تاثیر هندسه و سرعت ابزار بر تولید حرارت در فرایند برش نانومتری تکبلور مسی با استفاده از روش شبیهسازی دینامیک مولکولی سید وحید حسینی^{*۱} و مهرداد وحدتی^۲

چکیدہ

تولید حرارت در طول فرایند ماشین کاری نانومتری یکی از پیامدهایی است که سعی می شود به کمترین حد رسانده شود. این پژوهش به بررسی تاثیر شعاع انحنای نوک ابزار و سرعت برش بر تولید حرارت و بالانس انرژی در قطعه کار می پردازد. در این راستا، فرایند برش نانومتریک بر قطعه کار تک بلور مس، با روش دینامیک مولکولی و تابع پتانسیل فلزی EAM شبیه سازی شده و با ارایه مدل توزیع انرژی، تاثیر عوامل یاد شده مورد بررسی قرار می گیرد. بر اساس نتایچ، با نفوذ ابزار به داخل قطعه کار، سرعت اتمهایی که در همسایگی ابزار قرار دارند، به شدت افزایش می یابد. این افزایش موضعی سرعت و تغییر شکل زیاد باعث می شود که دما در قطعه کار به صورت موضعی در اطراف ابزار و براده زیاد شود. افزایش موضعی سرعت و ترژی برش، تنها باعث افزایش حدود ٪27–21 نیروهای برشی می شود. سرعت برش، اما تاثیر قابل توجهی در تغییرات انرژی پتانسیل، جنبشی و انتقال حرارت در قطعه کار دارد. به گونه ای که در سرعت های برش بالا با کاهش مقدار انتقال حرارت، انرژی جنبشی و پتانسیل زیادی در قطعه کار دارد. به گونه ای که در سرعتهای برش بالا با کاهش مقدار انتقال حرارت، می شود. افزایش چهار برابری سرعت برشی می ماند که باعث افزایش شدید دما و گرادیان درجه حرارت در قطعه کار می شود. افزایش چهار برابری سرعت برش، از 80% که که می ماند که باعث افزایش شده دا و بالا با کاه ش مقدار انتقال حرارت، می شود. افزایش چهار برابری سرعت برش، از 80% کاری تاثیرگذار باشد. افزون بر این، با افزایش شعاع انحنا ابزار، میزان آونرد گی اتمها در جلوی ابزار افزایش می یابد و باعث افزایش نیروهای ابزار بویژه در جهت عمودی می شود که در نهایت، باعث افشردگی اتمها در جلوی ابزار افزایش می یابد و باعث افزایش نیروهای ابزار بویژه در جهت عمودی می شود که در نهایت، باعث

واژههای کلیدی: ماشین کاری نانومتری، شبیهسازی دینامیک مولکولی، تولید حرارت، بالانس انرژی.

¹⁻ دانشجوی دکتری، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه النصیرالدین

طـو سـي .

²⁻ استاديار، گروه ساخت و توليد دانشكده مهندسي مكانيك، دانشگاه صنعتي خواجه النصيرالدين طوسي.

^{*-} نویسنده مسئول مقاله: Mscmechanic@hotmail.com

پیشگفتار

امروزه فرایند ماشینکاری نانومتری در صنایع مکانیکی نوین، الکترونیک، مغناطیس و نوری کاربرد فراوانی پیدا کرده است. هدف از ماشین کاری نانومتری، رسيدن به كيفيت سطح بسيار بالا (در حد چند نانومتر) و دقت فرم بالا با حداقل خرابی در سطح ماشین کاری شده و ریزساختار قطعه است. عملیات ماشین کاری نانومتری به وسیله ماشین ابزارهای فرا دقیق ٔ با استفاده از ابزار الماس تک بلور بر بدنهای که دارای دقت بسیار بالا و صلبیت مناسب است، با عمق برادهبرداری چند نانومتر انجام می پذیرد [1]. با کم شدن عمق براده برداری تا حدود چند لایه اتمی، امکان فهم تجربی و آزمایشگاهی مکانیزم برادهبرداری و بررسی تاثیر پارامترهای ماشینکاری در ابعاد نانو بسیار سخت و هزینهبر است. روشهای المان محدود نیز اگر چه در فرایندهای میکرو ماشین کاری کاربرد قابل قبولی دارند، به دلیل انجام فرایند برش در ابعاد چند نانومتر و وابستگی شدید مکانیزم برادهبرداری به ویژگی های اتمی و جهات بلوری، قابل استفاده نمیباشند. امروزه روش جایگزین دینامیک مولکولی برای فهم بهتر یدیده برادهبرداری در ابعاد نانومتر کاربرد زیادی پیدا کرده است[2-7].

