

微量润滑磨削界面的分子动力学模拟

王德祥^{1,2}, 孙树峰^{1,2}, 唐沂珍^{2,3}, 刘新福^{1,2}, 江京亮^{1,2}

(1. 青岛理工大学机械与汽车工程学院, 266525, 山东青岛; 2. 青岛理工大学工业流体节能与污染控制教育部重点实验室, 266525, 山东青岛; 3. 青岛理工大学环境与市政工程学院, 266033, 山东青岛)

摘要: 为了研究微量润滑磨削界面的冷却润滑效应,以离子液体作为微量润滑磨削液,对微量润滑磨削界面进行了分子动力学模拟研究。分析了微量润滑磨削界面的热量分配关系,揭示了磨削界面热量的产生与分散机制,研究了磨削过程中磨削力、磨削力比以及磨粒工件之间液膜状态的变化。结果表明:离子液体雾滴在磨削界面的冷却效果显著,工件的热量分配比由干磨时的 74.1% 减小到微量润滑磨削时的 68%~69%;磨削热主要来源于剪切变形区内工件材料发生的晶格变形,其次是磨粒与工件之间的摩擦;磨削热首先在工件基体、磨粒和切屑之间传递,然后经切屑传递给雾滴,雾滴再传递给磨粒;磨削力随未变形切屑厚度的增加而线性增大;当磨粒切入工件形成切削作用时,磨粒-工件界面和磨粒-切屑界面会产生极高的挤压应力,导致难以形成边界润滑膜。

关键词: 微量润滑;磨削;冷却润滑;分子动力学;离子液体

中图分类号: TG580.1 **文献标志码:** A

DOI: 10.7652/xjtuxb202012020 **文章编号:** 0253-987X(2020)12-0168-08



Molecular Dynamics Simulation for Grinding Interface Under Minimum Quantity Lubrication

WANG Dexiang^{1,2}, SUN Shufeng^{1,2}, TANG Yizhen^{2,3}, LIU Xinfu^{1,2}, JIANG Jingliang^{1,2}

(1. School of Mechanical and Automotive Engineering, Qingdao University of Technology, Qingdao, Shandong 266525, China; 2. MOE Key Lab of Industrial Fluid Energy Conservation and Pollution Control, Qingdao University of Technology, Qingdao, Shandong 266525, China; 3. School of Environmental and Municipal Engineering, Qingdao University of Technology, Qingdao, Shandong 266033, China)

Abstract: To research the cooling and lubricating effects on the grinding interface under minimum quantity lubrication, a molecular dynamics simulation of grinding interface under minimum quantity lubrication with ionic liquid is performed. The heat partition relationship on the grinding interface is analyzed, and the generation and transfer mechanisms of grinding heat on the grinding interface are revealed. The variations of grinding force, grinding force ratio, and the liquid film between abrasive grain and workpiece are investigated. The results show that the cooling effect of the ionic liquid droplet is outstanding. The heat partition ratio of the workpiece reaches 74.1% in dry grinding, and under minimum quantity lubrication, the heat partition ratio of the workpiece is reduced to 68% - 69%. Grinding heat is mainly generated from the lattice deformation of the workpiece material in the shear zone, and the secondary heat source is friction between the abrasive grain and the workpiece. The generated heat is firstly transferred into the workpiece

substrate, the abrasive grain, and the grinding chip directly, afterwards, a portion of heat in the grinding chip is transferred into the ionic liquid droplet, then a portion of the heat in the ionic liquid droplet is transferred into the abrasive grain. The grinding force linearly increases with the increasing undeformed chip thickness. As the abrasive grain cutting into the workpiece, highly compressive stress appears on the grain-workpiece and grain-chip interfaces, which leads to difficulty in forming a boundary lubricating film.

Keywords: minimum quantity lubrication; grinding; cooling and lubricating; molecular dynamics; ionic liquid

对磨削区进行有效的冷却润滑是提高被磨零件表面完整性的重要基础。微量润滑技术采用极微量的磨削液与高压空气混合雾化后喷向磨削区,利用高速运动的气雾射流对磨削区进行冷却润滑。在高压空气作用下,磨削液散裂成为雾滴,以极高的速度和动能有效冲破砂轮表面“气障”层,进入磨削区,起到冷却和润滑作用。目前,微量润滑磨削的研究主要集中于磨削液属性(常规磨削液^[1]或纳米流体^[2])、供液参数^[3](磨削液流量、高压空气的压力)和喷嘴的布置^[3](位置和角度)等因素对气雾射流冷却和润滑性能的影响规律,利用磨削实验从宏观角度研究微量润滑技术的磨削加工性能。由于磨粒-工件接触区和磨粒-切屑接触区极小,难以利用微量润滑磨削实验直接观测磨削液雾滴的微观作用,因此对于微量润滑磨削界面的冷却润滑效应,还缺乏系统的微观尺度研究。

