

# ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ ΧΑΛΚΟΥ ΜΕ ΛΕΙΑΝΤΙΚΟΥΣ ΚΟΚΚΟΥΣ ΔΙΑΜΑΝΤΙΟΥ ΣΕ ΝΑΝΟΚΛΙΜΑΚΑ ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ



# ΣΑΒΒΟΠΟΥΛΟΣ ΙΩΑΝΝΗΣ

## A.M.:02101128

Επιβλέπων: Μανωλάκος Δημήτριος, Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Αθήνα, 2015

# Πρόλογος

Ξεκινώντας, θεωρώ πως είναι χρέος μου να ευχαριστήσω όλους όσους συνέβαλαν στο να πραγματοποιηθεί αυτή η διπλωματική εργασία. Θα ήθελα λοιπόν να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου, κ. Δημήτριο Μανωλάκο για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε, αναθέτοντάς μου αυτό το θέμα προς μελέτη και εκπόνηση διπλωματικής εργασίας, για την υποστήριξή του όλο αυτό το διάστημα, καθώς και για τις βάσεις που μου έδωσε μέσω των διδασκόμενων μαθημάτων κατά την κανονική περίοδο φοίτησης στο ΕΜΠ, καθιστώντας έτσι την Επιστήμη των Υλικών ένα από τα πλέον ελκυστικά πεδία του τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών που θα μπορούσα να ασχοληθώ περεταίρω.

Θερμές ευχαριστίες οφείλω να απευθύνω στον Δρ. Μηχανολόγο Μηχανικό Άγγελο Μαρκόπουλο για την πολύτιμη βοήθεια και την αμέριστη συμπαράστασή του καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας διπλωματικής εργασίας, καθώς και για την υπομονή του απέναντί μου.

Τέλος, ένα τεράστιο ευχαριστώ σε όλους τους φίλους και συναδέλφους που συντέλεσαν, έστω και ελάχιστα, στην ολοκλήρωση αυτής της εργασίας και ιδιαίτερα στην οικογένειά μου για την ηθική, ψυχολογική και όχι μόνο υποστήριξη, την απεριόριστη υπομονή και την άνευ όρων, τυφλή εμπιστοσύνη που ανιδιοτελώς έδειξαν στο πρόσωπό μου, καθ' όλη τη διάρκεια της φοίτησής μου στη σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών του Ε.Μ.Π.

# Περιεχόμενα

Πρόλογος	2
Ευρετήριο Εικόνων	6
Ευρετήριο Πινάκων	12
Περίληψη	13
Abstract	14
Κεφάλαιο 1: Μοριακές Προσομοιώσεις	15
1.1 Γενικά για τις Μοριακές Προσομοιώσεις	15
1.2 Μέθοδοι μοριακής προσομοίωσης	17
1.2.1 Μοριακή Μηχανική (Molecular Mechanics, MM)	17
1.2.2 Monte Carlo (MC)	17
1.2.3 Μοριακή Δυναμική (Molecular Dynamics, MD)	18
Κεφάλαιο 2: Θεωρία Μοριακής Δυναμικής (MD) και Εφαρμογή στις Κατεργασίες Νανοκλίμακας	της 21
2.1 Εισαγωγή	21
2.2 Είδη Ατόμων	22
2.2.1 Νευτώνεια Άτομα	22
2.2.2 Συνοριακά Άτομα	23
2.2.3 Άτομα Θερμοστάτες	24
2.3 Συναρτήσεις Δυναμικού Ενέργειας	25
2.3.1 Δυναμικό Morse	29
2.3.2 Δυναμικό Lennard – Jones	30
2.3.3 Δυναμικό Πολλαπλών Ατόμων (Embedded-Atom Potential)	31
2.3.4 Δυναμικό Tersoff	31
2.3.5 Δυναμικό Bolding – Anderson	32
2.4 Εξισώσεις Κίνησης	33
2.5 Μέθοδοι Ολοκλήρωσης	34
2.5.1 Μέθοδος Βατραχοδρασκελισμών (Leapfrog-Type Method)	35
2.5.2 Μέθοδος Verlet	37

2.5.3 Μέθοδοι Πρόβλεψης – Διόρθωσης
2.6 Συναρτήσεις Επανακαθορισμού Ταχυτήτων41
2.6.1 Συνάρτηση Επιθυμητής Θερμοκρασίας42
2.6.2 Επαναπροσδιορισμός ταχυτήτων42
2.7 Σύνοψη της μεθόδου Μοριακής Δυναμικής (MD) και εφαρμογή της στις κατεργασίες νανοκλίμακας43
2.7.1 Μειονεκτήματα της χρήσης της Μοριακής Δυναμικής (MD) στις κατεργασίες νανοκλίμακας
2.7.2 Πλεονεκτήματα της χρήσης της Μοριακής Δυναμικής (MD) στις κατεργασίες νανοκλίμακας
Κεφάλαιο 3: Βιβλιογραφική Ανασκόπηση Εφαρμογών Μοριακής Δυναμικής στις Κατεργασίες Νανοκλίμακας50
3.1 Εισαγωγή50
3.2 Βασικές Εφαρμογές Προσομοιώσεων MD στις Κατεργασίες Νανοκλίμακας50
3.3 Μελέτη της νανοκοπής χαλκού με εργαλείο διαμαντιού μέσω προσομοίωσης MD66
3.3.1 Επίδραση της θερμοκρασίας του κύριου όγκου του υλικού στον παραγόμενο όγκο αποβλήτου και στις δυνάμεις κοπής
3.4 Μελέτη της νανοκοπής μονοκρυσταλλικού πυριτίου (Si) με χρήση προσομοίωσης MD69
3.4.1 Αρχικές Συνθήκες και Μέθοδος Προσομοίωσης MD70
3 4 2 Αποτελέσματα και Διεξανωνή Προσομοίωσης MD 72
$5.4.2 \text{ Anoteneoputu kut } \Delta tesu f will in pool poloo (1000 mol s) and (110) and (12) and$
3.5 Μελέτη της Νανοκατεργασίας Χαλκού με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής
3.5 Μελέτη της Νανοκατεργασίας Χαλκού με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής
<ul> <li>3.5 Μελέτη της Νανοκατεργασίας Χαλκού με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής</li></ul>
3.4.2 Αποτελεσματα και Διεζαγωγη Προσομοιωσης ΝΠΣ
3.5 Μελέτη της Νανοκατεργασίας Χαλκού με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής
3.5 Μελέτη της Νανοκατεργασίας Χαλκού με τη βοήθεια της Μοριακής         Δυναμικής

Κεφάλαιο 4: Βασική Ανάλυση του Κώδικα Προσομοίωσης	97
4.1 Εισαγωγή	97
4.2 Γενική Δομή του Αλγόριθμου	97
4.3 Περιγραφή του Κώδικα Προσομοίωσης MD	100
4.3.1 Χρησιμοποιούμενες Μονάδες Μέτρησης	100
4.3.2 Ορισμός Αρχικών Συνθηκών και Βασικών Μεταβλητών	102
4.3.3 Κύριο Μέρος του Κώδικα και Ροή Στοιχειωδών Συναρτήσεων	105
4.3.4 Η Θερμοκρασία στην Προσομοίωση	107
Κεφάλαιο 5: Αποτελέσματα και Ανάλυση Προσομοιώσεων	110
5.1 Εισαγωγή	110
5.2 Πρώτη Σειρά Προσομοιώσεων	110
5.2.1 Προσομοίωση 1a	110
5.2.2 Προσομοίωση 1b	121
5.2.3 Προσομοίωση 1c	128
5.2.4 Παρατηρήσεις	135
5.3 Δεύτερη Σειρά Προσομοιώσεων	136
5.3.1 Προσομοίωση 2a	136
5.3.2 Προσομοίωση 2b	143
5.3.3 Προσομοίωση 2c	150
5.4 Τρίτη Σειρά Προσομοιώσεων	157
5.4.1 Προσομοίωση 3a	157
5.4.2 Προσομοίωση 3b	164
5.5 Σύγκριση Αποτελεσμάτων Προσομοιώσεων	172
Κεφάλαιο 6: Συμπεράσματα και Προτάσεις για περεταίρω Μελέτ	η181
6.1 Συμπεράσματα	181
6.2 Προτάσεις για περεταίρω Μελέτη	184
Βιβλιογραφία	186
Παράρτημα	193

# Ευρετήριο Εικόνων

Εικόνα 2.1: Τρισδιάστατη αναπαράσταση των διαφόρων ζωνών ενός τεμαχίου και Εικόνα 2.2: Αλληλεπίδραση ατόμων στη νανοκοπή [19]......25 Εικόνα 2.3: (a)κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα fcc (b) μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα [19]......25 Εικόνα 2.4: Μεταβολή των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυνάμεων (a) και των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυναμικών ενέργειας (b), ως συνάρτηση της διατομικής απόστασης r, μεταξύ δύο απομονωμένων ατόμων [2]......28 Εικόνα 2.5: Δισδιάστατη αναπαράσταση των διαφόρων ζωνών ενός τεμαχίου. Οι άδειοι κύκλοι, είναι στην πρωταρχική ζώνη Ρ, όπου η κίνηση ελέγχεται μόνο με επίλυση των κλασσικών εξισώσεων κίνησης. Οι σκιασμένοι γκρι κύκλοι, είναι στη ζώνη Q, όπου οι ταχύτητες ορίζονται ξανά μετά από χρονικό διάστημα Δt. Οι γεμάτοι κύκλοι, είναι στο όριο της ζώνης Β. Είναι στάσιμοι και εξυπηρετούν την ίδια λειτουργία με το σφιγκτήρα του εργαλείου κατεργασίας. Διατηρούν το τεμάχιο σταθερό κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής ,λείανσης ή εισχώρησης. [2]......41 Εικόνα 2.7: Σχηματική παρουσίαση προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής κοπής νανοκλίμακας [19]......45 Εικόνα 2.8: Σχηματική παράσταση της επιφάνειας προσομοίωσης με τη μέθοδο της Εικόνα 3.1 Δεξιά: Διαφορετικές φάσεις της κατεργασίας για (a)20000 (b) 40000 (c) 60000. Αριστερά: Σχηματισμός αποβλήτου και μετάδοση θερμότητας με δυναμικό (a)Morse (b) Born-Meyer και από κάτω το μοντέλο προσομοίωσης πριν την Εικόνα 3.2: Κοπή αλουμινίου με ταγύτητα κοπής 1000 m / sec και βάθος κοπής 1 nm Εικόνα 3.3: Διαφορετικές φάσεις κοπής αλουμινίου με γωνία κοπής 10 μοίρες [58]....54 Εικόνα 3.4: Διαφορετικές φάσεις κοπής αλουμινίου με γωνία κοπής 40 μοίρες [58]....55 Εικόνα 3.6: Διαφορετικές φάσεις κοπής νανοκλίμακας με 45 μοίρες γωνία κοπής, σε Εικόνα 3.7: Διαφορετικές φάσεις κοπής νανοκλίμακας με 0 μοίρες γωνία κοπής, σε Εικόνα 3.8: Μοντέλα προσομοίωσης με Μοριακή Δυναμική με τον αριθμό των ατόμων του τεμαγίου να είναι : (a) 2 εκατομμύρια (b) 4 εκατομμύρια και (c) 10 εκατομμύρια Εικόνα 3.9: Μοντέλο προσομοίωσης με Μοριακή Δυναμική δημιουργίας εισχώρησης σε 

Εικόνα 3.10:Πλαστική παραμόρφωση εισχώρησης γύρω από το σημείο επαφής στους 600 K.[64]......60 Εικόνα 3.11:Διαφορετικές φάσεις της κατεργασίας της εισχώρησης για χρόνο (a) 22ps (b) 30ps (c) 40ps (d) 50ps.[64].....61 Εικόνα 3.12Α:Διαφορετικές φάσεις της κατεργασίας της εισχώρησης-απόξεσης(scratching) με προσανατολισμό τεμαχίου-εργαλείου Εικόνα 3.12Β:Διαφορετικές φάσεις της κατεργασίας της εισχώρησης-scratching με Εικόνα 3.13:Διαφορετικές φάσεις της προσομοίωσης nano-indentation σε nano-scratching (νανο-εισχώρηση σε νανο-εκτριβή ή νανο-απόξεση).[69].....65 Εικόνα 3.14: Μοντέλο προσομοίωσης MΔ [70]......66 Εικόνα 3.15: Στιγμιότυπα τομών του επιπέδου xz κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής για διαφορετικές θερμοκρασίες κύριου όγκου υλικού [70]......67 Εικόνα 3.16: Μέσες δυνάμεις κοπής και κάθετες δυνάμεις για διαφορετικές θερμοκρασίες κύριου όγκου υλικού [70]......69 Εικόνα 3.17: Σχέδιο του μοντέλο προσομοίωσης ΜΔ [71].....70 Εικόνα 3.18: Τομή τρισδιάστατης διαδικασίας κοπής: (a) Αρχική αλληλεπίδραση μεταξύ εργαλείου και υλικού, (b) Δημιουργία αποβλήτου, (c) Κατεργασμένη επιφάνεια [71]...73 Εικόνα 3.19: Δόνηση δύναμης κοπής: (a) Δύναμη κοπής (b) Συχνότητα της δύναμης κοπής [71]......74 Εικόνα 3.20: Παραμόρφωση πλέγματος: (a) Σχέδιο για την παραμόρφωση πλέγματος, (b) RDF του αποβλήτου κοπής, (c) Φάσμα Raman του πραγματικού αποβλήτου κοπής Εικόνα 3.21: Δυνάμεις κοπής για διάφορα βάθη, (a) ακμή κοπής 1 nm, (b) ακμή κοπής 1.5 nm, (c) ακμή κοπής 2 nm, (d) ακμή κοπής 2.5 nm [71]......77 Εικόνα 3.22: Δύναμη κοπής με και χωρίς δημιουργία αποβλήτου [71]......78 Εικόνα 3.24: Αρχική διάταξη του τεμαχίου κατεργασίας και του εργαλείου με γωνία αποβλήτου -45°, πριν την νανοκοπή επιφάνειας (001) χαλκού. Το βάθος κοπής είναι 0.9 nm. Τα στρώματα στις πλευρές και στο κάτω μέρος του κελιού είναι άκαμπτα. Στο σχήμα φαίνεται το επίπεδο x-z των ατόμων (σταθερό επίπεδο y) [62].....80 Εικόνα 3.25: Τελικές διαμορφώσεις μετά την προσομοίωση μοριακής δυναμικής κατά την νανοκοπή επιφάνειας (001) χαλκού με άκαμπτο εργαλείο γωνίας αποβλήτου -450, για ταχύτητες κοπής 180, 18 και 1.8 m/s. Το βάθος κοπής σε κάθε περίπτωση είναι 1 nm Εικόνα 3.26: Διαμόρφωση του υλικού κατεργασίας μετά τη χαλάρωση του, με το εργαλείο σε θέση φόρτισης, με χρόνο προσομοίωσης MA 120 ps (150000 βήματα), για ταχύτητες κοπής 180, 18 και 1.8 m/s. [62]......85

Εικόνα 3.29: Μοντέλο προσομοίωσης MD νανοκατεργασίας με κόκκους 2 (abrasive grains)[65]	λείανσης 90
Εικόνα 3.30 : Διάγραμμα ροής της προσομοίωσης MD[65]	91
Εικόνα 3.31: Τρεις διαφορετικές φάσεις της λειαντικής διεργασίας.[65]	92
Εικόνα 3.32: Καμπύλη δύναμης κοπής σε συνάρτηση με το χρόνο. Παρατηρ διακυμάνσεις μετά το 400ο βήμα, γύρω από την τιμή 0.5.[65]	ούμε τις 93
Εικόνα 3.33: Διακύμανση της θερμοκρασίας λείανσης στο ατομικό πλέγμα κ κατεργασία.[65]	ατά την

