بررسی تاثیر ابعاد قطعه کار بر ماشینکاری نانومتری سیلیکون تک کریستال با استفاده از روش دینامیک مولکولی

سید نادر عاملی کلخوران	دانشجوی دکتری، گروه ساخت و تولید، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران
مهرداد وحدتی*	دانشیار، گروه ساخت و تولید، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران
جیوانگ یان	استاد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه کِیو، یوکوهاما، ژاپن

چکیدہ

فرآیند ماشینکاری نانومتری، روشی فوق پیشرفته جهت ساخت قطعات با دقت ابعادی چندمیکرومتر و صافی سطح نانومتری میباشد. علیرغم روشهای ماشینکاری سنتی، در این روش میتوان قطعات ترد مانند سیلیکون را نیز به خوبی ماشینکاری نمود. با توجه به انجام این فرآیند در مقیاس نانومتری، رفتار ماده متفاوت از حالت حجیم آن خواهد بود. از این روی، ابعاد قطعهکار نیز بر خروجی و کیفیت نهایی قطعات ماشینکاری شده تاثیرگذار میباشد. در این تحقیق، با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی و ثابت در نظر گرفتن تمامی پارامترهای ماشینکاری و تحلیلی، تاثیر گذار میباشد. در این تحقیق، با بررسی گردیده است. نتایج مشخص نمود که کوچک شدن بیش از حد ابعاد قطعهکار، سبب ایجاد یک شوک اولیه در قطعه میگردد. این موضوع سبب افزایش برادههای منقطع و کاهش کیفیت سطح میگردد. همچنین نتایج نشان داد با اینکه پیشروی ابزار سبب افزایش دمای قطعه کار می گردد، اما در قطعات با طول کمتر از ۲۱ نانومتر، این شتاب بسیار بیشتر میباشد. علاوه بر این، مشخص گردید که افزایش ابعاد قطعهکار، سبب ایران در این قطعات با طول ماشینکاری می گردد، است. نتایج مشخص نمود که کوچک شدن بیش از حد ابعاد قطعه کار، سبب ایجاد یک شوک اولیه در قطعه میگردد. این موضوع سبب افزایش برادههای منقطع و کاهش کیفیت سطح میگردد. همچنین نتایج نشان داد با اینکه پیشروی ابزار سبب افزایش دمای قطعه کار می گردد، اما در قطعات با طول کمتر از ۲۱ نانومتر، این شتاب بسیار بیشتر میباشد. علاوه بر این، مشخص گردید که افزایش ابعاد قطعه کار، سبب کاهش نوسانات نیرو و همچنین نیروی کل ماشینکاری می گردد.

واژههای کلیدی: ماشینکاری نانومتری، سیلیکون، دینامیک مولکولی، ابعاد قطعه کار.

Investigation on the Effect of Workpiece Dimension in Nanometric Machining of Monocrystalline Silicon by Molecular Dynamics Simulation

S. N. Ameli KalkhoranDepartment of Mechanical Engineering, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, IranM. VahdatiDepartment of Mechanical Engineering, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, IranJ. YanDepartment of Mechanical Engineering, Keio University, Yokohama, Japan

Abstract

Nanometric machining process is an advanced method for fabrication of components with sub-micron tolerances and nanometric roughness. In spite of traditional machining systems, machining of the brittle materials, such as silicon, could be achieved by this technique. Due to the nanometric nature of this method, the behavior of material removal would be different with the bulk workpieces. Consequently, workpiece dimension also affect the final quality of the machined components. In this study, the effect of workpiece width and dimension on machining quality has been investigated by molecular dynamics technique. Machining parameters and molecular dynamics analysis condition were assumed invariant. The results revealed that shrinking the workpiece dimension consumedly would result in an initial shock. This issue leads to segmented chips and reducing surface finish. Besides, the results indicated that by tool advancement, workpiece temperature would increase; however, this is much faster in workpieces smaller than 21nm. In addition, it was clarified that increasing in the workpiece dimensions, reduces resultant force and its fluctuations.

Keywords: Nanometric machining, Silicon, Molecular dynamics, Workpiece dimension.

