18,19]。而关于分子动力学模拟原子尺度损伤检测的补充理论和实验研究成果不足。分子动力学模拟是研究扰动体系和限制体系最有效的手段, 由于导电电子的转移, 其相互作用只能选用多体势来表达, 采用了插入原子 (EAM) 势, 研究声子传播和位错缺陷之间的关系, 并且引入单个位错之后发现, 每次引入单个不全位错时可以看到应力释放及出现尖锐的屈服点等, 证明了通过分子动力学研究声发射的可行性^[20-23]。同时, Nikonov 等人^[24,25]也通过分子动力学模拟金属加载过程中声发射信号对其分析。研究发现原子尺度的声发射是由势能和动能的变化决定的, 晶格原子发生位移并形成更多的缺陷构型, 即涉及塑性变形的材料体积

收稿日期: 2021-07-05

基金项目: 国家自然科学基金 (52065036); 甘肃省自然科学基金 (20JR5RA448); 兰州理工大学红柳一流学科建设项目

作者简介: 姚永军, 男, 1994 年生, 硕士生, 兰州理工大学机电工程学院, 甘肃 兰州 730050, E-mail: yaoyj@lut.edu.cn

增加；产生的声发射信号由具有不同频率和振幅的不同分量组成，高的声发射信号振幅给出了低频分量。Filippov 等人^[26]为了揭示精细车削过程中工件颤振的声发射响应，通过实验和分子动力学模拟进行了对比研究，得到了声发射信号幅值、中值频率和功率谱的实验相关性，仿真结果与实验结果基本一致。因此，通过分子动力学模拟纳米切削过程中的声发射响应具有较强的可行性。

基于现有的理论与文献，针对纳米切削过程的损伤检测鲜有研究。单晶 γ -TiAl 合金作为典型的难加工脆性材料，在切削过程中不可避免地会引入一些缺陷。因此，在微纳切削加工过程中损伤变形检测变得极其重要。为此，本研究利用 MD 模拟单晶 γ -TiAl 合金纳米切削过程的声发射响应，分析一定参数下纳米切削过程中裂纹的形成机理，提取并分析材料变形过程中的声发射信号，阐述 γ -TiAl 合金纳米切削过程中的声发射响应。

1 仿真过程与方法

1.1 MD 模型

如图 1 所示，该模型包含约 90 万个原子，切削参数如表 1 所示。将刀具建模为不可变形体，沿 Z 方向采用周期边界条件。工件分为 3 层，包括：(1) 牛顿层，在原子之间执行牛顿第二定律；(2) 边界层，位于工件底部和左端，防止原子移出边界；(3) 以上 2 层之间设有恒温层，以吸收切削时产生的热量。采用恒定原子数，恒定体积和恒定温度的正则系综 (NVT)^[27]对模型进行仿真，并利用前端恒温器在 1 K 下对模型平衡 90 ps。由于温度会影响分子热激活导致工件内部原子剧烈运动，故选择模拟温度为 1 K。嵌入原子法 (EAM)^[28]势能准确地描述金属原子间的相互作用，它是金属和合金中应用最广泛的原子间势。而 Morse^[29]是一种典型的基于双原子理论的势模型，能很好地逼近原子振动的精细结构。因此，仿真采用嵌入原子法势来描述 Ti-Al 原子间的相互作用，Morse 描述 Ti-C 与 Al-C 的相互作用。MD 仿真使用 LAMMPS 软件进行。此外，刀具和工件原子间较强相互作用对原子体积压缩明显，对工件变形过程有较大影响。为此，采用 Voronoi 算法^[30]计算原子体积，为应力计算和声发射信号提取提供更为精确的值。

1.2 信号处理

在切削过程中，声发射的传播模式为应力波发射，因此其信号采集提取，信号采集频率为 100 GHz。考虑裂纹萌生和扩展，选择总切削距离为 30 nm，并且为了对比声波传递的变化规律，切削深度为 30 nm 时，选择 35 和 25 nm 各分布 4 个信号点。同时，为了讨论声波的传递，在 10 nm 深度下也布置 4 个信号点。因

此，分布 3 层共计 12 个信号点。每次均对这 12 个点进行信号提取，如图 1 中蓝色圆点所示，即 $P_i(i=1, 2, \dots, 12)$ 。在纳米尺度下，由于产生的信号在晶格传递的过程中有较大的损耗，每次提取都会对所有信号做一次平均，以减小随机过程带来的影响。然后将信号通过韦尔奇估计^[31]计算其功率密度函数 (power spectral density, PSD) $G_i(f)$ ，计算声发射功率：