离子液体是一种完全由正负离子构成的、在室温或室温附近呈液态的离子化合物,其液态性质和离子存在形式使其展现出优良的传热性能。研究表明,离子液体具有导热性能好、不可燃、热稳定性高、低蒸气压、面向环境友好等优点,是一类极具发展前途的传热介质^[4]。更进一步的研究表明,离子液体能够在多种摩擦副表面形成具有优良减摩抗磨性能的边界润滑膜^[5]。Pham 等将离子液体作为切削液应用到铝合金的微铣加工中,以切削力、表面形貌和表面粗糙度为指标,评价离子液体的润滑性能^[6]。研究表明,与传统的油基切削液相比,离子液体具有更好的润滑性能。因此,基于优良的传热和润滑性能,离子液体展现出了作为微量润滑磨削液的巨大潜质。

分子动力学模拟是进行微观尺度研究的有效方法,能够从原子尺度直观地展示模拟体系的微观演变过程。目前,分子动力学模拟在纳米切削领域应用广泛,已成功用于纳米切削机理、刀具磨损和晶体缺陷演变等研究中。因此,本文以离子液体作为微

量润滑磨削液,对微量润滑磨削界面进行分子动力学模拟,从原子尺度研究微量润滑磨削界面的冷却润滑效应。

1 分子动力学模型

本文采用分子动力学模拟软件 LAMMPS 进行模拟计算^[7],利用可视化软件 OVITO 对模拟结果进行可视化,建立的微量润滑磨削界面分子动力学模型如图 1 所示。

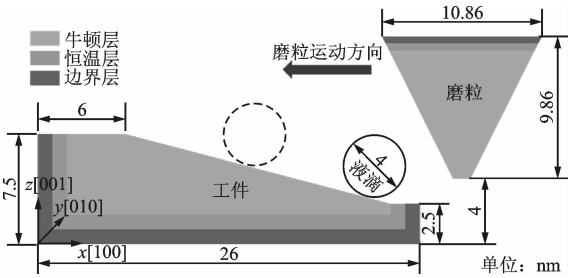


图 1 微量润滑磨削界面分子动力学模型

1.1 建立模型

工件材料是单晶镍铁铬(Ni-Fe-Cr)系镍基合金,具有面心立方结构,晶格常数是 0.352 nm^[8]。为简化模型,将工件材料设定为镍铁铬 3 组分合金,镍、铁和铬原子数百分比分别是 52%、30%和 18%,3 种元素在工件材料内部随机分布^[8]。为了贴近宏观磨削状态,将磨削区建立为倾斜平面,如图 1 所示。工件宽度为 15 nm,沿工件长度和高度方向(x 和 z 方向)的尺寸如图 1 所示。在模拟时,将 x 和 z 方向设置为固定边界条件,将 y 方向设置为周期性边界条件。工件分为边界层、恒温层和牛顿层,边界层和恒温层厚度都是 1 nm。在整个模拟过程中,边界层原子固定不动,以防止工件在磨削过程中发生整体移动。恒温层温度保持恒定,以使磨削过程中产生的热量及时传导出,避免温度过高造成模拟体系崩溃。牛顿层是参与磨削的部分,牛顿层和恒温层原子的运动符合牛顿第二运动定律。

磨粒材料是单晶立方氮化硼,具有类金刚石晶格结构,晶格常数是 $0.362\text{ nm}^{[8]}$ 。将磨粒建立为正四棱锥体,底面边长和棱锥高都是 10.86 nm ,沿棱锥高将锥顶切除,切除高度是 1 nm ,如图 1 所示。将磨粒形状建立为切除锥顶的正四棱锥体的原因:一是立方氮化硼(CBN)磨粒的顶尖形状近似于多棱锥^[9];二是磨削过程中磨粒发生磨损,磨粒顶尖将会被磨平。磨粒分为边界层、恒温层和牛顿层,边界层和恒温层的厚度都是 0.5 nm 。

离子液体采用 1-丁基-3-甲基咪唑四氟硼酸盐 [BMIM][BF₄],其初始构型通过量子化学计算获得。首先,采用 GaussView 建立 BMIM⁺ 阳离子和 BF₄⁻ 阴离子的初始构型。然后,采用 Gaussian 09^[10] 在 B3LYP/6-31 G(d,p) 基组水平上,分别对阴、阳离子进行结构优化。最后,在 B3LYP/6-31 G(d,p) 基组水平上,计算并最终得到阴阳离子对的最优构型,如图 2 所示(图中字母表示元素符号,数字表示原子序号)。所有优化的结构都采用频率验证,保证没有虚频,以确保获得稳定的构型。在得到 [BMIM][BF₄] 的最优构型后,采用 Packmol 和 Moltemplate 构建离子液体雾滴的初始球形结构,雾滴直径是 4 nm ,由 100 个离子对随机组成。雾滴原子分为恒温层和牛顿层两种类型,距离球心 0.5 nm 半径范围内的原子是恒温层原子,其他原子是牛顿层原子。