حالی است که در عمل، ماشینکاری سنتی سیلیکون به طور دقیق امکان پذیر نمی باشد. دلیل این امر ایجاد براده های گسسته و ضربه ها و نوساناتی می باشد که در هربار شکست براده به قطعه کار وارد شده و سبب کاهش کیفیت سطح ماشینکاری می گردد. با توجه به ناکار آمدی مبانی مکانیک پیوسته⁷ در عمق های برشی کمتر از یک میکرون، معمولاً در مدلسازی فرآیند ماشینکاری نانومتری، از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی استفاده می شود. ابعاد قطعه کار، علاوه بر تاثیری که

۱– مقدمه

فرآیند ماشینکاری نانومتری^۱ با استفاده از ابزار الماس تک کریستال^۲، روشی فوق دقیق جهت نیل به صافی سطح نانومتری می باشد. با استفاده از این فرآیند، می توان قطعات ترد مانند سیلیکون را به راحتی ماشینکاری کرد. این ماده کاربرد فراوانی در حوزه الکترونیک و اپتیک داشته و صافی سطح آن بسیار حائز اهمیت می باشد. این در

¹ Nanometric machining

² Monocrystalline Diamond Tool

^{*} نویسنده مکاتبه کننده، آدرس پست الکترونیکی: vahdati@kntu.ac.ir تاریخ دریافت: ۹۶/۱۲/۰۲ تاریخ پذیرش: ۹۷/۱۱/۲۹

³ Continuum mechanics

بر نتیجه فرآیند دارد، میتواند بر صحت شبیهسازیهای دینامیک مولکولی نیز تاثیرگذار باشد.

واضح است که هرچقدر ابعاد قطعه کار کوچکتر باشد، زمان محاسبات و تحليل نيز كمتر خواهد بود. اما اين كاهش ابعاد مىتواند همراه با خطاهای اثر اندازه نیز باشد. حالت ایدهآل در روش دینامیک مولکولی،کاهش نسبت تعداد اتمهای سطح به حجم میباشد؛ که این، با بزرگتر شدن ابعاد قطعه کار حاصل خواهد شد. بلکمن [۱] نشان داده است، زمانیکه تعداد اتمهای یک قطعه مکعبی شکل، بیشتر از ۱۰۵ اتم باشد، این نسبت به کمتر از ۱۰٪ خواهد رسید. اما از طرف دیگر، نمي توان صرفاً جهت ارضاى اين شرايط، ابعاد قطعه كار و حجم سيستم را افزایش داد. دلیل اصلی این موضوع، محدودیت در سختافزارهای محاسباتی و زمان تحلیل میباشد. وحید حسینی [۲] پنج اندازه مختلف را جهت شبیه سازی دینامیک مولکولی فرآیند ماشینکاری نانومتری قطعه کار مسی مورد مطالعه قرار داد. او مشخص کرد که نسبت اتمهای سطح به حجم، تاثیر به سزایی بر صحت مقادیر خروجی خواهد داشت. نتایج این تحقیق مشخص کرد که قطعه کار با ابعاد 10.84nm×14.46nm دارای کمتر از ۵٪ اتمهای سطحی بوده و برای شبیهسازی مناسب میباشد. او همچنین ادعا کرد که تحت این شرایط، خطای شبیهسازی کمتر از ۳٪ خواهد بود. ژانگ و همکارانش [۳] در سال ۲۰۰۱ به بررسی تاثیر ابعاد ابزار ماشینکاری بر مکانیزم برادهبرداری پرداختند. آنها شعاعهای مختلف از ابزار را بررسی کرده و مشخص نمودند هنگامیکه سطح تماس ابزار و قطعه کار به حدود ۲۰ نانومتر برسد، فرآیند چسبش-لغزش ً رخ داده و نابجاییها تولید می گردند. پدینگ و بریلز [۴] بر روی تاثیر ابعاد شبیه سازی دینامیک مولكولى بر خواص ذوبى پليمرها انجام داده و اثبات كردند كه نتايج شبیهسازی نانولوله پلیاتیلن با قطر ۵٬۴ نانومتر، همخوانی مناسبی با آزمایشات تجربی خواهد داشت. یاماکوو و همکارانش [۵] در سال ۲۰۰۴ مشخص نمودند که اندازه دانه قطعه کار چه تاثیری بر رفتار الاستیک و مکانیزم تغییر شکل خواهد داشت. سلان و همکارانش [۶] در سال ۲۰۱۰، تاثیر ابعاد قطعهکار بر رسانایی گرمایی قطعهکار سیلیکونی را مورد بررسی قرار دادند. آنها استفاده از قطعهکاری با ۱۰۰۰۰ عدد اتم را مناسب تشخیص دادند. در تحقیق دینامیک مولکولی دیگری که توسط حسینی و همکارانش [۷] در سال ۲۰۱۲ انجام پذیرفت، تاثیر وجود یک حفره در درون قطعهکار تک کریستال مسی بررسی شده است. نتایج عددی مشخص کرد که وجود حفره می تواند سبب کاهش نیروهای ابزار گشته و بر روی مکانیزم تشکیل براده تاثیر بگذارد. همچنین در قطعه کار عیبدار، مقدار اتمهای تحت فشار در ناحیه جلوی نوک ابزار کاهش یافته است. لی و همکارانش [۸] در سال ۲۰۱۵ به بررسی تاثیر شرایط سطح قطعهکار در فرآیند سنگزنی نانومتری پرداختند. آنها با استفاده از تکنیک شبیهسازی ديناميک مولکولي مشخص کردند که هر چقدر ميزان ناصافي اوليه سطح قطعه کار بیشتر باشد، کیفیت نهایی سنگزنی نیز کمتر خواهد بود. زارع چاوشی و همکارانش [۹] در شبیه سازی دینامیک مولکولی که

