

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

سید نادر عاملی کلخوران

مهرداد وحدتی*

جیوانگ یان

دانشجوی دکتری، گروه ساخت و تولید، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

دانشیار، گروه ساخت و تولید، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران

استاد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه کیو، یوکوهاما، ژاپن

چکیده

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 قطعه کار 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 پهنا و ابعاد قطعه کار بر کیفیت ماشینکاری بررسی گردیده 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 می‌گردد، 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 می‌گردد.

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 Kalkhoran

M. Vahdati

J. Yan

Department of Mechanical Engineering, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

Department of Mechanical Engineering, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

Department 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 نمی‌باشد. دلیل این امر ایجاد براده‌های گسسته و ضربه‌ها و نوساناتی می‌باشد که در هربار شکست براده به قطعه کار وارد شده و سبب کاهش کیفیت سطح ماشینکاری می‌گردد. با توجه به ناکارآمدی مبانی مکانیک پیوسته^۳ در عمق‌های برشی کمتر از یک میکرون، معمولاً در مدل‌سازی فرآیند ماشینکاری نانومتری، از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده می‌شود. 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 می‌باشد. با استفاده از این فرآیند، می‌توان 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 می‌باشد. این در

¹ Nanometric machining

² Monocrystalline Diamond Tool

³ Continuum mechanics

بر نتیجه فرآیند دارد، می تواند بر صحت شبیه سازی های دینامیک مولکولی نیز تاثیر گذار باشد.

واضح است که هرچقدر ابعاد قطعه کار کوچکتر باشد، زمان محاسبات و تحلیل نیز کمتر خواهد بود. اما این کاهش ابعاد می تواند همراه با خطاهای اثر اندازه^۱ نیز باشد. حالت ایده آل در روش دینامیک مولکولی، کاهش نسبت تعداد اتم های سطح به حجم می باشد؛ که این، با بزرگتر شدن ابعاد قطعه کار حاصل خواهد شد. بلکم^۱ [۱] نشان داده است، زمانیکه تعداد اتم های یک قطعه مکعبی شکل، بیشتر از ۱۰۵ اتم باشد، این نسبت به کمتر از ۱۰٪ خواهد رسید. اما از طرف دیگر، نمی توان صرفاً جهت ارضای این شرایط، ابعاد قطعه کار و حجم سیستم را افزایش داد. دلیل اصلی این موضوع، محدودیت در سخت افزارهای محاسباتی و زمان تحلیل می باشد. 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 اتم های 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٪ اتم های سطحی بوده و برای شبیه سازی مناسب می باشد. او همچنین ادعا کرد که تحت این شرایط، خطای شبیه سازی کمتر از ۳٪ خواهد بود. ژانگ و همکارانش [۳] در سال ۲۰۰۱ به بررسی تاثیر ابعاد ابزار ماشینکاری بر مکانیزم براده برداری پرداختند. آن ها شعاع های مختلف از ابزار را بررسی کرده و مشخص نمودند هنگامیکه سطح تماس ابزار و قطعه کار به حدود ۲۰ نانومتر برسد، فرآیند چسبش-لغزش^۲ رخ داده و نایجابی ها تولید می گردند. پدینگ و بریلز [۴] بر روی تاثیر ابعاد شبیه سازی دینامیک مولکولی بر خواص ذوبی پلیمرها انجام داده و اثبات کردند که نتایج شبیه سازی نانولوله پلی اتیلن با قطر ۵/۴ نانومتر، همخوانی مناسبی با آزمایشات تجربی خواهد داشت. یاماگوو 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 قطعه کار بر رسانایی گرمایی قطعه کار سیلیکونی را مورد بررسی قرار دادند. آن ها استفاده از قطعه کاری 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 قطعه کار 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 عیب دار، مقدار اتم های تحت فشار در ناحیه جلوی نوک ابزار کاهش یافته است. لی و همکارانش [۸] در سال ۲۰۱۵ به بررسی تاثیر شرایط سطح قطعه کار در فرآیند سنگ زنی نانومتری پرداختند. آن ها با استفاده از تکنیک شبیه سازی دینامیک مولکولی مشخص کردند که هر چقدر میزان ناصافی اولیه سطح قطعه کار بیشتر باشد، کیفیت نهایی سنگ زنی نیز کمتر خواهد بود. زارچ چاوشی و همکارانش [۹] در شبیه سازی دینامیک مولکولی که