میکاوا و ایتو^۲ فرایند ماشین کاری نانومتری تک بلور مس را با استفاده از ابزار الماس با نوک گرد مطالعه کردند[2]. انرژی ویژه در نسبت عمق برش به شعاع انحنای ابزار مشخص که با استفاده از روش دینامیک مولکولی بدست آمده بود، با نتایج تجربی مطابقت داشت. ایشان در این پژوهش در زمینه سایش ابزار، مطالعاتی انجام دادند که با نتایج تجربی همخوانی قابل قبولی انجام دادند که با نتایج تجربی همخوانی قابل قبولی تجهیزات پیشرفته آزمایشگاهی و محاسباتی در دانشگاه اوکلاهما امریکا، در زمینه ماشینکاری نانومتری پژوهشهای ارزشمندی را انجام دادهاند. آنها در این مجموعه پژوهشها، تاثیر شعاع انحنای ابزار، زاویه حمله

پتانسیل جفتی مورس[†] مطالعه کردند[3–5]. افزون بر این، در پژوهشی دیگر فرایند شکستگی و تولید لبه تیز^۵ را در انتهای فرایند ماشین کاری نانومتری روی مواد نرم و ترد در عمقهای برش گوناگون و با استفاده از زوایای حمله گوناگون بررسی کردند [6]. در پژوهشی دیگر، فانگ و ونگ⁵ با استفاده از شبیهسازی تک بلور مس با تابع پتانسیل مورس، فرایند ماشین کاری نانومتری به وسیله ابزار پین شکل الماس را مطالعه کرده و توانستند ضرایب اسطکاک را در فرایند برادهبرداری بدست آورند. همچنین، ایشان با محاسبه نیروی وارد بر ابزار، افزون بر مشاهده پدیده چسبش و لغزش⁷، به این نتیجه رسیدند که نیروهای ابزار بصورت لگاریتمی به زاویه ابزار ارتباط دارند [7].

در فرایند برش، ابزار باید بر استحکام برشی قطعهکار غلبه کند که این امر باعث آزاد شدن مقدار زیادی انرژی حرارتی در ناحیهای نسبتا کوچک می شود که در نهایت، باعث افزایش درجه حرارت در قطعه کار می شود. درجه حرارت بالا تاثیر قابل توجهی بر سایش ابزار، عمر ابزار، ویژگیهای سطح ماشین کاری شده، مکانیزم برادهبرداری و تغییر شکل حرارتی که بزرگترین منبع تولید خطا در فرایند ماشین کاری است، می گذارد [8]. از سوی دیگر، افزایش درجه حرارت قطعه کار بویژه در نواحی برش، باعث کاهش سختی و استحکام ماده و در نهایت، نیروی وارد بر ابزار می شود. افزون بر این، افزایش درجه حرارت در ناحیه تماس ابزار و قطعه کار، باعث تغییر مشخصههای تماس و تغییر ضریب اصطکاک می شود که ارتباط زیادی با هندسه ابزار و عمق برش دارد[9]. از أنجا كه افزايش حرارت و گرادیان دما در قطعهکار یکی از پیامدهای منفی فرایند ماشین کاری لحاظ می شود، عموما سعی می شود که با شناخت منابع موثر بر حرارت، نرخ افزایش آن را به کمترین حد برسانند. عوامل گوناگونی در افزایش دما از جمله هندسه ابزار، جنس قطعه کار، سرعت و عمق برش، سیال خنک کننده و ... تاثیرگذارند. در این راستا، در ماشین کاری های متداول مدل های گوناگونی جهت تبدیل

⁴- Pairwise Morse Potential

⁵ -Exit Failure

⁶ -Fang and Weng

^{7 -}Stick-Slip Phenomena

¹-Ultra Precision Machining (UPM)

²- Maekawa and Itoh

³ -Chandrasekaran and Komanduri

انرژی ناشی از برش به حرارت ارایه شده است [9-11]. اگر چه با کم بودن عمق برش، تولید حرارت در ماشین کاری نانومتری نسبت به ماشین کاری های متداول كمتر است، ولى با توجه به كيفيت بالاى سطح مورد نياز، در سالیان اخیر پژوهشهایی در راستای کاهش اثرات منفی افزایش دما انجام گرفته است. در این راستا، یی و بیسواز ' با شبیهسازی فرایند ماشینکاری نانومتری تک بلور مس، تاثیر سرعت برش ابزار با زاویه حمله منفی را بررسی کردند [12]. آنها در این مطالعه با استفاده از تابع پتانسیل فلزی EAM، به این نتیجه رسیدند که در سرعتهای برش بالا، دمای قطعه کار، زبری سطح و هم-چنین، حجم برادهبرداری افزایش مییابد. رنچ و ایناساکی در سال 2006 توانستند اثر سیال خنککن را در فرایند ماشین کاری نانومتری با استفاده از روشهای دینامیک مولکولی شبیهسازی کنند[14,13]. نتایج حاکی از این بود که وجود سیال، تاثیری در توزیع تنش در قطعهکار ندارد، ولی باعث تغییر در توزیع درجه حرارت در قطعه کار می شود. اگرچه که استفاده از سیال باعث کاهش میانگین درجه حرارت قطعه کار شده بود، ولی گرادیان درجه حرارت در حالتی که از سیال خنککن استفاده می شد، زیادتر بود که اثرات نامطلوبی در پی داشت.