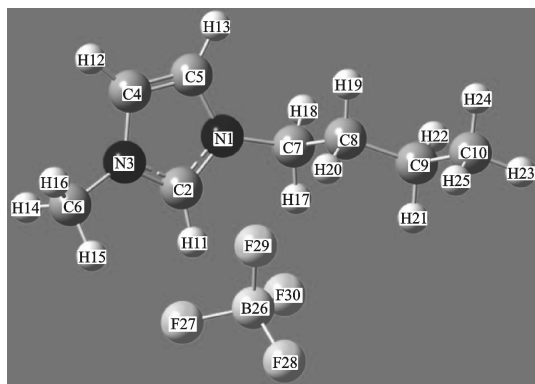
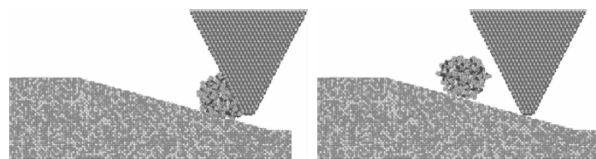


图2 [BMIM][BF₄]的最优构型

1.2 模拟细节

总共进行 3 组模拟计算:Ⅰ干磨;Ⅱ雾滴球心初始坐标在 $(22.5, 7.5, 5.5)\text{ nm}$,如图 1 中实线圆圆心所在位置;Ⅲ雾滴球心初始坐标在 $(14.0, 7.5, 7.5)\text{ nm}$,如图 1 中虚线圆圆心所在位置。第Ⅰ组模拟作为参照组,与后两组模拟进行对比,对比结果用于评价离子液体的冷却和润滑性能。第Ⅱ组模拟,在磨粒磨削工件之前,磨粒工件之间已经形成液

膜,如图 3a 所示。第Ⅲ组模拟,磨粒刚开始磨削工件时,磨粒与工件之间并没有液膜存在,如图 3b 所示,直到磨粒与雾滴接触,磨粒与工件之间才形成液膜。利用第Ⅱ组和第Ⅲ组的模拟计算结果,研究微量润滑磨削界面的冷却润滑效应。



(a)第Ⅱ组模拟

(b)第Ⅲ组模拟

图3 磨削开始阶段磨粒与工件之间的液膜状态

每组模拟计算都分为 4 个阶段:①在 NVT 系综下采用 Berendsen 热浴控温,分别将工件、磨粒和雾滴(干磨时无雾滴)弛豫至平衡态,平衡温度是 298 K ;②利用已弛豫至平衡态的工件、磨粒和雾滴构建模拟体系,然后采用共轭梯度法对模拟体系进行能量优化;③在 NVT 系综下采用 Berendsen 热浴控温,将模拟体系弛豫至平衡态,平衡温度也是 298 K ;④在 NVE 系综下,磨粒沿 x 方向以 0.5 m/s 的速度磨削工件,行程是 26 nm ,并采用 Nose-Hoover 热浴将工件、磨粒和雾滴的恒温层温度控制在 298 K 。在以上各阶段的计算中,时间步长都是 2 fs 。在第 4 阶段的计算中,模拟体系处于 NVE 系综下,整个体系总能量守恒,能量守恒关系如下

$$W = Q_g + Q_w + Q_f \quad (1)$$

$$W = \int F_x dx \quad (2)$$

式中: W 是切向磨削力 F_x 所做的功,是模拟体系增加的能量; Q_g 、 Q_w 和 Q_f 分别是经磨粒、工件和雾滴的恒温层疏导出模拟体系的能量,也是磨削过程中分别传入磨粒、工件和雾滴的热量,可通过 LAMMPS 模拟计算输出,下标 g 、 w 和 f 分别表示磨粒、工件和雾滴。因此,式(1)所表达的能量守恒关系也可用来描述磨粒、工件和雾滴之间的热量分配关系,即

$$R_g = Q_g/W; R_w = Q_w/W; R_f = Q_f/W \quad (3)$$

式中: R_g 、 R_w 、 R_f 分别是微量润滑磨削时磨粒、工件和雾滴之间的热量分配比。

1.3 势函数

磨粒内部原子之间的相互作用采用 LOS 等建立的扩展 Tersoff 势函数^[11]描述,其表达式为

$$E(r_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} f_c(r_{ij}) [V_R(r_{ij}) - B_{ij} V_A(r_{ij})] \quad (4)$$

式中: $E(r_{ij})$ 是原子间相互作用能; r_{ij} 是原子间距; $f_c(r_{ij})$ 是截断函数; $V_R(r_{ij})$ 是排斥势; $V_A(r_{ij})$ 是吸引势; B_{ij} 是总键级。采用的扩展 Tersoff 势函数参数详见文献[11]。

工件内部原子之间的相互作用采用 BONNY 等^[12]建立的嵌入原子势(EAM)势函数描述,其表达式为

$$E(r_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N V_{t_i t_j}(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F_{t_i}(\rho_i) \quad (5)$$

