

重复纳米切削对 γ -TiAl 合金表面质量及亚表面损伤的影响

刘洋^{1,2}, 冯瑞成^{1,2}, 姚鹏^{1,2}, 李海燕^{1,2}, 曹卉^{1,2}, 雷春丽^{1,2}, 李建华^{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省部共建教育部重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

摘要: 本研究运用分子动力学方法对单晶 γ -TiAl 合金重复纳米切削过程进行了模拟, 研究了重复纳米切削过程中的切削力和微观缺陷演化, 分析了已加工表面的粗糙度和残余应力, 讨论了重复纳米切削和单次切削之间的差异。结果表明: 重复纳米切削伴随着位错的形成和湮灭, 第 2 次切削过程中的位错线长度波动小于第 1 次切削, 切削状态更稳定; 加工初始阶段的切削力迅速增大, 随后切削力进入稳定加工阶段, 同时发现, 第 2 次切削的切削力小于第 1 次切削; 二次切削后, 残余应力分布更加均匀, 且刀具的二次挤压作用使得加工表面层残余压应力增大; 两次切削加工可以提高表面质量和降低亚表面损伤, 而残余压应力的增大及加工所需能量的增加降低了已加工表面的可塑性, 使得第 3 次切削加工对表面和亚表面没有明显改善。

关键词: 重复切削; γ -TiAl 合金; 亚表面损伤; 分子动力学; 位错

中图分类号: TG146.23; TG111; TH161

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2023)10-3507-08

纳米切削技术是纳米精度复杂型面加工的重要手段, 对整个纳米加工的发展起着重要的支撑作用。尽管制造技术发展迅速, 但对纳米切削过程中表面及亚表面发生的晶体结构的演化和相变的理解仍不够完善^[1]。纳米切削仅仅涉及邻近表面的表层原子, 而当切削量控制在几个或者几十个纳米量级时, 对加工设备的精度、运动控制的稳定性、环境条件以及刀具状态等各方面的要求极其苛刻, 对测试观察仪器也提出了很高的要求。在如此小的尺度下, 分子动力学 (molecular dynamics, MD)^[2] 是研究纳米加工机理和过程的重要工具。MD 模拟可以在原子尺度上研究压痕、粘附、摩擦、断裂、表面缺陷和切削, 并提供与接触形成、摩擦滑动、位错形核和断裂界面等有关的原子尺度现象的具体细节^[3]。

借助 MD 方法, 纳米切削加工过程中已加工表面质量和亚表面损伤等方面得到了更加深入的研究。Wang 等^[4]使用 MD 模拟了单晶铜纳米切削产生的亚表面缺陷结构, 发现纳米切削后的工件亚表层只残留稳定的缺陷结构。此外, 空位、原子团簇、正四面体堆垛层错及梯杆位错组成的亚表面损伤层产生了残余应力。Liu 等^[5]采用 MD 方法模拟纳米切削和纳米压痕, 研究了单晶铜纳米切削过程中层错四面体 (stacking fault tetrahedra,

SFT) 的演化过程, 验证了 SFT 是加工硬化效果的原因之一。Khatri 等^[6]通过实验与 MD 模拟结合对金刚石车削硅过程中工艺参数对表面质量的影响进行了研究, 发现刀具进给量、切削深度和主轴速度对于实现最小表面粗糙度具有重要影响。Guo 等^[7]通过建立单晶钨在不同晶向下的纳米切削 MD 模拟模型, 发现沿[110]切削可以获得最佳的表面质量、最小的亚表面损伤层厚度和最大的损伤层弹性恢复。

近年来, 对于材料重复纳米切削方面的研究逐渐增多。Zhang 等^[8]通过 MD 方法研究了纳米尺度金刚石刀具重复单点车削单晶硅, 发现在第 1 次纳米切削后, 一层受损的非晶硅残留在了表面下方, 而第 2 次纳米切削过程中, 非晶相硅转变为无序体心 β -硅。Zhang 等^[9]利用金刚石压头对单晶铜的加工诱导表面进行了基于原子力显微镜 (AFM) 的纳米压痕 MD 模拟, 表明在重复纳米切削中, 第 1 次纳米切削引入的缺陷和变形会导致位错的形核和扩展, 而第 2 次切削加工表面下聚集了更多的空位和空位簇, 力学性能发生显著改变。Lai 等^[10]利用 MD 模拟了单晶铝的连续多次车削实验, 研究发现当采用不同的进给量进行连续切削时, 已加工表面的形貌明显不同, 进给量和切削深度对已加工表面的质量有较

收稿日期: 2022-09-26

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: 刘洋, 男, 1995 年生, 硕士生, 兰州理工大学机电工程学院, 甘肃 兰州 730050, E-mail: liuy@lut.edu.cn