$$E = \int_{f_{\min}}^{f_{\max}} G(f)df \quad (1)$$

并做归一化处理：

$$\tilde{G}(f) = G(f)/E \quad (2)$$

再通过：

$$\int_0^{f_m} G(f)df = \int_{f_m}^{\infty} G(f)df \quad (3)$$

计算中频。不同的声发射种类具有不同的波形以及对应的 PSD。

2 仿真结果

2.1 脆性加工引起的工件损伤

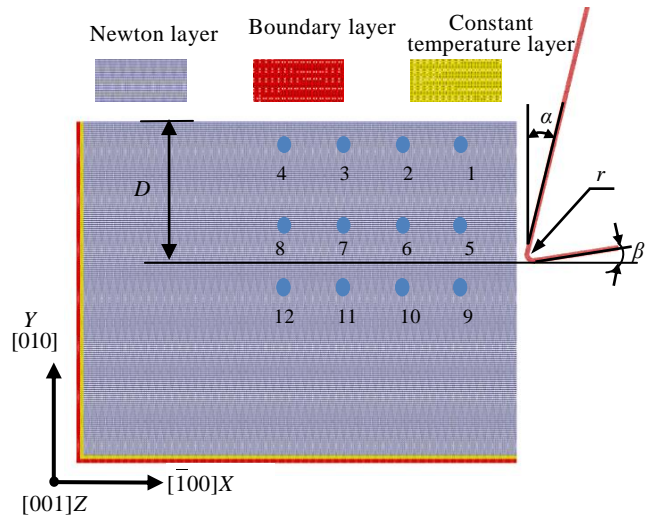


图 1 γ -TiAl 合金纳米切削模型

Fig.1 Nano-cutting model of γ -TiAl alloy

表 1 模拟切削参数

Table 1 Simulated cutting parameters	
Cutting tool material	Single crystal diamond
Workpiece dimensions, $L_1 \times L_2 \times L_3/\text{nm}$	100×70×2
Tool edge radius, r/nm	2
Cutting depth, D/nm	30
Rake angle, $\alpha/(\circ)$	15
Back angle, $\beta/(\circ)$	8
Cutting speed/ m s^{-1}	100
Cutting direction	$\bar{[100]}$
Time step/ps	0.001
Temperature/K	1

在切削过程中,为降低刀具与工件原子在初始状态下的相互作用,将刀具置于工件右侧 2 nm 处。基于所选切削深度 (D) 和刀具刀尖半径 (r),较大的刀具相对锐度 (D/r),使得材料去除过程类似于剪切模型。加工初始阶段,刀具接触到工件用时为 20 ps,之后工件在刀具挤压作用下发生弹性变形。直至切削应力超过弹性极限,大约持续 10 ps,工件进入屈服阶段后,伴随着剪切带 S_1 的形成,剪切区产生了第 1 条 Shockley 位错,如图 2 所示。同时,工件内部产生了更大的压应力,使刀具尖端塑性变形区域产生了更多的位错形核点。

在切削进行到 58 ps 之后,刀具前端高应变区域沿易滑移方向先后形成剪切带 S_1 和 S_2 ,均与 X 的负半轴成 -45° 角,如图 3 所示。其中,剪切带 S_1 是由刀具

与工件原子之间较大的接触应力沿剪切面释放所产生的。而 S_2 是由于纳米切削的不连续性,切削力产生的应力波以晶格振动的方式传递,沿着切削方向传递的过程中遇到了晶格阻塞,随之在易滑移面产生的剪切带。随着剪切带 S_1 、 S_2 的发射,2 个应力释放的尖端均产生了 Shockley 位错,这表明剪切带的形成与位错的迁移过程具有一致性。伴随切削力的持续传递,剪切带 S_1 持续增长。在 65 ps 时,新产生的剪切带 S_3 使得刀具前端产生的高压应力得以释放,导致 S_2 没有足够的应力继续传递增长,对应位错只能消耗应变能向表面迁移,如图 4 所示。此时,由于剪切带 S_1 和 S_2 的产生具有间隔性,均伴随对应 Shockley 位错的滑移进行不同程度的增长。

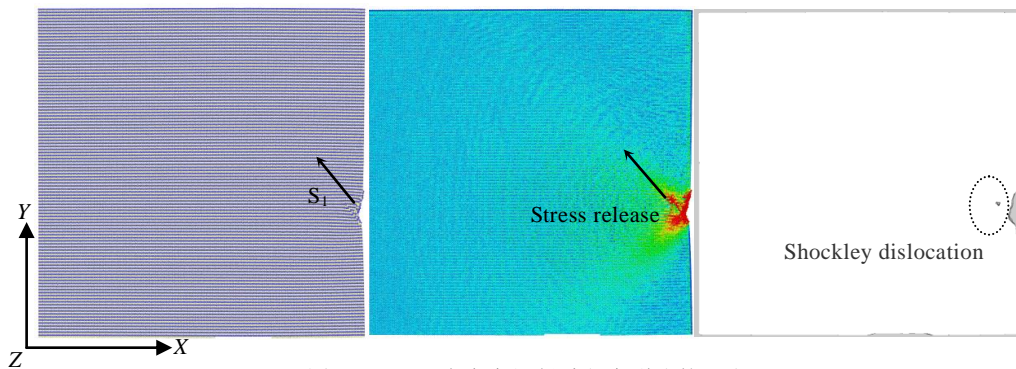


图 2 γ -TiAl 合金在切削过程中裂纹的形成

Fig.2 Crack formation in γ -TiAl alloy during cutting process (30 ps)