در این پژوهش در جهت شناخت بهتر عوامل موثر بر حرارت، تاثیر دو عامل سرعت برش و شعاع انحنای ابزار با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی ارایه خواهد شد. در واقع در فرایندهای معمول ماشینکاری نانومتری سرعت برش در محدوده 2m/ 20–10 است [15]، ولی با توجه به ماشینکاری سرعت بالا، در برخی از این نوع ماشینکاریها تا سرعت برش 1000 هم استفاده زمانی در روش دینامیک مولکولی، عموما نیاز است تا می توریع دما در قطعهکار شود. افزون بر این، از آنجا که در ماشینکاری نانومتری نسبت عمق برش به شعاع انحنای ابزار کمتر از یک میباشد، صرف نظر از انحنای ابزار و عدم

(

در نظر گرفتن مقدار تیزی نوک ابزار میتواند در افزایش ضریب اصطکاک و تولید دما تاثیرگذار باشد که در این مقاله به آن پرداخته میشود.

مواد و **روش** انجام پژوهش

روش دینامیک مولکولی که در آن از قوانین مکانیک کلاسیک جهت محاسبه مسیرهای اتمی استفاده میشود، ابزاری ارزشمند برای مطالعه و درک فرایندهای میکروسکوپی میباشد. در این روش فرض میشود که انرژی کل موجود در هر مجموعه اتمی به شرط آنکه تغییری از خارج بر آن وارد نشود، ثابت میماند. این انرژی شامل دو بخش کلی پتانسیل و جنبشی است. با فرض ثابت بودن جرم مولکولها، انرژی پتانسیل تابع موقعیت و انرژی جنبشی تابع اندازه حرکت اتمها است. در این روش نیروی وارد بر هم اتم از جمع برداری نیرویهای جاذبه و دافعه ناشی از اتمهای همسایه محاسبه می شود. این محاسبه برای تعداد زیادی از اتمها بسیار حجیم و زمانبر است و از آنجا که بزرگی نیروهای بین اتمی با مجذور فاصله نسبت عکس دارد، برای هر اتم تنها اتمهایی که در کروای به شعاع قطع $R_{
m CUT}$ قرار دارند، محاسبه می شود .[17]

میدانهای نیرو

از آنجا که سختی ابزار الماس در مقایسه با قطعه کار بسیار بالاتر است [18]، برای کاهش زمان تحلیل، ابزار صلب در نظر گرفته میشود و نیازی به تعریف میدان نیرویی بین دو اتم کربن داخل ابزار وجود ندارد. برای مدل سازی برهم کنشها بین اتمهای کربن موجود در ابزار و مس موجود در قطعه کار از تابع پتانسیل جفتی مورس استفاده شده است (رابطه 1). تابع پتانسیل جفتی مورس یکی از توابع بین اتمی جفتی میباشد که به دلیل سادگی، زمان محاسبات را کاهش میدهد. در این تابعO انرژی پیوستگی، α مدول الاستیک، r_{ij} فاصله بین اتمی و r_{0} .

 $U(rij)=E_{O}\left\{e^{-2\alpha (rij-ro)}-2e^{-\alpha (rij-ro)}\right\}$

¹-Ye and Biswas

² - Embedded Atom Method

³- Rentsch and Inasaki

همچنین، برای افزایش دقت محاسبات در قطعه کار تکبلور مسی، از تابع پتانسیل فلزی EAM استفاده شده است که دارای دقت بالاتری است و قابلیت محاسبه ویژگیهای الاستیک، تولید انرژی عیوب، مکانیزم شکست و محاسبه دقیقتر ویژگیهای انرژیهای سطحی را فراهم میکند[19]، ولی چون ماهیت برهمکنش چند ذرهای میکند[19]، ولی چون ماهیت برهمکنش چند ذرهای دارند، حجم محاسبات آنها سنگینتر است. تابع پتانسیل EAM از دو بخش انرژی ناشی از مجاورت با هستهها و مجاورت با الکترونهای آزاد در فلزات بدست میآید (رابطه2). در واقع این تابع پتانسیل از جمع انرژی پتانسیل جفتی یونهای مثبت $V_{ij}(r_{ij})$ (جمله دفعی) و انرژی ناشی از چگالی الکترونی پس زمینه $\rho_i F($ بدست آمده است (جذبی). N تعداد یونهای مثبت است [19].

$$U_{metal} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=i}^{N} V_{ij}(r_{ij}) + \sum_{i=1}^{N} F(\rho_i)$$
(2)