در ارتباط با ماشینکاری نانومتری قطعات سیلیکونی انجام داده بودند، از قطعه کاری به ابعاد 19nm×38nm و ضخامت ۱۰/۸ نانومتر استفاده نمودند. با این حال، این محققین در تحقیقات بعدیشان، ضخامت قطعه کار را به ۵/۴ نانومتر کاهش دادند [۱۰]-[۱۲]. دلیل این موضوع در متناوب بودن شرایط مرزی در این راستا می باشد. زو و همکارانش [۱۳] در سال ۲۰۱۷، با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی، تاثیر هندسه ابزار بر ماشینکاری نانومتری قطعه کار مسی را بررسی نمودند. آن ها 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 قطعه کار سیلیکونی در ماشینکاری نانومتری پرداختند. آن ها نشان دادند که جهت کریستالی [100]-[110]، [110]-[110] و [111]-[111] بهترین نتیجه و کیفیت ماشینکاری را حاصل خواهد کرد.

در اکثر تحقیقات انجام یافته، محققین بر روی شرایط قطعه کار و ماشینکاری متمرکز گردیده و تحقیقی بر روی ابعاد قطعه کار نداشته اند. این تحقیقات، تنها به ابعاد مورد استفاده در گزارشات پیشین استناد نموده و مطالعه ای بر روی ابعاد مناسب انجام ندهاند. در این مقاله، برای اولین بار به بررسی تاثیر پهنا و ابعاد مختلف قطعه کار سیلیکونی در فرآیند ماشینکاری نانومتری پرداخته شده است. بدین جهت، ۶ اندازه و همچنین ۵ پهناي مختلف قطعه کار تحت ماشینکاری نانومتری قرار گرفته و مکانیزم براده برداری، تغییرات دمایی و نیروی ماشینکاری در آن ها بررسی شده است. نتایج این تحقیق می تواند معیاری مناسب را جهت تحقیقات آتی دیگر محققین در این حوزه ارائه نماید.

۲- روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

در این پژوهش، از نرم افزار لمپس^۳ جهت شبیه سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانومتری قطعه کار سیلیکونی تک کریستال استفاده شده است [۱۵]. عوامل بسیار زیادی در پیاده سازی یک شبیه سازی صحیح دینامیک مولکولی موثر می باشند. از طرف دیگر، تقریباً تمام نرم افزارهای شبیه سازی دینامیک مولکولی، از جمله لمپس، بصورت کدنویسی و غیرتصویری هستند. لذا انتخاب شرایط مناسب و نحوه اعمال صحیح آن ها، علاوه بر دانش گسترده دینامیک مولکولی است، نیازمند تسلط عمیق بر نرم افزار شبیه سازی و همچنین مبانی ریاضی و فیزیک دارد.

در فرآیند ماشینکاری نانومتری، ابزار ماشینکاری نقشی اساسی در مکانیزم براده برداری، نیروهای ماشینکاری و صافی سطح نهایی ایفا می کند. این ابزار باید از کیفیت سطح و دقت ابعادی بسیاری بالایی برخوردار بوده و مقاومت به سایش مناسبی داشته باشد. در عمل، از الماس تک کریستال بعنوان ابزار برشی استفاده می شود. با توجه به سایش بسیار اندک این ماده در حین فرآیند ماشینکاری، معمولاً در شبیه سازی های دینامیک مولکولی، ابزار برشی را بصورت صلب در نظر می گیرند [۱۶]، [۱۷]. در تحقیق پیش رو نیز از این رویکرد استفاده شده است. قطعه کار مورد نظر در این تحقیق از جنس سیلیکون

^۱ Size effect

^۲ Stick-slip phenomenon

^۳ LAMMPS

(اتم‌های 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.