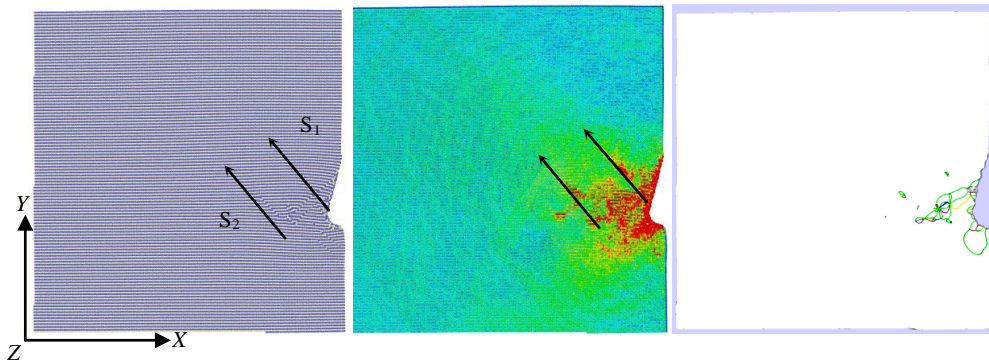


图 3 γ -TiAl 合金在切削过程中裂纹的形成

Fig.3 Crack formation in γ -TiAl alloy during cutting process (58 ps)

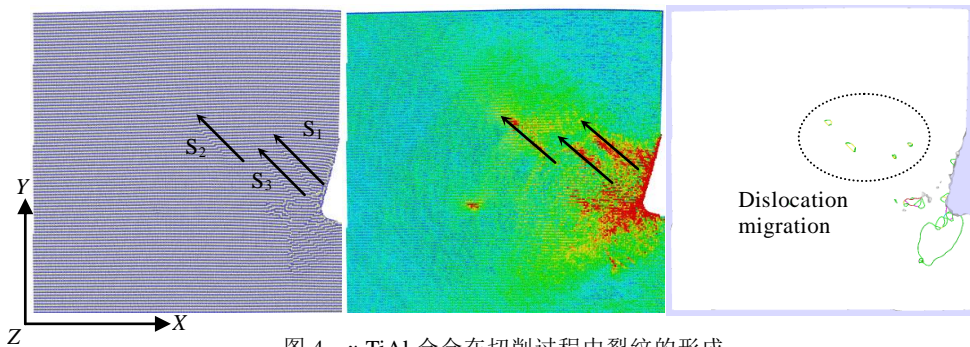


图 4 γ -TiAl 合金在切削过程中裂纹的形成

Fig.4 Crack formation in γ -TiAl alloy during cutting process (65 ps)

由图 5 可以看出, 在 130 ps 时, 由于刀具前角面形成较大的塑性变形区域, 破坏原有的晶格结构, 生成了类晶粒晶界的非晶原子带。由于非晶原子带的阻碍, 在切削区无法继续沿着易滑移方向产生剪切带, 导致应力持续储存。出现了区域范围性的应力释放, 这是由于类晶粒晶界的非晶原子带的产生, 应力无法继续以剪切带的形式进行释放, 所产生的范围性应力释放区域, 并且在切屑层产生了一层弹性变形程度大, 一层弹性变形程度小的均匀分布现象。对比发现, 钛层具有更高的弹性变形程度, 而铝层的弹性变形程度相对较低, 这是由于选择的单晶 γ -TiAl 合金自身的层状晶体结构所决定, 文献[32]提到在单晶 γ -TiAl 合金中, Ti-Al 的键能最大, Ti-Ti 键的键能次之, Al-Al 键的键能最小, 键能越大意味着破坏键就需要更多的能量, 就产生更高的弹性变形程度, 所以钛层比铝层具有较高的弹性变形。

此时可以看出裂纹已经萌生。对其位错分析时发现在晶体中位错的高密度区出现位错线缠结现象, 而此位错缠结点恰好成为了位错滑移的障碍, 导致应力

集中。与此同时, 在刀具前面的三角形塑性变形区域可以明显看到拉应力集中, 位错线的缠结点恰好为三角形区域的一个锐角, 并且这个锐角指向刀具的切削方向。随着切削的进行导致此点持续应力集中, 诱导裂纹沿着切削方向扩展。