式中: N 是工件原子总数; $V_{t_i t_j}(r_{ij})$ 是对势,下标 t_i 和 t_j 表示原子 i,j 的元素类型; $F(\rho_i)$ 表示嵌入能; ρ_i 表示原子 i 周围的电子云密度。采用的 EAM 势函数参数详见文献[12]。

[BMIM][BF₄]离子液体内部原子之间的相互作用采用文献[13]建立的全原子力场描述,公式为

$$E = \sum K_r(r-r_0)^2 + \sum K_\theta(\theta-\theta_0)^2 + \sum \frac{K_\phi}{2}[1+\cos(n\phi-\gamma)] + \sum_{i<j} 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum_{i<j} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \quad (6)$$

式中:右侧第 1 项是键伸缩势, K_r 是键长伸缩能量系数, r 和 r_0 分别是键长和平衡键长;第 2 项是键角弯曲势, K_θ 是键角弯曲能量系数, θ 和 θ_0 分别是键角和平衡键角;第 3 项是二面角扭转势, K_ϕ 是二面角扭转能量系数, n 是多重相位因子, γ 是平衡二面角;第 4 项是范德华作用势, ϵ_{ij} 是势阱深度, σ_{ij} 是第 i 个和第 j 个原子之间范德华作用势能等于 0 时的距离;第 5 项是静电相互作用势, q_i 和 q_j 分别表示第 i 个和第 j 个原子的电荷。采用[BMIM][BF₄]离子液体全原子力场参数详见文献[13]。

工件和磨粒原子之间的相互作用采用 Morse 势函数描述,表达式为

$$E(r_{ij}) = D[e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}] \quad (7)$$

式中: $E(r_{ij})$ 是原子间相互作用能; D 是结合能; α 是弹性系数。采用的 Morse 势函数参数列于表 1,截断半径设置为 0.25 nm。

雾滴和工件、磨粒原子之间的相互作用采用 Lennard-Jones 势函数描述,表达式为

$$E(r_{ij}) = 4\epsilon_{ij} \left(\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right) \quad (8)$$

式中: ϵ 是能量常数; σ 是距离常数。采用的 Lennard-Jones 势函数参数列于表 2,这些参数通过普遍的力场模型计算获得^[14],截断半径设置为 1.5 nm。

表 1 Morse 势函数参数^[8]

工件原子	磨粒原子	D/eV	α/nm^{-1}	r_0/nm
Ni	N	1.550	2 160	0.186 0
	B	1.122	1 340	0.213 1
Fe	N	1.540	2 144	0.187 7
	B	1.1175	1 324	0.163 39
Cr	N	1.588	2 240	0.185 2
	B	1.149	1 416	0.162 24

表 2 Lennard-Jones 势函数参数

雾滴原子	工件原子	磨粒原子	ϵ/eV	σ/nm
N	Ni	B	0.004 832 7	0.344 91
		N	0.002 992 1	0.326 07
		Fe	0.001 395 1	0.289 27
		Cr	0.001 395 1	0.297 69
		B	0.001 298 8	0.292 75
		N	0.005 961 6	0.353 42
C	Ni	N	0.003 691 0	0.334 58
		Fe	0.001 721 0	0.297 78
		Cr	0.001 721 0	0.306 20
		B	0.001 602 1	0.301 26
		N	0.003 859 2	0.310 43
		Fe	0.002 389 4	0.291 59
H	Ni	Cr	0.001 114 0	0.254 80
		Fe	0.001 114 0	0.263 22
		Cr	0.001 037 1	0.258 27
		B	0.007 805 5	0.363 75
		N	0.004 832 7	0.344 91
		Fe	0.002 253 3	0.308 12
B	Ni	Cr	0.002 253 3	0.316 54
		B	0.002 097 7	0.311 59
		N	0.004 113 9	0.331 73
		Fe	0.002 547 1	0.312 88
		Ni	0.001 187 6	0.276 09
		Fe	0.001 187 6	0.284 51
F	Ni	Cr	0.001 105 6	0.279 56

2 冷却效应分析

2.1 能量守恒分析

如前所述,总共进行 3 组模拟计算,每组模拟计算都分为 4 个阶段,磨粒磨削工件处于第 4 阶段的计算中。在磨粒磨削工件过程中,模拟体系处于 NVE 系综下,模拟体系的总能量守恒,如图 4 所示。

图中“恒温层输出能量”是指经工件、磨粒和雾滴的恒温层疏导出模拟体系的能量总和。由图4可知,切向磨削力所做的功与恒温层输出的能量基本吻合,两者之间的少许差异是由数值计算误差造成的。图4验证了模拟体系的能量守恒关系,也证明了模拟计算的结果是可信的。