در ارتباط با ماشینکاری نانومتری قطعات سیلیکونی انجام داده بودند، از قطعهکاری به ابعاد ۱۹۳۳ و ضخامت ۱۰۸ نانومتر استفاده نمودند. با این حال، این محققین در تحقیقات بعدیشان، ضخامت قطعهکار را به ۸۴ نانومتر کاهش دادند [۱۰]–[۱۲]. دلیل این موضوع در متناوب بودن شرایط مرزی در این راستا میباشد. زو و همکارانش هندسه ابزار بر ماشینکاری نانومتری قطعهکار مسی را بررسی نمودند. آنها با استفاده از یک هندسه جدید ابزار، توانستند به کیفیت بالاتر ماشینکاری دست بیابند. وانگ و همکارانش [۱۴] در سال ۲۰۱۷ به بررسی تاثیر ناهمسانگردی قطعهکار سیلیکونی در ماشینکاری نانومتری پرداختند. آنها نشان دادند که جهت کریستالی [10–](10)، اورا-1](11) بهترین نتیجه و کیفیت ماشینکاری را حاصل خواهد کرد.

در اکثر تحقیقات انجام یافته، محققین بر روی شرایط قطعهکار و ماشینکاری متمرکز گردیده و تحقیقی بر روی ابعاد قطعهکار نداشتهاند. این تحقیقات، تنها به ابعاد مورد استفاده در گزارشات پیشین استناد نموده و مطالعهای بر روی ابعاد مناسب انجام ندادهاند. در این مقاله، برای اولین بار به بررسی تاثیر پهنا و ابعاد مختلف قطعهکار سیلیکونی در فرآیند ماشینکاری نانومتری پرداخته شده است. بدین جهت، ۶ اندازه و همچنین ۵ پهنای مختلف قطعهکار تحت ماشینکاری نانومتری قرار گرفته و مکانیزم برادهبرداری، تغییرات دمایی و نیروی ماشینکاری در آنها بررسی شده است. نتایج این تحقیق میتواند معیاری مناسب را جهت تحقیقات آتی دیگر محققین در این حوزه ارائه نماید.

۲- روش شبیهسازی دینامیک مولکولی

در این پژوهش، از نرمافزار لمپس^۳ جهت شبیهسازی دینامیک مولکولی فرآیند نانومتری قطعهکار سیلیکونی تککریستال استفاده شده است [۱۵]. عوامل بسیار زیادی در پیادهسازی یک شبیهسازی صحیح دینامیک مولکولی موثر میباشند. از طرف دیگر، تقریباً تمام نرمافزارهای شبیهسازی دینامیک مولکولی، از جمله لمپس، بصورت کدنویسی و غیرتصویری هستند. لذا انتخاب شرایط مناسب و نحوه اعمال صحیح آنها، علاوه بر دانش گسترده دینامیک مولکولی است، نیازمند تسلط عمیق بر نرمافزار شبیهسازی و همچنین مبانی ریاضی و فیزیک دارد.

در فرآیند ماشینکاری نانومتری، ابزار ماشینکاری نقشی اساسی در مکانیزم برادهبرداری، نیروهای ماشینکاری و صافی سطح نهایی ایفا میکند. این ابزار باید از کیفیت سطح و دقت ابعادی بسیاری بالایی برخوردار بوده و مقاومت به سایش مناسبی داشته باشد. در عمل، از الماس تککریستال بعنوان ابزار برشی استفاده میشود. با توجه به سایش بسیار اندک این ماده در حین فرآیند ماشینکاری، معمولاً در شبیه سازیهای دینامیک مولکولی، ابزار برشی را بصورت صلب در نظر میگیرند [۱۶], [۱۷]. در تحقیق پیش رو نیز از این رویکرد استفاده شده است. قطعه کار مورد نظر در این تحقیق از جنس سیلیکون

¹ Size effect

² Stick-slip phenomenon

³ LAMMPS

تک کریستال میباشد. به منظور بررسی تاثیر ابعاد قطعه کار بر نتایج تحلیل، از ۶ اندازه مختلف قطعه کار و ۵ پهنای متفاوت مطابق با جدول ۱ استفاده شده است.