最终, 当剪切带 S_1 、 S_2 、 S_3 均运动到工件表面时, 在图 6 中可以明显地观察到锯齿状切屑形貌。大量实验现象表明, 具有低热导率、低密度、低比热容的工件材料很容易产生锯齿形切屑^[33]。Klocke 等^[34]的实验研究也证实了 γ -TiAl 合金切屑横截面呈现锯齿状。 γ -TiAl 合金正具有低热导率、低密度、低比热容等特性, 似乎绝热剪切机理能很好的解释 γ -TiAl 合金切屑的形成。

综上所述, 针对裂纹形成的原因, 主要是切屑形成区出现的三角形塑性变形区域, 区域内原子堆积体积膨胀, 形成类晶粒晶界的非晶原子带, 阻碍剪切带周期性的发射, 最终导致垂直切削方向拉应力持续增大。在拉应力的作用下, 三角形塑性变形区域附近材料产生微小裂纹, 形成裂纹萌生区, 裂纹萌生和扩展的主要原因是垂直切削方向的拉应力。

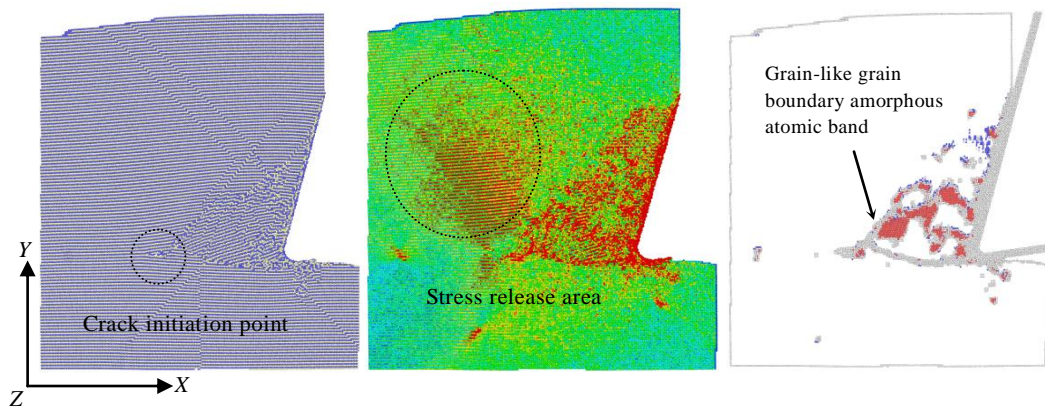


图 5 γ -TiAl 合金在切削过程中裂纹的形成

Fig.5 Crack formation in γ -TiAl alloy during cutting process (130 ps)

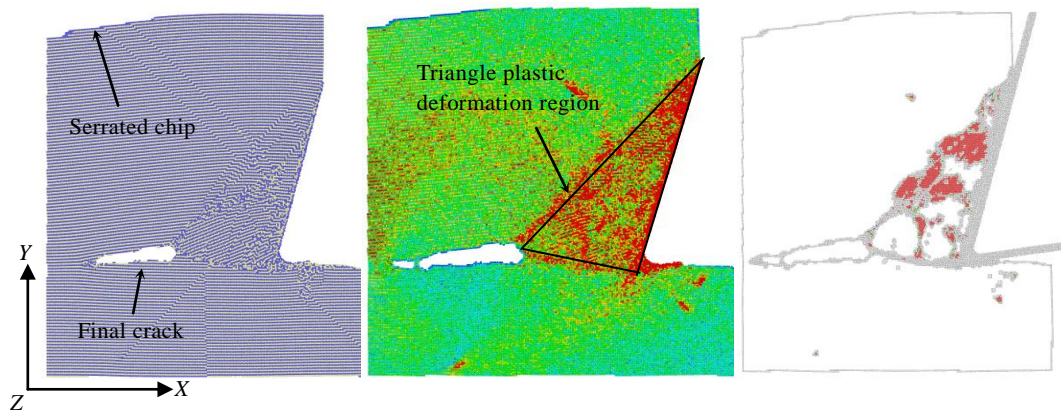


图 6 γ -TiAl 合金在切削过程中裂纹的形成

Fig.6 Crack formation in γ -TiAl alloy during cutting process (150 ps)

2.2 信号分析

2.2.1 中频-功率分析

图 7 所示是切削深度为 30 nm，信号点和裂纹产生位置以及扩展的方向，此时裂纹萌生并扩展的深度 h 近似于切削深度 D 。图 8 为切削温度为 1 K 时中频、AE 功率与时间之间的关系， P_i ($i=1, 2, \dots, 12$) 为图 1 切削模型中 12 个信号采集点。由于模拟温度为 1 K，原子的布朗运动以及微观的晶格振动受到极大的限制。在图 8 中可以观察到一个共同现象，功率 E 在刀具进入切削后整体呈下降趋势，产生这种现象的主要原因是刀具对工件原子的挤压作用，打破了弛豫之后原子内部的作用力，使得原子间间隙减小，且呈现一种压应力状态，继而使原子振动的幅度减小，导致功