大影响,且在切削深度相同的条件下,多次切削产生的非晶变形层厚度比单次切削小。Yuan 等^[11]利用 MD 模拟探讨了不同划痕参数下的二次纳米划痕对硅亚表面损伤的影响机制,发现二次划痕的主要去除部分是初始划痕诱导的非晶层,二次划痕可以有效去除预制亚表面损伤。较大的划痕深度和刀具半径会导致划痕力和温度的增加,从而增加亚表面损伤层的厚度。Zhao 等^[12]对 2 种磨粒加工硅片进行 MD 模拟,研究了磨削过程中表面生成的叠加机制,表明单晶硅磨削中的叠加过程重新分布了加工表面和亚表面损伤层,使得表面生成过程与单一磨削过程显著不同。

γ -TiAl 合金具有低密度、高弹性模量、优异的高温强度及良好的阻燃性能等优点,在航空航天、医学和汽车等领域有很大的发展潜力^[13]。但是由于 γ -TiAl 合金具有难变形加工和室温脆性等缺点,切削加工过程中易产生表面裂纹和残余应力,造成零件服役性能的严重下降^[14]。因此,深入研究 γ -TiAl 合金纳米切削加工表面质量和亚表面损伤,对提高 γ -TiAl 合金纳米切削加工水平和改善零部件服役性能具有重要意义。

目前,学者们已经利用 MD 方法对 γ -TiAl 合金的纳米加工进行了研究,并得到了许多有价值的研究成果。Xie 等^[15]通过 MD 模拟研究了高温下 γ -TiAl 合金在纳米划痕过程中的力学行为和变形机制,发现温度升高导致表面摩擦和法向力减小,高温可以显著促进 γ -TiAl 合金的非晶化程度且位错密度明显低于室温。Jiang 等^[16]采用 MD 模拟研究加工参数(切割速度和深度)与原子尺度表面结构的关系,发现 γ -TiAl 合金工件的材料去除以刀具与工件之间的挤压和剪切为主,切削过程中表面原子向上的弹性恢复引入了弹性变形,较大的切削深度和切削速度将导致严重的局部应力。Li 等^[17]采用 MD 模拟研究了水介质对单晶 γ -TiAl 合金纳米切削的影响以及亚表面缺陷的演变,发现通过刀具的挤压和剪切作用从工件表面去除了原子,同时水介质的冷却和润滑作用降低了切削温度和切削力。Li 等^[18]利用 MD 方法建立金刚石纳米切削单晶 γ -TiAl 合金模型来研究切削距离和切削速度对工件亚表面损伤(subsurface damage, SSD)层深度的影响,表明随着纳米切削的进行,一些相对稳定的缺陷结构保留在工件的亚表面,形成 SSD 层。SSD 层的深度随着切削距离增加不断变化,当切削状态稳定后,SSD 层的深度基本保持不变,且提高切削速度对亚表面损伤影响很小。Feng 等^[19]基于 MD 等现代物理研究方法,对单晶 γ -TiAl 合金的纳米切削过程进行了研究,脆性 γ -TiAl 合金的纳米级延性切削过程是在刀具附近的高静水压力下通过相变实现的,切削过程中的相变可分为高应力诱导非晶化和弹性应力诱导位错。Yang 等^[20]采用

MD 方法研究了随机粗糙度对 γ -TiAl 合金纳米切削的影响,采用多参数的 Weierstrass-Mandelbrot (W-M) 函数生成随机表面粗糙度,用工件的等效高度来量化切削深度,表明粗糙度对工件的纳米切削有不可忽视的影响。此外,粗糙度的影响在不同切削参数的情况下也不同。

在以往基于 MD 模拟的单晶 γ -TiAl 合金纳米切削的研究中,一般仅研究了单次加工过程,对多次加工关注较少。而在 γ -TiAl 合金实际加工中,无论是宏观加工还是微纳米加工,都存在多次走刀,通过粗加工及精加工等提高表面质量。本文研究重复纳米切削过程中的切削力和微观组织缺陷演化,分析已加工表面的粗糙度和残余应力,讨论重复纳米切削和单次切削之间的差异。阐述重复纳米切削对单晶 γ -TiAl 合金的表面质量和亚表面损伤的影响,为通过加工工艺调控切削加工表面完整性提供理论支持。

1 模型

分子动力学模拟单晶 γ -TiAl 合金重复纳米切削加工的模型如图 1 所示。采用 LAMMPS^[21]进行 MD 模拟计算,运用开源工具 OVITO (open visualization tool)^[22]实现重复纳米切削加工模拟的可视化分析。刀具为刚体金刚石,刀具前角 α 为 20° ,后角 β 为 5° ,钝圆半径 R 为 3 nm。工件为 L_{10} 型面心四方 (fcc)^[23]单晶 γ -TiAl 合金,初始模拟工件尺寸为 $50 \text{ nm} \times 20 \text{ nm} \times 20 \text{ nm}$,包含 1 200 000 个原子。工件被划分为牛顿层、恒温层和边界层,边界层原子被固定成刚性层以减少边界效应,牛顿层和恒温层原子的运动遵循牛顿第二定律。系统初始温度保持在 293 K,重复纳米切削过程中通过微正则系综(NVE)进行牛顿力学的模拟计算,使用正则系综(NVT)来保证切削过程中的热平衡^[24]。单晶 γ -TiAl 合金的原子相互作用力的计算采取 EAM 势^[25],工件原子与刀具原子之间使用 Morse 势^[26]。此外,工件模型取向分别为 x -[100]、 y -[010]和 z -[001], x 和 y 方向使用自由

