

等离子体处理对45钢力学性能影响的试验及 分子动力学模拟研究

彭照波 孔金星* 杜东兴 罗涵赜 岳恒

中国工程物理研究院机械制造工艺研究所, 绵阳, 621900

摘要:为探明等离子体处理对45钢材料力学性能的影响规律,采用试验与分子动力学模拟相结合的方法,对处理前后45钢材料力学性能的变化进行对比研究。试验结果表明:等离子体处理后,45钢材料硬度和拉伸力学性能明显下降;在1、5、10 min的处理时间下,纳米硬度分别降低12%、21%和28%,且处理时间越长,改性效果越好,并且改性效果的持续时间均长达20 h以上;拉伸试样厚度为0.1、0.15、0.2 mm时,抗拉强度分别降低3.3%、4.5%和5.3%,断后伸长率分别降低39.69%、42.17%和42.49%。分子动力学仿真结果表明,等离子体改性降低了45钢材料中Fe-Fe键的数量和强度,导致材料屈服强度和表面硬度降低,与试验所得结果基本一致。

关键词:等离子体;分子动力学;纳米硬度;抗拉强度;45钢

中图分类号:TH142.1

DOI:10.3969/j.issn.1004-132X.2025.10.004

开放科学(资源服务)标识码(OSID):



Experimental and Molecular Dynamics Simulation for Mechanics Properties of 45 Steel Treated by Plasma

PENG Zhaobo KONG Jinxing* DU Dongxing LUO Hankun YUE Hen

Institute of Mechanical Manufacturing Technology, China Academy of Engineering Physics, Mianyang, Sichuan, 621900

Abstract: To investigate the influences of plasma treatment on the mechanics properties of 45 steel, the changes of mechanics properties of 45 steel before and after treatment were studied by combining experiments and molecular dynamics simulation. The test results show that the hardness and tensile mechanics properties of 45 steel are obviously decreased after plasma treatment. Under the treatment durations of 1, 5 and 10 min, the nano-hardness decreased by 12%, 21% and 28% respectively, and the longer the treatment time, the better the modification effect, and the duration of the modification effect is more than 20 h. When the thickness of tensile specimens is as 0.1, 0.15 and 0.2 mm, the tensile strength decreases by 3.3%, 4.5% and 5.3%, and the elongation after fracture decreases by 39.69%, 42.17% and 42.49%, respectively. The molecular dynamics simulation results show that the number and strength of Fe-Fe bonds in 45 steel are reduced after plasma modification, resulting in the reduction of yield strength and surface hardness of the materials, which is basically consistent with the experimental results.

Key words: plasma; molecular dynamics; nano-hardness; tensile strength; 45 steel

0 引言

45钢因其优良的耐高温、耐腐蚀性及经济性,常用于制作各种超高精度的零部件,如模具、金属反射镜等^[1-2]。采用金刚石刀具进行超精密切削是实现45钢构件超高精度加工的重要途径^[3-4]。金刚石刀具直接切削45钢材料时会发生剧烈的化学磨损,导致加工精度和加工质量的急剧下降以及金刚石刀具的快速磨损^[5]。为解决这一问题,国内外学者从工艺优化^[6-7]、刀具改性^[8]和

工件改性^[9-10]等方面开展了广泛研究,其中常温等离子体辅助表面材料改性技术具有几乎无改性层残留、不影响加工后工件性能、有效抑制刀具磨损等优点。

经过等离子体处理后,被切削材料屈服强度及硬度等力学性能降低,可切削性提高,可有效抑制刀具磨损。LIU等^[11]将常压等离子体用于辅助纯铁材料的精密切削,经过等离子体处理后,表面粗糙度和切削力明显降低,刀具磨损得到有效抑制。LYU等^[12-13]先将等离子体辅助刻蚀引入单晶氧化镧的超精密加工中,实现了表面粗糙度为0.45 nm的超光滑表面加工;后开发了电感耦合等

收稿日期:2024-12-26

基金项目:国家重点研发计划(J0149(2)-2325-KYF)

离子体辅助切削的新方法并将其应用在多晶锡的亚纳米精加工中,得到了Sa最低为0.80 nm的表面粗糙度,并有效降低了加工残余应力。XU等^[14]将冷等离子射流作为辅助工艺,有效抑制了金刚石切削黑色金属时的刀具磨损。KONG等^[15]通过分子动力学模拟与试验相结合的方式,研究了等离子体处理对纯铁材料的硬度和拉伸力学性能的改性机理。曹发祥等^[16]通过试验方式研究了等离子体处理对Nd:YAG晶体硬度的改性机理,试验结果表明改性后材料硬度呈现出保持、下降与回复、稳定的阶段性变化。

综上所述,通过等离子体处理实现工件表面改性的切削方式,对提高工件表面质量、降低金刚石刀具磨损具有重要的作用,因此,探明等离子体处理对黑色金属材料的改性作用机理是改进切削工艺的重要前提。本文采用常温等离子体装置对45钢材料表面进行改性,通过试验和分子动力学方法,对45钢改性前后的硬度、拉伸性能等力学参数进行对比研究。