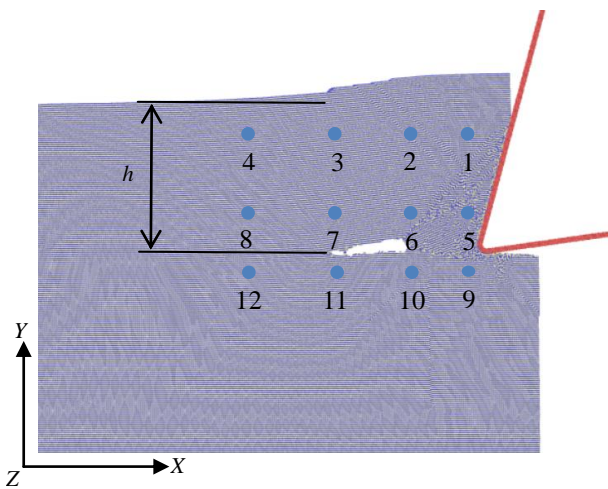


图 7 在 150 ps 时裂纹位置和信号点分布

Fig.7 Crack location and signal point distribution at 150 ps

率呈现持续降低的状态；并且同一深度下信号点与刀具之间的距离越远，功率下降幅度越小，这是由于晶格对于切削所产生的声波阻碍和衰减的作用，使切削区产生的信号在传播过程中受到损失。从频率的角度来看，当信号点位置在 25 和 35 nm 时，切削过程中对应频率有较大的变化；而信号点位置在 10 nm 时，在整个切削过程中的频率没有明显变化。由于刀具相对锐度 D/r 值较大，使切削过程呈现剪切模式，剪切力占据主导地位，信号点距离切削深度越远其影响越小。对于切削过程中的频率的变化如图 8 所示，在 20 ps 之前，刀具未和工件接触，但是可以看出频率具有明显的波动，其波动的原因可能是晶格振动，也可能是刀具的运动或者刀具和工件原子之间的作用力引起的。对其讨论发现，由于所选取的信号点分布均在工件上，刀具和工件之间有足够的距离。因此，刀具运动对信号采集影响可以忽略不计，且这段时间信号点采集的频率信号的峰值基本相同，功率也处于最大值，说明频率和功率对此类声发射源具有较强的敏感性。而在 30 nm 的切削深度下，在 25 nm 下的信号点最接近原子变形区域，受到的影响最大，对应的功率 E 的下降趋势却逐渐减缓，在其他 2 个深度下却没有明显的缓慢，因此，排除刀具运动对频率的影响，这种信号波动就是由晶格振动和刀具与工件原子之间的作用力引起的，且功率和频率对其具有较强的敏感性。通过查阅相关文献，Feng 等^[35]通过分子动力学模拟脆性材料 6H-SiC 纳米切削，也证实了晶格振动在纳米切削过程中的可检测性。

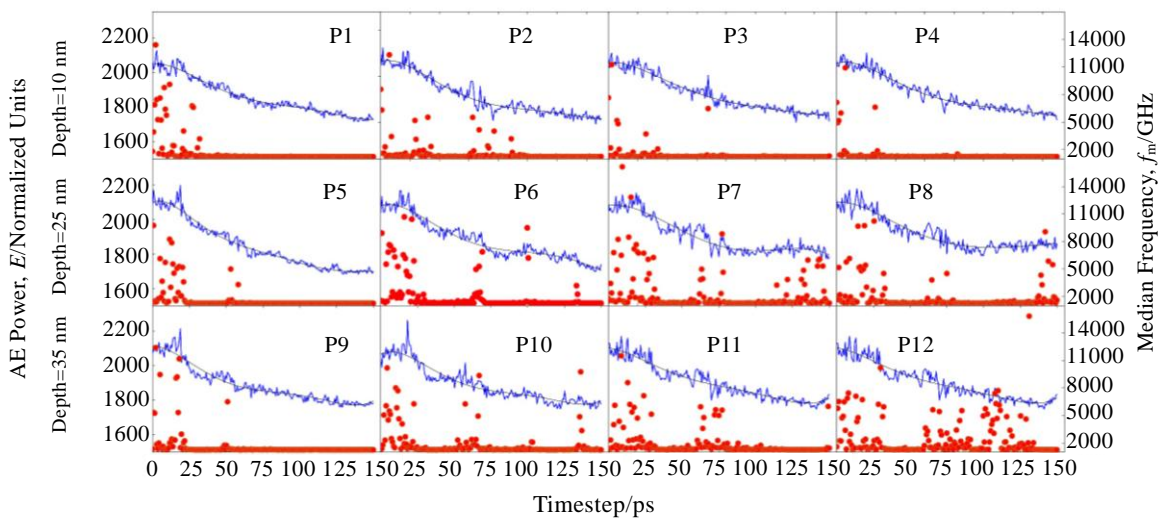


图 8 采集点处中频 (f_m) 分布与功率 (E) 函数

Fig.8 Distribution of median frequency (f_m) and function of power (E) at the collection points