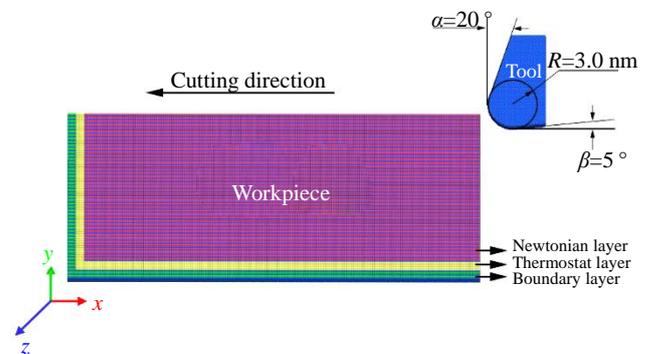


图 1 单晶 γ -TiAl 合金重复纳米切削模型

Fig.1 Molecular dynamics simulation model for repeated nanocutting of single crystal γ -TiAl alloy

边界条件，而 z 方向使用周期性边界条件。切削平面为 (001)，重复切削方向为 $[\bar{1}00]$ 。

重复纳米切削过程是：刀具切削速度为 0.2 nm/ps，加工深度为 1.5 nm，沿着 $-x$ 方向进行第 1 次切削加工，切削距离为 44 nm。第 1 次切削加工完成后，刀具沿 z 轴正方向抬起，再向 x 正方向运动，然后沿 $-z$ 方向运动到第 2 次切削的刀具起始位置。按照相同速度、相同加工深度，对工件进行切削距离为 38 nm 的第 2 次切削加工和切削距离为 32 nm 的第 3 次切削加工。单晶 γ -TiAl 合金重复纳米切削 MD 模拟参数如表 1 所示。

表 1 γ -TiAl 合金重复纳米切削模拟参数

Table 1 MD simulation modeling parameters of γ -TiAl alloy repeated nanometric cutting

Machining parameter	Value
Workpiece material	Single crystal γ -TiAl alloy
Workpiece dimension	50 nm×20 nm×20 nm
Atoms of workpiece	1 200 000
Lattice structure	fct
Tool material	Diamond
Tool width/nm	20
Atoms of tool	220 053
Tool rake angle (α)/(°)	20
Tool clearance angle (β)/(°)	5
Radius of edge (R)/nm	3
Single cutting depth/nm	1.5
Cutting direction	$[\bar{1}00]$
Tool cutting velocity/ nm ps ⁻¹	0.2
Timestep/fs	1

2 结果与讨论

2.1 亚表面缺陷与表面粗糙度

图 2 为通过 OVITO 软件中的公共邻域分析 (common neighbor analysis, CNA) 和位错提取算法 (dislocation extraction algorithm, DXA) 技术得到的单次切削深度 1.5 nm 时 3 次切削过程中亚表面微观缺陷分布演化。图 2a~2c 分别对应着第 1 次切削 44 nm、第 2 次切削 38 nm 和第 3 次切削 32 nm 的 CNA 图，其中灰色表示非晶原子，红色表示密排六方结构 (hcp)，蓝色表示体心立方结构 (bcc)。图 2a~2c 中标注了亚表面损伤层及部分切屑、空位簇和堆垛层错；图 2d~2f 分别对应着第 1 次切削 44 nm、第 2 次切削 38 nm 和第 3 次切削 32 nm 的 DXA 图，其中肖克莱不全位错表征为绿色，压杆位错表征为紫色，全位错表征为蓝色，Hirth 位错表征为黄色，其他类型位错表征为红色。第 3 次切削的加工初始阶段均产生大体积层错，并残留在已加工表面。在加工初始阶段肖克莱不全位错出现，工件开始产生塑性变形，刀具前方开始逐渐发生剧烈的位错反应，层错形核沿滑移面扩展至工件右侧，连接至两个表面的层错不易消失，因此主要通过稳定切削阶段的已加工表面来对亚表面损伤进行研究。图 2 显示第 1 次切削加工完成后，工件亚表面产生了大量的层错、空位和位错，且存在较多相变后的 bcc 原子，亚表面损伤层厚度大；第 2 次切削加工后，刀具的二次挤压作用使得亚表面缺陷明显减少，仅剩下少量的原子团簇和位错，已加工表面质量得到明显的改善；第 3 次切削加工后，稳定加工区域对应的亚表面损伤层缺陷略多于第 2 次切削，且对比刀具下方工件内部的位错密度可以看出，加工过程中法向位错的交互作用更剧烈，不可避免地会产生更多的亚表面缺陷和引入表面残余拉应力。