به منظور انجام یک مقایسه قابل اتکا، تمامی شرایط شبیهسازی، از جمله نسبت طول به عمق نمونهها، ثابت در نظر گرفته شده و فقط ابعاد قطعات تغییر پیدا کرده است. جهت محاسبه اندرکنش اتمهای قطعه کار از تابع پتانسیل ترسوف و اندرکنش بین اتمهای ابزار کریستالی و قطعه کار، از تابع پتانسیل مورس استفاده شده است [۱۸]. شکل ۱ مدل سهبعدی دینامیک مولکولی ماشینکاری نانومتری را نشان میدهد. مطابق این شکل، اتمهای قطعه کار به سه ناحیه تقسیم شده میدهد. مطابق این شکل، اتمهای قطعه کار به سه ناحیه تقسیم شده می مدد. در حین مدلسازی، با صفر درنظر گرفتن سرعت و نیروهای میباشد. در حین مدلسازی، با صفر درنظر گرفتن سرعت و نیروهای بین این اتمها، از حرکت آنها جلوگیری به عمل آمده و صلب گردیدهاند. این موضوع به دلیل کاهش اثرات مرزی و تثبیت ساختار کریستالی در طول قطعه کار می باشد. گروه دوم، سه لایه اتمی دماثابت

(اتههای بنفش رنگ) است. دمای این قسمت از قطعهکار با استفاده از روش مقیاسدهی ثابت و برابر با ۲۹۳ کلوین در نظر گرفته شده است. دلیل ثابت نگاه داشتن دمای این ناحیه، اعمال شرایط حاملهای گرما مانند برادهها و سیالات خنککاری میباشد.

بیشترین حجم اتمی قطعه کار را اتمهای نیوتونی به خود اختصاص دادهاند (اتمهای آبی رنگ). دلیل نامگذاری این دسته از اتمها با نام "اتمهای نیوتونی"، پیروی این ذرات از قوانین مکانیک نیوتونی می باشد [۱۹], [۲۰]. قطعه کار دارای شرایط مرزی متناوب در راستای پهنا می باشد. بدین صورت اثرات ابعادی قطعه کار به حداقل رسیده و اتمهای می باشد. بدین صورت اثرات ابعادی قطعه کار به حداقل رسیده و اتمهای این دسته از مدلسازی ها در جدول ۲ آورده شده است. البته لازم به توضیح است که سرعت برش در آزمایشات تجربی در حدود ۲۰– ۲۰ متر بر ثانیه می باشد [۲۱]. با این حال با توجه به محدودیت زمانی شبیه سازی های دینامیک مولکولی، در اینجا از سرعت ۱۰۰ متر بر ثانیه استفاده شده است.

هه شده	ارهای مطال	ف قطعه کا	ابعاد مختل	جدول ۱-
	~ ~ ~		•	

تعداد اتمها	پهنای قطعهکار (nm)	عمق قطعهکار (nm)	طول قطعهکار (nm)	نام قطعه
36610	۵٫۴۳۱	٨,١۴۶	18,798	WP1
80510	۵٫۴۳۱	۱۰,۸۶۲	۲۱٫۷۲۴	WP2
140710	۵٫۴۳۱	18,798	۳۲٬۵۸۶	WP3
۱۹۸۱۱۰	۵٫۴۳۱	۱۹ _/ ۰۰۸	۳۸,۰۱۷	WP4
20161.	۵٫۴۳۱	۲۱,۷۲۴	۴ ٣, ۴ ۴Л	WP5
4.2.1.	۵٫۴۳۱	۲۷,۱۵۵	۵۴٫۳۱۰	WP6
89877	١,• ٨٦٢	۱۹,۰۰۸	۳۸,۰۱۷	WP7
99.00	۲,۷۱۵۵	۱۹,۰۰۸	۳۸,۰۱۷	WP8
292180	٨,١۴۶۵	۱۹,۰۰۸	\mathcal{CA}_{i} ·) V	WP9
898770	۱۰,۸۶۲	۱٩,٠٠٨	۳۸, ۰ ۱۷	WP10



شکل ۱- نمونهای از قطعه کار و ابزار مورد مطالعه

اگرچه اتمهای این قطعات تحت شرایط واقعی خود شامل جرم اتمی، فاصله اتمی و شبکه کریستالی صحیح چیده شدهاند، با این حال ممکن است هنوز در حالت کمینه انرژی و تعادل قرار نگرفته باشند. لذا به منظور نیل به بیشترین دقت ممکن، از دو مرحله کمینه سازی انرژی به روش گرادیان های مزدوج¹ و یک مرحله تعادل رسانی استفاده شده است.