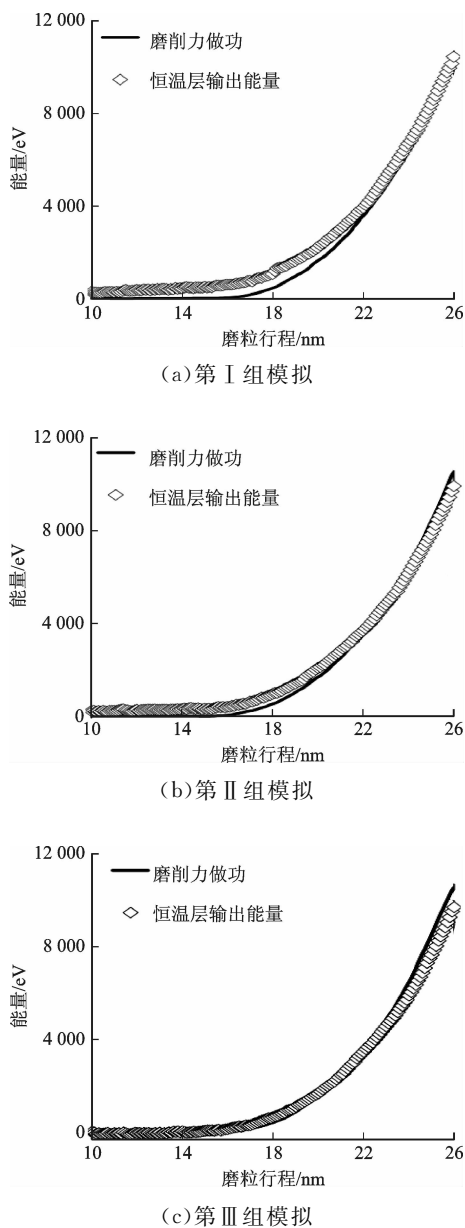
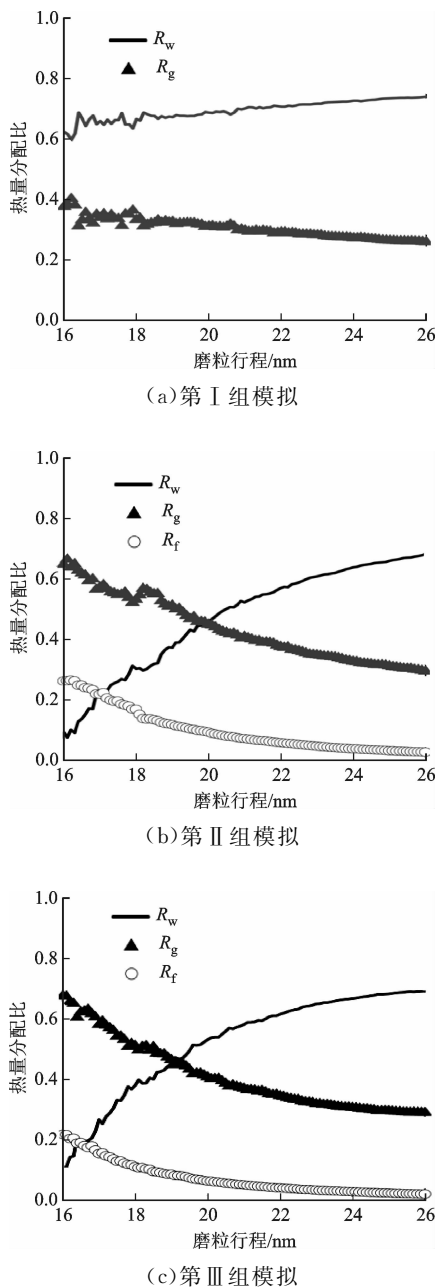


图4 模拟体系能量变化曲线

2.2 热量分配关系

在磨粒磨削过程中,磨粒、工件和雾滴之间的热量分配比变化曲线如图5a~5c所示,随着磨粒行程的增加,未变形切屑厚度随之线性增大。由图5可知,随着磨削过程的继续,工件的热量分配比逐渐增大,磨粒和雾滴的热量分配比逐渐减小。作者前期

分析了宏观尺度下氧化铝磨粒与淬硬轴承钢 GCr15 工件之间的热量分配关系,并得到了工件的热量分配比沿磨削区的分布^[15],如图5d所示。其中, l 表示磨削区内任意点的位置, $l \in [0, l_c]$, l_c 是磨削区长度,随着 l/l_c 的增加,未变形切屑厚度也随之线性增大。对比分析图5a~5d可知,本文得到的原子尺度下的工件热量分配比,在数值上与宏观尺度下的工件热量分配比有一定差异,这是因为本研究中磨粒和工件材料与图5d中的不同。但是,工件热量分配比的变化趋势是一致的,即随着未变形切屑厚度的增加,工件热量分配比逐渐增大,这也间接证明了本文模拟计算结果的正确性。