محاسبه درجه حرارت

در روش دینامیک مولکولی عموما موقعیت و سرعت اتمها به صورت مشخص محاسبه میشود و بسیاری از کمیتهای مورد نظر پس از اتمام هر مرحله گام زمانی، قابل محاسبه است. برای محاسبه دما ابتدا نیاز است تا انرژی جنبشی هر اتم بر اساس سرعت آن محاسبه شود (رابطه 3). در این رابطه m, v, m به ترتیب جرم، سرعت و انرژی جنبشی هر اتم است. در مرحله بعد، میتوان با انرژی جنبشی هر اتم است. در مرحله بعد، میتوان با توجه به رابطه دما و انرژی جنبشی، دما را در حجم محاسباتی قطعه کار محاسبه کرد (رابطه 4). در این رابطه N تعداد اتمهای مورد نظر جهت محاسبه دما، T دمای ناحیه مدنظر میباشد. همچنین $k_{\rm B}$ ضریب بولتزمن و

برابر با $rac{m^2kg}{s^2K}$ مىباشد [17].

$$k_i = \frac{1}{2} mV^2 \tag{3}$$

$$T = \frac{2}{3} \frac{\sum_{i=1}^{N} k_{i}}{Nk_{B}}$$

$$\tag{4}$$

مدل فرایند ماشینکاری نانومتری

شکل 1 مدل هندسی فرایند ماشین کاری نانومتری را نمایش می دهد. ابعاد قطعه کار برابر با 308×408× 108 می باشد که در آن a برابر با ثابت شبکه مس با ساختار بلوری FCC می باشد. مقدار a برابر با 208/0 نانومتر می باشد [18]. افزون بر این، برای مطالعه اثر شعاع نوک ابزار بر تولید درجه حرارت در قطعه کار، ابزار صلب با سه شعاع انحنای 33، 44 و 56 در نوک ابزار در نظر گرفته شده است. گفتنی است که در این ابزارها زاویه حمله ^۲ و لقی^۲ ثابت و به ترتیب برابر با 15 و 10 درجه می باشد.

بر اساس شکل 1، اتمهای آبی و سبز رنگ⁷ به عنوان شرایط مرزی تعریف شدهاند. تغییر مکان این اتمها صفر می باشد. در این مدل از شرط مرزی متناوب مرای دو صفحه موجود در راستای x (عمود بر صفحه) استفاده شده است که این امکان را فراهم میکند که اتمهای مرزی در صفحات ذکر شده حالت مرزی نداشته باشند و حرکتها و انرژیهای آنها همانند ذرات میانی در نظر گرفته شود تا عوامل تاثیرگذار بر خطای محاسباتی به کمترین حد برسد. صفحه بالایی هم صفحه ماشینکاری است و شرط مرزی برای آن در نظر گرفته نشده است تا رفتار آن با اعمال بار از راه ابزار شبیهسازی شود. همچنین، این مدل از شرط مرزی دما ثابت استفاده می کند تا در آن امكان انتقال حرارت از قطعه كار بوجود آيد (لايه اتمى زرد رنگ). برای اعمال این شرط مرزی، دمای این لایه در 300 °K با استفاده از الگوریتم نوز ثابت نگه داشته می شود. سرعت اولیه بر اساس رابطه ماکسول- بولتزمن در دمای K [°]K توزیع شده است [17]. جدول 1 ویژگیهای محیط محاسباتی شبیهسازی دینامیک مولکولی فرایند ماشین کاری نانومتری را نشان میدهد. از آنجا که در شبیهسازیهای دینامیک مولکولی اتمها بر اساس ساختار شبکه بلوری چیدمان می شوند، ویژگی های ناهمسانگردی به صورت خودکار در ابعاد نانومتری در نظر گرفته می شود. این ویژگی روش دینامیک مولکولی، از

¹ - Rate Angle

² - Clearance Angle

³⁻ براي ديدن شكل رنگي به سايت مجله مراجعه شود.