除了晶格振动，剪切带的生成也是一种特征信号源。如图 8 所示，剪切带 S_1 、 S_2 完全生成的时刻为 30 和 58 ps。由于剪切带初始形成的位置不同，形成位置最近的信号点具有较强的信号响应。 S_1 、 S_2 形成初期距离 P1、P5 最近，在对应时刻频率均又明显波动。且在 P1、P5 产生的中频波动。随着 X 方向信号点与刀具距离的增加，可以看出中频波动的时间有一定的减弱后移。剪切带 S_3 生成的时间是 65 ps，此时在 P6 中观察到剪切带比 P5 频率波动更大，这是由于剪切带生成具有间隔性，已经产生的全部剪切带所产生的声波此时传播到了 P7 点，所以造成了 P7 点中频相对最高。由于声波在晶格内传递时损失，到达下一个点的时候相对减弱。在此过程中，伴随着中频产生较大的波动，功率 E 会出现一定程度的下降。

在切削过程中，相比其他位置信号点，P7、P8 距离裂纹萌生和扩展最近。因此 P7、P8 将会更好地采集到裂纹萌生和扩展的信号。120 ps 后，在 P7 中可以看出此时功率没有明显变化，但是中频却出现了明显变化，频率从 0 增加到了 5000 GHz 的峰值，然而此时 P5、P6 信号点均在裂纹形成点的后方，没有观察到明显的频率变化，即可以认为此时频率的波动是由裂纹萌生所引起的。进一步对 P8 分析发现，裂纹萌生后向着切削的方向扩展，此时 P8 恰好可以直观地表示裂纹扩展时频率的变化，其频率达到了 8000 GHz 的峰值，但在 P7 中却只有 6000 GHz，这是由于裂纹扩展所产生的信号传递损失引起的。因此，裂纹的萌生和扩展是检测到的另一种特征信号源，且裂纹扩展相比裂纹萌生具有更高的中频。

2.2.2 聚类分析

结合上述分析，为了更好地区分对应信号的特征，选取信号变化最明显的 4 个信号点 P5~P8 对功率-频率进行聚类分析。选取经典的 K-means 聚类算法进行聚类，采用手肘法和轮廓系数法确定 K 值。采用手肘法确定 K 值时，随着 K 值的增大，误差平方和 SSE (sum of the squared errors) 的值会逐渐减小，当 K 值小于最优簇数时，随着 K 值的增大，总 SSE 可能会迅速下降，而当 K 值大于等于最优簇数时，随着 K 值的增大，总 SSE 呈缓慢下降趋势，对应的肘点就是最优的 K 值，如图 9a 所示，肘点是 $K=3$ 时。而采用轮廓系数法确定 K 值时，平均轮廓系数最大的 K 便是最佳聚类数，从图 9b 中可以看出 $K=2$ 时，平均轮廓系数最大。结合 2 种评价指标，选取 $K=3$ 为最优的聚类数。

图 10 为中频-功率的 K-means 聚类分析图，最终选 $K=3$ 为聚类数，选取的数据相对合理，得到的点区分明显，可以观察到不同类的点重叠度较小，类与类

之间存在较大的差异。功率与中频是 AE 信号的 2 个重要特征参数，可以用来分析 AE 信号特征。将 AE 特征参数功率和中频进行聚类分析，将分类簇结果分别命名为簇 A、B、C。从图中可以看出，分布在簇 A 到簇 C 的点逐渐减小，对应的频率逐渐增大，而功率上没有太大的区别。簇 A 中 AE 信号的频率较低，但分布的信号点是最多的，而簇 B 中 AE 信号的中频较高，对比之下，簇 C 中一般都是高频 AE 信号，但分布的点最少。

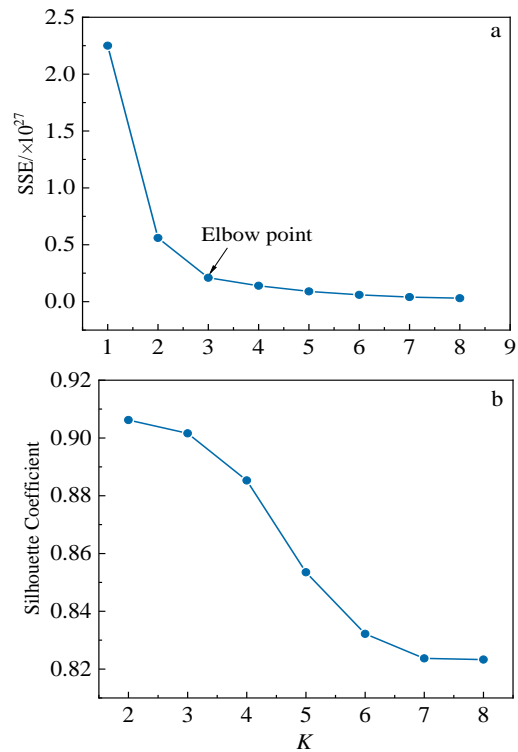


图 9 手肘法和轮廓系数法确定 K 值

Fig.9 Elbow method (a) and silhouette coefficient method (b) to determine K value