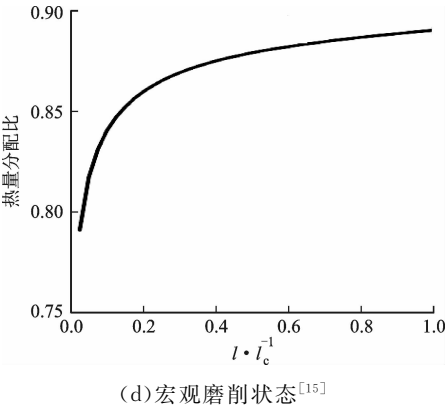


图 5 磨削过程中热量分配比的变化曲线

磨粒结束磨削行程后,将 3 组模拟计算的热量分配比列于表 3。由表 3 可知,离子液体雾滴的冷却效应明显,工件热量分配比由于磨时的 74.1%减小到微量润滑磨削时的 68%~69%,由雾滴带走的热量占总热量的 2%左右。相比于第Ⅲ组,第Ⅱ组中雾滴的热量分配比更大,这意味着第Ⅱ组中由雾滴疏导出能量更多。这是因为第Ⅱ组中的雾滴早于第Ⅲ组在磨粒工件之间形成液膜,发挥冷却作用的时间更长,如图 3 所示。

表 3 磨粒结束磨削行程时的热量分配比

对象	热量分配比/%		
	第Ⅰ组	第Ⅱ组	第Ⅲ组
工件	74.1	68.1	69.2
磨粒	25.9	29.3	28.9
雾滴		2.6	1.9

2.3 磨削界面热量的产生与传散机制

当磨粒结束磨削行程时,模拟体系的温度分布如图 6 所示。本文采用近邻平均法计算模拟体系的温度分布,基本步骤如下:①在进行分子模拟计算时,计算并输出模拟体系中所有原子的动能;②逐个扫描模拟体系中的所有原子,以被扫描原子的坐标为球心,以 r_c (本文取 $r_c=1\text{ nm}$) 为半径做球面,统计球面内的原子总数 N ,并计算球面内所有原子的动能总和 E_K ;③利用下式计算被扫描原子的温度 T

$$E_K = \frac{3}{2} N k_B T \tag{9}$$

式中: k_B 是玻尔兹曼常数。

由图 6a 可知,干磨时磨削温度的最高值出现在磨粒前方工件材料的剪切变形区内,这是由于磨粒的推挤作用使得工件材料在剪切变形区内发生了强烈的晶格变形,从而产生了极高的热量。这也说明

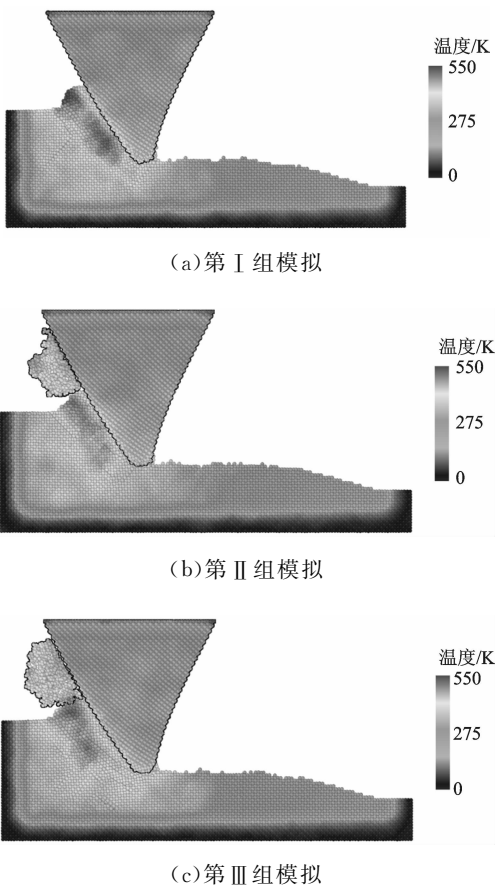


图 6 模拟体系的温度分布云图

在单颗磨粒磨削过程中,磨削热主要来源于剪切变形区内工件材料发生的强烈的晶格变形,其次才是磨粒与工件之间的摩擦。

由图 6 可知,相比于干磨,微量润滑磨削时高温区的面积明显减小,冷却效果显著,热量由剪切变形区经切屑传递给离子液体雾滴。通过对比分析图 6,可得单颗磨粒微量润滑磨削界面热量的传散机制:①工件材料的剪切变形区是磨削总热源,其内部的热量首先在工件基体、磨粒和切屑之间传递;②由于切屑的温度高于雾滴的温度,因此热量流经切屑后再传递给雾滴;③在雾滴和磨粒接触区附近,雾滴的温度高于磨粒,因此一部分传递给雾滴的热量,还会再传递给磨粒,表 3 中的数据也对此进行了证实。如表 3 所示,干磨时磨粒的热量分配比是 25.9%,微量润滑磨削时磨粒的热量分配比是 29%左右,磨粒热量分配比的增大说明一部分传入雾滴的热量后续会再传递给磨粒。综上,单颗磨粒微量润滑磨削界面热量的传散路径如图 7 所示。