1 试验方法与结果分析

1.1 试验材料与样品准备

1.1.1 纳米压痕试验样品准备

试验所用45钢材料产自太原钢铁厂,取样后加工成20 mm × 20 mm × 10 mm的样品,如图1a所示。为了接近实际超精密切削过程中的工件状态,通过磨抛处理将样品上表面粗糙度Sa加工至优于30 nm,图1b所示为工件在白光干涉仪下的表面形貌,取样范围为700 μm × 530 μm。

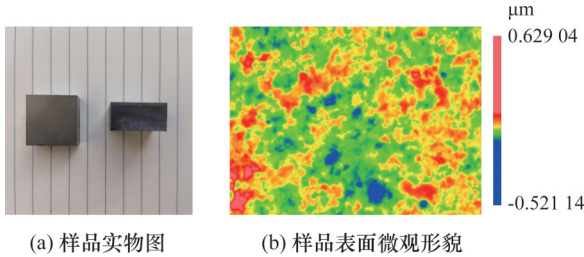


图1 样品准备

Fig.1 Sample preparation

1.1.2 拉伸试验样品准备

等离子体处理后改性层厚度仅为微米量级,为更明显地观察改性处理对工件拉伸性能的影响,需将样品制备成厚度尽可能小的薄板拉伸试样。选用冷轧态45钢薄板原料,从原料上取样后加工成图2所示的矩形横截面非比例拉伸试样,薄板拉伸件原始宽度 $b_0 = 12.5$ mm,原始标距 $L_0 = 50$ mm,平行长度 $L_c = 75$ mm,原始厚度 $a_0 = 0.1, 0.15, 0.2$ mm。

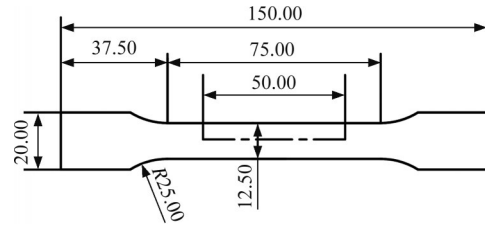


图2 薄板拉伸试样尺寸

Fig.2 Dimensional drawing of thin sheet tensile specimen

由于45钢材料本身较硬脆的材料特性,在制备薄板拉伸件时会无可避免地引入一定的加工缺陷和机加工残余应力,在拉伸试验的加载过程中,试样可能会从这些缺陷处提前断裂从而影响试验结果。为了保证试验数据的可靠性,每组参数下需进行10组以上的重复试验以消除这部分因素产生的绝对偏差对改性规律探究的干扰。

1.2 试验方案

为探明等离子体改性处理对45钢材料力学性能的影响,根据是否经过等离子体处理分为处理组和常规组。等离子体处理工件时,等离子体射流喷嘴距离工件表面垂直距离不大于6 mm,等离子体射流在一定处理时间内均匀地扫过工件表面,使工件表面各处的改性处理效果一致。等离子体射流对45钢工件的改性处理过程与处理过程中的扫描路径如图3所示。

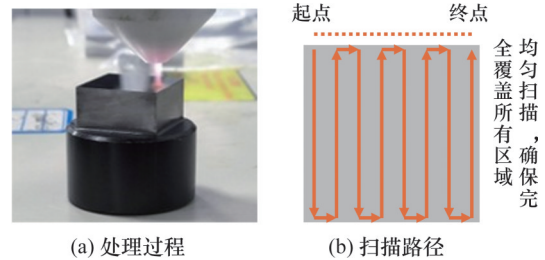


图3 等离子体射流改性处理方式

Fig.3 Method of plasma jet modification treatment

1.2.1 纳米压痕试验

采用纳米压痕仪对45钢材料经等离子体改性前后的表面硬度进行对比测试,并研究不同处理时间的改性效果和改性前后纳米硬度等表面力学性能随时间的变化规律。常规组和不同处理时间(1、5、10 min)组均单独使用1个图1所示的样品进行纳米压痕试验。一般而言,等离子体改性的效果具有即时性,采用在线处理的方式即可达到较好的改性效果。纳米压痕试验由于设备条件限制,无法使用在线处理的方式进行试验,因此采用预先处理,再开展纳米压痕试验的方式对处理后的材料硬度进行测试。

在常规组样品中心区域均匀取点进行纳米压

痕试验,最大压入深度设定为2000 nm,加/卸载速度为10 nm/s,每组重复5次,各压痕间隔100 μm 。同样,在处理组样品中心区域均匀取点,进行改性处理后20 h内表面力学性能的变化规律试验,参数设置与常规组相同。

1.2.2 拉伸试验

采用准静态拉伸试验方法研究等离子体处理对45钢材料拉伸力学性能的影响规律,试验前先清洗并吹干拉伸试样表面,然后将吹干后的拉伸试样两端正确装夹在万能试验机的上下两个夹头上,避免紧固后的试样出现倾斜现象。试验时设置固定加载速率6 mm/min,屈服前后的应变率均为 10^{-3}s^{-1} ,调整上下夹头之间的距离以保证预紧力为1 N左右,采集试验数据直到试样断裂。处理组中,在开始拉伸的同时打开等离子体射流发生器对工件进行处理,直到拉伸结束。