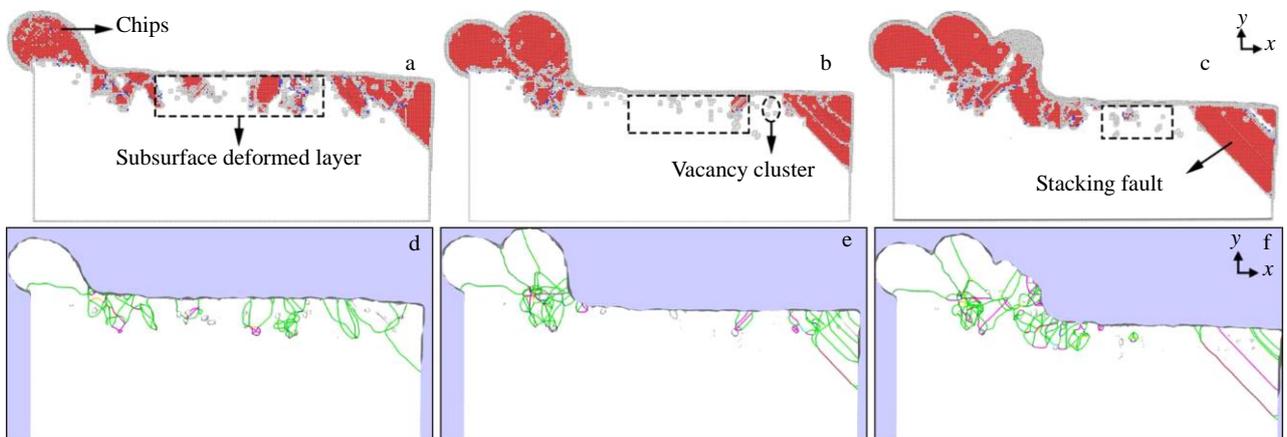


图 2 3 次切削弛豫后的亚表面微观缺陷分布

Fig.2 CAN (a-c) and DXA (d-f) images of subsurface microscopic defects after three repeated cutting and relaxation of γ -TiAl: (a, d) the first, (b, e) the second, and (c, f) the third

对于单次切削深度为 1.5 nm 时的重复纳米切削加工过程中一些典型的位错反应进行分析。图 3a 为第 1 次切削距离达 26 nm 时的扩展位错。该扩展位错的反应公式为 $1/2[110]=1/6[121]+1/6[2\bar{1}1]$ ，全位错的运动由 2 个不全位错的运动来完成，位错滑移所需要的能量更少，更容易滑移。层错能越小，扩展位错的宽度越大。图 3b 显示了第 1 次切削距离达 44 nm 时的原子团簇。刀具行进过程中产生作用力，层错发生形核和扩展，不同层错滑移至团簇位置，使得形成团簇的原子发生相变。随着刀具的远离，层错收缩使得层错相交处的原子团簇脱离进而成为独立的球形原子团簇。这也说明了缺陷原子对于位错的运动和增殖存在阻碍作用。图 3c 为第 2 次切削距离达 38 nm 时的 SFT。2 个肖克莱不全位错在晶体的 2 个滑移面上运动到相交处，位错反应生成压杆位错，

该纯刃型位错与晶体的滑移面不同，不易滑移，只能攀移，形成固定的位错群。位错线的变化伴随着相应位错面的生长和收缩，通过复杂的位错反应生成了由 6 个压杆位错组成的 SFT，该结构孤立且稳定。图 3d 为第 1 次切削距离达 14 nm 时的 V 型位错。V 型位错的形核发生在刀具的前方，肖克莱位错线位于层错和完整晶体的边界，新出现的层错与旧层错相交，在滑移面的交线处位错反应生成压杆位错，形成了成熟的 V 型位错，该位错连接至工件表面，随刀具行进发生湮灭。工件内部的 V 型位错易在加工过程中湮灭，而连接至工件表面的 V 型位错可能留在亚表面。