جدول ۲- جزئیات مدل دینامیک مولکولی جهت بررسی تاثیر ابعاد قطعهکار

	-	
سیلیکون (تککریستال)	جنس قطعهكار	
٢	نسبت طول به عمق قطعه کار	
۵٫۴۳۱nm	پهنای قطعهکار و ابزار	
الماس	جنس ابزار	
۳nm	شعاع لبه ابزار	
-1•	زاویه پیشانی ابزار	
۱۵	زاویه آزاد ابزار	
۱٫۰۵nm	عمق ماشینکاری	
• ٫٣۵	نسبت عمق ماشینکاری به شعاع لبه	
	ابزار	
798K	دمای قطعه کار	
۱۰۰ m/s	سرعت برش	
١fs	گام زمانی	
۱۱nm	طول ماشینکاری	
كربن-سيليكون: مورس	1	
سيليكون-سيليكون: ترسوف	توابع پدسین	

در مرحله اول، پس از تعریف قطعهکار و ابزار، الگوریتم کمینهسازی اعمال گردیده است. سپس ابزار تا عمق ماشینکاری مورد نظر حرکت کرده و دومین گام کمینهسازی نیز اعمال گردید. این کار به منظور حذف اندک تغییرات انرژی سیستم با حرکت ابزار بوده است. در ادامه، دمای قطعهکار برابر با ۲۹۳ کلوین تعریف شد. به منظور اعمال این دما به تمامی اتمهای قطعهکار و جایابی صحیح آنها نسبت به این شرایط، کل سیستم به مدت ۲۵ پیکوئانیه و بدون هیچگونه حرکتی در ابزار، به حال خود رها شده و به تعادل رسید.

در مرحله ماشینکاری، از هنگرد کانونی کوچک (NVE) استفاده شده است. در این هنگرد، تعداد ذرات، حجم و انرژی سیستم ثابت در نظر گرفته شده و با پیشروی ابزار در درون قطعهکار، دیگر پارامترها میتوانند تغییر کنند [۲۲]. همچنین به منظور تعریف سرعت اولیه ذرات از توزیع آماری ماکسول- بولتزمن^۲ استفاده شده است. این رابطه عبارت است از:

$$P(v_{ix}) = \left(\frac{m_i}{2\pi k_B T}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m_i v_{ix}^2}{2k_B T}\right]$$
(1)

با استفاده از این رابطه، میتوان احتمال سرعت اتم i با جرم *m_i را* در دمای T پیشبینی نمود.

¹ Conjugate gradient

اندازه گامهای زمانی مورد استفاده در این تحلیلها برابر با Ifs میباشد. با توجه به محدودیت گرافیکی نرم افزار لمپس، در اینجا از نرمافزار منبع باز اوویتو^۲ جهت مشاهده مختصات اتمها و مکانیزم ماشینکاری استفاده شده است. این نرمافزار مختصات خام اتمی را به نمایش گرافیکی قدرتمند تبدیل کرده و امکان تفسیر آن را میدهد.

۳– نتایج و بحث ۳–۱– مورفولوژی [†] سطح و مکانیزم تشکیل براده⁴

شکل ۲ تاثیر تغییرات طول و عرض قطعه کار را بر کیفیت برادهبرداری در ۱۱mm پیشروی ابزار² در راستای طول نمونه نشان می دهد. مطابق این شکل، ابعاد دو قطعه کار کوچک در حدی است که اتمهای ناحیه ثابتشده، بر مکانیزم برادهبرداری تاثیر گذاشته و میزان موج نیروی حاصل از ماشینکاری، پس از برخورد با دیواره ثابت رخ داده باشد. از منظر فیزیکی، ایجاد براده منقطع و یا پیوسته، بیشتر به جنس ماده و پارامترهای ابزار و ماشینکاری بستگی دارد. لذا شکل گیری برادههای منقطع در ابعاد کوچکتر، حاکی از کافی نبودن این ابعاد جهت مطالعات ماشینکاری نانومتری میباشد. از طرف دیگر، کیفیت بطح و حجم برادههای تولید شده در ابعاد بزرگ قطعه کار نیز تفاوت چندانی با یکدیگر ندارند؛ لیکن زمان بسیار زیادی را جهت تحلیل نرمافزاری به خود اختصاص میدهند. از این روی، ابعاد میانی درنظر گرفته شده برای قطعات مناسبتر به نظر میرسد.