1.3 试验设备

本文使用的常温等离子体射流发生器由大连理工大学研制,其结构如图4所示,主要由电极系统、控制电源和供气系统等组成。采用裸电极放电方式将高纯氮气离子化,气体流量为12 L/min,气体压力为0.5 MPa,放电电压为1.53 kV。该装置能产生稳定的等离子体射流,射流长度可达16 mm。

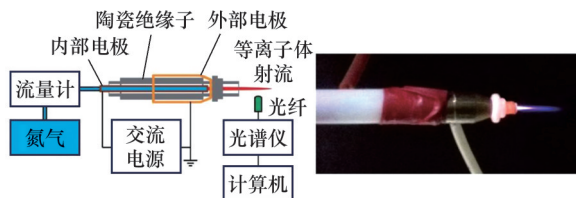


图4 等离子体射流发生装置原理图

Fig.4 Schematic of plasma jet generator

拉伸试验使用万能试验机,主要结构包括上压头、下夹紧头、压力传感器、试样夹具、变形测量仪和控制系统等。上压头用于施加压力,下夹紧头用于固定试样,压力传感器用于测量施加的压力,试样夹具用于固定和夹紧试样,变形测量仪用于测量试样的变形情况,控制系统用于控制试验过程和记录数据。

纳米压痕试验使用纳米压痕仪进行试验,载荷范围为0~500 mN,载荷分辨力为40 nN,使用三棱锥玻氏压头进行压痕试验,该压头尖端轮廓半径为100 nm,中心与侧面的夹角为 63.5° 。该纳米压痕仪具有静态法(载荷控制法)和连续刚度法(压入深度法)两种测试模式。本文采用连续刚度模式进行测试,该模式可以输出压入深度范围内

纳米硬度随深度的变化,可直观反映硬度变化规律。

1.4 试验结果与分析

1.4.1 等离子体处理对45钢表面硬度的影响

材料纳米硬度 H 的计算公式^[17]为

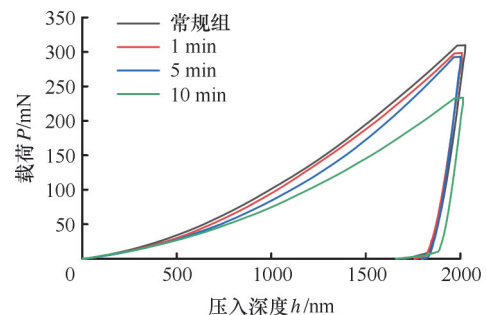
$$H = \frac{P_{\max}}{Ah_c} \quad (1)$$

式中: P_{\max} 为最大载荷; A 为压头尖端与试样在最大载荷下的投影面积,与最大压入深度 h_c 的平方成正比。

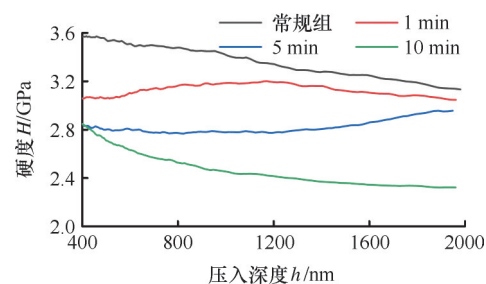
由式(1)可知,相同载荷下,压入深度越大,纳米硬度越小;相同压入深度时,载荷越大,纳米硬度越大。图5a为等离子体处理前后的载荷-位移曲线,可知,在相同压入深度时,等离子体处理可以有效降低45钢材料的表面硬度,且随着处理时间的增长,改性的效果越好,硬度降低越明显。

由于尺寸效应的影响,在压入深度200 nm范围内,测得的材料纳米硬度值会远高于真实值,为了排除尺寸效应的干扰,本文对深度为400~2000 nm范围内测得的材料硬度变化规律进行分析,如图5b所示。由图5b可知,常规组的硬度随深度的增大逐渐降低,在400~800 nm范围内45钢纳米硬度平均值为3.52 GPa,在1000~1400 nm范围内为3.34 GPa,在1600~2000 nm范围内为3.19 GPa,这是尺寸效应对材料硬度的影响随着深度增大而削弱的表现。

等离子体处理1 min后,45钢纳米硬度随深



(a) 载荷-深度曲线



(b) 硬度-深度曲线

图5 处理前后45钢硬度变化

Fig.5 Changes in hardness of 45 steel before and after treatment

度的增大呈先上升后降低的变化趋势,在400~800 nm 范围内硬度平均值为3.1 GPa,降低约12%,在1000~1400 nm 范围内为3.18 GPa,降低约4.8%,在1600~2000 nm 范围内为3.08 GPa,降低约3.6%。

等离子体处理5 min后,45钢纳米硬度在400~1400 nm 范围内基本保持不变,400~800 nm 和1000~1400 nm 范围内硬度平均值分别为2.80 GPa和2.79 GPa,相比处理前分别降低21%和17%,而1600~2000 nm 范围内变化趋势与处理1 min组的前半段相似,表明此时位于有效改性层与45钢基体的交界处,硬度平均值为2.91 GPa,降低约8.8%。