图 4 为不同切削次数下已加工表面长度为 28 nm 时的表面形貌。表面原子部分在刀具前端堆积，其它部分受到堆积原子和刀具的挤压作用形成已加工表面，工件

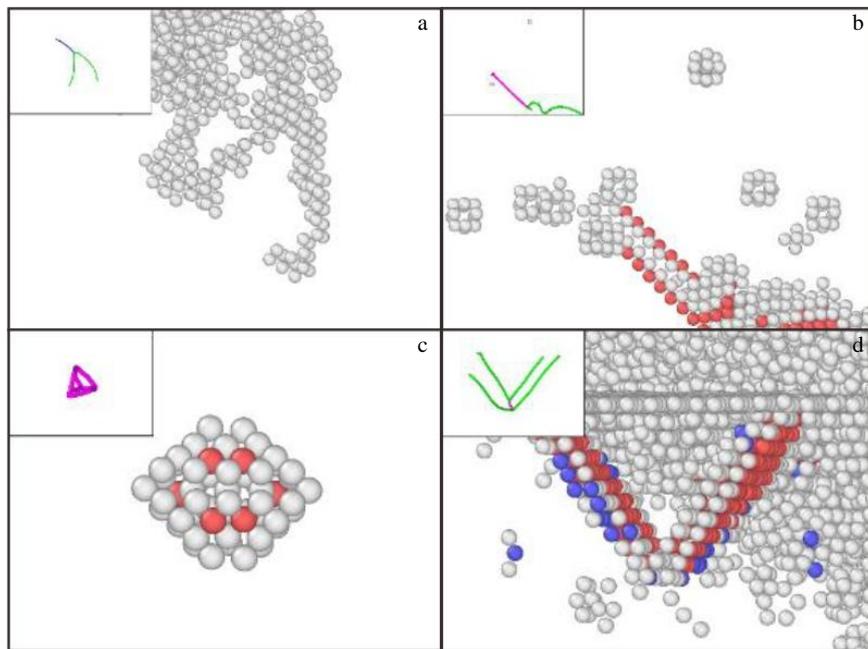


图 3 γ -TiAl 合金重复纳米切削加工过程中的典型位错

Fig.3 Typical dislocations in γ -TiAl repeated nanocutting processes: (a) extended dislocation, (b) atomic clusters, (c) stacking fault tetrahedral (SFT), and (d) V-shaped dislocation

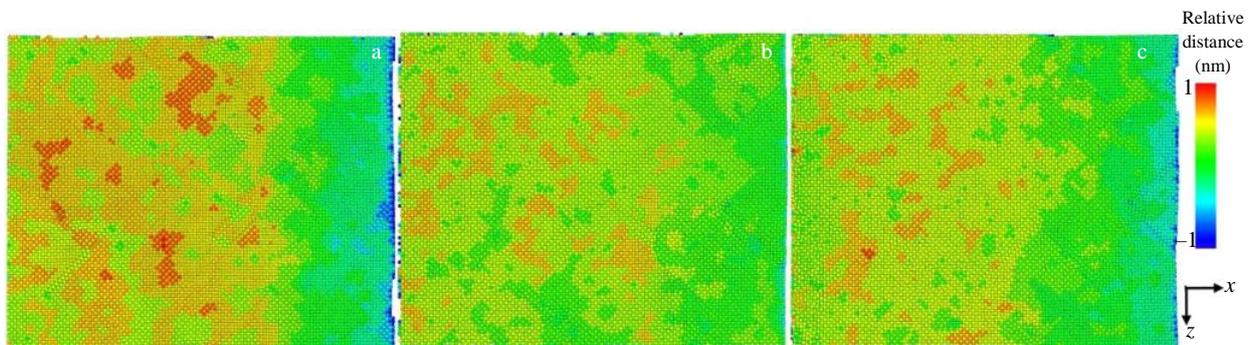


图 4 不同切削道次下已加工表面长度为 28 nm 时的表面形貌

Fig.4 Surface topographies of machined surface after cutting for 28 nm at repeated cutting times of the first (a), the second (b), and the third (c)

表层原子位置更接近理想表面。图 5 为重复纳米切削不同切削道次时已加工表面粗糙度，采用 $z=0$ 和 $z=\pm 5$ nm 处稳定切削阶段已加工表面单层原子的平均轮廓算术偏差 R_a 和轮廓最大高度 R_z 对 3 次切削加工后的表面粗糙度进行评价。第 1 次切削加工后的表面粗糙度比较大，其中连接至加工表面的层错和位错等对已加工表面的不平整存在较大影响。在重复纳米切削过程中，切削力的波动，切削热的不均匀分布以及位错演化等，导致已加工表面的微观形貌凹凸不平。在加工初始阶段，工件受到刀具的挤压作用，被挤压原子主要向原子更少的刀具前刀面聚集，随着刀具的推进向前流动，较少原子对已加工表面进行填补，粗糙度较大。第 2 次切削加工表面粗糙度降低，这是由于第 2 次切削加工的切削力减小，改善了亚表面缺陷；第 3 次切削后亚表面损伤不再明显减少，表面粗糙度略有升高。

2.2 两次切削的切削力变化

图 6 为单次切削深度 1.5 nm 时重复纳米切削过程中切削力的变化。加工初期随着作用在刀具上的工件原子数的增加，刀具受到的抗力增大，切削力快速增大；当切削距离达到稳定阶段，切削力的变化相对稳定，但波动更加明显。这是因为新旧滑移系的交替变化相对稳定，切削过程中原子晶格被破坏形成非晶态原子和位错等缺陷的演化导致晶格应变能的变化引起了切削力的较大波动。

通过对切向切削力和法向切削力的变化情况进行比较，发现 2 种切削力的变化趋势较为一致。这是由于晶体的易滑移面和加工平面夹角为 45° ，刀具行进过程中遇到层错等缺陷结构产生抗力的增加或缺陷破坏后抗力的减少，对于切向力和法向力来说同时发生。结合图 6a 和 6b 来看，法向切削力大于切向切削力，这是由于刀具刃口半径大于单次切削深度，相对钝度 (RTS) ≤ 1 ，材料切削机制中挤压切削起主导作用^[19]。在相同加工参数下，第 1 次切削的切削力大于第 2 次切削的切削力。这