Εικόνα4.1: Κατανομή θέσεων των ατόμων στο πλέγμα του υλικού κατεργασίας......109

Εικόνα 5.6 : Μεταβολή της δύναμης στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου......114

Εικόνα 5.7 : Μεταβολή της δύναμης στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου.....115 Εικόνα 5.8 : Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου.....15

Εικόνα 5.9 : Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα γ συναρτήσει του χρόνου.....116

Εικόνα 5.10 : Μεταβολή της κινητικής ενέργειας συναρτήσει του χρόνου......117 Εικόνα 5.11 : Μεταβολή της ολικής ενέργειας συναρτήσει του χρόνου......117

Εικόνα 5.12 : Μεταβολή του αθροίσματος ταχυτήτων συναρτήσει του χρόνου......118

Εικόνα 5.13 : Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας......119 Εικόνα 5.14 : Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων συναρτήσει του χρόνου..119

Εικόνα 5.22: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας......126

Εικόνα 5.23: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.24: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.25: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνες 5.26-5.30 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της προσομοίωσης 1c129-131
Εικόνα 5.31: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας133
Εικόνα 5.32: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.33: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.34: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.35: Μέση θερμοκρασία των Συνοριακών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.36: Μέση θερμοκρασία των ατόμων του κόκκου κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνες 5.37-5.41 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της προσομοίωσης 2a137-139
Εικόνα 5.42: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας141
Εικόνα 5.43: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.44: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.45: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης142
Εικόνες 5.46-5.50 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της προσομοίωσης 2b144-146
Εικόνα 5.51: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας148
Εικόνα 5.52: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη λείανση148
Εικόνα 5.53: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.54: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνες 5.55-5.59 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της προσομοίωσης 2c151-153
Εικόνα 5.60: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας154

Εικόνα 5.61: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.62: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.63: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνες 5.64-5.68 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της προσομοίωσης 3a158-160
Εικόνα 5.69 : Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου161
Εικόνα 5.70: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου161
Εικόνα 5.71: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας162
Εικόνα 5.72: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.73: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.74: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνες 5.75-5.79 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της προσομοίωσης 3b165-167
Εικόνα 5.80 : Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα x συναρτήσει του χρόνου168
Εικόνα 5.81: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άξονα y συναρτήσει του χρόνου169
Εικόνα 5.82: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας169
Εικόνα 5.83: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.84: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.85: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης
Εικόνα 5.86: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων κοπής για την 1η σειρά προσομοιώσεων
Εικόνα 5.87: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων κοπής για την 2η σειρά προσομοιώσεων
Εικόνα 5.88: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων κοπής για την 3η σειρά προσομοιώσεων
Εικόνα 5.89: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για την 1η σειρά προσομοιώσεων173
Εικόνα 5.90: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για την 2η σειρά προσομοιώσεων173
Εικόνα 5.91: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για την 3η σειρά προσομοιώσεων174
Εικόνα 5.92: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων για βάθος λείανσης 4 Å174 10

Εικόνα 5.93: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων για βάθος λείανσης 8 Å175
Εικόνα 5.94: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων για βάθος λείανσης 12 Å175
Εικόνα 5.95: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για βάθος λείανσης 4 Å175
Εικόνα 5.96: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για βάθος λείανσης 8 Å176
Εικόνα 5.97: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για βάθος λείανσης 12 Å176
Εικόνα 5.98: Μέγιστες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου κατά x για κάθε προσομοίωση
Εικόνα 5.99: Μέγιστες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου κατά y για κάθε προσομοίωση
Εικόνα 5.100: Μέγιστες μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου κατά x για κάθε προσομοίωση
Εικόνα 5.101: Μέγιστες μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου κατά y για κάθε προσομοίωση
Εικόνα 5.102: Μέγιστες τιμές της σωρευτικής θερμοκρασίας του υλικού κατεργασίας για κάθε προσομοίωση
Εικόνα 5.103: Μέγιστες τιμές της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων για κάθε προσομοίωση179
Εικόνα 5.104: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων για κάθε προσομοίωση180
Εικόνα 5.105: Μέγιστες τιμές σωρευτικής θερμοκρασίας υλικού και μέγιστες μέσες τιμές θερμοκρασίας Νευτώνειων ατόμων για κάθε προσομοίωση

# Ευρετήριο Πινάκων

Πίνακας 1.1: Κύρια χαρακτηριστικά προσομοιώσεων σε μοριακό επίπεδο [7]20
Πίνακας 2.1: Παράμετροι δυναμικού Morse σύμφωνα με τους Girifalco και Weizer [45]
Πίνακας 2.2: Παράμετροι πρόβλεψης – διόρθωσης για δευτεροβάθμιες εξισώσεις [33]
Πίνακας 2.3: Τυπικές τιμές παραμέτρων που χρησιμοποιούνται στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής για προσομοίωση κατεργασιών [2]
Πίνακας 3.1: Υπολογιστικές παράμετροι της προσομοίωσης ΜΔ [70]66
Πίνακας 3.2: Υλικό κατεργασίας και συνθήκες προσομοίωσης [71]71
Πίνακας 3.3: Παράμετροι δυναμικού [71]72
Πίνακας 3.4: Παράμετροι υλικού κατεργασίας και προσομοίωσης(αριστερή στήλη για το τεμάχιο, δεξιά στήλη για το εργαλείο) [62]83
Πίνακας 3.5: Δυναμικές ενέργειες του υλικού κατεργασίας μετά την κοπή, αλλά και μετά τη χαλάρωση [62]
Πίνακας 5.1: Παράμετροι προσομοίωσης 1a111
Πίνακας 5.2: Παράμετροι προσομοίωσης 1b
Πίνακας 5.3: Παράμετροι προσομοίωσης 1c128
Πίνακας 5.4: Παράμετροι προσομοίωσης 2a137
Πίνακας 5.5: Παράμετροι προσομοίωσης 2b143
Πίνακας 5.6: Παράμετροι προσομοίωσης 2c150
Πίνακας 5.7: Παράμετροι προσομοίωσης 3a157
Πίνακας 5.8: Παράμετροι προσομοίωσης 3b165

# ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής παίζει έναν εξέχοντα ρόλο ανάμεσα στις τεχνικές προσομοίωσης που ασχολούνται με την ανάλυση της συμπεριφοράς των υλικών σε ατομικό επίπεδο. Η πρόβλεψη της συμπεριφοράς των υλικών, βασιζόμενη σε μια ανάλυση ατομικού επιπέδου, παρέχει χρήσιμες και ακριβείς πληροφορίες για μια πληθώρα εφαρμογών, που αφορούν στην επιστήμη των υλικών, την τριβολογία και τις κατεργασίες.

Στην παρούσα διπλωματική εργασία γίνεται αναλυτική περιγραφή της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής για χρήση της στην προσομοίωση λείανσης χαλκού με κόκκους διαμαντιού στη νανοκλίμακα, αξιολόγηση της ποιότητας των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων συγκριτικά με άλλες μελέτες και πειράματα, καθώς και διερεύνηση της καταλληλότητας της εν λόγω μεθόδου σε αντίστοιχες προσομοιώσεις νανοκατεργασιών.

Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μία εισαγωγή στις μοριακές προσομοιώσεις και μία σύντομη παράθεση των επικρατέστερων μεθόδων που εφαρμόζονται. Στο δεύτερο κεφάλαιο παρουσιάζεται μία ενδελεχής μελέτη των ειδών των ατόμων που παίρνουν μέρος στην προσομοίωση, των δυναμικών ενέργειας και των μεθόδων ολοκλήρωσης που μπορούν να χρησιμοποιηθούν, των συναρτήσεων επιθυμητής θερμοκρασίας και επαναπροσδιορισμού ταχυτήτων. Ταυτόχρονα, αναλύονται τα πλεονεκτήματα, τα μειονεκτήματα, καθώς και το σκεπτικό της εφαρμογής της προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής στις νανοκατεργασίες. Στο τρίτο κεφάλαιο έχουμε μία ανασκόπηση πολλών διαφορετικών εφαρμογών της προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής στις κατεργασίες νανοκλίμακας, καθώς και αναλυτική περιγραφή κάποιων επιλεγμένων μελετών προσομοίωσης νανοκατεργασιών με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής, που είναι συναφείς με την παρούσα διπλωματική εργασία. Στο τέταρτο κεφάλαιο περιγράφεται αρχικά η δομή του αλγόριθμου και στη συνέχεια γίνεται λεπτομερής ανάλυση του βασικού κώδικα προσομοίωσης, καθώς και των προσθηκών και των τροποποιήσεων που έγιναν σε αυτόν για να επιτύγουμε την αποτελεσματική προσομοίωση της κατεργασίας της λείανσης χαλκού με κόκκους διαμαντιού σε νανοκλίμακα. Ο κώδικας αναπτύχθηκε με τη χρήση του υπολογιστικού πακέτου Matlab R2009b. Στο πέμπτο κεφάλαιο παρουσιάζονται διεξοδικά τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που πραγματοποιήθηκαν. Μελετώνται η εξέλιξη της διαδικασίας αποβολής υλικού, η μεταβολή των θερμοκρασιών και οι αναπτυσσόμενες δυνάμεις εντός του όγκου του υλικού για διαφορετικά βάθη κοπής και για συγκεκριμένες μεταβολές της γεωμετρίας και της ταχύτητας του κόκκου λείανσης. Στο έκτο και τελευταίο κεφάλαιο αναλύονται τα συμπεράσματα που μπορούμε να εξάγουμε από τις προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν και τη σύγκριση των αποτελεσμάτων μας με αυτά άλλων ερευνητών, για τα διάφορα μεγέθη που μας απασχολούν (δυνάμεις κοπής του κόκκου, αναπτυσσόμενες θερμοκρασίες του τεμαγίου κατεργασίας. ποιότητα της κατεργαζόμενης επιφάνειας, μηγανισμός σχηματισμού αποβλήτου). Επίσης, στο τέλος του κεφαλαίου, παρατίθενται κάποιες προτάσεις για περεταίρω μελέτη και έρευνα.

**Λέξεις κλειδιά:** Προσομοίωση, Μοριακή Δυναμική, Κόκκοι Λείανσης, Λείανση στη Νανοκλίμακα, Σχηματισμός Αποβλήτου, Ποιότητα Κατεργασμένης Επιφάνειας, Κατανομή Θερμοκρασιών, Δυνάμεις Κοπής

# ABSTRACT

Molecular Dynamics (MD) simulation has a prominent role among simulation techniques involved with the analysis of material behavior at an atomic level. The prediction of material behavior, based on an atomic level of analysis, provide useful and accurate information for a variety of applications, relating to material science, tribology and machining processes.

This thesis presents a detailed description of the method of Molecular Dynamics used in the copper grinding simulation with diamond abrasive grains at the nanoscale, while assessing the quality of the simulations' results compared with other studies and experiments and investigating the adequacy of this method in corresponding micro-machining simulations.

The first chapter is an introduction to molecular simulations and a brief statement of the prevailing methods applied. The second chapter presents a thorough study on the kinds of atoms that take part in the simulation, the energy potentials and integration methods that can be used, the desired temperature and redefining speed functions. At the same time, the advantages, disadvantages and the reasoning behind the application of MD simulations on micro-machining are analyzed. In the third chapter we have an overview of many different applications of MD simulations on nanoscale machining processes and a detailed description of some selected MD simulation studies of micro-machining, which are relevant to this thesis. In the fourth chapter, first the structure of the algorithm and then a detailed analysis of the basic simulation code is described. The additions and modifications of the basic MD simulation code, in order to achieve an efficient simulation of the process of copper grinding with diamond abrasive grains at the nanoscale, are also presented. The code was developed using the computational package Matlab R2009b. The fifth chapter presents the detailed results of the simulations performed. The progress of the material removal process, the variation of temperature values and the developing forces within the workpiece, for different cutting depths and specific changes concerning the geometry and speed of the abrasive grain, are considered. The sixth and last chapter examines the conclusions that can be drawn from the various simulations that took place and the comparison of our results with those of other researchers, concerning distinct variables (cutting forces of abrasive grain, developing temperatures in the workpiece, quality of the processed surface, chip formation mechanism). At the end of the chapter, some suggestions for further study and research are also listed.

**Keywords:** Simulation, Molecular Dynamics, Abrasive Grains, Nanoscale Grinding, Chip Formation, Processed Surface Quality, Thermal Distribution, Cutting Forces

# Κεφάλαιο 1

# Μοριακές Προσομοιώσεις

## 1.1 Γενικά για τις Μοριακές Προσομοιώσεις

Οι μοριακές προσομοιώσεις είναι μια σχετικά πρόσφατη μεθοδολογία της επιστήμης και στις μέρες μας γίνεται όλο και πιο αποδεκτή σαν μια μέθοδος έρευνας στην επιστήμη των υλικών, στο ρόλο συνδετικού κρίκου μεταξύ θεωρητικής προσέγγισης και πειραματικής. Τα πολύπλοκα αυτά μοντέλα προσομοίωσης, με τη βοήθεια πανίσχυρων επεξεργαστών, μπορούν να μας προσφέρουν καλύτερη κατανόηση της μοριακής δομής και των ιδιοτήτων των υλικών, όπως και των συμπεριφορών τους κάτω από ορισμένες συνθήκες. Η ακρίβεια των αποτελεσμάτων των μεθόδων αυτών, παρά την ύπαρξη αριθμητικών σφαλμάτων, κάνει τη χρήση τους σχεδόν απαραίτητη στο σχεδιασμό και τη μελέτη των υλικών, καθώς και στην πρόβλεψη και διερεύνηση νέων υλικών που δεν υπάρχουν στη φύση. Στην ουσία, έχουμε έναν σχετικά εύχρηστο και γρήγορο εναλλακτικό τρόπο επίλυσης των προβλημάτων στατιστικής μηχανικής, και όχι μόνο. Αναμφίβολα, οι μοριακές προσομοιώσεις μπορούν να αποτελέσουν των υλικών συμακροσκοπικών ιδιοτήτων των υλικών των υλικών των υλικών των προβλημάτων στατιστικής μηχανικής και όμοριακούς μηχανισμούς που διέπουν τη συμπεριφορά τους, συνδέοντας έτσι το μικρόκοσμο (μοριακή δομή) με το μακρόκοσμο. [1,3]

Η μοριακή προσομοίωση λειτουργεί συμπληρωματικά της εργαστηριακής πειραματικής διαδικασίας. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων συγκρίνονται τόσο με τις πειραματικές παρατηρήσεις, οπότε μπορεί να προκύψουν βελτιώσεις των μοντέλων προσομοίωσης, όσο και με τις προβλέψεις της θεωρίας, οπότε μπορεί να βελτιωθούν οι παραδοχές στις οποίες στηρίζεται η επίλυση των θεωρητικών μοντέλων. Πιο συγκεκριμένα, η μέθοδός αυτή μπορεί να υποδείξει ή να απορρίψει πιθανά μοντέλα περιγραφής των φυσικών διεργασιών όπου λαμβάνουν χώρα σε ένα μοριακό σύστημα και να εξηγήσει τους εσωτερικούς μηχανισμούς τους σε ατομικό επίπεδο. Βοηθά δηλαδή στον καθορισμό των συνθηκών κάτω από τις οποίες γίνεται το εργαστηριακό πείραμα, συμβάλλει δε σε σημαντικό βαθμό στην κατανόηση των μηχανισμών που λαμβάνουν χώρα κατά την πειραματική διαδικασία. Σε σχέση με αντίστοιχες θεωρητικές προσεγγίσεις σε μακροσκοπικό επίπεδο, κατά κανόνα οι μοριακές προσομοιώσεις παρουσιάζουν μεγαλύτερη ακρίβεια, δεδομένου ότι οι δεύτερες πραγματώνονται στην μελέτη της συμπεριφοράς της ύλης σε μοριακό και ατομικό επίπεδο.