等离子体处理10 min后,此时改性效果显著,且改性层厚度已大于2000 nm,45钢纳米硬度随深度的变化趋势受尺寸效应影响,与处理前相同。在400~800 nm 范围内硬度平均值为2.66 GPa,降低约24%,1000~1400 nm 范围内为2.41 GPa,降低约28%,1600~2000 nm 范围内为2.33 GPa,降低约27%。

由于改性层中氮元素含量较低,常用的测试手段如X射线光电子能谱(XPS)技术等难以直接测定改性层厚度,并且随着深度的增加改性效果逐渐降低,与材料基体之间并无明显分界。本文通过硬度-深度曲线中材料硬度的变化情况对改性层厚度进行表征。在常规组中,随着压入深度的增大,尺寸效应逐渐削弱,从材料表面到基体的硬度呈逐渐降低的趋势。

处理1 min时,深度从400 nm 增大到1200 nm 时,材料硬度逐渐增大,并且均明显低于处理前材料硬度,超过1200 nm 后材料硬度逐渐降低,变化趋势与常规组相似。表明此时的改性层厚度约为1200 nm,并且改性效果较好的深度范围应为400~800 nm。

处理5 min时,深度从400 nm 增大到2000 nm 时,材料硬度不断增大,到2000 nm 处材料硬度已较为接近处理1 min组的材料基体硬度。可以认为此时的改性层厚度约为2000 nm,并且改性效果较好的深度范围为400~1400 nm。

处理10 min时,深度从400 nm 增大到2000 nm 时,材料硬度逐渐降低,深度随硬度的变化趋势与常规组相似,表明此时的改性层厚度明显大于2000 nm,并且在2000 nm 深度范围内改性效果均较好。

应用到超精密切削中时,应将单位面积的改

性处理时间控制在与处理5 min组基本一致的水平,即在降低工件材料力学性能的同时保证改性层材料可以被完全切削去除。

图6所示为等离子体处理后20 h,在400~800 nm 和1600~2000 nm 两个深度范围内45钢材料纳米硬度平均值随时间的变化。由图6可知,等离子体处理对45钢材料硬度的改性效果持续时间可达20 h以上,验证了采用先处理再试验的方式进行纳米压痕试验方案的可行性。

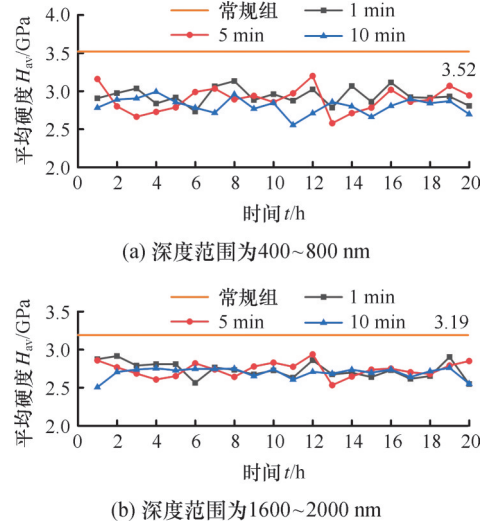


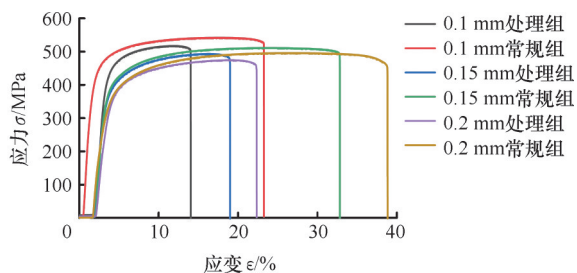
图6 45钢纳米硬度-时间变化曲线

Fig.6 45 steel nano-hardness and time variation curve

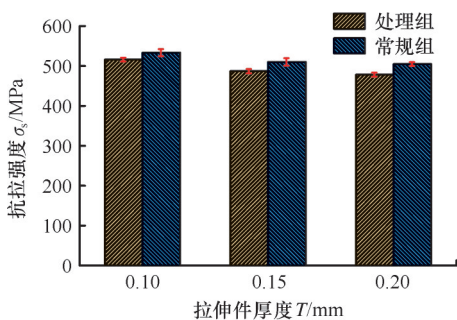
处理10 min时的曲线方差和波动相对更小,表明处理时间越长,改性效果均匀性越好。等离子体处理对材料硬度的改性效果持续时间足以完成一次超精密切削,这是等离子体改性处理应用到超精密切削中可以先改性再处理的依据。