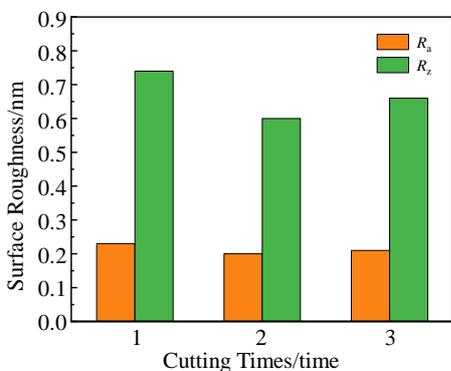


图 5 重复纳米切削不同切削道次时已加工表面粗糙度

Fig.5 Roughness of the machined surface after different repeated nanocutting times

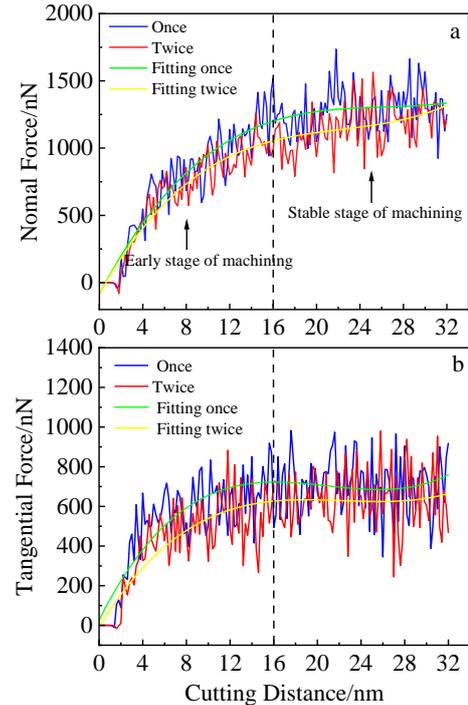


图 6 重复纳米切削过程中切削力的变化

Fig.6 Normal cutting force (a) and tangential cutting force (b) variations in repeated nanocutting process

是因为第 1 次切削加工的工件表面为理想晶体结构，而第 2 次切削待加工表面存在以非晶相为主的亚表面损伤，降低了待加工区域的硬度和弹性。第 2 次切削时，待加工表面的层错会对加工产生一定程度上的阻碍作用，单次切削深度和损伤层厚度的变化也会影响切削力的变化。综合切向切削力和法向切削力考虑，二次切削可以更好地提高已加工表面质量。

2.3 两次切削过程中的位错分析

位错可以在晶体中运动，通过位错运动实现晶体宏观的塑性变形。单晶 γ -TiAl 的强度、塑性和断裂等均与位错的运动有关，所以研究位错运动的有关规律，有利于改善和控制晶体力学性能。MD 仿真输出信息为单个原子信息，位错由成百上千的原子组成且仿真系统涉及百万原子，因此采用位错提取算法 (DXA) 识别加工过程中产生的位错的位置、种类和长度等信息。图 7 为两次切削过程中工件材料的位错线长度变化，可以发现两次切削过程中产生的位错以伯格矢量 $1/6\langle 112 \rangle$ 的肖克莱不全位错为主， $1/6\langle 110 \rangle$ 、 $1/3\langle 111 \rangle$ 和 $1/2\langle 110 \rangle$ 等多种位错同时出现。肖克莱不全位错不仅是已滑移区和未滑移区的边界，而且是有层错区和无层错区的边界，两次切削过程中产生了较多的堆垛层错，导致了肖克莱不全位错的占比大。层错区与正常堆垛区交界线可以是各种形状的，除了刃型外，肖克莱不全位错还可以有螺

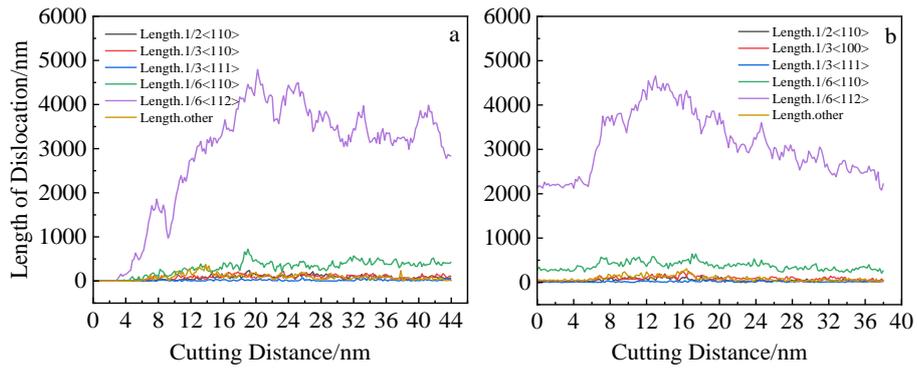


图 7 两次切削过程中工件材料的位错线长度变化曲线

Fig.7 Variation curves of dislocation line length of workpiece material during two cutting processes: (a) the first cutting and (b) the second cutting