3 润滑效应分析

磨削力和磨削力比是评价离子液体雾滴润滑性

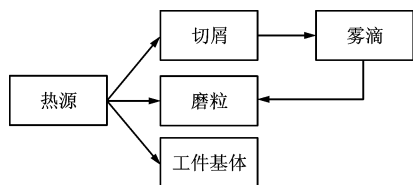


图7 磨削界面热量分散路径

能的重要指标,磨削力比是切向磨削力 F_x 与法向磨削力 F_z 之间的比值。在单颗磨粒微量润滑磨削过程中,磨削力的变化曲线如图8所示,磨削力比的变化曲线如图9所示。由图8可知,随着磨削过程的继续,磨削力基本成线性增大趋势,这说明磨削力随着未变形切屑厚度的增加而线性增大。磨削力的波动是由磨削过程中工件内部的晶格变形、晶格重构和非晶相变造成的^[16]。

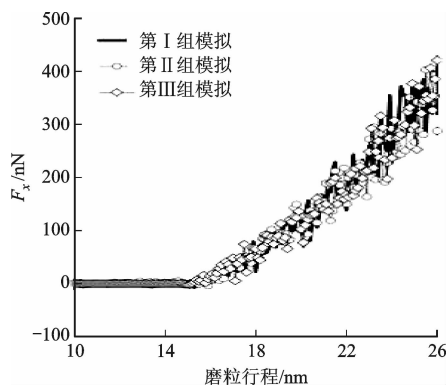
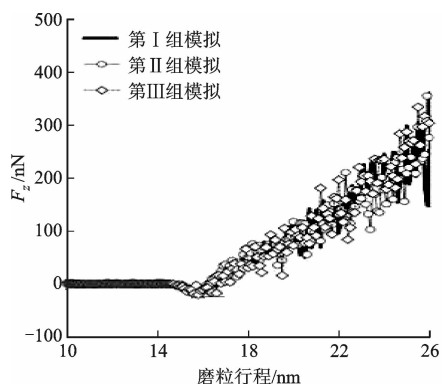
(a) 切向磨削力 F_x (b) 法向磨削力 F_z

图8 磨削过程中磨削力的变化曲线

由图9可知,在磨粒开始磨削工件之初,磨削力比剧烈变化,随着磨削过程的继续,磨削力比逐渐趋于稳定,在其平均值(约为1.4)上下小幅波动。在宏观尺度下,磨削力比一般小于1,这与本文得到的原子尺度下的磨削力比有很大差距。这是因为在建立分子动力学模型时,将磨粒和工件材料建立为无缺陷的单晶材料,而在工程实际当中,磨粒和工件材

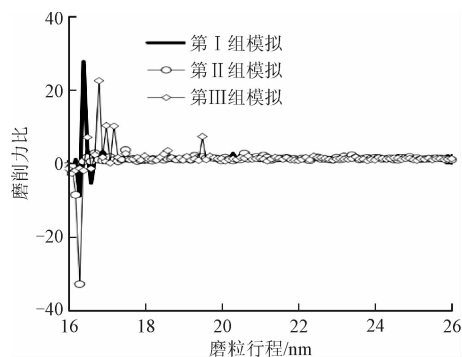


图9 磨削过程中磨削力比的变化曲线

料都是存在缺陷的多晶材料,在实际磨削过程中,去除单位体积材料所需的切向磨削力要比分子动力学模拟时小很多。

由图8和图9可知,3组模拟的磨削力和磨削力比的变化曲线基本一致,这表明,在磨粒磨削过程中,离子液体雾滴并未起到有效的润滑作用。图10也表明,在磨粒磨削过程中,虽然磨粒工件之间一直存有液膜,但是液膜被挤出了磨粒-工件界面和磨粒-切屑界面,并未在磨粒-工件界面和磨粒-切屑界面形成具有减摩作用的润滑膜。以上研究表明,在磨粒磨削过程中,如果磨粒切入工件形成切削作用,那么磨粒-工件界面和磨粒-切屑界面难以形成边界润滑膜。这是因为,磨粒切入工件形成切削作用后,磨粒-工件界面和磨粒-切屑界面的挤压应力很大,远超过边界润滑膜的承载能力,在极高的挤压应力的作用下,润滑剂分子会被挤出磨粒-工件界面和磨粒-切屑界面。在宏观磨削状态下,微量润滑技术的润滑作用明显,润滑机制是在磨粒-工件界面和磨粒-切屑界面形成了边界润滑膜。为了直观展示边界润滑膜的形成机制,在建立分子动力学模型时,应考虑磨粒和工件的表面形貌。但是,本文在建立分子动力学模型时,将磨粒和工件表面建立为光滑表