1.4.2 等离子体处理对45钢拉伸力学性能的影响

图7所示为准静态拉伸方式下拉伸试样有/无等离子体处理的应力-应变曲线和抗拉强度实测结果。由图7可知,相比于未处理试样,等离子体在线处理时,厚度为0.1 mm的45钢拉伸试样抗拉强度从533.33 MPa降低至515.97 MPa,降低约3.3%,断后伸长率降低约39.69%;厚度为0.15 mm的45钢拉伸件抗拉强度从510.16 MPa降低至486.99 MPa,降低约4.5%,断后伸长率降低约42.17%;厚度为0.2 mm的45钢拉伸件抗拉强度从504.85 MPa降低至478.19 MPa,降低约5.3%,断后伸长率降低约42.49%。结果表明,拉伸件厚度越大,抗拉强度降低幅度也越大,与文献[18]变化趋势有所不同,原因在于试验中,等离子体处理一直持续到拉伸件被拉断为止,在厚度为0.1 mm、0.15 mm和0.2 mm时,等离子体射流对试样的处理时间分别约为67 s、92 s和110 s,即处理时



(a) 不同厚度拉伸件应力-应变曲线



(b) 不同厚度拉伸件抗拉强度

图7 有/无等离子体处理下的45钢拉伸力学性能

Fig.7 Tensile mechanical properties of 45 steel with/without plasma treatment

间越长,对拉伸力学性能的影响越大。

观察分析断口形状发现,处理组拉伸件断裂后,断口形成与常规组齐口状断口(图8a)和之字状断口(图8b)不同的点断状断口,如图8c所示。这是由于等离子体射流处理在工件表面形成了抗拉强度明显低于其他位置的薄弱点,在拉伸加载的过程中试样从被处理位置提前断裂,表现为抗拉强度和断后伸长率的降低。此外,在试样厚度仅为0.1~0.2 mm时抗拉强度降低幅度也极小,表明等离子体改性辅助工艺仅适用于材料去除量小的精密和超精密加工。

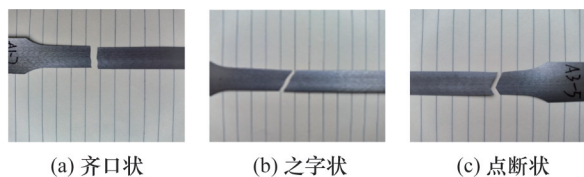


图8 拉伸件断口形状

Fig.8 Fracture shape of tensile piece

2 分子动力学模拟方法与结果分析

2.1 分子动力学建模与势函数设置

分子动力学可以在原子尺度下描述体系中粒子之间的相互作用,直观地观察体系中粒子的变化情况,被广泛应用于微纳尺度的相关研究,本节通过分子动力学模拟开展等离子体处理对45钢纳米硬度和拉伸力学性能的改性机理研究。

首先是45钢模型的创建与参数设置。45钢

模型晶格常数为0.2866 nm,晶体结构为体心立方结构。纳米压痕模拟中,45钢模型尺寸为11.464 nm×11.464 nm×5.732 nm;拉伸模拟中,45钢薄板拉伸模型长宽尺寸为42.99 nm×5.732 nm,拉伸模型厚度分别为1.433、2.866、4.299 nm。等离子体处理模拟时,等离子体的主要成分为亚稳态的分子N₂,且等离子体经过电离击穿后高能粒子所携带的能量大小为6.2~10 eV,本文取10 eV。处理前后均需等在等压等温系综(NPT)、300 K的温度下弛豫足够长时间以消除内应力。

然后是常规组和处理组中涉及的势参数设置。本文采用由ALLERA等^[19]开发的合金钢经典Embedded Atom Method势函数(EAM)来描述45钢中Fe-Fe、Fe-C和C-C原子之间的相互作用;根据LEE等^[20]的研究结果,等离子体处理后N原子与45钢中的Fe原子形成化合物,采用Mixed Element Atomistic Method势函数(MEAM)描述Fe-N原子对的相互作用;C-N和N-N原子对的相互作用是简单的两体势,采用Morse势函数进行表征,参数设置如表1所示^[21-22],其中D为势阱深度,a为粒子间相互作用的距离参数,r₀为截断半径。

表1 等离子体处理模拟中采用的Morse参数^[21-22]Tab.1 Morse parameters used in plasma processing simulation^[21-22]

	D/eV	a/Å ⁻¹	r ₀ /Å
N-N	0.001	1.556	4.21
C-N	0.230	2.140	1.90

最后是相关过程中的模拟参数设置。等离子体改性处理过程的模拟采用微正则(NVE)系综,该系综下模型中原子数量、体积和能量保持不变,适用于模拟处理中剧烈的能量交换过程。通过Velocity-Verlet算法对原子运动进行计算,Morse势函数的截止半径设置为3.0 Å,模拟盒子X、Y和Z方向均采用周期性边界条件。将弛豫完成的模型导入盒子后使用velocity命令对氮等离子体施加10 eV的能量,由于速度极大,时间步长设置为0.1 fs,模拟60 000步等离子体已完成充分改性处理后,使用Nosé-Hoover算法对改性后试样进行控温,使温度降低至300 K。

在纳米压痕模拟中,X、Y和Z方向上均采用周期性边界条件,采用正则(NVT)系综进行模拟,该系综下模型中原子数量、体积和温度保持不变,适用于模拟压痕过程中的材料变形结构变化。使用LAMMPS自带的indent命令进行纳米压痕过程模拟,压头半径为15 Å,硬度系数为10,