Χρησιμοποιώντας τις αρχές τις στατιστικής μηχανικής και πληροφορίες που σχετίζονται με την γεωμετρία και το είδος των αλληλεπιδράσεων που εκδηλώνονται στο σύστημα η μοριακή προσομοίωση είναι χρήσιμη για την παρατήρηση της συμπεριφοράς των συστημάτων τόσο σε μικροσκοπικό όσο και μακροσκοπικό επίπεδο. Ορισμένα

προβλήματα στατιστικής μηχανικής επιδέχονται ακριβή αναλυτική λύση. Αυτό συμβαίνει όταν από κάποιες μικροσκοπικές ιδιότητες του υπό μελέτη συστήματος παράγονται σχέσεις οι οποίες περιγράφουν τη μακροσκοπική συμπεριφορά του. Άλλα προβλήματα αν και δεν μπορούν να επιλυθούν αναλυτικά λόγω της πολυπλοκότητας τους προσεγγίζονται κάνοντας χρήση παραδοχών που οδηγούν σε απλούστευση της επίλυσης. Μία ακριβής λύση μπορεί να δοθεί τότε για το απλουστευμένο πρόβλημα. Οι προσομοιώσεις έρχονται να δώσουν ακριβείς απαντήσεις σε προβλήματα που μελετώνται κάτω από αυτές τις συνθήκες. Το αν το μοντέλο προσομοίωσης το οποίο χρησιμοποιήθηκε περιγράφει ορθώς το πραγματικό σύστημα δίνει η σύγκριση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης με τα πραγματικά πειραματικά δεδομένα. Η σύγκριση των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης με θεωρητικές προβλέψεις αποτελεί επιπλέον έλεγχο της ορθότητας της. [2]

Σημαντικό πλεονέκτημα μιας προσομοίωσης θεωρείται και το γεγονός ότι ένα σύστημα μπορεί να μελετηθεί και υπό εικονικές ακραίες συνθήκες πίεσης και θερμοκρασίας, κάτι το οποίο δε μπορεί να γίνει εύκολα πειραματικά.

Η εφαρμογή των προσομοιώσεων σε πραγματικά συστήματα καλείται να υπερκεράσει δύο σημαντικά εμπόδια: την έλλειψη επαρκούς γνώσης του τρόπου αλληλεπίδρασης των συστατικών του συστήματος σε ατομικό επίπεδο και τις αυξημένες ανάγκες σε υπολογιστικό χρόνο και ισχύ. Το πρώτο εμπόδιο αντιμετωπίζεται με κβαντομηχανικούς υπολογισμούς της υπερεπιφάνειας της δυναμικής ενέργειας ως συνάρτησης των ατομικών συντεταγμένων του συστήματος, ενώ το δεύτερο με ανάπτυξη βελτιστοποιημένων κωδίκων επίλυσης και χρήση σύγχρονων, τεχνολογικά εξελιγμένων υπολογιστικών συστημάτων. [4]

Η μεγάλη πρόοδος που συντελείται στο πεδίο της μοριακής προσομοίωσης σήμερα είναι άρρηκτα συνδεδεμένη με τη ραγδαία εξέλιξη των διαθέσιμων υπολογιστικών μέσων. Η διαθέσιμη υπολογιστική ισχύς είναι ένας καθοριστικός παράγοντας για την αποτελεσματικότητα και πρακτική χρησιμότητα της μοριακής προσομοίωσης. Όσο ταχύτερο είναι το υπολογιστικό σύστημα τόσο ταχύτερα μπορεί να εξομοιωθεί ένα μοριακό σύστημα. Ταυτόχρονα, οι προσεγγίσεις στις οποίες στηρίζονται οι υπολογιστικές μέθοδοι μπορούν να μειωθούν και κατά συνέπεια να εξαχθούν ακριβέστερα αποτελέσματα. Η ισχύς δηλαδή του υπολογιστικού συστήματος δρα στην ουσία περιοριστικά στην ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Για αυτό και η μελέτη πολύπλοκων συστημάτων (και επομένως απαιτητικών σε υπολογιστική ισχύ) γίνεται με τη χρήση συστημάτων συστοιχίας ηλεκτρονικών υπολογιστών, όπου ο υπολογιστικός φόρτος διαμοιράζεται εξίσου σε αυτούς. [6]

# 1.2 Μέθοδοι μοριακής προσομοίωσης

Οι πρώτες μοριακές προσομοιώσεις πραγματοποιήθηκαν στο υπολογιστικό κέντρο του Los Alamos National Laboratory από τους Metropolis et al. [5]. Στο ίδιο υπολογιστικό κέντρο αναπτύχθηκε συστηματικά και ο αλγόριθμος Monte Carlo, ο οποίος δίνει έμφαση στη χρήση τυχαίων αριθμών, από τους Neumann, Ulam και Metropolis το 1944 σε μια προσπάθεια μελέτης της διάχυσης νετρονίων σε σχάσιμα υλικά, το οποίο πρακτικά είναι ένα πρόβλημα τυχαίου περιπάτου.

Οι κύριες και πιο ανεπτυγμένες κατηγορίες μοριακών προσομοιώσεων είναι οι μέθοδοι Μοριακής Μηχανικής, Monte Carlo και Μοριακής Δυναμικής. Ακολουθεί μία σύντομη περιγραφή για τις δύο πρώτες και μια λίγο πιο αναλυτική για τη Μοριακή Δυναμική.[7]

# 1.2.1 Μοριακή Μηχανική (Molecular Mechanics, MM)

Με τη μέθοδο της Μοριακής Μηχανικής ο υπολογισμός των ιδιοτήτων του συστήματος γίνεται βάσει ενός συνόλου στατικών μικροσκοπικών απεικονίσεων, οι οποίες δημιουργούνται έχοντας ως αφετηρία μια αρχική απεικόνιση και ελαχιστοποιώντας τη δυναμική ενέργεια του συστήματος ως προς όλους τους βαθμούς ελευθερίας του. Οι απεικονίσεις που προκύπτουν αποτελούν τοπικά ελάχιστα της δυναμικής ενέργειας και χρησιμοποιούνται συχνά ως αρχικές απεικονίσεις των δύο άλλων μεθόδων προσομοίωσης. [1,3,11]

# 1.2.2 Monte Carlo (MC)

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, η μέθοδος Monte Carlo αναπτύχθηκε από τους Neumann, Ulam και Metropolis το 1944 στο National Laboratory του Los Alamos. Το όνομα 'Monte Carlo' επιλέχθηκε λόγω της ευρείας χρήσης τυχαίων αριθμών στους υπολογισμούς. Ο πρώτος χρονολογικά και πιο διαδεδομένος αλγόριθμος Monte Carlo είναι ο αλγόριθμος του Metropolis. Η ονομασία του προέρχεται από τον Nicolas Metropolis [8] όταν μαζί με τους συνεργάτες του το 1953 χρησιμοποίησαν τον αλγόριθμο αυτό για την προσομοίωση αερίων.

Στη μέθοδο αυτή υπολογίζονται θερμοδυναμικοί μέσοι όροι μέσω στοχαστικής δειγματοληψίας ενός μεγάλου αριθμού μικροσκοπικών απεικονίσεων του συστήματος σύμφωνα με την κατανομή που ορίζει ένα στατιστικό σύνολο ισορροπίας. Με την τεχνική αυτή μπορούν να ξεπεραστούν ενεργειακοί φραγμοί στην υπερεπιφάνεια ενέργειας του συστήματος που προκύπτουν από τις αλληλεπιδράσεις των βαθμών ελευθερίας του και έτσι να επιτευχθεί γρηγορότερα η ισορροπία, δεν γίνεται όμως να εξαχθούν άμεσες πληροφορίες σχετικά με τη δυναμική του. [12]

## 1.2.3 Μοριακή Δυναμική (Molecular Dynamics, MD)

Η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής (MD) αναπτύχθηκε αρχικά από τους Adler και Wainwright το 1956 [9] και συνίσταται στην αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Newton, N ατόμων, τα οποία υποθέτουμε ότι αλληλεπιδρούν μεταξύ τους με κάποιο γνωστό δυναμικό [7]. Η μελέτη αυτή συντέλεσε στην ανάδυση πολλών και σημαντικών νέων απόψεων για τη συμπεριφορά των απλών υγρών. Το επόμενο μεγάλο βήμα έγινε το 1964, όταν ο Rahman διεξήγαγε την πρώτη προσομοίωση χρησιμοποιώντας εξισώσεις που εκφράζουν με αρκετά ρεαλιστικό τρόπο τις διαμοριακές δυνάμεις στο υγρό Αργό (Ar) [10]. Η πρώτη Μοριακή Δυναμική προσομοίωση ενός ρεαλιστικού συστήματος έγινε πραγματικότητα από τους Rahman και Stillinger, προσομοιάζοντας το νερό στην υγρή κατάσταση το 1974. Το 1977 πρωτοεμφανίστηκαν οι προσομοιώσεις πρωτεϊνών με την εξομοίωση του παρεμποδιστή της παγκρεατικής θρυψίνης (Bovine Pancreatic Trypsin Inhibitor, BPTI). [17]

Ωστόσο, μέχρι τα τέλη της δεκαετίας του '80 δεν είχε εφαρμοστεί η προσομοίωση της Μοριακής Δυναμικής (MD) στον τομέα της επιστήμης των υλικών. Από το 1970 και έπειτα, τα προβλήματα της κατεργασίας των μετάλλων αντιμετωπίζονταν με τη βοήθεια των προσεγγίσεων της συνεχούς μηχανικής (μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών και μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων). Αν και η MD μπορεί να θεωρηθεί μια ώριμη μέθοδος, από την άποψη ότι έχουν γραφεί πολλές μελέτες και βιβλία πάνω στο αντικείμενο, η εφαρμογή της στις κατεργασίες είναι μια πιο πρόσφατη τάση και μόνο λίγες ερευνητικές ομάδες ανά τον κόσμο εμπλέκονται ενεργά με την διερεύνηση των διαδικασιών αυτών. [17]

Οι πρώτες βασικά πρωτότυπες εφαρμογές της MD προσομοίωσης στον τομέα της επιστήμης των υλικών πραγματοποιήθηκαν σε μελέτες δημιουργίας εισχώρησης και αφαίρεσης υλικού και δημοσιεύθηκαν μεταξύ 1989 και 1991 [13, 14, 15, 16]. Οι Belak και Stowers, καθώς και οι Shimada και Ikawa, διεξήγαν πρωτοπόρες μελέτες (ανεξάρτητα, αλλα και σε συνεργασία) στην προσομοίωση μέσω Μοριακής Δυναμικής της νανοκοπής του χαλκού με κοπτικό εργαλείο από διαμάντι.[20-28] Αυτό οδήγησε άλλους επιστήμονες, κυρίως στην Ιαπωνία, να ερευνήσουν και να επεκτείνουν την μέθοδο MD σε άλλες νανοκατεργασίες, όπως οι Inamura και Takezawa [29-32] kai οι Inasaki et al [18] που ήταν από τους πρώτους που εκπόνησαν μελέτη λείανσης σε νανοκλίμακα, με τη βοήθεια της MD προσομοίωσης.

Η μέθοδος της MD είναι μία από τις αιτιοκρατικές μεθόδους (deterministic methods) προσομοίωσης, σε αντίθεση με τις στοχαστικές μεθόδους (stochastic methods), που βασικός εκπρόσωπός τους είναι η μέθοδος Monte-Carlo. Οι τεχνικές Monte Carlo αποτελούν ένα πολύ ισχυρό εργαλείο για τον υπολογισμό θερμοδυναμικών ιδιοτήτων ισορροπίας, καθόσον οι κινήσεις μπορούν να σχεδιαστούν κατά τέτοιο τρόπο ώστε να επιτρέπουν αποτελεσματική δειγματοληψία της επιθυμητής πυκνότητας πιθανότητας. Εντούτοις όμως, οι μέθοδοι Monte Carlo δεν είναι δυνατό να δώσουν απευθείας πληροφορίες για τη δυναμική κατάσταση καθόσον δεν συμπεριλαμβάνουν το χρόνο στην εξέλιξη του συστήματος. [19]

Η ουσία της μεθόδου προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής είναι η αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Νεύτωνα, για ένα σύνολο ατόμων. Οι εξισώσεις αυτές ολοκληρώνονται με αριθμητικές τεχνικές σε εξαιρετικά μικρά χρονικά διαστήματα (2-3 femtoseconds), και οι στατιστικοί μέσοι ισορροπίας υπολογίζονται ως χρονικοί μέσοι στο διάστημα παρατήρησης. Βασικά, απαιτείται η γνώση της ηλεκτρονιακής θεμελιώδους κατάστασης σε κάθε γεωμετρία συστήματος, έτσι ώστε να έχουμε μια σωστή περιγραφή των διατομικών δυνάμεων. Όπως είπαμε παραπάνω, η Μοριακή Δυναμική είναι μια ντετερμινιστική τεχνική: δεδομένου ενός συνόλου συντεταγμένων και ταχυτήτων των ατόμων καθώς και του τύπου των αλληλεπιδράσεων μεταξύ τους, η μετέπειτα χρονική εξέλιξη του συστήματος είναι ουσιαστικά προδιαγεγραμμένη. Το μόνο σημείο όπου κάποιος παράγοντας τυχαιότητας υπεισέρχεται σε αυτή τη μέθοδο, είναι στην εκλογή της αρχικής κατανομής ταχυτήτων και θέσεων των ατόμων. Για να καταστήσουμε πρακτικά εφαρμόσιμες τις ατομιστικές μελέτες προσομοίωσης, απαιτείται ένα κλασσικό ή ημι-κλασσικό δυναμικό, από το οποίο μπορούν να υπολογιστούν οι διατομικές δυνάμεις. Αυτό επιτυγχάνεται μέσω μιας κατάλληλης εμπειρικής συνάρτησης ενέργειας δυναμικού, η οποία ικανοποιεί διάφορα αυστηρά κριτήρια για τις ιδιότητες του υλικού, στις οποίες συμπεριλαμβάνονται η σταθερά πλέγματος, η ενέργεια εξάχνωσης, η συμπιεστότητα, οι σταθερές ελαστικότητας, η εξίσωση φάσης και η σταθερότητα του ίδιου του κρυστάλλου.

Στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, οι διατομικές δυνάμεις δεσμών (ελκυστικές και απωστικές) ορίζονται μέσω μιας κατάλληλης εμπειρικής συνάρτησης ενέργειας δυναμικού. Η βάση όλων των μεθόδων μοριακής προσομοίωσης είναι ο καθορισμός μιας συνάρτησης δυναμικού, μέσω της οποίας γίνεται ο υπολογισμός της δυναμικής ενέργειας του συστήματος προσομοίωσης, σαν συνάρτηση των συντεταγμένων των ατόμων που το απαρτίζουν. Με γνωστή τη συνάρτηση αυτή, υπολογίζεται η δύναμη που ασκείται σε καθένα από τα άτομα. Για τα μέταλλα , χρησιμοποιούνται συχνά τα δυναμικά ζεύγους σωμάτων (*pairwise potentials*), όπως τα δυναμικά Morse ή Lennard-Jones. Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής συστήματος ελατηρίου- μάζας (άτομα ή θετικά ιόντα), υπό την εφαρμογή κάποιου φορτίου, ή συνθηκών ταχύτητας ή μετατόπισης. Από την άποψη αυτή, η μέθοδος MD είναι παρόμοια με άλλες αναλύσεις που εκπονούν οι μηχανικοί σε καθημερινή βάση, όπως η ανάλυση των ταλαντώσεων ενός μηχανικού συστήματος, το οποίο αποτελείται από μια σειρά αταλάντευτων μαζών και η απόκρισή του υπό γνωστό εξωτερικό φορτίο.

Η προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής παίζει έναν εξαιρετικά σημαντικό ρόλο στην ανάλυση της συμπεριφοράς των υλικών σε ατομικό επίπεδο, η οποία δε μπορεί να επιτευχθεί με άλλες θεωρητικές μεθόδους ή πειράματα. Αποτελεί μια μεθοδολογία εξέτασης των στατιστικών ιδιοτήτων συστημάτων συμπυκνωμένης ύλης. Η πρόβλεψη της συμπεριφοράς των υλικών, βασιζόμενη σε μια ανάλυση ατομικού επιπέδου, παρέχει χρήσιμες και ακριβείς πληροφορίες για μια πληθώρα εφαρμογών, που αφορούν στην επιστήμη των υλικών, την τριβολογία και τις κατεργασίες.

Όταν ο αριθμός των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη στο μοριακό μοντέλο μιας διεργασίας γίνεται μεγάλος, οι μέθοδοι κβαντικής μηχανικής γίνονται δυσεπίλυτες. Στις περιπτώσεις αυτές, πρέπει να χρησιμοποιηθεί η προσέγγιση της κλασσικής ή ψευδο-κλασσικής τροχιάς. Στις μεθόδους αυτές, ο πυρήνας θεωρούμε ότι κινείται 19

κλασσικά σε αδιαβατική επιφάνεια δυναμικής ενέργειας. Αν οι αρχικές στάθμες του συστήματος θεωρηθούν κβαντισμένες, η διαδικασία ονομάζεται ψευδο-κλασσική. Στη συμβατική προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, δε γίνεται προσπάθεια να επιλυθεί η πολύπλοκη εξίσωση του Schrödinger για την εύρεση του δυναμικού του συστήματος. Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων μοντελοποιούνται βάσει του εμπειρικού δυναμικού.

Το πρόβλημα της προσομοίωσης οποιασδήποτε μοριακής διεργασίας, είτε πρόκειται για χημική αντίδραση, είτε για φυσική διαδικασία, όπως η κατεργασία, περιλαμβάνει τέσσερα βασικά τμήματα, δηλαδή:

- τη διατύπωση και την ολοκλήρωση των κλασσικών εξισώσεων της κίνησης, για τα άτομα που συνιστούν το σύστημα που μας ενδιαφέρει,

- την επιλογή του μοριακού μοντέλου,
- την ανάπτυξη μιας συνάρτησης δυναμικής ενέργειας επαρκούς ακρίβειας και
- την προσομοίωση των πειραματικών συνθηκών.

Πρέπει να δοθεί ιδιαίτερη σημασία σε καθένα από αυτά τα βήματα, ώστε τα αποτελέσματα που θα προκύψουν από τις προσομοιώσεις να είναι χρήσιμα, για την ερμηνεία και την πρόβλεψη των πειραματικών δεδομένων. [20-32]

Παρακάτω παραθέτουμε τον συγκεντρωτικό Πίνακα 1.1 με τα κύρια χαρακτηριστικά των τριών βασικών μεθόδων προσομοίωσης, με βάση τα όσα προαναφέρθηκαν.

Μέθοδος	Κύριος Στόχος Υπολογισμού	Κύριο αποτέλεσμα
Molecular Mechanics (MM)	Μεμονωμένα μόρια ή μικρά μοριακά συστήματα (οργανικά μόρια)	Βελτιστοποιημένη γεωμετρία, Ελαχιστοποίηση ενέργειας, Χαρτογράφηση δυναμικού
Monte Carlo (MC)	Μεγάλος αριθμός ατόμων ή μορίων (υγρά, κράματα, αέρια)	Θερμοδυναμικές ιδιότητες, Κίνηση σωματιδίων
Molecular Dynamics (MD)	Μεγάλος αριθμός ατόμων ή μορίων (οργανικά, ανόργανα μόρια, υγρά, στερεά και αέρια)	Θερμοδυναμικές ιδιότητες, Δυναμική, Κίνηση σωματίδιων

Πίνακας 1.1: Κύρια χαρακτηριστικά προσομοιώσεων σε μοριακό επίπεδο [7]

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

# Θεωρία Μοριακής Δυναμικής (MD) και Εφαρμογή της στις Κατεργασίες Νανοκλίμακας

# 2.1 Εισαγωγή

Στο προηγούμενο κεφάλαιο έγινε μια σύντομη ανάλυση των αρχών και της φιλοσοφίας της Μοριακής Δυναμικής (MD). Όπως αναφέρθηκε, η ουσία της προσομοίωσης MD είναι η αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Newton σε ένα σύνολο ατόμων. Οι εξισώσεις αυτές ενσωματώνονται σε συγκεκριμένες αριθμητικές μεθόδους επίλυσης με πολύ μικρές χρονικές επαναλήψεις. Για να έχουμε μία σωστή περιγραφή του εκάστοτε υπό μελέτη συστήματος και προκειμένου να γίνεται σωστά ο υπολογισμός των διατομικών δυνάμεων, απαιτείται η χρήση συγκεκριμένων δυναμικών ενέργειας.

Στο παρόν κεφάλαιο θα γίνει μία πιο ενδελεχής μελέτη των ειδών των ατόμων που παίρνουν μέρος στην προσομοίωση, των δυναμικών ενέργειας και των μεθόδων ολοκλήρωσης που μπορούν να χρησιμοποιηθούν, των συναρτήσεων επιθυμητής θερμοκρασίας και επαναπροσδιορισμού ταχυτήτων. Ταυτόχρονα, θα προσπαθήσουμε να δώσουμε στον αναγνώστη μία σαφέστερη εικόνα για τον τρόπο, αλλά και το σκεπτικό της εφαρμογής της προσομοίωσης MD στις νανοκατεργασίες.

Στο σημείο αυτό αξίζει να σημειωθεί πως η παρούσα διπλωματική εργασία έχει ως θέμα την προσομοίωση MD λείανσης με κόκκους. Σύμφωνα με τον Inasaki [18] (αλλά και με το μεγαλύτερο μέρος της βιβλιογραφίας των μοριακών προσομοιώσεων νανοκατεργασιών [17]), οι προσομοιώσεις MD λείανσης με κόκκους, αντιστοιχούν σε κατάλληλες MD προσομοιώσεις νανοκοπών, όπου το εργαλείο (tool) έχει τη γεωμετρία ενός κόκκου. Η γεωμετρία του εργαλείου σε συνδυασμό με την κατάλληλη ταχύτητα εργαλείου παρέχουν το επιθυμητό αποτέλεσμα, την αρνητική γωνία αποβλήτου.

### 2.2 Είδη Ατόμων

#### 2.2.1 Νευτώνεια Άτομα

Το σύνολο των ατόμων στα οποία εφαρμόζεται η αριθμητική ολοκλήρωση των κλασσικών εξισώσεων του Νεύτωνα καλείται σύνολο Νευτώνειων Ατόμων (Newtonian Atoms). Επομένως ισχύουν τα παρακάτω:

$$m\frac{d^2r_l}{dt^2} = \frac{d(mU_l)}{dt} = \frac{dp_l}{dt} = F_l$$
(2.1)

Όπου *m* είναι η μάζα του ατόμου,  $r_i$  είναι η θέση,  $v_i$  είναι η ταχύτητα,  $p_i$  είναι η ορμή και  $F_i$  είναι η δύναμη που αφορούν το άτομο *i* του συνόλου των ατόμων [8].

Στη συνέχεια, μετά από την ενσωμάτωση των παραπάνω εξισώσεων και την επίλυσή τους, το αποτέλεσμα είναι οι τροχιές που ακολουθούν όλα τα άτομα, όπως επίσης και οι ταχύτητές τους. Η δύναμη  $F_i$  που ασκείται στο άτομο i, υπολογίζεται μέσω της χρησιμοποιούμενης συνάρτησης δυναμικού, σε σχέση με τη θέση του ατόμου, μέσω της σχέσης:

$$F_i = -\nabla_i V(r_1, r_2, \dots, r_1 N_m)$$
(2.2)

Όπου *V* είναι η συνάρτηση δυναμικού ενέργειας,  $N_m$  είναι ο αριθμός των ατόμων,  $r_i = x_i i + y_i j + z_i k$  είναι το διάνυσμα θέσης του ατόμου *i*, όπου  $x_i$ ,  $y_i$  και  $z_i$  είναι οι συντεταγμένες θέσης του ατόμου και ως γνωστόν

$$\nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i} i + \frac{\partial}{\partial y_j} j + \frac{\partial}{\partial z_k} k$$
(2.3)

Οι προσομοιώσεις λοιπόν μέσω της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής, περιλαμβάνουν μια σειρά από διαδοχικά χρονικά βήματα, κατά τη διάρκεια των οποίων γίνεται μία άθροιση των δυνάμεων που ασκούνται σε κάθε άτομο, υπολογίζονται οι καινούριες ταχύτητες και μετατοπίσεις σε κάθε χρονικό βήμα, ορίζονται οι καινούριες θέσεις των ατόμων και όλα αυτά με τον έλεγχο ότι υπάρχει διατήρηση της ενέργειας [19].

Για να κατανοήσουμε την πληθώρα των εξισώσεων που είναι απαραίτητο να υπολογιστούν, ενδεικτικά αναφέρεται ότι για Ν πλήθος ατόμων, οι εξισώσεις που πρέπει να επιλυθούν είναι περίπου 6Ν. Το πλήθος των ατόμων μπορεί να είναι από μερικές εκατοντάδες μέχρι αρκετές χιλιάδες. Βέβαια, όσο μεγαλύτερο είναι το πλήθος των ατόμων, τόσο μεγαλύτερος είναι και ο απαιτούμενος χρόνος υπολογισμού. Γενικά,

σε μια προσομοίωση, το πλήθος των ατόμων κυμαίνεται από 2000 έως 10000. Επομένως, ένα μοντέλο που απαρτίζεται από 2000 άτομα απαιτεί τον υπολογισμό 12000 διαφορικών εξισώσεων κίνησης πρώτης τάξης [2].

## 2.2.2 Συνοριακά Άτομα

Τα συνοριακά άτομα του εργαλείου και του τεμαχίου θεωρούνται ανεπηρέαστα από κατεργασία καθώς διεπιφάνεια την κοπής, είναι μακριά από την εργαλείου-τεμαχίου. Κατά συνέπεια, οι θέσεις των συνοριακών ατόμων δε θα μεταβληθούν η μια ως προς την άλλη κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής. Στην Εικόνα 2.1, η ακμή του εργαλείου (γεμάτοι κύκλοι) θεωρείται άκαμπτη (δηλ. δεν παραμορφώνεται) ή άπειρης σκληρότητας. Αυτή είναι γενικά η περίπτωση, όταν έναν μαλακό τεμάχιο, όπως η χαλκός ή το αλουμίνιο, κατεργάζεται από ένα σκληρό κοπτικό εργαλείο, όπως ένα εργαλείο από διαμάντι. Εναλλακτικά, οι κοπτικές ακμές αποτελούνται από Νευτώνεια άτομα, και τα συνοριακά άτομα μετακινούνται προς τα εξωτερικά τοιχώματα του εργαλείου, όπου στην περίπτωση αυτή, το εργαλείο μπορεί να παραμορφωθεί κατά τον ίδιο τρόπο που παραμορφώνεται και το τεμάχιο κατεργασίας. Αυτή είναι η περίπτωση όπου ένα τεμάχιο από χαλκό κατεργάζεται από ένα σιδερένιο εργαλείο, ή όπου η διαφορική σκληρότητα των δύο υλικών είναι μικρή.

Ομοίως, τα συνοριακά άτομα στην πλευρά μακριά από το εργαλείο στην Εικόνα 2.1 μπορούν να αναπαρασταθούν ως πράσινα σφαιρίδια, ή μπορούν να αντικατασταθούν (μαζί με άτομα θερμοστάτες, άτομα δηλαδή που απορροφούν θερμότητα ώστε να διατηρείται η θερμοκρασία του συνόλου σταθερή και θα αναλύσουμε τη λειτουργεία τους αμέσως μετά) από Νευτώνεια άτομα (κόκκινα σφαιρίδια), στην οποία περίπτωση το όριο δεν είναι πλέον άκαμπτο. Η πλαστική παραμόρφωση του εργαλείου και του τεμαχίου μπορούν να μελετηθούν μέσω αυτής της προσέγγισης. Καθώς η δημιουργία προεξοχών στις κατεργασίες συμβαίνει στην πλευρά εξόδου του τεμαχίου λόγω έλλειψης περιορισμού ακαμψίας, στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής τα συνοριακά άτομα (μαζί με τα άτομα θερμοστάτες) στη μακρινή πλευρά του τεμαχίου (ως προς την αρχική θέση του εργαλείου) απομακρύνονται, ώστε να επιτραπεί η παραμόρφωση των ατόμων χωρίς περιορισμό, όταν μοντελοποιείται η αστοχία εξόδου ή η δημιουργία προεξοχών. Τα άτομα που βρίσκονται σε δύο γειτονικά στρώματα ως προς τα οριακά άτομα, λειτουργούν ως θερμοστατικά άτομα. [2]



**Εικόνα 2.1:** Τρισδιάστατη αναπαράσταση των διαφόρων ζωνών ενός τεμαχίου και κοπτικού εργαλείου.[2]

## 2.2.3 Άτομα Θερμοστάτες

Στη Μοριακή Δυναμική γίνεται επιλογή του στατιστικού συνόλου που θα χρησιμοποιηθεί. Η επιλογή αφορά στους περιορισμούς που θα επιβληθούν στο σύστημα. Ο λόγος είναι ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης θα αναχθούν σε μακροσκοπικές ιδιότητες των προς προσομοίωση υλικών. Εκτός του μικροκανονικού στατιστικού συνόλου, όλα τα υπόλοιπα έχουν ως περιορισμό την θερμοκρασία. Η ρύθμιση της θερμοκρασίας στην επιθυμητή τιμή, γίνεται με την διαδικασία της θερμοστάτησης. Στην ουσία, το σύστημα αφήνεται να εξελιχτεί για λίγο, χωρίς περιορισμό θερμοκρασίας, και σε τακτά χρονικά διαστήματα, η θερμοκρασία επιβάλλεται να γίνει ίση με την επιθυμητή.

Στη διάρκεια εξέλιξης της Μοριακής Δυναμικής, εξελίχθηκαν διάφοροι αλγόριθμοι θερμοστάτησης, π.χ. Berensen, επανακαθορισμός ταχύτητας (Velocity rescaling), Nosé-Hoover. Οι διαφορές στους αλγορίθμους θερμοστάτησης, έγκειται στον τρόπο με τον οποίο προσαρμόζουν την θερμοκρασία στην επιθυμητή.