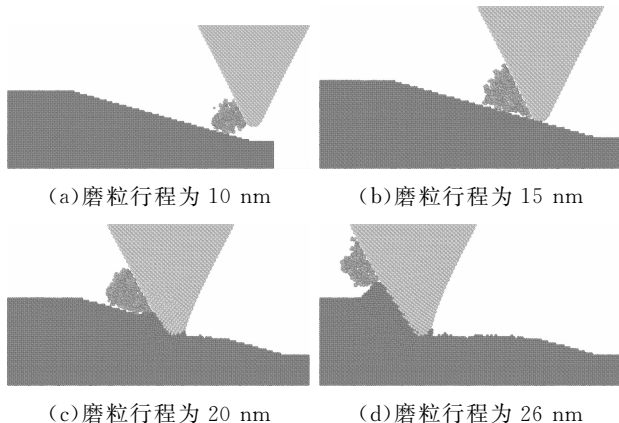


图10 第II组模拟磨粒与工件之间液膜状态的变化

面,没有考虑磨粒和工件的表面形貌,因此没有仿真得到具有减摩作用的边界润滑膜。对于磨粒-工件界面和磨粒-切屑界面边界润滑膜的形成机制,将会在后续工作中进一步深入研究。

4 结 论

(1)离子液体雾滴在磨削界面的冷却效果显著。由于离子液体雾滴的冷却作用,工件的热量分配比由干磨时的 74.1%减小到微量润滑磨削时的 68%~69%。

(2)在磨粒磨削过程中,磨削热主要来源于磨粒前方剪切变形区内工件材料发生的强烈的晶格变形,其次才是磨粒与工件之间的摩擦。

(3)磨削热首先在工件基体、磨粒和切屑之间传递,热量流经切屑后再传递给雾滴,其中一部分传递给雾滴的热量,还会再传递给磨粒。

(4)磨削力随着未变形切屑厚度的增加而线性增大。当磨粒切入工件形成切削作用时,磨粒-工件界面和磨粒-切屑界面会产生极高的挤压应力,导致难以形成边界润滑膜。

参考文献:

- [1] GARCIA M V, LOPES J C, DINIZ A E, et al. Grinding performance of bearing steel using MQL under different dilutions and wheel cleaning for green manufacture [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2020, 257: 120376.
- [2] LI Ming, YU Tianbiao, ZHANG Rongchuang, et al. Experimental evaluation of an eco-friendly grinding process combining minimum quantity lubrication and graphene-enhanced plant-oil-based cutting fluid [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2020, 244: 118747.
- [3] TAWAKOLI T, HADAD M J, SADEGHI M H. Influence of oil mist parameters on minimum quantity lubrication — MQL grinding process [J]. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 2010, 50 (6): 521-531.
- [4] 汪福宪. 石墨烯/离子液集热纳米流体的热物性及光热转换性能 [D]. 广州: 华南理工大学, 2013: 7-8.
- [5] SOMERS A E, HOWLETT P C, MACFARLANE D R, et al. A review of ionic liquid lubricants [J]. *Lubricants*, 2013, 1(1): 3-21.
- [6] PHAM M Q, YOON H S, KHARE V, et al. Evaluation of ionic liquids as lubricants in micro milling-process capability and sustainability [J]. *Journal of Cleaner Production*, 2014, 76: 167-173.
- [7] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19.
- [8] FAN Yihang, WANG Wenyuan, HAO Zhaopeng, et al. Work hardening mechanism based on molecular dynamics simulation in cutting Ni-Fe-Cr series of Ni-based alloy [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, 819: 153331.
- [9] 宿崇, 丁江民, 许立, 等. 单颗立方氮化硼磨粒切削特性及工件材料变形行为的微观力学分析 [J]. *兵工学报*, 2012, 33(4): 425-431.
- SU Chong, DING Jiangmin, XU Li, et al. Cutting characteristics of single CBN abrasive grain and micro-mechanics analysis of workpiece material deformation behavior [J]. *Acta Armamentarii*, 2012, 33(4): 425-431.
- [10] FRISCH M J, TRUCKS G W, SCHLEGEL H B, et al. Gaussian 09 [CP]. Wallingford, CT, USA: Gaussian Inc., 2010.
- [11] LOS J H, KROES J M, ALBE K, et al. Extended Tersoff potential for boron nitride: energetics and elastic properties of pristine and defective h-BN [J]. *Physical Review: B*, 2017, 96(18): 1-11.
- [12] BONNY G, TEREITYEV D, PASIANOT R C, et al. Interatomic potential to study plasticity in stainless steels: the FeNiCr model alloy [J]. *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*, 2011, 19 (8): 085008.
- [13] LIU Zhiping, HUANG Shiping, WANG Wenchuan. A refined force field for molecular simulation of imidazolium-based ionic liquids [J]. *The Journal of Physical Chemistry: B*, 2004, 108(34): 12978-12989.
- [14] LIANG Ting, ZHANG Ping, YUAN Peng, et al. In-plane thermal transport in black phosphorene/graphene layered heterostructures: a molecular dynamics study [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2018, 20 (32): 21151-21162.
- [15] WANG Dexiang, GE Peiqi, BI Wenbo, et al. Grain trajectory and grain workpiece contact analyses for modeling of grinding force and energy partition [J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2014, 70(9/10/11/12): 2111-2123.
- [16] 郭晓光. 单晶硅纳米级磨削过程的分子动力学仿真研究 [D]. 大连: 大连理工大学, 2008: 69-70.

(编辑 杜秀杰)