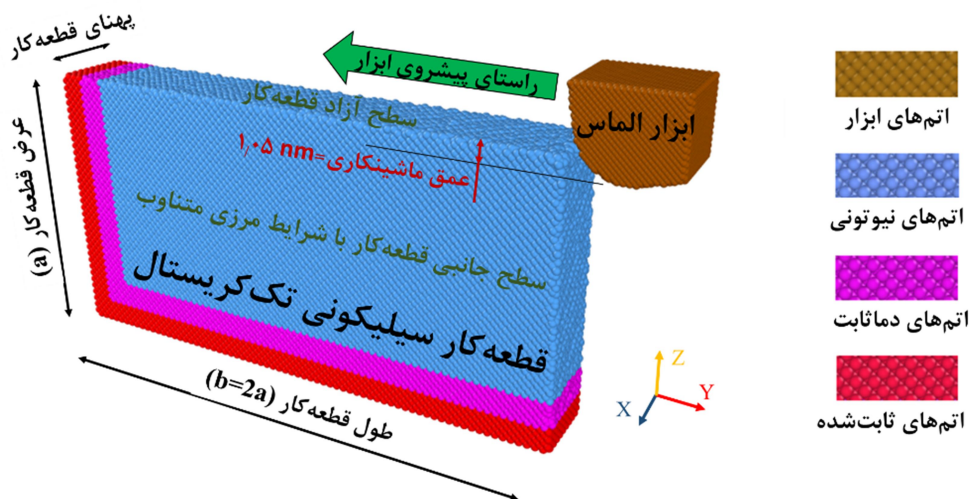
بیشترین حجم اتمی قطعه‌کار را اتم‌های نیوتونی به خود اختصاص داده‌اند (اتم‌های آبی‌رنگ). دلیل نامگذاری این دسته از اتم‌ها با نام "اتم‌های نیوتونی"، پیروی این ذرات از قوانین مکانیک نیوتونی می‌باشد [۱۹]، [۲۰]. قطعه‌کار دارای شرایط مرزی متناوب در راستای پهنا می‌باشد. بدین صورت اثرات ابعادی قطعه‌کار به حداقل رسیده و اتم‌های جانبی نیز می‌توانند رفتاری مانند اتم‌های میانی داشته باشند. جزئیات این دسته از مدلسازی‌ها در جدول ۲ آورده شده است. البته لازم به توضیح است که سرعت برش در آزمایشات تجربی در حدود ۱۰-۲۰ متر بر ثانیه می‌باشد [۲۱]. با این حال با توجه به محدودیت زمانی شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، در اینجا از سرعت ۱۰۰ متر بر ثانیه استفاده شده است.

تک‌کریستال می‌باشد. به منظور بررسی تاثیر ابعاد قطعه‌کار بر نتایج تحلیل، از ۶ اندازه مختلف قطعه‌کار و ۵ پهناهای 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 قطعه‌کار از تابع پتانسیل ترسوف و اندرکنش بین اتم‌های ابزار کریستالی و قطعه‌کار، از تابع پتانسیل مورس استفاده شده است [۱۸]. شکل ۱ مدل سه‌بعدی دینامیک مولکولی ماشینکاری نانومتری را نشان می‌دهد. مطابق این شکل، اتم‌های قطعه‌کار به سه ناحیه تقسیم شده است. گروه نخست، سه لایه اتمی ثابت شده (اتم‌های قرمز رنگ) می‌باشد. در حین مدلسازی، با صفر در نظر 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 قطعه‌کار می‌باشد. گروه دوم، سه لایه اتمی دمانتاب