۲-۳- رفتار گرمایی قطعهکار

(٢)

به دلیل ماهیت مکانیک آماری که بر اساس هنگردها تعریف شده است، تعریف خواص اتمها با تعریفی که از توده اجسام^۷ داریم متفاوت است. یکی از دلایل این موضوع، ارتعاشات و جابجاییهای بسیار کوچک در درون مقیاس اتمی میباشد. بطور معمول، دمای یک جسم به سرعت حرکت اتمها بستگی داشته و برای محاسبه آن، از رابطه بین انرژی جنبشی و دما بصورت زیر استفاده میشود:

$$\frac{1}{2}m_iv_i^2 = \frac{3}{2}k_bT$$

که در این رابطه، m_i برابر با جرم اتم، v_i سرعت اتم، k_b ثابت استفان-بولتزمن و T_i دمای اتم میباشد.

شکل ۳ نمودار تغییرات دمای قطعه کارها با ابعاد مختلف را (بر حسب جدول ۱) در طول ماشینکاری نشان می دهد. مطابق این شکل، قطعه کارها با ابعاد 8.146m (و 16.293n × 21.724 در ابتدای مسیر ماشینکاری یک جهش دمایی را تجربه می کنند. دلیل این موضوع این است که در ابتدای ورود ابزار به قطعه کار، نیروی قابل توجهی فقط به تعداد کمی اتم وارد می شود. از طرف دیگر، به دلیل کوچک بودن ابعاد قطعه کارها، این موج نیرو سریعاً به انتهای صلب قطعه رسیده و بازتاب می یابد. این شرایط باعث می گردد تا سطح انرژی

² Maxwell-Boltzmann distribution

³ OVITO

⁴ Morphology

⁵ Chip formation

⁶ Tool advancement

⁷ Bulk

جنبشی و پتانسیل تک تک اتمها بطور ناگهانی افزایش یافته و در همان شروع فرآیند، یک افزایش ناگهانی دما را تجربه نمایند. دقیقاً دلیل افزایش میزان برادههای ماشینکاری در قطعات کوچکتر نیز همین موضوع میباشد (شکل ۲- الف و ب). تکرار همین موضوع سبب ادامه روند افزایشی دما در گامهای بعدی فرآیند گردیده است. در مورد قطعات بزرگتر (قطعات شماره ۳ الی ۶)، به دلیل بزرگی نسبی طول قطعات، این شوک اولیه وجود نداشته و پرش ناگهانی دما اتفاق نیافتاده است. لیکن به دلیل افزایش دمای اتمها در ناحیه اطراف نوک ابزار، دمای متوسط قطعهکار به تدریج افزایش مییابد. در قطعه شماره ۳ (با ابعاد ۲۵.283m) به دلیل آنکه تعداد اتمها از قطعات

بزرگتر کمتر میباشد، این افزایش دمای موضعی سبب افزایش بیشتر میانگین دمایی در قطعهکار گردیده است. از طرف دیگر، تقریباً در میانه مسیر ماشینکاری، شدت افزایش دما بیشتر شده است. دلیل این موضوع این است که شوک اولیه نیرو که ناشی از ورود ابزار به قطعهکار بود، در این زمان به انتهای صلب قطعهکار رسیده و پس از بازخورد، سبب افزایش سطح انرژی و دمای قطعات شده است. اختلاف دمای میانگین قطعهکارهای شماره ۳ تا ۶، فقط به علت تفاوت در تعداد اتمها میباشد. لذا انتخاب هر کدام از این ابعاد جهت مطالعات بعدی، میتواند مناسب باشد.



شكل ۲-مكانيزم تشكيل براده در قطعهكار با ابعاد الف−16. 293*nm* × 8. 146*nm*، ب– 21. 724*nm* × 10. 862*nm* × 32. 586*nm* × 2. 586*nm* × 19. 008*nm* × 19. 008*nm* × 19. 008*nm* × 16. 293*nm*



شکل ۳ -تاثیر ابعاد قطعه کار بر دمای میانگین در طول مسیر ماشینکاری

۳-۳- نیروهای ماشینکاری

شکل ۴ تغییرات نیروی برشی و عمودی وارد بر قطعه کارهایی با ابعاد مختلف را در طول فرآیند ماشینکاری نشان میدهد. مطابق این

شکل، با افزایش ابعاد قطعهکار، روند نوسانات نیروهای ماشینکاری کاهش یافته است. می توان دلیل این موضوع را در پایدار تر شدن روند ماشینکاری در ابعاد بزرگتر دانست.



شکل ۴-تاثیر ابعاد قطعه کار بر نیروهای برشی و عمودی وارد بر قطعه کار

بررسى

همانطور که پیشتر در شکل ۲- الف و ب نشان داده شد، مقدار برادههای منقطع در قطعات کوچک، زیاد می باشد. همین موضوع می تواند دلیل اصلی شدت نوسانات نیروهای ماشینکاری در این قطعات باشد.