⁴ -Periodic boundary condition

ای که در ابزار با شعاع نوک 1/08 نانومتر، نیروی عمود بر ابزار پس از مدتی به علت انباشت براده روی لبه حمله ابزار (با زاویه مثبت) در جهت مثبت، کاهش می یابد. در صورتی که با افزایش شعاع انحنا نیروی عمود وارد بر ابزار افزایش می یابد که نشان دهنده این است که با افزایش شعاع انحنا نوک ابزار، حجم بیشتری از اتمها در ناحیه زیر ابزار فشرده می شوند. جدول 2 میانگین نیروهای وارد بر ابزار را در فرایند ماشین کاری نانومتری برای تمامی هندسههای ابزار و سرعت برش نشان میدهد. افزون بر هندسه ابزار، افزایش سرعت نیز باعث افزایش نیروهای وارد بر ابزار می شود. علت این پدیده این است که با افزایش سرعت، ابزار باید در زمان کوتاهتری یک طول برش مشخص را طی کند و نرخ کرنش افزایش مییابد. در نتیجه، با افزایش استحکام ماده در سرعتهای تغییرشکل زیاد، به نیروی بیشتری به وسیله ابزار برای برش نیاز است. اگرچه نیروهای وارد بر ابزار با افزایش سرعت، افزایش مییابد، ولی مقدار این افزایش در مقایسه با افزایش سرعت زیاد نیست. به گونه ای که با افزایش 4 برابری سرعت ابزار، نیروهای وارد بر ابزار با شعاعهای انحنای گوناگون حدود ./27- ./21 افزایش می یابد. این افزایش می تواند در تولید حرارت در قطعه کار نیز تاثیر گذار باشد. شكل 4 مقايسه بين نتايج محاسبه انرژى ويژه شبیهسازی اتمی اخیر و نتایج تجربی پژوهشگران [2,21] در ماشین کاری فرا دقیق را نشان میدهد. در این شکل نتایج عددی این پژوهش با سمبلهای دایروی شکل نشان داده شده است که تطابق قابل قبولی را با نتایج تجربی نشان میدهد و میتواند دلیلی بر درستی نتایج محاسبات باشد. انرژی ویژه ماشینکاری در واقع از تقسیم انرژی مورد نیاز برش (سطح آبی رنگ در شکل 3) بر حجم برادهبر داری بدست آمده است.

تولید حرارت در فرایند برش نانومتری

برای انجام فرایند برش نانومتری، ابزار باید انرژی مورد نیاز سه قسمت را تامین کند (شکل 5). قسمت نخست تامین انرژی مورد نیاز برش در ناحیه جلوی لبه انحنادار ابزار است. در این ناحیه، انرژی بسیار زیادی نیاز است تا با ایجاد کرنش برشی، جریان اتمی را به دو بخش تقسیم مزایای این روش نسبت به روش ماکروسکوپی المان محدود است[20]. البته، در روشهای المان محدود نیز امکان تعریف ویژگیهای ناهمسانگردی وجود دارد، ولی باید این ویژگیها در جهتهای گوناگون برای هر المان تعریف شود. بر اساس جدول 1 در این پژوهش ماشین کاری در جهت [010] و روی صفحه (001) انجام می پذیرد.

نتایج و بحث تغییر مکان اتمی

شکل 2 چگونگی تغییر شکل اتمی را در قطعه کار تک بلور مسی با استفاده از هندسههای گوناگون ابزار نشان می دهد. بر اساس شکل 2، با کاهش شعاع انحنای ابزار تغییر شکل پلاستیک قطعه کار بیش تر در ناحیه نوک ابزار از نوک ابزار تغییر چندانی نمی کند. در نتیجه، طول براده در این حالت بیش تر است و در نواحی دورتر از نوک ابزار تغییر شکل زیادی مشاهده نمی شود، ولی با افزایش شعاع انحنا، میزان تنش فشاری اتمها در ناحیه نوک ابزار افزایش می یابد و ناحیه بزرگتری تحت تغییر شکل زیاد قرار می گیرد. بطوریه گونه ای که بر اساس شکل 2، طول براده می گیرد. بطوریه گونه ای که بر اساس شکل 2، طول براده می خوض ناحیه تغییر شکل زیاد در جلوی ابزار ناحیهای عوض ناحیه تغییر شکل زیاد در جلوی ابزار ناحیهای بزرگتر است.

نیروهای وارد بر ابزار

شکل 3 روند نیروهای برش^۱ و نیروهای عمود^۲ ابزار را برای سه شعاع انحنای گوناگون در سرعت برش 100 متر بر ثانیه نمایش میدهد. بر اساس نتایج بدست آمده، با افزایش شعاع انحنا از 1/08 به 1/81 نانومتر، هم نیروی برشی و هم نیروی عمودی وارد بر ابزار افزایش مییابد. این بدین معنی است که تند بودن نوک ابزار، تاثیری قابل توجه در کاهش نیروهای وارد بر ابزار میگذارد. با دقت بیشتر در نتایج، سهم کاهش نیروهای عمودی وارد بر ابزار در مقایسه با نیروهای برشی، بزرگتر است. به گونه

¹- Cutting Force

²- Thrust Force

 Q_t

کند. قسمت دوم انرژی مورد نیاز جهت غلبه بر تنش هیدرواستاتیکی بالا در لبه حمله ابزار است. افزون بر این به دلیل وجود اصطکاک بسیار زیاد براده و ابزار، انرژی زیادی در غالب انرژی حرارتی آزاد خواهد شد. قسمت سوم تامین انرژی مورد نیاز جهت غلبه به تنش هیدرواستاتیکی و اصطکاکی در زاویه لقی ابزار است. بنابراین، انرژی کل تولید شده به وسیله ابزار $W_{\rm c}$, در محیط محاسباتی به انرژی کل ذخیره شده در قطعه کار محیط محاسباتی به انرژی کل دخیره شده در قطعه کار محیط محاسباتی به انرژی کل دی ماس رابطه (-5) تبدیل میشود.