Σύμφωνα με την μέθοδο θερμοστάτησης Nosé-Hoover, στο σύστημα εισάγεται ένα «υπερ-μόριο». Το μόριο αυτό αλληλεπιδρά με τα υπόλοιπα του συστήματος επηρεάζοντας την κινητική τους ενέργεια. Ο τρόπος με τον οποίο την επηρεάζει, οδηγεί σε κινητική ενέργεια που αντιστοιχεί στην επιθυμητή θερμοκρασία. Το παραπάνω, είναι ανάλογο με την βύθιση του συστήματος σε λουτρό, με σκοπό τη διατήρηση της θερμοκρασίας σταθερής. [35,36].

# 2.3 Συναρτήσεις Δυναμικού Ενέργειας

Όποτε αντιμετωπίζουμε ένα πρόβλημα σε ατομικό επίπεδο, όπως στην περίπτωση της προσομοίωσης της νανοκοπής μέσω Μοριακής Δυναμικής, είναι απαραίτητο να λάβουμε υπόψη τις δυνάμεις που υπάρχουν μεταξύ των ατόμων, διότι αυτές είναι κυρίως οι δυνάμεις που « αποφασίζουν» τι θα συμβεί σε οποιοδήποτε φυσικό φαινόμενο. Όπως φαίνεται και στην Εικόνα 2.2, σε κάθε χρονικό βήμα (Δt) κάθε άτομο αλλάζει θέση και αλληλεπιδρά με τα γειτονικά του άτομα με τρόπο, ο οποίος μπορεί να προσδιοριστεί από τη συνάρτηση διατομικών δυναμικών.



Εικόνα 2.2: Αλληλεπίδραση ατόμων στη νανοκοπή [19]

Παρόλο που η ακρίβεια του δυναμικού υπαγορεύει την ποιότητα των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης η συναρτησιακή του πολυπλοκότητα προσδιορίζει τον απαιτούμενο υπολογιστικό χρόνο, για ένα δεδομένο υπολογιστικό σύστημα. Οι διατομικές αυτές δυνάμεις μεταβάλλονται, ανάλογα με το αν το υλικό είναι μέταλλο (κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα fcc, κυβικό χωροκεντρωμένο σύστημα bcc, μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα hcp ) ημιαγωγικό, κεραμικό ή γυαλί. Μια έκφραση δυναμικού που αναπτύσσεται για μια κατηγορία υλικών, κατά πάσα πιθανότητα, δε θα μπορεί να εφαρμοσθεί ικανοποιητικά σε άλλες κατηγορίες υλικών, λόγω του ότι οι διατομικές δυνάμεις είναι διαφορετικές. Κατά συνέπεια, είναι απαραίτητο να αναπτυχθεί μια έκφραση δυναμικού για κάθε κατηγορία υλικών.



**Εικόνα 2.3:** (a)κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα fcc (b) μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα hcp [19]

Δυστυχώς, η ανάπτυξη μιας έκφρασης δυναμικού δεν είναι απλή, και απαιτεί σημαντικό χρόνο και εμπειρία. Ευτυχώς, οι εκφράσεις δυναμικού έχουν αναπτυχθεί για ένα εύρος υλικών και η έρευνα βρίσκεται σε εξέλιξη για άλλα υλικά. Για παράδειγμα, τα δυναμικά Morse και Lennard- Jones εφαρμόσθηκαν αρχικά σε μέταλλα με κυβική δομή. Η έκφραση δυναμικού πολλών σωματιδίων (Embedded Aton Method – EAM) αναπτύχθηκε ως βελτίωση για ένα μεγάλο εύρος υλικών. Ομοίως, τα δυναμικά Brenner και Tersoff αναπτύχθηκαν για υλικά με ομοιοπολικούς δεσμούς , όπως το πυρίτιο, το γερμάνιο, ακόμα και το διαμάντι. Το δυναμικό Born- Meyer αναπτύχθηκε ειδικά για κάποια κεραμικά. Πρέπει όμως να σημειωθεί, ότι τα δυναμικά αυτά αφορούν σε υλικά μονής φάσης μονοκρυστάλλου, με ένα συγκεκριμένο είδος δεσμών. Για τα πολυκρυσταλλικά υλικά, τα κράματα μετάλλων και για υλικά που είναι μερικώς ιοντικά και μερικώς ομοιοπολικά, απαιτείται η δημιουργία νέων πολυπλοκότερων δυναμικών.[34]

Πρέπει να τονισθεί ότι η ακρίβεια των τροχιών των ατόμων που θα προκύψει από την προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, επηρεάζεται σημαντικά από την κατάλληλη επιλογή της έκφρασης δυναμικού. Ως εκ τούτου, η επιλογή μιας κατάλληλης έκφρασης δυναμικού είναι προϋπόθεση. Η ολική ενέργεια του συστήματος είναι το άθροισμα των κινητικών και δυναμικών ενεργειών. Η κινητική ενέργεια είναι εύκολο να υπολογιστεί, αλλά ο υπολογισμός της δυναμικής ενέργειας είναι πιο πολύπλοκος, αφού εξαρτάται από τις θέσεις όλων των αλληλοεπιδρώντων ατόμων. Η δυναμική ενέργεια παίζει κεντρικό ρόλο στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής. Πρώτον, η δύναμη που δρα πάνω σε κάθε άτομο είναι ανάλογη της πρώτης παραγώγου της συνάρτησης δυναμικού. Δεύτερον, η ολική ενέργεια πρέπει να παρακολουθείται προσεκτικά σε μια προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής.[2]

Στην πραγματικότητα, τα δυναμικά αυτά παρουσιάζουν μια πιο ρεαλιστική άποψη των ατομικών αλληλεπιδράσεων, σε σύγκριση με τα δυναμικά που προκύπτουν από καθαρά θεωρητικές προσεγγίσεις. Τα εμπειρικά δυναμικά βασίζονται σε απλές μαθηματικές εκφράσεις για τις ανά ζεύγη αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο ατόμων ή ιόντων και περιέχουν μία ή περισσότερες παραμέτρους προσαρμοσμένες στα πειραματικά δεδομένα. Η εγκυρότητα της συνάρτησης καθώς και η σταθερότητα του κρυστάλλου για ένα δεδομένο υλικό, ελέγχονται για διάφορες ιδιότητες, όπως είναι η ενέργεια συνοχής, η θερμοκρασία Debye, η σταθερά πλέγματος, η συμπιεστότητα και οι ελαστικές σταθερές, καθώς και η εξίσωση κατάστασης. Κατά συνέπεια, τα δυναμικά αυτά μπορούν να θεωρηθούν αξιόπιστα για απλά μέταλλα κυβικής δομής.

Σε μεγαλύτερα συστήματα χρησιμοποιούνται εμπειρικές συναρτήσεις δυναμικού, οι οποίες λαμβάνουν υπόψη παράγοντες όπως την έκταση του ομοιοπολικού δεσμού, τη μεταβολή της γωνίας του δεσμού λόγω κάμψης, στρέψης ή αλληλεπιδράσεων van der Waals και Coulomb. Αυτή είναι η δεύτερη και πιο συνήθης μέθοδος, όπου οι

παράμετροι προσδιορίζονται βάσει των φυσικών ιδιοτήτων κάθε υλικού. Οι παράμετροι μπορούν να ληφθούν είτε από πειραματικές μελέτες, είτε από υπολογισμούς κβαντικής μηχανικής. Η διατομική δυναμική ενέργεια συνήθως λαμβάνεται ως το άθροισμα των (εμπειρικών) δυναμικών των *n* σωμάτων, το οποίο εξαρτάται μόνο από την απόσταση μεταξύ των ατόμων. Τα δυναμικά αυτά κατατάσσονται περαιτέρω, σε δυναμικά δύο, τριών ή περισσότερων σωμάτων, ανάλογα με την ομάδα των ατόμων από τα οποία εξαρτώνται οι όροι του δυναμικού.[2]

Αναφερόμενοι στην Εικόνα 2.4, το μήκος του δεσμού  $r_o$ , είναι η απόσταση των κέντρων των ατόμων. Οι ισχυροί δεσμοί φέρνουν τα άτομα σε μικρότερη απόσταση και έτσι το μήκος του δεσμού είναι μικρότερο σε σύγκριση με τους ασθενείς δεσμούς. Στο σημείο  $r_o$ , οι ελκτικές και οι απωστικές δυνάμεις εξισορροπούνται και η συνισταμένη δύναμη είναι μηδενική. Η κατάσταση αυτή αντιστοιχεί σε σταθερή ισορροπία ελάχιστης ενέργειας δυναμικού, το μέγεθος της οποίας είναι η ενέργεια του δεσμού. Οι ιδιότητες συνοχής ενός στερεού, η συμπεριφορά τήξης και ατμοποίησης προσδιορίζονται από το μέγεθος της μέγιστης ενέργειας δεσμού, η οποία καθορίζεται από την ελκτική συνιστώσα της διατομικής δύναμης. Όσο μεγαλύτερη είναι η ενέργεια δεσμού, τόσο μεγαλύτερη είναι η θερμοκρασία τήξης και το μέτρο ελαστικότητας του Young, και τόσο μικρότερος ο συντελεστής θερμικής διαστολής. Η κλίση της καμπύλης της δύναμης στο σημείο  $r_o$ , δίνει το μέτρο ελαστικότητας. Οι μεγάλες «βυθίσεις» του δυναμικού είναι πιο συμμετρικές γύρω από τη θέση ισορροπίας  $r_o$ , σε σχέση με τις πιο «ρηχές» βυθίσεις. [34-39]

Οι εκφράσεις ενέργειας δυναμικού γενικά αφορούν σε ένα μέτριο εύρος απόστασης ζευγών, σε εξαιρετικά μικρά όμως επίπεδα ενέργειας. Αγνοώντας τις διατομικές επιδράσεις κάτω από ένα σημείο αποκοπής, μπορεί να επιτευχθεί μια σημαντική μείωση στον υπολογιστικό χρόνο με ασήμαντη απώλεια ακρίβειας. Η αποκοπή του δυναμικού καταλήγει επίσης και σε παρόμοια αποκοπή στην καμπύλη της δύναμης. Η απόσταση αποκοπής μπορεί να επιλεγεί σε οποιοδήποτε σημείο, αλλά γενικά επιλέγεται σε απόσταση τέτοια, όπου η τιμή της δυναμικής ενέργειας είναι 3 ως 5% της τιμής της δυναμικής ενέργειας ισορροπίας. Στη συνέχεια θα δοθούν οι εκφράσεις μερικών εμπειρικών δυναμικών που χρησιμοποιούνται ευρέως. [2,19,34,37]



Εικόνα 2.4: Μεταβολή των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυνάμεων (a) και των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυναμικών ενέργειας (b), ως συνάρτηση της διατομικής απόστασης r, μεταξύ δύο απομονωμένων ατόμων [2]

### 2.3.1 Δυναμικό Morse

Ο Philip McCord Morse πρότεινε το δυναμικό Morse, το οποίο αποτελεί ένα ευρέως χρησιμοποιούμενο «εμπειρικό» δυναμικό.[44,34] Είναι ένα δυναμικό ζεύγους κατάλληλο για τη μοντελοποίηση μετάλλων κυβικής δομής. Ανήκει στην κατηγορία των "soft" models αλλά υπάρχουν hard-sphere παραλλαγές. Παράγει απωθητικές δυνάμεις στις μικρές αποστάσεις, ελκτικές δυνάμεις στις μεσαίες αποστάσεις και ελαχιστοποιείται στο μηδέν καθώς οι αποστάσεις μεγαλώνουν. Χρησιμοποιεί μια μορφή δυναμικού που περιέχει δύο εκθετικούς όρους αντί για ένα νόμο που εξαρτάται από την ισχύ. Η συνάρτηση δυναμικού ενέργειας δίνεται από τη σχέση:

$$V_{ij} = D \left\{ \exp[-2a(r_{ij} - r_e)] - 2\exp[-a(r_{ij} - r_e)] \right\}$$
(2.4)

Όπου  $r_e$  και  $r_{ij}$  είναι η απόσταση ισορροπίας και η στιγμιαία απόσταση μεταξύ των ατόμων i και j, αντίστοιχα, ενώ D και a είναι σταθερές που προσδιορίζονται βάσει των φυσικών ιδιοτήτων του υλικού.

Για παράδειγμα, τα  $r_e$ , D και a λαμβάνονται από την κοντινότερη απόσταση μεταξύ των ατόμων (αποστάσεις ισορροπίας πλέγματος), τη θερμοκρασία Debye και την ενέργεια εξάχνωσης. Η εγκυρότητα της συνάρτησης καθώς και η σταθερότητα του κρυστάλλου για ένα δοσμένο υλικό ελέγχεται ως προς διάφορες ιδιότητες, οι οποίες περιλαμβάνουν την ενέργεια συνοχής, τη σταθερά πλέγματος, τη σταθερά συμπιεστότητας και ελαστικότητας καθώς και την εξίσωση φάσης και την σταθερότητα του κρυστάλλου. [44,34]

Οι Girifalco και Weizer [45] υπολόγισαν τις παραμέτρους Morse με χρήση πειραματικών τιμών για την ενέργεια ατμοποίησης, τις σταθερές πλέγματος και τη συμπιεστότητα. Η εξίσωση φάσης, οι ελαστικές σταθερές και οι συνθήκες σταθερότητας υπολογίστηκαν με χρήση των παραμέτρων Morse για μέταλλα με κυβική δομή και βρέθηκε ότι τα αποτελέσματα συμφωνούσαν με τα πειραματικά. Αυτό που έχει παρατηρηθεί από έρευνες είναι ότι το δυναμικό Morse μπορεί να χρησιμοποιηθεί καλύτερα για να περιγράψει υλικά με δομή fcc και όχι τόσο καλά υλικά με δομή bcc, για τα οποία πρέπει να χρησιμοποιηθεί κάποιο άλλο δυναμικό [46].

Στον παρακάτω πίνακα (Πίνακας 2.1) δίνονται οι παράμετροι Morse για διάφορα υλικά, έτσι όπως προτάθηκαν από τους Girifalco και Weizer.

Metal	ad <sub>0</sub>	β	$L \times 10^{-22} \text{ (eV)}$	$\alpha \left( A^{-1} \right)$	r <sub>0</sub> (A)	D (eV)
Pb	2.921	83.02	7.073	1.1836	3.733	0.2348
Ag	2.788	71.17	10.012	1.3690	3.115	0.3323
Ni	2.500	51.78	12.667	1.4199	2.780	0.4205
Cu	2,450	49.11	10.330	1.3588	2.866	0.3429
AI	2.347	44.17	8.144	1.1646	3.253	0.2703
Ca	2.238	39.63	4.888	0.805 35	4.569	0.1623
Sr	2.238	39.63	4.557	0.737 76	4.988	0.1513
Mo	2.368	88.91	24.197	1.5079	2.976	0.8032
W	2.225	72.19	29.843	1.4116	3.032	0.9906
Cr	2.260	75.92	13.297	1.5721	2.754	0.4414
Fe	1.988	51.97	12.573	1.3885	2.845	0.4174
Ba	1.650	34.12	4.266	0.656 98	5.373	0.1416
K	1.293	23.80	1.634	0.497 67	6.369	0.05424
Na	1.267	23.28	1.908	0.589 93	5,336	0.063 34
Cs	1.260	23.14	1.351	0.415 69	7.557	0.044 85
Rb	1.206	22.15	1.399	0.42981	7.207	0.04644

Πίνακας 2.1: Παράμετροι δυναμικού Morse σύμφωνα με τους Girifalco και Weizer [45].