使用 velocity 命令控制压头运动,加载和卸载速率均为 $1 \text{ \AA}/\text{ps}$,最大压入深度为 10 \AA 。对原子运动所用算法与前文一致,时间步长设置为 1 fs ,加载和卸载过程均运行 $10\ 000$ 步。

在拉伸模拟中,X、Y和Z方向上均采用周期性边界条件,采用NPT系综进行模拟,该系综下模型中原子数量、压强和温度保持不变,适用于拉伸模拟中试样结构变形过程。使用 deform 命令进行拉伸模拟,应变速率为 0.01 。时间步长设置为 0.1 fs ,为完整记录模拟数据,拉伸模拟共运行 $600\ 000$ 步。

2.2 分子动力学结果与分析

2.2.1 微观组织结构变化分析

图9为处理前后45钢原子堆垛与对应的微观组织放大图。经过等离子体处理后,模拟得到的45钢试样改性层厚度为 $8\sim 10 \text{ \AA}$,而由前文分析可知,试验中的改性层厚度为 $2\sim 5 \mu\text{m}$ 。导致模拟与试验改性层厚度差异的主要原因在于时空尺度的差异,分子动力学模拟中的时空尺度为 $\text{ps}-\text{\AA}$,而试验的时空尺度为 $\text{min}-\mu\text{m}$ 。尽管两者的时空尺度有所差异,但并不影响通过试验探究等离子体改性作用规律,通过分子动力学模拟探究改性作用机理,并将两者在各自尺度下的结论进行整合。

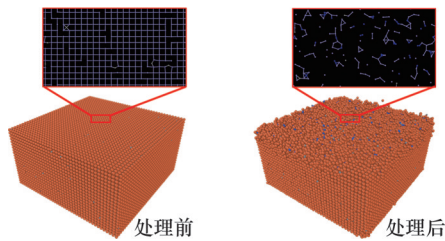


图9 处理前后45钢微观组织变化

Fig.9 Microstructure changes of 45 steel before and after treatment

金属材料微观结构中金属键的数量和强度是决定材料力学性能的关键。通过分子动力学模拟中原子结构的演化可知,在等离子体的作用下,45钢中的铁原子会脱离原本位置并形成空位缺陷,造成Fe-Fe键数量的减少;同时部分N原子会残留在45钢内部,与Fe原子以化合物的方式结合,这部分离子键会在一定程度上削弱剩余Fe-Fe键的强度。此外,经过等离子体处理后,改性层中Fe原子在高速粒子的作用下离开晶格格位,而这些Fe原子失去晶格格位对原子位置的约束后,将形成图9所示处理后相对松散杂乱的原子堆垛。

2.2.2 纳米压痕分子动力学模拟结果分析

本文采用LAMMPS自带的纳米压痕模拟命令进行分子动力学模拟,加载速率为 $1 \text{ \AA}/\text{ps}$,时

间步长为 0.0001 ps ,最大压入深度为 10 \AA ,图10所示为处理前后纳米压痕模拟结果。

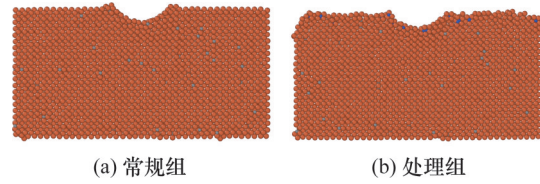


图10 纳米压痕模拟结果

Fig.10 Results of nanoindentation simulation

图11为相同压入深度时,由分子动力学模拟获得的45钢材料等离子体处理前后纳米压痕载荷-位移曲线。由图11可知,当压入深度在 $0\sim 8 \text{ \AA}$ 范围内时,压头位于改性层,相同深度下处理后的载荷明显低于处理前的常规组;而当压入深度超过 8 \AA 后,处理组同深度下的的载荷反而超过了常规组,这是由于模拟中改性层和未被改性的材料基体之间形成了明显的分界,由改性层到材料基体硬度有所上升,而试验中由于改性层与基体的分界不明显,在纳米硬度-深度曲线中则表现为先升高后降低的转折变化。

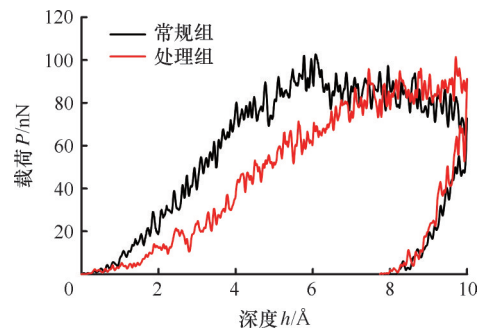


图11 处理前后的纳米压痕模拟载荷-位移曲线

Fig.11 Simulated load-displacement curves of nano-indentation before and after treatment

从纳米压痕过程中45钢原子结构的演化可以看出,随着压头的不断压入,越来越多的45钢材料发生了屈服和塑性流动。事实上,材料的纳米硬度本质上也是由屈服强度决定的,由于等离子体处理降低了45钢表层材料的屈服强度,导致其纳米硬度也随之降低,与试验结果相吻合。