$$W_c = \int F_c dx = \Delta E + Q_t \tag{5}$$

$$\Delta E = \Delta K + \Delta P \tag{6}$$

$$=Q_{cond}+Q_{conv} \tag{7}$$

بر اساس این روابط، انرژی کل قطعه کار از جمع انرژی جنبشی ΔK و پتانسیل ΔP تشکیل شده است. همچنین، انتقال حرارت از دو بخش هدایت Q_{cond} (به داخل حجم قطعه کار) و همرفتی Q_{conv} (به محیط بیرون) داخل حجم قطعه کار) و همرفتی کومای (به محیط بیرون) تشکیل شده است. از آنجا که در ماشین کاری های نانومتری متداول از سیال خنک کن استفاده نمی شود، بخش انتقال حرارت همرفتی کوچک و قابل صرفنظر است [13].

شکل 6 تغییرات انرژی جنبشی و پتانسیل در قطعهکار مسی با شعاع 1/48 نانومتر و سرعت برش 100 متر بر ثانیه را بر حسب طول برش نشان میدهد. برای این حالت ویژه در طول فرایند نانوماشین کاری، انرژی جنبشی حالت ویژه در طول فرایند نانوماشین کاری، انرژی جنبشی eV 312 و انرژی پتانسیل 9 496 افزایش یافته است که در نهایت، باعث افزایش V9 496 انرژی کل قطعه کار شده است. اگر نمودارهای انرژی پتانسیل و جنبشی با نشده است. اگر نمودارهای انرژی پتانسیل و جنبشی با نقت مورد ملاحظه قرار گیرد، در طول فرایند افزایشی انرژی، هم نمودار انرژی جنبشی و هم نمودار انرژی پتانسیل دارای نوسان هایی با دامنه کوچک و با فرکانس بالا هستند. در حالی که این نوسانها فرکانس بالا در طول روند افزایشی نمودار انرژی کل دیده نمیشود. این موضوع نشاندهنده تبدیل انرژی جنبشی و پتانسیل به یکدیگر در طول فرایند ماشین کاری است.

شکل 7 بالانس انرژی در فرایند ماشین کاری در سرعتهای گوناگون برای شعاع انحناهای گوناگون ابزار را مقایسه میکند. بر اساس نتایج، اگر چه انرژی مورد نیاز برش (سطح آبی زیر نمودار نیروی برش شکل 3) در سرعتهای 50 و 100 متر بر ثانیه تغییر زیادی نکرده است، ولى اين مقدار در سرعت برش 200 متر بر ثانيه اندكى افزايش يافته است. نكته قابل توجه تغييرات چشمگیر انرژی پتانسیل، جنبشی و انتقال حرارت در قطعه کار بر حسب سرعت برش است. بر اساس شکل 7، از آنجایی که در سرعتهای پایین زمان کافی برای انتقال حرارت در قطعه کار وجود دارد، درصد زیادی از انرژی تولید شده (بیش از ./60) به صورت حرارت از قطعه کار خارج می شود و بقیه تبدیل به انرژی جنبشی (افزایش دما) و پتانسیل (افزایش تنش) در قطعه کار می شود. با افزایش سرعت برش و کاهش زمان انتقال حرارت، درصد کمتری از انرژی تولید شده میتواند از قطعه کار خارج شود (كمتر از ./25) كه اين امر باعث بوجود آمدن گراديان دما و تنش در قطعه کار می شود. افزون بر این، با افزایش شعاع انحنای ابزار، انرژی مورد نیاز ابزار افزایش می یابد که این موضوع در پی آن باعث افزایش انرژی جنبشی در قطعه کار مىشود.

دما در قطعه کار

شكل 8 ميانگين درجه حرارت قطعهكار را در سرعتهاى گوناگون براى شعاع انحناهاى گوناگون ابزار نشان مىدهد. ميانگين دماى قطعهكار در حالتى كه سرعت ابزار كمتر از 50 متر بر ثانيه است، كمتر از 50 درجه كلوين افزايش مىيابد. اين بدين معنى است كه در حالاتى كه ماشينكارى با سرعت پايين انجام مىگيرد، هم سرعت آزاد سازى انرژى پايين تر است و هم زمان كافى جهت انتقال حرارت وجود دارد، ولى با افزايش سرعت قطعهكار و كاهش زمان واكنش، افزون بر اين كه نرخ انرژى آزاد شده افزايش يافته و زمان انتقال حرارت كاهش مىيابد، به دليل افزايش استحكام ماده در سرعتهاى تغيير شكل بالا، نيروى لازم براى تغيير شكل افزايش مىيابد. اين موضوع نيز به نوبه خود در افزايش دما تاثير قابل توجهى دارد.