### 2.3.2 Δυναμικό Lennard - Jones

To 1924 ο Άγγλος χημικός Sir John Edward Lennard – Jones πρότεινε το δυναμικό Lennard – Jones '12 – 6':

$$V_{ij} = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{o}{r_{ij}} \right)^6 - \left( \frac{o}{r_{ij}} \right)^{12} \right]$$
(2.5)

Το δυναμικό αυτό αποτελεί ειδική περίπτωση του δυναμικού Mie (προτάθηκε από το Γερμανό φυσικό Gustav Mie το 1903). Όπως και το δυναμικό Morse, το δυναμικό Lennard – Jones '12 – 6' τείνει να υπολογίσει απωθητικές δυνάμεις σε μικρή κλίμακα και ελκτικές δυνάμεις σε μεγαλύτερη κλίμακα. Η σειρά των όρων μέσα στην αγκύλη εξαρτάται από τη σύμβαση των πρόσημων που δεχόμαστε για τις απωθητικές και τις ελκτικές δυνάμεις, ενώ οι σταθερές σ και ε προσδιορίζονται από τις φυσικές ιδιότητες του υλικού [34,47].

Στην πορεία εμφανίστηκαν πολλές παραλλαγές του δυναμικού Lennard – Jones, οι οποίες ουσιαστικά αποτελούν ειδικές περιπτώσεις του δυναμικού Mie. Ενδεικτικά αναφέρουμε το δυναμικό Lennard – Jones n – m, το δυναμικό Lennard – Jones n – 6, το δυναμικό Lennard – Jones 8 – 6, το δυναμικό Lennard – Jones 9 – 3, το δυναμικό Lennard – Jones 9 – 6 καθώς και το Soft-core Lennard – Jones δυναμικό ('soft' model παραλλαγή), παρά το γεγονός ότι το '12-6' θεωρείται βασισμένο στα μοντέλα σκληρών σφαιρών (hard – sphere models).[47]

### 2.3.3 Δυναμικό Πολλαπλών Ατόμων (Embedded-Atom Potential)

Δυναμικά πολλαπλών σωμάτων, όπως το embedded – atom δυναμικό για κυβικά υλικά έχουν πρόσφατα αναπτυχθεί για να περιγράψουν το μεταλλικό δεσμό με πιο ακριβή τρόπο σε σχέση με τα δυναμικά δύο σωμάτων. Το embedded – atom δυναμικό (ακριβής μετάφραση: δυναμικό ενσωματωμένων ατόμων) είναι μια επέκταση του δυναμικού δύο σωμάτων για μέταλλα και αναμένεται να περιγράφει με ρεαλιστικό τρόπο την επίδραση του ελεύθερου ηλεκτρονιακού νέφους που περιβάλλει κάθε άτομο. Θεωρείται να είναι μια πιο ρεαλιστική συνάρτηση δυναμικού, η οποία μπορεί να μοντελοποιήσει σωστά την αλλαγή των ιδιοτήτων των υλικών κοντά σε μια ελεύθερη επιφάνεια. Η συνολική ενέργεια του συστήματος στη συγκεκριμένη περίπτωση περιγράφεται από τη σχέση:

$$E = (1/2) \left[ \Sigma \varphi_{ij} (r_{ij}) \right] + \Sigma \varphi_j \left[ \Sigma \varphi_j (r_{ij}) \right]$$
(2.6)

όπου οι όροι  $\varphi_{ii}$  και  $\varphi_i$  εξαρτώνται από το είδος των ατόμων.

Η συγκεκριμένη μέθοδος έχει έναν σημαντικό περιορισμό στην ποικιλία των μεταλλικών συστημάτων για τα οποία μπορεί να είναι ακριβής. Για το λόγο αυτό έχουν αναπτυχθεί τροποποιημένα δυναμικά που μπορούν να περιγράψουν μεγαλύτερη γκάμα υλικών με διαφορετικές δομές [48,34,50].

#### 2.3.4 Δυναμικό Tersoff

Ένα διαδεδομένο και αποτελεσματικό εμπειρικό δυναμικό για την περιγραφή ομοιοπολικών δεσμών είναι το δυναμικό Tersoff (Tersoff, 1989). Ιδιαίτερο χαρακτηριστικό του είναι το γεγονός ότι επιτρέπει το σχηματισμό και το σπάσιμο χημικών δεσμών κατά τη διάρκεια μιας προσομοίωσης χρησιμοποιώντας όρους πολλών σωμάτων, οι οποίοι μεταβάλλουν την ισχύ του ελκτικού τμήματος του δυναμικού ανάλογα με το χημικό περιβάλλον το κάθε ατόμου.[34,41]

Σύμφωνα με το δυναμικό Tersoff, η ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο ατόμων σε απόσταση  $\mathbf{r}_{ij}$  δίνεται από τη σχέση:

$$V_{ij} = f_c \left( r_{ij} \right) \left[ V_R \left( r_{ij} \right) + b_{ij} V_A \left( r_{ij} \right) \right]$$

$$(2.7)$$

$$V_{R}\left(r_{ij}\right) = A_{ij} \exp\left(-\lambda_{ij}r_{ij}\right)$$
(2.8)

31

Όπου

$$V_A\left(r_{ij}\right) = -B_{ij}\exp\left(-\mu_{ij}r_{ij}\right) \tag{2.9}$$

ένας απωστικός και ένας ελκτικός όρος τύπου Morse,  $fc(r_{ij})$  μία συνάρτηση αποκοπής που περιορίζει τις αλληλεπιδράσεις σε πρώτη γειτονία και ορίζεται ως

$$f_{c}(r_{ij}) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left( 1 + \cos \frac{\pi (r_{ij} - R_{ij})}{S_{ij} - R_{ij}} \right) & \gamma \quad R_{ij} \le r_{ij} \le S_{ij} \end{cases}$$
(2.10)

η οποία παίρνει την τιμή 1 για  $r_{ij} < R_{ij}$  και την τιμή 0 για  $r_{ij} > S_{ij}$ .

Η ολική δυναμική ενέργεια του συστήματος δίνεται από το άθροισμα:

$$V(\overline{r}) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij}$$
(2.11)

Το δυναμικό Tersoff προσφέρει μία ρεαλιστική προσέγγιση του ομοιοπολικού δεσμού και διαθέτει παραμετροποιήσεις για συστήματα που περιέχουν άνθρακα, πυρίτιο και γερμάνιο (Tersoff, 1989), οξυγόνο, βόριο και άζωτο και με κάποιες μετατροπές υδρογόνο και στοιχεία της ομάδας ΙΙΙ-V. Επέκταση του μοντέλου Tersoff για την καλύτερη περιγραφή συστημάτων άνθρακα και υδρογονανθράκων αποτελούν τα δυναμικά Reactive Empirical Bond Order REBO (Brenner, 1990).

Τόσο το δυναμικό Tersoff όσο και τα δυναμικά REBO αποτελούν προσεγγίσεις των ομοιοπολικών αλληλεπιδράσεων, χωρίς να λαμβάνουν υπόψη τις αλληλεπιδράσεις van der Waals. Η απευθείας εισαγωγή ενός δυναμικού τέτοιων αλληλεπιδράσεων στα δυναμικά των ομοιοπολικών δεσμών έχει καταστρεπτικές συνέπειες, καθώς οι αποστάσεις κάτω από τις οποίες εμφανίζεται η van der Waals άπωση είναι μεγαλύτερες από τις τυπικές αποστάσεις των χημικών δεσμών, στις οποίες έχουν ελάχιστα τα δυναμικά Tersoff και REBO. Για το λόγο αυτό απαιτείται μία ελεγχόμενη ενσωμάτωση των van der Waals αλληλεπιδράσεων, με τέτοιο τρόπο ώστε το σύστημα να επιλέγει πότε είναι δυνατός ο σχηματισμός ενός χημικού δεσμού ή ενός δεσμού van der Waals. [41]

#### 2.3.5 Δυναμικό Bolding - Anderson

Στις περιπτώσεις των ημιαγώγιμων υλικών, όπως είναι το πυρίτιο, το γερμάνιο και το διαμάντι, τα οποία είναι μέταλλα ομοιοπολικών δεσμών, τα δυναμικά δύο σωμάτων Morse ή Lennard-Jones δεν είναι αποδεκτά. Για τη μελέτη της κοπής σε

και

πυρίτιο ή διαμάντι, είναι προτιμότερο να χρησιμοποιηθεί το δυναμικό Bolding-Anderson, το οποίο είναι μια σύνθετη συνάρτηση πολλών σωμάτων, η οποία μπορεί να αναπαράγει όλα τα απαραίτητα χαρακτηριστικά των συστημάτων της πυριτίου ή του διαμαντιού. Τα δυναμικά πολλών σωμάτων επινοήθηκαν, για να περιγράψουν τον ομοιοπολικό δεσμό με χαρακτηριστικά κατεύθυνσης.[34,38]

Καθώς τα άτομα του άνθρακα στο πλέγμα του διαμαντιού έχουν μεταξύ τους ομοιοπολικούς δεσμούς και εξαρτώνται από την τύπο υβριδισμού, η φύση του δεσμού είναι πολύ σημαντική. Για το διαμάντι, το εμπειρικό δυναμικό που αναπτύχθηκε είναι το εξής:

$$V_{ij} = V_R \left( r_{ij} \right) - B_{ij} V_A \left( r_{ij} \right)$$
(2.12)

Όπου  $V_R(r_{ij})$  και  $V_A(r_{ij})$  είναι τα δυναμικά μεταξύ των ατόμων *i* και *j* λόγω των απωστικών και των ελκτικών δυνάμεων. Το μέγεθος  $\overline{B_{ij}}$  λαμβάνει υπόψη του την κατεύθυνση και το μήκος του δεσμού.

Συνοψίζοντας, μπορεί να τονισθεί ότι η επιλογή μιας έκφρασης δυναμικού εξαρτάται από το υλικό, καθώς και από τον τύπο της εφαρμογής. Κατά συνέπεια, η έκφραση του δυναμικού ενέργειας παίζει πολύ σημαντικό ρόλο σε μια προσομοίωση, καθώς υπαγορεύει το μέγεθος και την κατεύθυνση των δυνάμεων που ασκούνται σε ένα άτομο κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Το πιο κρίσιμο και δύσκολο μέρος μιας προσομοίωσης μοριακής δυναμικής είναι η ανάπτυξη μιας επιφάνειας δυναμικού είναι ικανοποιητικά ενέργειας , η οποία να κοντά στο δυναμικό των αντίστοιχων πειραματικών συστημάτων που εξετάζονται, ώστε τα αποτελέσματα των δυναμικών υπολογισμών να έχουν νόημα. [38,41]

## 2.4 Εξισώσεις Κίνησης

Στα προηγούμενα αναλύσαμε κάποια βασικά δυναμικά ενέργειας που έχουν αναπτυχθεί. Οι εξισώσεις δυναμικού ενέργειας είναι θεμελιώδεις για την κατανόηση της συμπεριφοράς του συστήματος των ατόμων και εκφράζουν τη δυνατότητα κίνησης των δομικών μονάδων. Όμως δεν μας δίνουν πληροφορίες για την απόκριση των ατόμων. Για να γίνει αυτό απαιτούνται εξισώσεις, οι οποίες μέσω του δυναμικού θα χρησιμοποιηθεί, δίνουν τελικά τις δυνάμεις αλληλεπίδρασης μεταξύ των ατόμων. Ούτε αυτές οι εξισώσεις όμως αρκούν, καθώς χρειάζεται συσχέτιση των δυνάμεων αλληλεπίδρασης με τις θέσεις των ατόμων. Για το λόγο αυτό απαραίτητες είναι οι δυναμικές εξισώσεις του συστήματος. Χρησιμοποιώντας λοιπόν την κατάλληλη συνάρτηση δυναμικού και υπολογίζοντας τις δυνάμεις αλληλεπίδρασης και τη σχέση τους με τα άτομα, παίρνουμε τελικά το σύστημα των διαφορικών εξισώσεων, το οποίο αν επιλυθεί μας δίνει την απόκριση του συστήματος.

Η επιλογή των κατάλληλων εξισώσεων γίνεται με βάση την επιθυμητή πολυπλοκότητα μοντελοποίησης. Στην κλίμακα που σκοπεύουμε να μελετήσουμε, ουσιαστικά κυριαρχεί η Κβαντική Μηχανική, όπου για να περιγραφεί αναλυτικά η αλληλεπίδραση των ηλεκτρονιακών νεφών απαιτείται επίλυση της εξίσωσης Schrödinger. Ο λόγος που χρησιμοποιούμε τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής και όχι την Κβαντική Μηχανική είναι ότι η τελευταία έχει πολύ υψηλή υπολογιστική πολυπλοκότητα και μπορεί να χρησιμοποιηθεί μόνο για την προσομοίωση πολύ μικρών συστημάτων.

Στα πλαίσια της δικής μας μελέτης, που ασχολείται με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής, μπορούν να χρησιμοποιηθούν άλλες εξισώσεις, όπως οι εξισώσεις Lagrange, Newton και Hamilton. Επιπλέον, μπορεί να χρησιμοποιηθεί και η εξίσωση Schrödinger, αν μετασχηματιστεί καταλλήλως και έρθει σε αποσυζευγμένη μορφή [33].

# 2.5 Μέθοδοι Ολοκλήρωσης

Στην υπολογιστική υλοποίηση της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής, σημαντικό ρόλο παίζει ο τρόπος ολοκλήρωσης των διαφορικών εξισώσεων, προκειμένου να προκύψουν από αυτές τα επιθυμητά αποτελέσματα και πιο συγκεκριμένα οι τροχιές που ακολουθούν τα άτομα κατά τη διάρκεια της κοπής. Ο υπολογισμός μιας τροχιάς απαιτεί αριθμητική ολοκλήρωση των διαφορικών εξισώσεων κίνησης από το αρχικό στάδιο, το οποίο για την περίπτωση της κοπής είναι το στάδιο όπου το κοπτικό εργαλείο πλησιάζει το τεμάχιο αλλά δεν έχει ακόμη έρθει σε επαφή με αυτό, μέχρι κάποιο τελικό στάδιο, το οποίο μπορεί να είναι αφότου ένα συγκεκριμένο ποσοστό υλικού έχει αφαιρεθεί από το τεμάχιο.

Από την αριθμητική ανάλυση είναι διαθέσιμες πολλές μέθοδοι ολοκλήρωσης διαφορικών εξισώσεων, η πλειοψηφία των οποίων όμως απορρίπτεται για χρήση στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής. Ο λόγος είναι ότι απαιτούν περισσότερους από έναν υπολογισμούς των δυνάμεων αλληλεπίδρασης σε κάθε χρονική επανάληψη. Εφόσον ο υπολογισμός δυνάμεων συνιστά το υπολογιστικώς ακριβότερο τμήμα του αλγορίθμου, οι μέθοδοι αυτές δεν είναι αποδοτικές. Θα ήταν αποδεκτές, εάν η επιπρόσθετη ακρίβεια την οποία προσφέρουν επέτρεπε την αύξηση του χρονικού βήματος ολοκλήρωσης Δt. Όμως το βήμα ολοκλήρωσης είναι άνω φραγμένο, λόγω της ανάγκης ακριβούς υπολογισμού στην περιοχή του εξαιρετικώς απότομου απωστικού τμήματος του δυναμικού στις κοντινές αποστάσεις. Κατά συνέπεια, μέθοδοι όπως οι Runge-Kutta δεν δύνανται να προσφέρουν κάποιο πλεονέκτημα μείωσης των επαναλήψεων. Το ίδιο ισχύει και για προσαρμοστικές μεθόδους που μεταβάλλουν δυναμικώς το βήμα Δt, προκειμένου να διατηρήσουν κάποια προκαθορισμένη ακρίβεια. Το σύστημα που θέλουμε να μελετήσουμε εξελίσσεται ραγδαία, καθώς τα άτομα συνεχώς αλλάζουν θέση. Αυτό σημαίνει ότι ο υπολογισμός με απόλυτη ακρίβεια των τροχιών που ακολουθούν όλα τα άτομα δεν είναι εφικτό να πραγματοποιηθεί, καθώς το σύστημα είναι χαοτικό. Μία απειροστή διαφορά στις αρχικές συνθήκες που εφαρμόζουμε στο σύστημα, μπορεί να επιφέρει, μετά από συγκεκριμένο χρόνο, άπειρη απόσταση μεταξύ τροχιών, οι οποίες αρχικά έτειναν να συμπέσουν.