型和混合型。两次切削过程中产生了少量的柏氏矢量为 $1/6\langle 110 \rangle$ 的压杆位错，它们由肖克莱不全位错通过交互作用生成，波动较小。这是由于压杆位错是纯刃型位错，其柏氏矢量的滑移面与工件晶体的滑移面不同，不易滑移，为结构相对稳定的固定位错。图 7a 中，在第 1 次切削的初始阶段，肖克莱不全位错的出现表明工件开始发生塑性变形，随着刀具向前运动的挤压，分解出的切应力作用在滑移面上使位错继续进行滑移。而第 2 次切削开始时存在小于第 1 次切削完成后的位错线长度，说明退刀过程中的弛豫消除了部分位错，如图 7b 所示。两次切削过程中产生的肖克莱位错线长度远大于其他位错且波动较大，说明切削过程中伴随着位错的形成和湮灭，塑性变形过程中新旧滑移系交替变化。第 2 次切削过程中的位错线长度波动小于第 1 次切削，这表明第 2 次切削时晶格的破坏和变形更小，切削状态更稳定，有利于表面加工质量的提高。

2.4 两次切削的残余应力分布

纳米切削要去除工件表层原子，靠近刀具前刀面的材料在被破坏前发生塑性变形，刀具后刀面与加工表面产生挤压和摩擦，会产生残余应力，图 8 为两次切削完成后残余应力分布。第 1 次切削完成时，高于 12 GPa

的残余压应力集中分布在已加工表面下方部分区域(蓝色区域)；第 2 次切削完成时，残余应力分布较为均匀，且刀具的二次挤压作用使得工件内部残余压应力增大。在材料的实际服役过程中，通常认为残余压应力可以提高疲劳性能，而残余拉应力对疲劳性能有不利影响。选取经过退刀和弛豫后的单晶 γ -TiAl 一次切削和二次切削工件，对于不同切削深度下的残余压应力进行研究，图 9 为工件残余压应力在深度方向上的分布。从图 9 中曲线的变化可以发现，切削加工后工件内部的残余压应力随着工件深度的增加先增大后减小。这是由于随着工件深度的增加，刀具对于工件挤压作用的影响减小，而在工件表面下方一定深度范围内的层错演化和位错反应较为剧烈，使得产生的残余压应力增大。二次切削后工件的残余压应力最大值比一次切削后大，一次切削和二次切削残余压应力的最大值分别为 2.194 和 2.375 GPa。这是因为第 2 次切削时，刀具对一次切削已加工表面产生了第 2 次挤压作用，工件的塑性变形程度增大，第 2 次切削时位错反应所释放的部分能量继续残留在工件内部，残余压应力增大。第 2 次切削后工件内部残余压应力增大且更加稳定，提高了工件的力学性能。

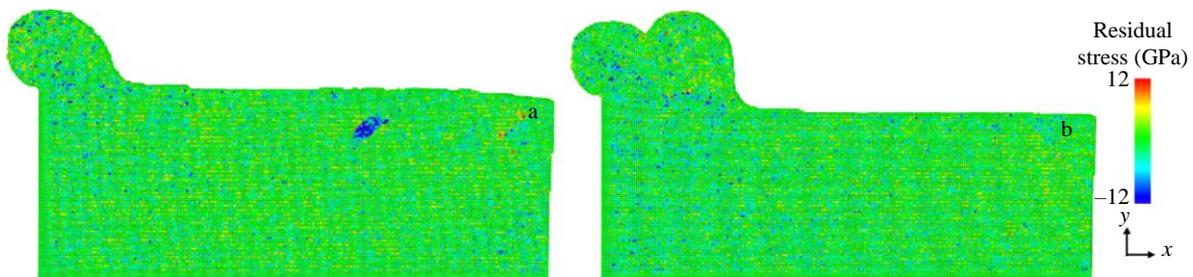


图 8 第 1 次和第 2 次切削及弛豫后残余应力分布

Fig.8 Residual stress distribution of the first (a) and the second (b) nanocutting

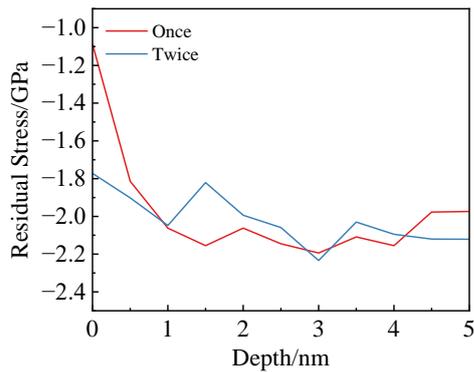


图9 第1次和第2次切削及弛豫后残余压应力在深度方向上的变化曲线

Fig.9 Change curves of residual compressive stress in depth direction after once and twice cuttings and relaxation

3 结 论

1) 综合亚表面缺陷和表面粗糙度两方面看, 二次切削加工可以提高表面质量和降低亚表面损伤, 而残余压应力的增大及加工所需能量的增加降低了已加工表面的可塑性, 使得第3次切削加工对二者没有明显改善。