شکل 9 میانگین درجه حرارت قطعه کار را برای سه نوع هندسه ابزار در سرعت برش 100 متر بر ثانیه نشان میدهد. بر اساس نتایج موجود، با افزایش شعاع انحنای نوک ابزار، همان گونه که انرژی مورد نیاز برش افزایش می یابد، درجه حرارت هم که به گونه ای نشان دهنده انرژی جنبشی قطعهکار است، افزایش مییابد. برای مشاهده توزیع درجه حرارت در قطعه کار، نیاز است که دما در نواحی کوچکتر و محدودتر محاسبه شود. بر این اساس، با انتخاب نواحی کوچکتر حول هر اتم، بر اساس رابطه 4 توزيع دما در قطعه کار بدست آمد. شکل 10 توزیع دما در قطعه کار را برای هندسه و سرعت گوناگون ابزار نشان میدهد. بر اساس این نتایج، مشخص است که در سرعت برش 50 متر بر ثانیه درجه حرارت خیلی افزایش نیافته است و بیشتر افزایش درجه حرارت مربوط به براده و نواحی اطراف نوک ابزار است که کمتر از 600 درجه کلوین میباشد. با افزایش سرعت ماشین کاری، تولید حرارت و افزایش دما در قطعه کار بویژه در نواحی براده و اطراف ابزار تغییر محسوسی مییابد. در این حالت، با وجود اینکه دما در قطعهکار بویژه در قسمتهایی که از ابزار دور هستند، تغییر چندانی نکرده است، ولی در براده و نواحی اطراف ابزار به بیش از 600 درجه کلوین رسیده است. با افزایش شعاع انحنای ابزار، افزون بر پیشانی ابزار (ناحیه براده تولید شده)، ناحیه زیر ابزار (سطح ماشین کاری شده) نیز دچار افزایش دما شده است. با افزایش بیشتر سرعت برش تا 200 متر بر ثانیه، دمای قطعه کار بویژه در نواحی اطراف ابزار بسیار شدید افزایش می یابد و تا بیش از 1000 درجه کلوین می رسد. در این حالت دما به صورت شعاعی با دور شدن از ابزار به شدت کاهش می یابد به گونه ای که شیب شدید حرارتی، باعث افزایش تنشهای حرارتی در سطح قطعه شده و تاثیر بسزایی در کاهش کیفیت سطح ماشین کاری دارد. افزون بر این، افزایش دما تا 1000 درجه کلوین، امکان افزایش 3- R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L.M. Raff, "Effect of tool geometry in nanometric cutting: an MD simulation approach", Wear 219, p.84-97, 1998. 4- R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L.M.

4- R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L.M. Raff, "Some aspects of machining with negative rake tools simulating grinding: an

واکنشهای شیمیایی سطوح مانند اکسایش سطحی و یا جذب هیدروژن را بیشتر میکند.

نتيجەگىرى

- با افزایش شعاع انحنا نوک ابزار (کند شدن ابزار)، فشردگی اتمها در جلوی ابزار افزایش می یابد و ناحیه بزرگتری تحت تغییر شکل پلاستیک قرار می گیرد. در نتیجه، نیروهای ابزار بویژه نیروهای عمودی افزایش می یابد. لذا، با افزایش انرژی برش، سهم افزایش می طعه کار هم افزوده می شود که باعث افزایش گرادیان درجه حرارت در قطعه کار بویژه در ناحیه تولید براده می شود.
- 2. افزايش ./400 سرعت برش، تنها باعث افزايش حدود ./27-21 نيروهاى برشى مىشود. در واقع، به دليل افزایش استحکام ماده در سرعتهای تغییر شکل بالا، نيروى لازم براى تغيير شكل افزايش مىيابد. سرعت برش تاثیر قابل توجهی در تغییرات انرژی پتانسیل، جنبشی و انتقال حرارت در قطعه کار دارد. به گونه ای که در سرعتهای پایین که زمان کافی برای انتقال حرارت در قطعه کار وجود دارد، درصد زیادی از انرژی برش به صورت حرارت از قطعه کار خارج می شود. در نتيجه، دما در نواحي اطراف ابزار كمتر از 300 درجه کلوین افزایش می یابد که با توجه به شیب خفیف حرارتی، سطح تنشهای پسماند در قطعهکار کاهش می یابد. در سرعتهای برش بالا با کاهش مقدار انتقال حرارت، انرژی جنبشی و پتانسیل زیادی در قطعه کار باقی میماند که باعث افزایش شدید دما و گرادیان درجه حرارت در قطعهکار میشود و در نهایت، می تواند در کیفیت نهایی سطح ماشین کاری شده تاثیر گذار باشد.

Refrences

1- D. Dornfeld, D. Lee, "Precision Manufacturing", Springer Pub., 2008.

2- K. Maekawa, A. Itoh, "Friction and tool wear in nano-scale machining-a molecular dynamics approach", Wear 188, p.115-122, 1995.