Επομένως, στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής δεν ενδείκνυται η χρήση αρκετών μεθόδων αριθμητικής ολοκλήρωσης. Σύμφωνα με τη διεθνή βιβλιογραφία, στις προσομοιώσεις MD, συνήθως χρησιμοποιείται μία από τις παρακάτω μεθόδους [33]:

- Μέθοδος Βατραχοδρασκελισμών (Leapfrog Type Method)
- Μέθοδος Verlet
- Μέθοδος Πρόβλεψης Διόρθωσης

### 2.5.1 Μέθοδος Βατραχοδρασκελισμών (Leapfrog-Type Method)

Η μέθοδος αυτή βασίζεται στο ανάπτυγμα Taylor της θέσης x(t) συναρτήσει του χρόνου t, το οποίο φαίνεται στη συνέχεια:

$$x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + \frac{n^2}{2}\ddot{x}(t) + O(h^3)$$
(2.13)

$$x(t-h) = x(t) - h\dot{x}(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{x}(t) + O(h^3)$$
(2.14)

Όπου h=Δt είναι το χρονικό βήμα. Στη μέθοδο αυτή, το ανάπτυγμα Taylor μπορεί να γίνει ως εξής:

$$x(t+h) = x(t) + h\left(\dot{x}(t) + \frac{h}{2}\ddot{x}(t)\right) + O(h^{3}) = x(t) + h\dot{x}(t + \frac{h}{2})$$
(2.15)

$$x(t-h) = x(t) - h\left(\dot{x}(t) - \frac{h}{2}\ddot{x}(t)\right) + O(h^3) = x(t) - h\dot{x}(t - \frac{h}{2})$$
(2.16)

Αφαιρώντας τις δύο τελευταίες εξισώσεις, έχουμε:

$$\dot{x}\left(t+\frac{h}{2}\right) = \dot{x}\left(t-\frac{h}{2}\right) + h\ddot{x}(t) \tag{2.17}$$

$$\dot{x}(t+h) = \dot{x}(t) + h\dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right)$$
(2.18)

που αποτελεί το αναδρομικό σχήμα της μεθόδου Leapfrog για τον υπολογισμό των θέσεων και των ταχυτήτων των ατόμων.

Ο όρος 'βατραχοδρασκελισμός' προέρχεται από το γεγονός ότι ο υπολογισμός των θέσεων και των ταχυτήτων γίνεται για διαφορετικές χρονικές στιγμές, όπως φαίνεται και από τις προηγούμενες σχέσεις. Βέβαια κάτι τέτοιο δεν αποτελεί πρόβλημα. Για να υπολογιστεί η ταχύτητα τη χρονική στιγμή *t*, μπορεί να χρησιμοποιηθεί μία από τις παρακάτω σχέσεις:

$$\dot{x}(t) = \dot{x}\left(t - \frac{h}{2}\right) + \frac{h}{2}\ddot{x}(t)$$
(2.19)

$$\dot{x}(t) = \dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) - \frac{h}{2}\ddot{x}(t)$$
(2.20)

Η μέθοδος των βατραχοδρασκελισμών μπορεί να μετασχηματιστεί σε έναν εναλλακτικό, αλγεβρικά ισοδύναμο τρόπο, που επιτρέπει να γίνεται ο υπολογισμός των θέσεων και των ταχυτήτων την ίδια χρονική στιγμή, προκειμένου να αποφεύγεται η αποθήκευση των θέσεων και των ταχυτήτων σε διαφορετικές χρονικές στιγμές και ο μετέπειτα υπολογισμός των ταχυτήτων για τη χρονική στιγμή *t*, από τις τελευταίες εξισώσεις [33]. Για να γίνει αυτό, οι υπολογισμοί χωρίζονται σε τρία μέρη:

 Πριν υπολογιστούν οι τιμές των επιταχύνσεων, γίνεται υπολογισμός των ταχυτήτων για μισό χρονικό βήμα, χρησιμοποιώντας τις παλιές τιμές των επιταχύνσεων, με τη σχέση:

$$\dot{x}\left(t+\frac{h}{2}\right) = \dot{x}(t) + \frac{h}{2}\ddot{x}(t)$$
 (2.21)

2. Στη συνέχεια, υπολογίζονται οι συντεταγμένες για ένα ολόκληρο χρονικό βήμα, χρησιμοποιώντας τις ενδιάμεσες τιμές των ταχυτήτων που υπολογίστηκαν από την προηγούμενη σχέση:
$$\dot{x}(t+h) = x(t) + h\dot{x}\left(t+\frac{h}{2}\right)$$
 (2.22)

3. Έπειτα, χρησιμοποιούνται οι καινούριες συντεταγμένες για να υπολογιστούν οι καινούριες τιμές των επιταχύνσεων και στη συνέχεια υπολογίζονται οι ταχύτητες προσθέτοντας και το άλλο μισό χρονικό βήμα, σύμφωνα με τη σχέση:

$$\dot{x}(t+h) = \dot{x}\left(t+\frac{h}{2}\right) + \frac{h}{2}\ddot{x}(t+h)$$
(2.23)

#### 2.5.2 Μέθοδος Verlet

Ο αλγόριθμος ολοκλήρωσης Verlet είναι αλγεβρικά ισοδύναμος με τον αλγόριθμο των βατραχοδρασκελισμών. Επινοήθηκε από τον Loup Verlet και βασίζεται και αυτός στο ανάπτυγμα κατά Taylor:

$$x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + \frac{\hbar^2}{2}\ddot{x}(t) + O(h^3)$$
(2.24)

$$x(t-h) = x(t) - h\dot{x}(t) + \frac{\hbar^2}{2}\ddot{x}(t) + O(h^3)$$
(2.25)

Και από πρόσθεση των παραπάνω αναπτυγμάτων προκύπτει:

$$x(t+h) = 2x(t) - x(t-h) + h^2 \ddot{x}(t) + O(h^4)$$
(2.26)

Οι θέσεις για την παρούσα χρονική στιγμή και την προηγούμενή της, δηλαδή οι *x(t)* και *x(t-h)*, είναι γνωστές και επομένως μπορούν να υπολογιστούν και οι επιταχύνσεις των ατόμων, ως συνάρτηση των συντεταγμένων τους. Ακόμη, εάν θέλουμε να υπολογίσουμε τις τιμές της ταχύτητας, παρότι ο υπολογισμός της δεν εμπλέκεται στην επίλυση, χρησιμοποιούμε τη σχέση:

$$\dot{x}(t) = \frac{x(t+h) - (t-h)}{2h} + O(h^2)$$
(2.27)

Στο σημείο αυτό μπορούμε να παρατηρήσουμε δύο χαρακτηριστικά στοιχεία. Το πρώτο είναι ότι για τον υπολογισμό της μετατόπισης από τη δύναμη δεν απαιτείται ο υπολογισμός κάποιας ενδιάμεσης μεταβλητής. Αυτό είναι ένα πολύ σημαντικό πλεονέκτημα, καθώς με αυτό τον τρόπο επιτυγχάνεται μεγάλη ακρίβεια, αποκοπή όρων και συσσώρευση αριθμητικών σφαλμάτων που εξαλείφονται. Το δεύτερο χαρακτηριστικό που μπορούμε να διακρίνουμε και το οποίο είναι άμεση συνέπεια από το πρώτο, είναι ότι με τη μέθοδο αυτή επιτυγχάνεται ακρίβεια **Ο(Δt4)** [33].

Στις δύο προαναφερθείσες μεθόδους μπορούμε να κάνουμε κάποιες παρατηρήσεις. Και οι δύο δίνουν ακρίβεια στον υπολογισμό των συντεταγμένων μέχρι και την τρίτη δύναμη του Δt. Στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής μάς ενδιαφέρει συγκεκριμένες ποσότητες, όπως η ενέργεια, να διατηρούνται. Κάτι τέτοιο βέβαια είναι αδύνατο να επιτευχθεί απολύτως, λόγω των διαφόρων αριθμητικών σφαλμάτων που εμφανίζονται, και προτιμώνται γενικότερα μέθοδοι οι οποίες να δίνουν καλή ακρίβεια στη διατήρηση της ενέργειας. Οι μέθοδοι των βατραχοδρασκελισμών και του Verlet, που είναι χαμηλής τάξης μέθοδοι, δίνουν καλύτερα και ακριβέστερα αποτελέσματα ως προς τη διατήρηση της ενέργειας σε σχέση με μεθόδους υψηλότερης τάξης. Επιπλέον, απαιτούν ελάχιστη μνήμη και γαρακτηρίζονται από υψηλότερη ευστάθεια σε σχέση με την απλή ολοκλήρωση κατά Euler.

## 2.5.3 Μέθοδοι Πρόβλεψης – Διόρθωσης

Οι μέθοδοι πρόβλεψης – διόρθωσης (predictor – corrector (PC) methods) είναι μέθοδοι πολλαπλών τιμών, με την έννοια ότι χρησιμοποιούν πλήθος πληροφοριών που υπολογίζονται σε ένα ή περισσότερα προηγούμενα χρονικά βήματα. Ουσιαστικά, προηγούνται στην αριθμητική ολοκλήρωση, υπολογίζοντας αρχικά κάποια εκτίμηση του μεγέθους και βελτιώνοντας την τιμή αυτή, καθώς προχωράει ο υπολογισμός. Οι δύο πιο δημοφιλείς μορφές της μεθόδου διακρίνονται από το εάν χρησιμοποιούνται οι τιμές της επιτάχυνσης προηγούμενων χρονικών βημάτων (μέθοδος Adams πολλαπλών βημάτων), ή εάν χρησιμοποιούνται παράγωγοι της επιτάχυνσης της παρούσας χρονικής στιγμής (μέθοδος Nordsieck). Σε περιπτώσεις όπου η ακρίβεια είναι συγκεκριμένη ως προς δεδομένη ισχύ του βήματος ολοκλήρωσης  $\Delta t$ , οι δύο παραπάνω μορφές αποδεικνύεται ότι είναι αλγεβρικά ισοδύναμες. Οι μέθοδοι είναι υψηλότερης τάξης από τη μέθοδο των βατραχοδρασκελισμών, αλλά συνεπάγονται συγκεκριμένη ποσότητα από επιπλέον υπολογισμούς και απαιτούν μεγαλύτερη μνήμη για τις επιπλέον μεταβλητές που σχετίζονται με κάθε άτομο. Εδώ θα αναφερθούμε μόνο στις μεθόδους πολλαπλών βημάτων, όπως είναι η μέθοδος Adams, καθώς οι παράγωγοι της επιτάχυνσης απουσιάζουν, εφ' όσον δεν συμμετέχουν με φυσικό τρόπο στη δυναμική του Newton [33].

Στη μέθοδο Adams, στόχος είναι η επίλυση της δευτεροβάθμιας διαφορικής εξίσωσης:

$$\ddot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) \tag{2.28}$$

Στη φάση πρόβλεψης (predictor step) για τη χρονική στιγμή t + h γίνεται μια προεκβολή των τιμών που υπολογίστηκαν σε προηγούμενα χρονικά βήματα t, t - h, ..., με τον τύπο Adams - Bashforth:

$$P(x): x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + h^2 \sum_{l=1}^{k-1} (a_l f(t+(1-l)h))$$
(2.29)

Για δεδομένη τιμή του k, ο παραπάνω τύπος παρέχει ακριβή αποτελέσματα για όλα τα πολυώνυμα:  $\mathbf{x}(t) = t^q$ , για κάθε  $q \leq k$ . Στη γενική περίπτωση το τοπικό σφάλμα είναι  $\mathcal{O}(h^{k+1})$ . Για να ισχύει η απαίτηση αυτή, πρέπει οι συντελεστές  $a_i$  να ικανοποιούν το ακόλουθο σύστημα των k-1 εξισώσεων:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1-i)^{q} a_{i} = \frac{1}{(q+1)(q+2)} , q=0,...,k-2$$
(2.30)

Το παραπάνω αλλά και τα επακόλουθα συστήματα εξισώσεων εύκολα επιλύονται και δίνουν ρητές συναρτήσεις για τα *α*<sub>i</sub>. Αντίστοιχη συνάρτηση υπάρχει και για την ταχύτητα:

$$P(\dot{x}):h\dot{x}(t+h) = x(t+h) - x(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} (a_i^{i} f(t+(1-i)h))$$
(2.31)

με συντελεστές που να ικανοποιούν τις εξισώσεις:

$$\sum_{l=1}^{k-1} (1-l)^{l_l} u_l' = \frac{1}{(l_l+2)}$$
(2.32)

Αφού λοιπόν υπολογιστούν οι προβλέψεις για τη θέση και την ταχύτητα της χρονικής στιγμής t + h, στη συνέχεια χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό της τιμής του f(t + h). Οι διορθώσεις γίνονται με τη βοήθεια του τύπου Adams – Moulton:

$$\mathcal{C}(x): x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + h^2 \sum_{l=1}^{k-1} (\beta_l f(t+(2-l)h))$$
(2.33)

$$C(\dot{x}):h\dot{x}(t+h) = x(t+h) - x(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} (\beta_i' f(t+(2-i)h))$$
 2.34)

με τους συντελεστές να προκύπτουν από το ακόλουθο σύστημα:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (2-i)^{ij} \beta_i = \frac{1}{(q+1)(q+2)}$$
(2.35)

$$\sum_{l=1}^{k-1} (2-l)^{r_l} \beta_l' = \frac{1}{(q+2)}$$
(2.36)

Αυτό που μπορούμε να παρατηρήσουμε είναι ότι οι προβλέψεις δεν εμφανίζονται στις εξισώσεις διόρθωσης, πέρα από τη χρήση τους για τον υπολογισμό του *f*. Η μέθοδος πρόβλεψης διόρθωσης ουσιαστικά αποτελεί μία γενίκευση της μεθόδου ολοκλήρωσης κατά Gauss. Οι συντελεστές πινακοποιούνται και αντίστοιχες σχέσεις ορίζονται και για την επίλυση συστημάτων πρώτης τάξης.

Ένα παράδειγμα αποτελεσμάτων για τους συντελεστές (ai) που προκύπτουν από την επίλυση των εξισώσεων αυτών για k = 4 και για k = 5 παρουσιάζονται στον επόμενο πίνακα (Πίνακας 2.2):

	3	2	1	$k=4(\times1/24)$
	3	-10	19	P(x):
	7	-22	27	$P(\dot{x})$ :
	-1	10	3	C(x):
	-1	6	7	$C(\dot{x})$ :
4	3	2	1	$k = 5 \ (\times \ 1/360)$
-38	159	-264	323	P(x):
-97	396	-621	502	$P(\dot{x})$ :
7	-36	171	38	C(x):
8	-39	114	97	$C(\dot{x})$ :

Πίνακας 2.2: Παράμετροι πρόβλεψης – διόρθωσης για δευτεροβάθμιες εζισώσεις [33].