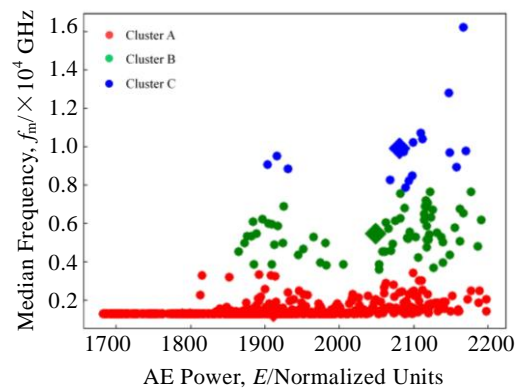


图 10 采集到信号的中频-功率 K-means 聚类分析

Fig.10 Clustering analysis of median frequency-power K-means collected signals

表2 聚类分析各簇质心位置及数量

Table 2 Cluster analysis of the cluster centroid position and number

Cluster	Point	Centroid power/Normalized Units	Centroid frequency/GHz
A	745	1.9110×10^3	0.1393×10^4
B	66	2.0492×10^3	0.5429×10^4
C	16	2.0811×10^3	0.9906×10^4

每一簇聚类的质心功率、频率坐标及其点的数量如表2所示。其中聚类簇A的质心功率、频率对应的参数都最低,表面产生这种信号的机制应变能非常小,但对应的点数确是最多的,考虑到上述讨论,簇A对应晶格振动。簇C对应的质心功率和频率最大,表明这种机制释放了较大的应变能,且具有的点数最少,说明是短时高能量的释放,结合上述讨论,簇C对应的是裂纹的萌生及扩展。其中簇B质心功率和频率以及点数都介于簇A、C之间,释放的应变能也相对较小,因此判定簇B为剪切带的产生。

3 结论

1) γ -TiAl 合金纳米切削过程中,由于原子键能不同,Ti层比Al层具有较高的弹性变形。切削过程中,在切屑形成区出现的三角形塑性变形区域,形成类晶粒晶界的非晶原子带,阻碍剪切带周期性的发射,使切削产生的应力无法通过剪切带释放,导致垂直切削方向拉应力持续变大。与此同时,在位错形成的高密度区域出现的位错缠结点恰好阻碍了位错滑移,使拉应力集中,致使裂纹萌生并扩展。导致其裂纹萌生和扩展的主要原因是垂直切削方向的拉应力。同时,产生的剪切带运动到表面,产生了锯齿状的切屑。

2) 纳米切削过程中,通过对模拟过程中 γ -TiAl合金结构变化和信号中频-功率分析,有效地识别到晶格振动、剪切带产生以及裂纹萌生与扩展。发现中频和功率都对晶格振动具有较强的敏感性;而剪切带的产生会增加信号的中频,快速降低功率值;裂纹的萌生和扩展会释放大量的应变能,使其具有较高的中频,其中功率值也会出现小幅度的增加。

参考文献 References

[1] Yang Xin(杨鑫), Xi Zhengping(奚正平), Liu Yong(刘咏) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2011, 40(12): 2252

[2] Yan Chao(杨超). *Foundry Technology*(铸造技术)[J], 2014, 35(9): 1933

[3] Ouyang Hongwu(欧阳鸿武), Liu Yong(刘咏), He Yuehui(贺跃辉) et al. *Materials Reports*(材料导报)[J], 2003, 17(4): 8

[4] Chen Gang(陈刚), Jiang Yijun(江义军). *Sichuan Nonferrous Metals*(四川有色金属)[J], 2014(2): 61

[5] Fang Fengzhou(房丰洲), Lai Min(赖敏). *Scientia Sinica (Technologica)*(中国科学: 技术科学)[J], 2014, 44(10): 1052

[6] Yang Ruifeng(杨瑞峰), Ma Tiehua(马铁华). *Journal of North University of China, Natural Science Edition*(中北大学学报, 自然科学版)[J], 2006(5): 456

[7] Sheng Gongtian(沈功田), Geng Rongsheng(耿荣生), Liu Shifeng(刘时风). *Nondestructive Testing*(无损检测)[J], 2002, 24(3): 114

[8] Linderov M, Segel C, Weidner A et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2014, 597: 183

[9] Vinogradov A, Vasilev E, Linderov M et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2016, 676: 351