MD simulation approach", Phil. Mag. B 79, p.955-968, 1999.

5- R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L.M. Raff, "Orientation Effects in Nanometric Cutting of Single Crystal Materials: An MD Simulation Approach", CIRP Annals-Manufacturing Technology 48, p. 67-72, 1999. 6- R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L.M. Raff, "MD simulation of exit failure in nanometric cutting", Materials Science and Engineering A 311, p.1-12, 2001.

7- T.H. Fang, Ch. I. Weng, "Threedimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale", Nanotechnology 11, p.148–53, 2000.

8- Y. Takeuchi, M. Sakamoto, T. Sa ta, "Improvement in the working accuracy of an NC lathe by compensating for thermal expansion", Precision Eng. 4 1, p.19–24, 1982.
9- N.A. Abukhshim, P.T. M ativenga, M.A. Sheikh, "Heat generation and temperature prediction in metal cutting: A review and implications for high speed machining", International Journal of Machine Tools & Manufacture 46, p.782–800, 2006.

10- G. Barrow, "A review of experimental and theoretical techniques for assessing cutting temperatures", CIRP Annals-Manufacturing Technology 22 2, p.203–211, 1973.

11- A.O. Schmidt, O.W. Gilbert, A. Boston, "Thermal balance method and mechanical investigation for evaluating machinability", Trans. ASME 67, p.84-97, 1945.

12- Y.Y. Ye, R. Biswas, et al., "Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper", Nanotechnology 14, p.390–396, 2003.

13- R. Rentsch, I. Inasaki, "Effects of fluids on the surface generation in material removal processes - molecular dynamics simulation", CIRP Annals-Manufacturing Technology 55, p.601-604, 2006.

14- R. Rentsch, I. Inasaki, "Molecular dynamics simulation of the nanometer scale cutting process", Int. J. Manufacturing Research 1 1, p.83 – 100, 2006.

15- H. Chen, I. Hagiwara, "Parallel molecular dynamics simulation of nanometric grinding", Transactions of the Japan Society for Computational Engineering and Science 7, p. 207-213, 2005.

16- J. Shimizu, L.B. Zhou, H. Eda, "Simulation and experimental analysis of super high-speed grinding of ductile material", J. of Materials Processing Technology 129, p.19-24, 2002.

17- D.C. Rapaport, "The Art of Molecular Dynamics Simulation", Cambridge University Press, 1995.

18- D. R. Lide, "Handbook of Chemistry and Physics", CRC Press, 2002.

19- S.M. Foiles, M.S. Daw, M.I. Baskes, "Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys", Physical Review B 33 12, p.7983-7991, 1986.

20- R. Komanduri, L.M. Raff, "A review on the molecular dynamics simulation of machining at the atomic scale", Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part B: Journal of Engineering Manufacture 215, p.1639-1672, 2001.

21- I.F. Stowers et al., "Molecular dynamics simulation of the chip forming process in single crystal copper and comparison with experimental data", Proc. ASPE Annu. Meet., p.13-18, 1991.



الف- شعاع انحناى 08/ 1 نانومترى ب- شعاع انحناى 1/45 نانومترى ج- شعاع انحناى 1/81 نانومترى

www.SID.ir



شکل 2- چگونگی تغییر مکان اتمی در قطعه کار با هندسه های گوناگون ابزار.

جدول 2- میانگین نیروهای وارد بر ابزار در فرایند ماشین کاری نانومتری. سبعت انال

نيرو کل	نيروى عمودى	نیروی برشی	سرعت ابزار	شعاع انحناي ابزار
(nN)	(nN)	(nN)	(m/s)	(nm)
44/5	21/1	36/8	50	
40/0	15/1	34/8	100	1/08
56/2	27/4	47/3	200	
54/1	32/2	41/4	50	
57/0	38/2	39/8	100	1/48
66/5	43/0	48/1	200	
57/0	37/0	40/2	50	
61/3	41/5	41/8	100	1/81
69/8	45/8	49/2	200	



شکل 4-مقایسه نتایج محاسبه انرژی ویژه برش در شبیهسازی دینامیک مولکولی اخیر (سمبلهای دایرهای) و نتایج



شکل 7- مقایسه بالانس انرژی در قطعهکار در سرعتهای گوناگون ابزار (شعاع 1/45 نانومتری انحنای ابزار).

www.SID.ir



شکل 8– تاثیر سرعت برش در میانگین درجه حرارت قطعه کار در شعاعهای گوناگون نوک ابزار.

www.SID.ir



شكل 9- تاثير شعاع انحناى نوك ابزار بر ميانگين درجه حرارت قطعهكار (سرعت ابزار برابر 100 متر بر ثانيه).



شکل 10- توزیع دما در قطعهکار در شعاعهای گوناگون لبه ابزار و سرعتهای برش مختلف.