روند تغییرات میانگین نیروی ماشینکاری با افزایش ابعاد قطعهکار در شکل ۵ آورده شده است. مقدار تفاوت نیرو در قطعهکارها با ابعاد 16.293nm×8.146nm و 16.293nm×8.146nm به ترتیب برابر با ۳۸٫۵۱ و ۳۰٫۷۹ درصد میباشد. در واقع این مقدار خطا، درصد تفاوت نیروی ماشینکاری هر قطعه نسبت به بزرگترین قطعهکار (با ابعاد 27.155nm (با ابعاد 54.310, میباشد. دلیلی که بزرگترین قطعهکار بعنوان معیار در نظر گرفته شده این است که ابعاد این قطعهکار به مقدار فیزیکی نزدیکتر بوده و اثرات بازگشت موج نیرو در آن وجود ندارد. این در حالی است که این میزان خطا برای قطعهکار با ابعاد این در حالی است که این میزان خطا برای قطعهکار با ابعاد میباشد. لذا میتوان این قطعهکار را بعنوان معیاری که دارای ابعاد و تعداد اتم کافی و قابل اتکا جهت مطالعات دینامیک مولکولی ماشینکاری نانومتری سیلیکون میباشد، انتخاب کرد.

۳-۴- تاثیر پهنای قطعهکار

شکل ۶ تاثیر پارامتر بی بعد ۵/۸ بر نسبت نیرو (۱) و همچنین دمای میانگین قطعهکار را نشان می دهد. در اینجا، w برابر با اندازه پهنای قطعهکار، a برابر با ثابت شبکه کریستالی سیلیکون و t برابر با نسبت نیروی عمودی^۱ (F) به نیروی برشی^۲ (F) می باشد. مطابق این شکل، در پهنای بسیار کم قطعهکار، نسبت نیرو و بخصوص دما به شدت کاهش یافته است. با این حال، نتایج نشان می دهد که با رسیدن پهنای قطعهکار تا ۱۰ برابر اندازهی ثابت شبکه کریستالی سیلیکون، این مقادیر به ثبات رسیده و با افزایش بیشتر پهنای قطعهکار، تغییر چندانی در مقدار آن ها حاصل نمی گردد. لذا می توان این پهنا را بعنوان معیاری مناسب جهت مطالعات دینامیک مولکولی این حوزه در نظر گرفت.





¹ Thrust force



۴- نتیجهگیری

در این مقاله، با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی تاثیر ابعاد قطعه کار سیلیکونی بر شرایط ماشینکاری نانومتری پرداخته شد. تغییر در تعداد اتم های قطعه کار میتواند بر مکانیزم براده برداری، دمای قطعه کار و همچنین نیروهای ماشینکاری تاثیر گذار باشد. مهم ترین نتایج این تحقیق به شرح ذیل می باشد:

- در ماشینکاری نانومتری قطعهکارهایی با ابعاد کمتر از 21.724nm × 10.862nm، برادهها بصورت کاملاً منقطع بوده و سطح قطعهکار شدیداً ناهموار خواهد شد.
- بدون توجه به ابعاد قطعه کار، دمای تمامی قطعات در طول فرآیند ماشینکاری نانومتری افزایش مییابد. لیکن این افزایش دما در قطعات بزرگتر، کمتر میباشد.
- کاهش بیش از حد ابعاد قطعهکار، منجر به ایجاد یک شوک حرارتی و جهش دمایی در ابتدای فرآیند ماشینکاری نانومتری خواهد شد. با این حال، با افزایش ارتفاع قطعهکار به اندازه ۱۵٬۵۱۷ برابر عمق ماشینکاری، این شوک حرارتی از بین خواهد رفت.
- علاوه بر شوک اولیه حرارتی، در ماشینکاری نانومتری قطعات
 کوچک، در میانه فرآیند نیز قطعات دچار شوک دیگری گردیده و
 نرخ افزایش دمای آنها، افزایش می ابد.
- افزایش ابعاد قطعه کار منجر به کاهش نیروی کل ماشینکاری و همچنین نوسانات آن در طول مسیر می گردد.
- با در نظر گرفتن لزوم صحت نتایج و همچنین هزینههای مالی و محاسباتی، انتخاب قطعهکار با ابعاد 19.008mm×19.008 و تعداد اتم ۱۹۸۱۱۰، مبنایی مناسب جهت انجام آزمایشات ماشینکاری نانومتری قطعات سیلیکونی میباشد.