[10] Bohlen J, Chmelik F, Dobroń P et al. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2004, 378(1-2): 214

[11] Vinogradov A Y, Merson D L. *Low Temperature Physics*[J], 2018, 44(9): 1186

[12] Shimada S, Ikawa N, Tanaka H et al. *CIRP Annals*[J], 1993, 42(1): 91

[13] Shimada S, Ikawa N. *CIRP Annals*[J], 1992, 41(1): 117

[14] Li Haiyan, Shao Zihao, Feng Ruicheng et al. *Philosophical Magazine*[J], 2021, 101(1): 38

[15] Zhao Wei, Hong Haibo, Wang Hongzhi. *Micromachines*[J], 2019, 10(10): 696

[16] Sharma A, Ranjan P, Balasubramaniam R. *Journal of Micromanufacturing*[J], 2020, 4(1): 6

[17] Wang Yongqiang, Tang Sai, Guo Jian. *Applied Surface Science*[J], 2020, 510: 145 492

[18] Xie Wenkun, Fang Fengzhou. *Nanoscale Res Lett*[J], 2019, 14(1): 370

[19] Luo Liang, Yang Xiaojing. *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2020, 49(4): 1144

[20] Hikata A, Johnson R A, Elbaum C et al. *Physical Review B*[J], 1970, 2(12): 4856

[21] Doyama M, Kogure Y. *Radiation Effects and Defects in Solids*[J], 1997, 142(1-4): 107

[22] Kogure Y, Kosugi T, Doyama M et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2006, 442(1-2): 71

[23] Kogure Y, Kosugi T, Nozaki T. *Chinese Journal of Physics*[J], 2011, 49(1): 375

[24] Nikonov A Y. *AIP Conference Proceedings*[C]. Washington: AIP Publishing LLC, 2017: 20 151

- [25] Nikonov A Y. *AIP Conference Proceedings*[C]. Washington: AIP Publishing LLC, 2017: 20 150
- [26] Filippov A V, Nikonov A Y, Rubtsov V E *et al. Journal of Materials Processing Technology*[J], 2017, 246: 224
- [27] Fang Kangqi(樊康旗), Jia Jianyuan(贾建援). *Micronano-electronic Technology*(微纳电子技术)[J], 2005, 42(3): 133
- [28] Daw M S, Baskes M I. *Physical Review B*[J], 1984, 29(12): 6443
- [29] Morse P M. *Physical Review*[J], 1929, 34(1): 57
- [30] Rycroft C H. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*[J], 2009, 19(4): 41 111
- [31] Welch P. *IEEE Transactions on Audio and Electroacoustics* [J], 1967, 15(2): 70
- [32] Zhou Hongbo, Zhang Ying, Liu Yuelin *et al. Journal of Physics: Condensed Matter*[J], 2009, 21(17): 175 407
- [33] Su Guosheng(苏国胜). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Jinan: Shandong University, 2011
- [34] Klocke F, Lung D, Arft M *et al. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*[J], 2013, 65(1): 155
- [35] Feng Ruicheng, Qi Yongniang, Li Haiyan *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2021, 50(5): 1602

Acoustic Emission Response to Nano-Cutting Process of Monocrystal γ -TiAl Alloy via Atomistic Simulation

Yao Yongjun¹, Feng Ruicheng^{1,2}, Zhang Jun¹, Cao Hui^{1,2}, Li Haiyan^{1,2}, Lei Chunli^{1,2}

(1. School of Mechanical and Electrical 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)

Abstract: In this paper, the acoustic emission (AE) response of monocrystal γ -TiAl alloy during nano-cutting process was studied by molecular dynamics method. The mechanism of crack formation in the cutting process of monocrystal γ -TiAl alloy was described at the atomic scale. It is found that periodic shear bands are formed in the shear zone with the continuous increase of cutting force at the beginning of cutting. At the same time, under the combined action of high pressure stress and elastic stress wave, the formation of the amorphous atomic band in the grain-like grain boundary blocks the continuous emission of the shear band, so that the stress in the main shear zone can not be released through the shear band in time, resulting in local stress concentration, which leads to the initiation and propagation of cracks. By analyzing the collected acoustic emission signal, it is found that the compressive stress contributes to the decrease of acoustic emission power in cutting process. In the time domain, the acoustic emission response characteristics of lattice vibration, shear band and crack initiation and propagation in nano-cutting process were described by analyzing the microdefect evolution and AE power-frequency comparison. At the same time, the power and frequency characteristics of damage were obtained by clustering analysis.

Key words: nano cutting; acoustic emission; monocrystal γ -TiAl alloy; molecular dynamics

Corresponding author: Feng Ruicheng, Ph. D., Professor, School of Mechanical and Electrical Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, P. R. China, Tel: 0086-931-5135199, E-mail: postfeng@lut.edu.cn