2.2.3 拉伸力学性能分子动力学模拟结果分析

本文使用 deform 拉伸方式对分子动力学模型进行单向拉伸,应变速率为 0.1 ps^{-1} ,时间步长为 0.0001 ps ,在拉伸过程中,拉伸件模型明显可见图12所示的颈缩现象,与试验相符。



图12 拉伸模拟中的颈缩现象

Fig.12 Necking phenomenon in tensile simulation

图13为不同厚度下常规组和处理组的拉伸试验应力-应变曲线,可以看出,等离子体处理可以有效降低45钢材料的屈服强度和抗拉强度,且厚度为5、10和15个晶格常数时,抗拉强度分别降低至69%、78%和86%。等离子体处理后的改性层厚度始终为8~10 Å,即改性层厚度占比越高,对抗拉强度的降低效果越明显,与试验结论相符。

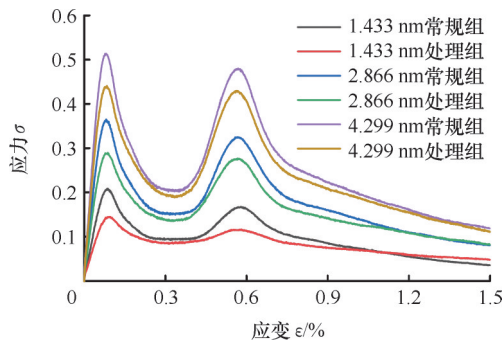


图13 处理前后45钢拉伸模拟应力-应变曲线

Fig.13 Tensile stress-strain curves of 45 steel before and after treatment

根据分子动力学模拟结果中单向拉伸的原子结构演化,分析屈服应力降低的根本原因如下:在单向拉伸过程中,45钢首先发生弹性变形,表现为Fe-Fe键的拉伸,随着应变的进一步发生,Fe的晶格发生扭曲,宏观表现为应力超过屈服强度后产生塑性变形。可以看出,屈服强度的大小在微观上取决于45钢中Fe-Fe键的数量和强度。根据等离子体处理处理后45钢表面的原子堆垛结构可以看出,等离子体处理造成大量的Fe-Fe键断裂,导致Fe-Fe键数量的减少,此外,N原子的存在会削弱Fe-Fe原子键的强度,由此导致了45钢中Fe-Fe键数量和强度均有所降低,宏观上则表现为45钢材料屈服强度和抗拉强度的降低。

3 结果与讨论

1)等离子体处理可以显著降低45钢材料的表面硬度,处理1、5、10 min后,纳米硬度最高分别降低12%、21%和28%,处理时间越长,改性层厚度越大,改性效果也越好,且改性效果均可持续20 h以上。

2)等离子体处理可有效降低45钢材料的抗拉强度和断后伸长率,试样厚度为0.1、0.15、0.2 mm时,试样厚度越大,至拉断时等离子体处理时间也越长,改性效果也相对越好,抗拉强度分别降低3.3%、4.5%和5.3%,断后伸长率分别降低39.69%、42.17%和42.49%。

3)纳米压痕试验的分子动力学模拟中,在0~8 Å的改性层内,处理组载荷低于常规组,当压入深度超过改性层厚度时,由于处理后处理层与基体之间存在的硬化作用,处理组载荷升高至大于常规组,与试验规律基本吻合。拉伸试验的分子动力学模拟中,不同厚度下改性层深度相同,均为8 Å,因此处理后抗拉强度的降低幅度随着厚度的增大而减小,即改性层厚度占比越高,对抗拉强度的降低效果越明显。

4)根据分子动力学模拟中原子结构的演化得出结论:等离子体处理降低45钢材料力学性能的微观本质是处理过程中打断了材料中的部分Fe-Fe键,并削弱了相邻Fe-Fe键的强度,导致材料屈服强度降低,在纳米压痕和拉伸试验中抵抗变形的能力削弱,表现为纳米硬度和抗拉强度的降低。

5)被切削材料的硬度和抗拉强度等力学性能对切削过程中的热力耦合效应具有重要影响。等离子体处理可降低45钢材料的力学性能,从而提高工件材料的可切削性,削弱切削区热力作用,在抑制超精密切削工艺中的金刚石刀具磨损方面具有重要的应用价值和实际意义。

参考文献:

- [1] HATEFI S, ABOU-EL-HOSSEIN K. Review of Single-point Diamond Turning Process in Terms of Ultra-precision Optical Surface Roughness[J]. The International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 2020, 106(5):2167-2187.
- [2] 蒋庄德, 李常胜, 孙林, 等. 高端光学元件超精密加工技术与装备发展研究[J]. 中国工程科学, 2023, 25(1):131-141.
JIANG Zhuangde, LI Changsheng, SUN Lin, et al. Ultra-Precision Machining Technology and Equipment for High-End Optical Elements[J]. Strategic Study of CAE, 2023, 25(1):131-141.
- [3] BRINKSMEIER E, PREUSS W. Micro-machining [J]. Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2012, 370(1973):3973-3992.
- [4] WANG Y, SUZUKI N, SHAMOTO E. et al. Investigation of Tool Wear Suppression in Ultraprecision Diamond Machining of Die Steel[J]. Precision Engineering, 2011, 35(4):677-685.
- [5] MCKEOWN P A. The Role of Precision Engineering in Manufacturing of the Future[J]. CIRP Annals Manufacturing Technology, 1987, 36(2):495-501.
- [6] ZOU L, YIN J C, HUANG Y, et al. Essential