جدول ۱- ابعاد مختلف قطعه‌کارهای مطالعه شده

نام قطعه	طول قطعه‌کار (nm)	عمق قطعه‌کار (nm)	پهنای قطعه‌کار (nm)	تعداد اتم‌ها
WP1	۱۶,۲۹۳	۸,۱۴۶	۵,۴۳۱	۳۶۹۱۰
WP2	۲۱,۷۲۴	۱۰,۸۶۲	۵,۴۳۱	۶۵۲۱۰
WP3	۳۲,۵۸۶	۱۶,۲۹۳	۵,۴۳۱	۱۴۵۸۱۰
WP4	۳۸,۰۱۷	۱۹,۰۰۸	۵,۴۳۱	۱۹۸۱۱۰
WP5	۴۳,۴۴۸	۲۱,۷۲۴	۵,۴۳۱	۲۵۸۴۱۰
WP6	۵۴,۳۱۰	۲۷,۱۵۵	۵,۴۳۱	۴۰۳۰۱۰
WP7	۳۸,۰۱۷	۱۹,۰۰۸	۱۰,۸۶۲	۳۹۶۲۲
WP8	۳۸,۰۱۷	۱۹,۰۰۸	۲,۷۱۵۵	۹۹۰۵۵
WP9	۳۸,۰۱۷	۱۹,۰۰۸	۸,۱۴۶۵	۲۹۷۱۶۵
WP10	۳۸,۰۱۷	۱۹,۰۰۸	۱۰,۸۶۲	۳۹۶۲۲۰



شکل ۱- نمونه‌ای از قطعه‌کار و ابزار مورد مطالعه

اندازه گام‌های زمانی مورد استفاده در این تحلیل‌ها برابر با 1fs می‌باشد. با توجه به محدودیت گرافیکی نرم افزار لمپس، در اینجا از نرم‌افزار منبع باز اوویتو^۳ 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^۴ سطح و مکانیزم تشکیل براده^۵

شکل ۲ تاثیر تغییرات طول و عرض قطعه کار را بر کیفیت براده برداری در 11nm پیشروی ابزار^۶ در راستای طول نمونه نشان می‌دهد. مطابق این شکل، ابعاد دو قطعه کار کوچک در حدی است که اتم‌های ناحیه ثابت شده، بر مکانیزم براده برداری تاثیر گذاشته و میزان انقطاع براده‌ها افزایش یافته است. این موضوع می‌تواند به دلیل بازگشت 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 شکل‌گیری براده‌های منقطع در ابعاد کوچک‌تر، حاکی از کافی نبودن این ابعاد جهت مطالعات ماشینکاری نانومتری می‌باشد. از طرف دیگر، کیفیت سطح 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 در نظر گرفته شده برای قطعات مناسبتر به نظر می‌رسد.

۳-۲- رفتار گرمایی قطعه کار

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 جایجایی‌های 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:

$$\frac{1}{2} m_i v_i^2 = \frac{3}{2} k_B T_i \quad (2)$$

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 می‌دهد. مطابق این شکل، قطعه کارها با ابعاد $16.293\text{nm} \times 8.146\text{nm}$ و $21.724\text{nm} \times 10.862\text{nm}$ در ابتدای مسیر ماشینکاری یک جهش دمایی را تجربه می‌کنند. دلیل این موضوع این است که در ابتدای ورود ابزار به قطعه کار، نیروی قابل توجهی فقط به تعداد کمی اتم وارد می‌شود. از طرف دیگر، به دلیل کوچک بودن ابعاد قطعه کارها، این موج نیرو سریعاً به انتهای صلب قطعه رسیده و بازتاب می‌یابد. این شرایط باعث می‌گردد تا سطح انرژی

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 کمینه‌سازی انرژی به روش گرادینان‌های مزدوج^۱ و یک مرحله تعادل‌رسانی استفاده شده است.