۵- مراجع

- Blackman J. A., Handbook of Metal Physics: Metallic Nanoparticles, 1st editio. Elsevier B.V., 2009.
- [۲] حسینی س. و.، شبیهسازی فرآیند ماشینکاری نانومتری و مطالعه اثر عیوب کریستالی با روش دینامیک مولکولی، رساله دکتری دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، ۱۳۹۱.
- [3] Zhang L. C., Johnson K. L., and Cheong W. C. D., A molecular dynamics study of scale effects on the friction of single-asperity contacts, *Tribology Letters*, Vol. 10, No. 1– 2, pp. 23–28, 2001.
- [4] Padding J. T., and Briels W. J., Time and length scales of polymer melts studied by coarse-grained molecular

² Cutting force

dynamics simulations, *The Journal of* Chemical Physics., Vol. 117, No. 2, pp. 925, 2002.

- [5] Yamakov V., Wolf D., Phillpot S. R., Mukherjee A. K., and Gleiter H., Deformation-mechanism map for nanocrystalline metals by molecular-dynamics simulation, *Nature Materials*, Vol. 3, No. 1, pp. 43–47, 2004.
- [6] Sellan D. P., Landry E. S., Turney J. E., McGaughey A. J. H., and Amon C. H., Size effects in molecular dynamics thermal conductivity predictions, *Physical Review B*,Vol. 81, No. 21, pp. 214305, 2010.
- [7] Hosseini S. V., Vahdati M., and Shokuhfar A., Molecular Dynamics Simulation on Nano-Machining of Single Crystal Copper with a Void, *Materials with* Complex Behaviour II, Vol. 16, pp. 1–13, 2012.
- [8] Li J., Fang Q., Zhang L., and Liu Y., The effect of rough surface on nanoscale high speed grinding by a molecular dynamics simulation, *Computational Materials* Science, Vol. 98, pp. 252–262, 2015.
- [9] Chavoshi S. Z., Xu S., and Luo X., Dislocation-mediated plasticity in silicon during nanometric cutting: A molecular dynamics simulation study, *Materials Science in Semiconductor Processing*, Vol. 51, pp. 60–70, Aug. 2016.
- [10] Chavoshi S. Z., Goel S., and Luo X., Molecular dynamics simulation investigation on the plastic flow behaviour of silicon during nanometric cutting, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 24, No. 1, pp. 15002, Jan. 2016.
- [11] Chavoshi S. Z., Goel S., and Luo X., Influence of temperature on the anisotropic cutting behaviour of single crystal silicon: A molecular dynamics simulation investigation, journal of *manufacturing processes*, Vol. 23, pp. 201–210, 2016.
- [12] Chavoshi S. Z. and Luo X., An atomistic simulation investigation on chip related phenomena in nanometric cutting of single crystal silicon at elevated temperatures, *computational materials* science, Vol. 113, pp. 1–10, Feb. 2016.
- [13] Xu F., Wang J., Fang F., and Zhang X., A study on the tool edge geometry effect on nano-cutting, *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, Vol. 91, No. 5–8, pp. 2787–2797, Jul. 2017.
- [14] Wang Z., Chen J., Wang G., Bai Q., and Liang Y., Anisotropy of Single-Crystal Silicon in Nanometric Cutting, *Nanoscale Research Letters*, Vol. 12, No. 1, pp. 300, Dec. 2017.
- [15] Plimpton S., Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *Journal of Computational Physics*, Vol. 117, No. 1, pp. 1–19, Mar. 1995.
- [16] Gao Y., and Urbassek H. M., Scratching of nanocrystalline metals: A molecular dynamics study of Fe, *Applied Surface Science*, Vol. 389, pp. 688–695, 2016.
- [17] Otieno T., and Abou-El-Hossein K., Molecular dynamics analysis of nanomachining of rapidly solidified aluminium, *International Journal of Advanced Manufacturing*, Aug. 2017.
- [18] Tersoff J., New empirical approach for the structure and energy of covalent systems, *Phys. Rev. B*, Vol. 37, No. 12, pp. 6991–7000, 1988.
- [19] Ren J., Hao M., Lv M., Wang S., and Zhu B., Molecular dynamics research on ultra-high-speed grinding mechanism of monocrystalline nickel, *Applied Surface Science*, Vol. 455, No. March, pp. 629–634, Oct. 2018.

[20] عاملي كلخوران س. ن.، وحدتي م.، تاثير تابع پتانسيل بر شبيهسازي

علوم کاربردی و محاسباتی در مکانیک، دوره ۳۰، شماره ۲، بهار و

تابستان ۱۳۹۸، صفحات ۱۷–۳۲.

- [21] Chen H., Hagiwara I., Chang D., and Huang T., Parallel molecular dynamics simulation on nanometric ginding, *Trans. JSCES*, vol. 7, pp. 207–213, 2005.
- [22] Rapaport D. C., *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Vol. 2. 2004.