- Causes for Tool Wear of Single Crystal Diamond in Ultra-precision Cutting of Ferrous Metals[J]. *Diamond and Related Materials*, 2018,86:29-40.
- [7] HUANG S, LIU X, CHEN F Z, et al. Diamond-cutting Ferrous Metals Assisted by Cold Plasma and Ultrasonic Elliptical Vibration[J]. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2016, 85(1):673-681.
- [8] STOCK H, SCHLETT V, KOHLSCHEEN J, et al. Characterization and Mechanical Properties of Ion-implanted Diamond Surfaces [J]. *Surface and Coatings Technology*, 2001, 146/147(1):425-429.
- [9] OSMER J, GLÄBE R, RIEMER O, et al. Ultra-precision Machining of Nitrocarburized Steels[C]// 5th International Symposium on Advanced Optical Manufacturing and Testing Technologies. Dalian, 2010:133-136.
- [10] WANG J S, ZHANG X D, FANG F Z, et al. Diamond Cutting of Micro-structure Array on Brittle Material Assisted by Multi-ion Implantation[J]. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 2019, 137:58-66.
- [11] LIU X, ZHANG F, LIU J, et al. Atmospheric Pressure Plasma-assisted Precision Turning of Pure Iron Material[J]. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2020, 106(11): 5187-5197.
- [12] LYU P, LAI M, LIU Z, et al. Ultra-smooth Finishing of Single-crystal Lutetium Oxide by Plasma-assisted Etching[J]. *Precision Engineering*, 2021, 67:77-88.
- [13] LYU P, LAI M, Song Y, et al. Sub-nanometer Finishing of Polycrystalline Tin by Inductively Coupled Plasma-assisted Cutting[J]. *Frontiers of Mechanical Engineering*, 2023, 18(3):35.
- [14] XU W J, HUANG S, CHEN F Z, et al. Diamond Wear Properties in Cold Plasma Jet[J]. *Diamond and Related Materials*, 2014,48:96-103.
- [15] KONG J X, DU D X, SONG A, et al. Surface Physical and Chemical Modification of Pure Iron by Using Atmospheric Pressure Plasma Treatment[J]. *Materials* 2020, 13:4775.
- [16] 曹发祥,孔金星,杜东兴. Nd:YAG晶体表面性能等离子体改性研究[J]. *华南理工大学学报(自然科学版)*,2021,49(3):55-61.
CAO Faxiang, KONG Jinxing, DU Dongxing. Research on Surface Properties of Nd: YAG Crystal Modified by Plasma Jet[J]. *Journal of South China University of Technology (Natural Science Edition)*, 2021,49(3):55-61.
- [17] OLIVER W C, PHARR G M. An Improved Technique for Determining Hardness and Elastic Modulus Using Load and Displacement Sensing Indentation Experiments[J]. *Journal of Materials Research*,1992, 7(6) :15641583.
- [18] 张帆. 大气压冷等离子体射流辅助切削纯铁材料研究[D]. 大连:大连理工大学,2020.
ZHANG Fan. Research on Atmospheric Pressure Cold Plasma Jet Assisted Machining of Pure Iron Material[D]. Dalian:Dalian University of Technology, 2020.
- [19] ALLERA A, RIBEIRO F, PERAZ M, et al. Carbon-induced Strengthening of BCC Iron at the Atomic Scale[J]. *Physical Review Materials*, 2022, 6(1):013608.
- [20] LEE B J, LEE T H, KIM S J. A Modified Embedded-atom Method Interatomic Potential for the Fe-N System:a Comparative Study with the Fe-C System[J]. *Acta Materialia*,2006, 54(17):4597-4607.
- [21] HAO Z P, CUI R R, FAN Y H, et al. Diffusion Mechanism of Tools and Simulation in Nanoscale Cutting the Ni-Fe-Fr Series of Nickel-based Superalloy [J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2019, 150:625-636.
- [22] LYU B, CHEN C, ZHANG F C, et al. Potentials for Describing Interatomic Interactions in γ Fe-Mn-C-N System[J]. *Metals*, 2022;12(6):982.

(编辑 袁兴玲)

作者简介:彭照波,男,2000年生,硕士研究生。研究方向为金刚石刀具磨损机理及抑制方法。E-mail:pengzhaobo0073@163.com。
孔金星*(通信作者),男,1976年生,研究员。研究方向为难加工材料的高速精密切削技术。E-mail:kjcmc106@163.com。

本文引用格式:

彭照波,孔金星,杜东兴,等. 等离子体处理对45钢力学性能影响的试验及分子动力学模拟研究[J]. *中国机械工程*,2025,36(10): 2190-2197.

PENG Zhaobo,KONG Jinxing,DU Dongxing,et al. Experimental and Molecular Dynamics Simulation for Mechanics Properties of 45 Steel Treated by Plasma[J]. *China Mechanical Engineering*, 2025,36(10):2190-2197.