جدول ۲- جزئیات مدل دینامیک مولکولی جهت بررسی تاثیر ابعاد قطعه کار

جنس قطعه کار	سیلیکون (تک کریستال)
نسبت طول به عمق قطعه کار	۲
پهنای قطعه کار و ابزار	۵,۴۳۱nm
جنس ابزار	الماس
شعاع لبه ابزار	۳nm
زاویه پیشانی ابزار	-۱۰
زاویه آزاد ابزار	۱۵
عمق ماشینکاری	۱,۰۵nm
نسبت عمق ماشینکاری به شعاع لبه ابزار	۰,۳۵
دمای قطعه کار	۲۹۳K
سرعت برش	۱۰۰ m/s
گام زمانی	۱fs
طول ماشینکاری	۱۱nm
توابع پتانسیل	کربن-سیلیکون: مورس سیلیکون-سیلیکون: ترسوف

در مرحله اول، پس از تعریف قطعه کار 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 قطعه کار برابر با ۲۹۳ کلوین تعریف شد. به منظور اعمال این دما به تمامی اتم‌های قطعه کار و جایجایی صحیح آن‌ها نسبت به این شرایط، کل سیستم به مدت ۲۵ پیکوثانیه 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 قطعه کار، 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:

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

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

³ OVITO

⁴ Morphology

⁵ Chip formation

⁶ Tool advancement

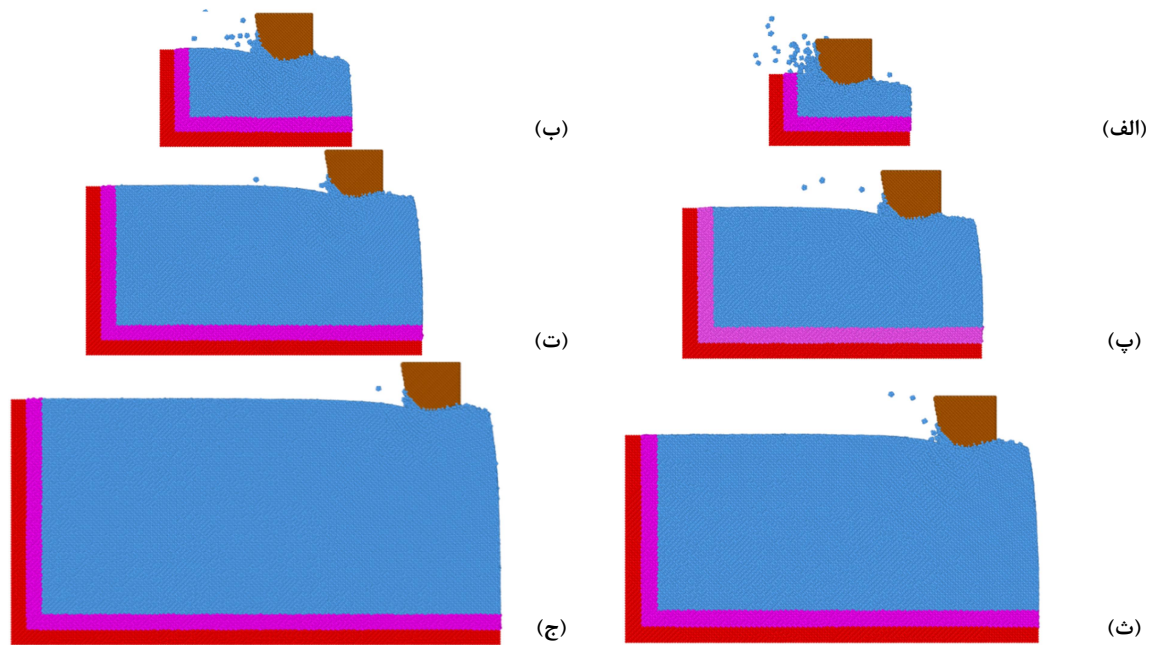
⁷ Bulk

¹ Conjugate gradient

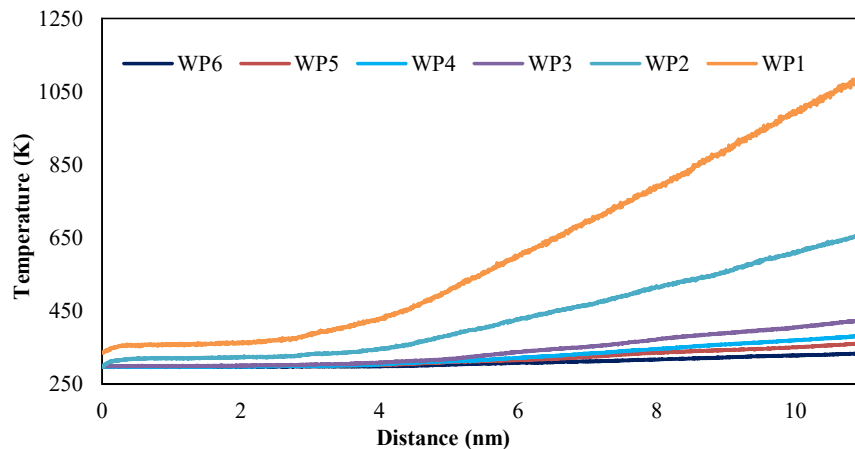
² Maxwell-Boltzmann distribution

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.

جنبشی و پتانسیل تک‌تک 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 $32.586\text{nm} \times 16.293\text{nm}$) به دلیل آنکه تعداد اتم‌ها از قطعات



شکل ۲- مکانیزم تشکیل براده در قطعه‌کار با ابعاد الف- $16.293\text{nm} \times 8.146\text{nm}$ ، ب- $21.724\text{nm} \times 10.862\text{nm}$ ، پ- $32.586\text{nm} \times 16.293\text{nm}$ ، ت- 16.293nm ، ث- $38.017\text{nm} \times 19.008\text{nm}$ ، ج- $43.448\text{nm} \times 21.724\text{nm}$ ، د- $54.310\text{nm} \times 27.155\text{nm}$



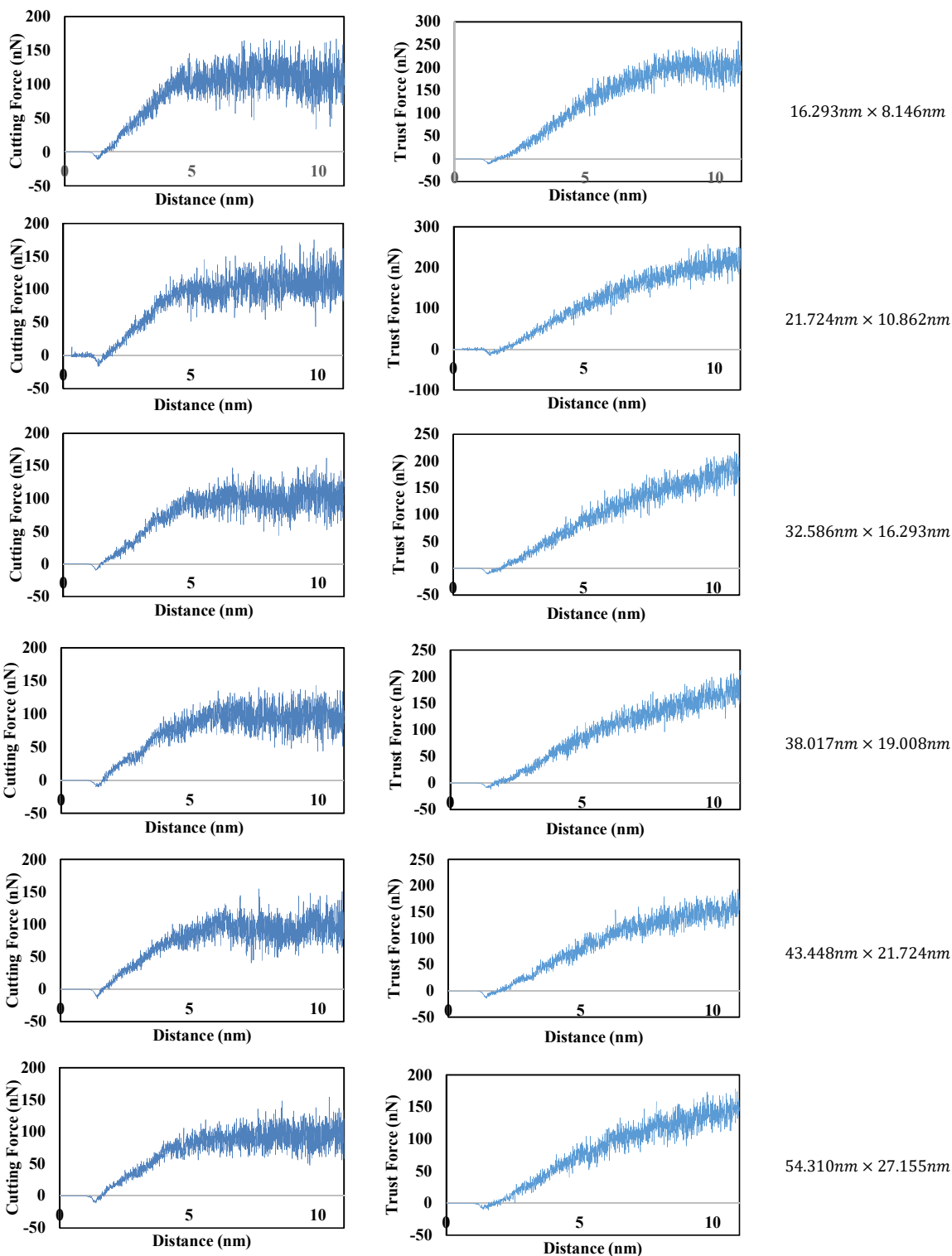
شکل ۳- تاثیر ابعاد قطعه‌کار بر دمای میانگین در طول مسیر ماشینکاری