2) 切削加工过程中, 随着作用在刀具上的工件原子数的增加, 初始切削力迅速增大, 然后进入稳定阶段。重复纳米切削加工中的第2次切削待加工表面的硬度和弹性降低, 第2次切削的切削力小于第1次切削的切削力。

3) 重复纳米切削过程中伴随着位错的形成和湮灭, 塑性变形过程中新旧滑移系交替变化, 产生的位错以肖克莱不全位错为主且波动较大。第2次切削过程中的位错线长度波动小于第1次切削, 晶格的破坏和变形更小, 切削状态更稳定。

4) 切削加工后, 工件内部的残余压应力随着距工件表面深度的增加先增大后减小; 二次切削后工件内部残余压应力增大且更加稳定, 提高了工件的力学性能。

参考文献 References

[1] 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
 [2] Rapaport D C. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2004: 505
 [3] Liang Y C, Chen J X, Chen M J *et al. Journal of Vacuum Science & Technology B*[J], 2009, 27: 1536
 [4] Wang Q L, Bai Q S, Chen J X *et al. Applied Surface Science*[J],

2015, 344: 38
 [5] Liu H T, Zhu X F, Sun Y Z *et al. Applied Surface Science*[J], 2017, 422: 413
 [6] Khatri N, Garg H, Karar V. *Materials Today: Proceedings*[J], 2018, 5(11): 23 984
 [7] Guo X G, Gou Y J, Dong Z G *et al. Applied Surface Science*[J], 2020, 526: 146 608
 [8] Zhang L, Zhao H W, Yang Y H *et al. Applied Physics A*[J], 2014, 116(1): 141
 [9] Zhang L, Zhao H W, Dai L *et al. RSC Advances*[J], 2015, 5(17): 12 678
 [10] Lai M, Zhang X D, Fang F Z *et al. Precision Engineering*[J], 2017, 49: 160
 [11] Yuan S, Guo X G, Liu S T *et al. Materials Science in Semiconductor Processing*[J], 2022, 144: 106 624
 [12] Zhao P Y, Zhao B, Pan J S *et al. Materials Science in Semiconductor Processing*[J], 2022, 147: 106 684
 [13] Yao C F, Lin J N, Wu D X *et al. Chinese Journal of Aeronautics*[J], 2018, 31(4): 826
 [14] Krupa K, Habrat W, Kocurek P *et al. Mechanik*[J], 2016, 10: 1508
 [15] Xie H C, Ma Z C, Zhao H W *et al. Materials Today Communications*[J], 2022, 30: 103 072
 [16] Jiang J Q, Dong Z W, Ma H W *et al. Solid State Communications*[J], 2022, 342: 114 618
 [17] Li J H, Wei P, Liu L Q *et al. Molecular Simulation*[J], 2021, 47(17): 1433
 [18] Li J Y, Sun Y X, Zhao W H *et al. Applied Physics A*[J], 2022, 128: 189
 [19] Feng R C, Shao Z H, Yang S Z *et al. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*[J], 2022, 119(9-10): 6729
 [20] Feng R C, Yang S Z, Shao Z H *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2022, 51(5): 1650
 [21] Thompson A P, Aktulga H M, Berger R *et al. Computer Physics Communications*[J], 2022, 271: 108 171
 [22] Stukowski A. *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*[J], 2010, 18: 15 012
 [23] Wang Q, Ding H S, Zhang H L *et al. Materials Characterization*[J], 2018, 137: 133
 [24] Vollmayr-Lee K. *American Journal of Physics*[J], 2020, 88(5): 401
 [25] Zope R R, Mishin Y. *Physical Review B*[J], 2003, 68(2): 024 112
 [26] Zhu Y, Zhang Y C, Qi S H *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2016, 45(4): 897

Effect of Repeated Nanocutting on Surface Quality and Subsurface Damage of γ -TiAl Alloy

Liu Yang^{1,2}, Feng Ruicheng^{1,2}, Yao Peng^{1,2}, Li Haiyan^{1,2}, Cao Hui^{1,2}, Lei Chunli^{1,2}, Li Jianhua^{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 repeated nanocutting process of single crystal γ -TiAl alloy was simulated by molecular dynamics method. The evolution of cutting force and microstructure defects in the repeated nanocutting process was studied. The roughness and residual stress of the machined surface were analyzed, and the difference between the repeated nanocutting and the single cutting was discussed. The results show that the repeated nano-cutting process is accompanied by the formation and annihilation of dislocations, and the fluctuation of dislocation line length in the second cutting process is less than that in the first cutting process, and the cutting state is more stable. The cutting force increases rapidly in the initial stage of machining, and then the cutting force enters the stable machining stage. At the same time, it is found that the cutting force of the second cutting is less than that of the first cutting. After the second cutting, the residual stress distribution is more uniform and the residual compressive stress of the machined surface increases due to the twice extrusion of the tool. Secondary machining can improve surface quality and reduce subsurface damage, while the increase in residual compressive stress and energy required for machining reduces the plasticity of the machined surface, so that the third machining has no obvious improvement in surface and subsurface quality.

Key words: repeated cutting; γ -TiAl alloy; subsurface damage; molecular dynamics; dislocation

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