شکل. با افزایش ابعاد قطعه کار، روند نوسانات نیروهای ماشینکاری کاهش یافته است. می توان دلیل این موضوع را در پایدارتر شدن روند ماشینکاری در ابعاد بزرگتر دانست.

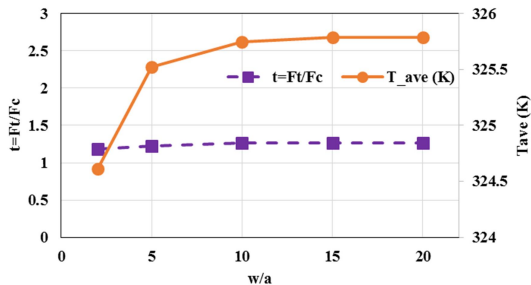
۳-۳- نیروهای ماشینکاری

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

بررسی تاثیر ابعاد قطعه کار بر ماشینکاری نانومتری ...



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



شکل ۶- تاثیر پهنای ابزار بر نسبت نیرو و دمای میانگین قطعه کار

۴- نتیجه گیری

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 می تواند 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 قطعه کارهایی با ابعاد کمتر از $21.724\text{nm} \times 10.862\text{nm}$ براده ها بصورت کاملاً منقطع بوده و سطح قطعه کار شدیداً ناهموار خواهد شد.
- بدون توجه به ابعاد قطعه کار، دمای تمامی قطعات در طول فرآیند ماشینکاری نانومتری افزایش می یابد. لیکن این افزایش دما در قطعات بزرگتر، کمتر می باشد.
- کاهش بیش از حد ابعاد قطعه کار، منجر به ایجاد یک شوک حرارتی و جهش دمایی در ابتدای فرآیند ماشینکاری نانومتری خواهد شد. با این حال، با افزایش ارتفاع قطعه کار به اندازه 15.517 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 آن ها، افزایش می یابد.
- 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 هزینه های مالی و محاسباتی، انتخاب قطعه کار با ابعاد $38.017\text{nm} \times 19.008\text{nm}$ و تعداد اتم 198110 ، مبنای مناسب جهت انجام آزمایشات ماشینکاری نانومتری قطعات سیلیکونی می باشد.

۵- مراجع

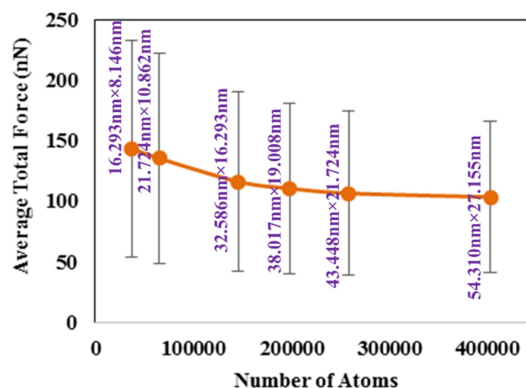
- [1] Blackman J. A., *Handbook of Metal Physics: Metallic Nanoparticles*, 1st editio. Elsevier B.V., 2009.
- [۲] حسینی س. و، شبیه سازی فرآیند ماشینکاری نانومتری و مطالعه اثر عیوب کریستالی با روش دینامیک مولکولی، رساله دکتری دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، ۱۳۹۱.
- [3] Zhang L. C., Johnson K. L., 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

همانطور که پیشتر در شکل ۲- الف و ب نشان داده شد، مقدار براده های 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 قطعه کار در شکل ۵ آورده شده است. مقدار تفاوت نیرو در قطعه کارها با ابعاد $16.293\text{nm} \times 8.146\text{nm}$ و $21.724\text{nm} \times 10.862\text{nm}$ ، به ترتیب برابر با 38.51 و 30.79 درصد می باشد. در واقع این مقدار خطا، درصد تفاوت نیروی ماشینکاری هر قطعه نسبت به بزرگترین قطعه کار (با ابعاد $54.310\text{nm} \times 27.155\text{nm}$) می باشد. دلیلی که بزرگترین قطعه کار بعنوان معیار در نظر گرفته شده این است که ابعاد این قطعه کار به مقدار فیزیکی نزدیک تر بوده و اثرات بازگشت موج نیرو در آن وجود ندارد. این در حالی است که این میزان خطا برای قطعه کار با ابعاد $38.017\text{nm} \times 19.008\text{nm}$ و تعداد اتم 198110 ، برابر با 6.92 درصد می باشد. لذا می توان این قطعه کار را بعنوان معیاری که دارای ابعاد و تعداد اتم کافی و قابل اتکا جهت مطالعات دینامیک مولکولی ماشینکاری نانومتری سیلیکون می باشد، انتخاب کرد.

۳-۴- تاثیر پهنای قطعه کار

شکل ۶ تاثیر پارامتر بی بعد w/a بر نسبت نیرو (t) و همچنین دمای میانگین قطعه کار را نشان می دهد. در اینجا، w برابر با اندازه پهنای قطعه کار، a برابر با ثابت شبکه کریستالی سیلیکون و t برابر با نسبت نیروی عمودی^۱ (F_t) به نیروی برشی^۲ (F_c) می باشد. مطابق این شکل، در پهنای بسیار کم قطعه کار، نسبت نیرو و بخصوص دما به شدت کاهش یافته است. با این حال، نتایج نشان می دهد که با رسیدن پهنای قطعه کار تا 10 برابر اندازه ی ثابت شبکه کریستالی سیلیکون، این مقادیر به ثبات رسیده و با افزایش بیشتر پهنای قطعه کار، تغییر چندانی در مقدار آن ها حاصل نمی گردد. لذا می توان این پهنای را بعنوان معیاری مناسب جهت مطالعات دینامیک مولکولی این حوزه در نظر گرفت.



شکل ۵- تغییرات میانگین نیروی ماشینکاری با افزایش ابعاد قطعه کار

¹ Thrust force
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] عاملی کلخوران س. ن.، وحدتی م.، تاثیر تابع پتانسیل بر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند ماشینکاری نانومتری سیلیکون تک‌کریستال، 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 grinding, *Trans. JSCES*, vol. 7, pp. 207–213, 2005.
- [22] Rapaport D. C., *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Vol. 2. 2004.