Τα αποτελέσματα αυτά μπορούν εύκολα να ενσωματωθούν στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής, με το πρώτο στάδιο της διαδικασίας να περιλαμβάνει την εφαρμογή του βήματος πρόβλεψης σε όλες τις μεταβλητές (θέσεις και ταχύτητες ατόμων), να ακολουθεί ο υπολογισμός των δυνάμεων βάση των υπολογισθέντων τιμών και στη συνέχεια το βήμα της διόρθωσης.

### 2.6 Συναρτήσεις Επανακαθορισμού Ταχυτήτων

Κατά τη διάρκεια που η πλαστική παραμόρφωση στη ζώνη διάτμησης και η τριβή στη διεπιφάνεια αποβλήτου - εργαλείου μετατρέπονται σε θερμότητα, είναι αναγκαίο η θερμότητα αυτή να αποβάλλεται διαρκώς. Στις πραγματικές κατεργασίες, μεγάλο μέρος της θερμότητας απομακρύνεται με το απόβλητο και το λιπαντικό, καθώς και από το εργαλείο και το κατεργαζόμενο υλικό. Η πιο αποτελεσματική μέθοδος προσομοίωσης αποβολής της παραγόμενης κατά την κατεργασία θερμότητας είναι η χρήση των συναρτήσεων ορισμού θερμότητας. Οι μέθοδοι αυτές προτάθηκαν από τους Agrawal et al [49] και Baskes et al [50]. Η διαδικασία αυτή επιτρέπει τις στατιστικές διακυμάνσεις γύρω από μια θερμοκρασία ισορροπίας.

Εάν θέλουμε να εφαρμόσουμε τη μέθοδο αυτή, θα πρέπει να χωρίσουμε τα N άτομα του πλέγματος σε τρεις ζώνες. Η πρωτεύουσα ζώνη (P- ζώνη) περιέχει τα νευτώνεια άτομα που μας ενδιαφέρουν. Μια δευτερεύουσα ζώνη (Q- ζώνη) συνίσταται από όλα τα περιφερειακά άτομα του κρυστάλλου. Τα πιο εξωτερικά άτομα είναι στο όριο ή στη B- ζώνη. Στους υπολογισμούς Μοριακής Δυναμικής, οι κινήσεις των ατόμων της P- ζώνης προσδιορίζονται μόνο από τις δυνάμεις που παράγονται από την αλληλεπίδραση του δυναμικού και της διαδικασίας κοπής. Οι κινήσεις των ατόμων της Q- ζώνης τροποποιούνται λόγω του επανακαθορισμού ταχυτήτων ή των συναρτήσεων θερμοποίησης, που αφορούν κάθε άτομο της ζώνης.[2]

•	•	•	•	•	•	•	•			
٠	•	•	•	۰	•	•	•	•	•	•
٠	•	•	•	۰	۰	•	۰	•	۰	•
٠	۰	•	0	0	0	0	0	0	۰	•
٠	•	0	0	о	0	0	0	0	۰	•
•	•	0	0	0	0	0	0	0	•	•
٠	•	•	0	0	0	0	0	0	•	•
٠	۰	•	0	0	0	0	0	0	۰	•
•	•	•	0	0	0	0	0	0	•	•
٠	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•
٠	۰	۰	•	•	•	•	۰	•	۰	•
•	•	•	•	•	•	•	•	•		

Εικόνα 2.5: Δισδιάστατη αναπαράσταση των διαφόρων ζωνών ενός τεμαχίου. Οι άδειοι κύκλοι, είναι στην πρωταρχική ζώνη P, όπου η κίνηση ελέγχεται μόνο με επίλυση των κλασσικών εξισώσεων κίνησης. Οι σκιασμένοι γκρι κύκλοι, είναι στη ζώνη Q, όπου οι ταχύτητες ορίζονται ζανά μετά από χρονικό διάστημα Δt. Οι γεμάτοι κύκλοι, είναι στο όριο της ζώνης B. Είναι στάσιμοι και εξυπηρετούν την ίδια λειτουργία με το σφιγκτήρα του εργαλείου κατεργασίας. Διατηρούν το τεμάχιο σταθερό κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής ,λείανσης ή εισχώρησης. [2]

Η συνάρτηση θερμοποίησης για τη x συνιστώσα της ταχύτητας του ι-οστού ατόμου του πλέγματος δίνεται από τη σχέση:

$$V_{x_i}^n = (1 - w)^{1/2} V_{x_i}^u + w^{\frac{1}{2}} V_{x_i}^r(\xi, T)$$
(2.37)

Όπου  $V_{x_i}^n$  είναι η νέα συνιστώσα της ταχύτητας για το άτομο *i* τη χρονική στιγμή  $t_n$  και  $V_{x_i}^{\omega}$  είναι η παλιά του ταχύτητα. Η  $V_{x_i}^{\Gamma}(\boldsymbol{\xi},T)$  είναι η τυχαία ταχύτητα που επιλέγεται από την κατανομή Boltzmann σε θερμοκρασία *T* από ένα τυχαίο πλήθος *x*. Η *w* είναι μια παράμετρος που ελέγχει τη δύναμη του επανακαθορισμού.

Ανάλογες εξισώσεις χρησιμοποιούνται και για τις y και z συνιστώσες της ταχύτητας. Αυτή η διαδικασία επανακαθορισμού εφαρμόζεται σε κάθε άτομο της Q- ζώνης, σε ίσα δομημένα χρονικά διαστήματα  $\Delta t$ . Η χρήση της παραπάνω εξίσωσης (2.37) προσομοιώνει με ακρίβεια τα φαινόμενα μεταφοράς ενέργειας του υλικού και επιτρέπει τον ακριβή υπολογισμό της θερμοκρασιακής κλίσης κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής. [33,51]

#### 2.6.1 Συνάρτηση Επιθυμητής Θερμοκρασίας

Η θερμοκρασία του συστήματος εκφράζεται από το μέσο τετράγωνο των ταχυτήτων των Ν ατόμων και δίνεται από:

$$T = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{l=1}^N \nu_l^2 = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{l=1, j \neq l}^N (\nu_x^2 + \nu_y^2 + \nu_z^2)$$
(2.38)

Για  $|\mathbf{T} - \mathbf{T}_d| \leq 3$  η συνθήκη ικανοποιείται, αλλιώς απαιτείται ανάθεση νέων ταχυτήτων. Τ<sub>d</sub> είναι η επιθυμητή θερμοκρασία. Εάν η απόλυτη διαφορά μεταξύ της μετρούμενης θερμοκρασίας και της επιθυμητής δεν υπερβαίνει τους 3 K τότε η ακρίβεια θεωρείται ικανοποιητική, οπότε η προσομοίωση προχωρά. Σε αντίθετη περίπτωση ανατίθενται νέες ταχύτητες μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο. [19,33,51]

### 2.6.2 Επαναπροσδιορισμός ταχυτήτων

Στις περιπτώσεις που είναι αναγκαία η ανάθεση νέων ταχυτήτων, δουλεύουμε με βάση τις παρακάτω σχέσεις για την επίλυση των εξισώσεων κίνησης με τον αλγόριθμο Verlet.

$$\boldsymbol{\nu}_{\mathrm{I}} = \sqrt{\frac{T_{\mathrm{cl}}}{t}} \boldsymbol{\nu}_{\mathrm{I}} \qquad i = 1, \dots N \tag{2.39}$$

$$\begin{array}{l}
\nu_{ix}^{Ne} \\
\nu_{iy} \\
\nu_{iz}_{i} \\
\nu_{iz}_{i} \\
\end{array} = \sqrt{\frac{T_{d}}{T}} \frac{\nu_{ix}}{\nu_{iy}} \\
i = 1, \dots N \\
(2.40)
\end{array}$$

Σε αυτό το στάδιο αξίζει να σημειώσουμε ότι μερικοί θεωρητικοί δε λαμβάνουν υπόψη την προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής ως μια πειραματική τεχνική διότι δεν εκτελούνται καθόλου μετρήσεις σε πραγματικά συστήματα, δηλαδή οι προσομοιώσεις της Μοριακής Δυναμικής είναι το αποτέλεσμα καθαρών υπολογισμών. Οι πειραματιστές θεωρούν ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, όπως τα πειράματα, χρησιμοποιούνται για να ελέγξουν τις θεωρίες και υπόκεινται σε προβλήματα δυσκολιών αναπαραγωγής και στατιστικών σφαλμάτων. [19,33,51]

## 2.7 Σύνοψη της μεθόδου Μοριακής Δυναμικής (MD) και εφαρμογή της στις κατεργασίες νανοκλίμακας

Σύμφωνα με τα παραπάνω, συμπεραίνουμε ότι το βασικό ζήτημα στην προσομοίωση με χρήση της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής είναι η αριθμητική ολοκλήρωση των κλασικών εξισώσεων κίνησης του Newton, για ένα σύστημα αλληλοεπιδρώντων ατόμων, για μία συγκεκριμένη χρονική περίοδο. Καθ' όλη τη διάρκεια της χρονικής αυτής περιόδου γίνεται υπολογισμός των τροχιών και των ταχυτήτων των ατόμων.

Μια σχηματική σύνοψη της μεθόδου παρουσιάζεται στην Εικόνα 2.6.



Εικόνα 2.6: Σύνοψη της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής [19].

Σχηματικές αποδόσεις της προσομοίωσης κατεργασιών σε νανοκλίμακα με χρήση της μεθόδου MD φαίνονται στην Εικόνα 2.7 (κοπή σε νανοκλίμακα) και στην Εικόνα 2.8 (λείανση σε νανοκλίμακα) που ακολουθούν. Το τεμάχιο, όπως επίσης και το κοπτικό εργαλείο, αντιπροσωπεύεται από ένα σύνολο N\*M ατόμων, τα οποία διατάσσονται σε μία χαρακτηριστική δομή του κρυσταλλικού συστήματος του υλικού, το οποίο μελετάται στη συγκεκριμένη περίπτωση. Συνεπώς, εάν πρόκειται για χαλκό ή αλουμίνιο, πρέπει να γρησιμοποιηθεί κρυσταλλική δομή κυβικού εδροκεντρωμένου συστήματος (fcc), ενώ αν πρόκειται για σίδηρο ή μολυβδένιο, είναι απαραίτητο να χρησιμοποιηθεί κρυσταλλική δομή κυβικού χωροκεντρωμένου συστήματος (bcc). Ένα κοπτικό εργαλείο από διαμάντι θα πρέπει να έχει τη χαρακτηριστική τετραεδρική του γεωμετρία. Στο σημείο αυτό αξίζει να σημειωθεί ότι ενώ αρκετοί είναι οι ερευνητές που χρησιμοποιούν κοπτικό εργαλείο από διαμάντι για την προσομοίωση, στην πραγματικότητα δε χρησιμοποιούν το δυναμικό που περιγράφει το διαμάντι, αλλά δυναμικά που αφορούν αόριστα σκληρά υλικά, όπως είναι το διαμάντι. Όπως διαπιστώσαμε σε προηγούμενες παραγράφους, τα άτομα στο τεμάχιο ή και στο εργαλείο διακρίνονται σε Νευτώνεια άτομα, άτομα Θερμοστάτες και Συνοριακά άτομα. Τα Συνοριακά άτομα λειτουργούν ως σταθερές βάσεις για το εργαλείο και το τεμάχιο και θεωρείται ότι παραμένουν ανεπηρέαστα από τη διαδικασία της κοπής, καθώς είναι μακριά από τη διεπιφάνεια εργαλείου- τεμαχίου. Επομένως, οι θέσεις των ατόμων αυτών παραμένουν σταθερές και ίδιες καθ' όλη τη διάρκεια της κοπής. Το εργαλείο κινείται προς το τεμάχιο με κάποιο χρονικό βήμα που είναι μικρότερο από την περίοδο κίνησης των ατόμων σε κάποια συγκεκριμένη και καθορισμένη ταχύτητα κοπής. Σε κάθε χρονικό βήμα, γίνεται υπολογισμός των θέσεων των ατόμων χρησιμοποιώντας κάποια συγκεκριμένη μέθοδο ολοκλήρωσης από αυτές που αναφέρθηκαν, μέσω της οποίας γίνεται αριθμητική ολοκλήρωση των κλασσικών εξισώσεων κίνησης του Newton για το N\*M σύστημα ατόμων. Η κίνηση του εργαλείου προς το τεμάχιο μπορεί να επιτευχθεί μετακινώντας τα Συνοριακά άτομα του εργαλείου. Οι διατομικές δυνάμεις που αναπτύσσονται ανάμεσα στα Συνοριακά άτομα και τα Νευτώνεια άτομα του εργαλείου κινούν ολόκληρο το εργαλείο προς το τεμάχιο, επιτρέποντας έτσι τη διαδικασία της κοπής. [2,49,33]



Εικόνα 2.7: Σχηματική παρουσίαση προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής κοπής νανοκλίμακας [19]



**Εικόνα 2.8**: Σχηματική παράσταση της επιφάνειας προσομοίωσης με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής [51].

Στον Πίνακα 2.3 φαίνονται συνήθεις τιμές παραμέτρων που χρησιμοποιούνται για προσομοίωση με χρήση της Μοριακής Δυναμικής.

Configuration	Quasi three-dimensional or plane strain cutting
Type of machining operation	Different machining problems outlined
Work materials	Cu, Al, Fe
Tool material	Infinitely hard tool material
Potential energy functions	Morse potential
Cutting direction	Cube direction in most cases; appropriate crystallographic direction of the tool with respect to workpiece in specific cases
Workpiece orientation	Appropriate crystallographic direction
Rake angle	Variable (positive to negative)
Edge radius	Variable
Clearance angle	6°
Cutting speed	500 m/s
Cut depth	Nanometre range
Cut width	One to several atomic layers (not including thermoset and boundary atoms)
Number of atoms:	
Work material	Several thousand atoms
Tool material	A few hundred atoms
Bulk temperature	293 K
Computational time step	10-15fs

Πίνακας 2.3: Τυπικές τιμές παραμέτρων που χρησιμοποιούνται στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής για προσομοίωση κατεργασιών [2].

# 2.7.1 Μειονεκτήματα της χρήσης της Μοριακής Δυναμικής (MD) στις κατεργασίες νανοκλίμακας

Στις περισσότερες μελέτες που έχουν διεξαχθεί έως τώρα, το εργαλείο θεωρείται γενικά άπειρης σκληρότητας και ως εκ τούτου οι αλληλεπιδράσεις εργαλείου-τεμαχίου, η φθορά και η παραμόρφωση του εργαλείου αμελούνται. Αυτός ο περιορισμός απλουστεύεται, αφού οι παράμετροι διεπιφάνειας μπορούν να αναπτυχθούν για τη συνάρτηση δυναμικού.

Η προσομοίωση MD εφαρμόζεται κυρίως σε ψευδο-δισδιάστατες (επίπεδες) κατεργασίες. Μια ψευδο-τρισδιάστατη κατεργασία μπορεί να διεξαχθεί ακόμα και αν απαιτεί πολύ περισσότερο χρόνο επεξεργασίας αφού είναι πιο αντιπροσωπευτική της πραγματικής διαδικασίας.

Η προσομοίωση εφαρμόζεται κυρίως στη νανοκλίμακα, δηλαδή σε επίπεδο νανόμετρου και όχι στην ευρεία περιοχή κατεργασιών. Αυτό φυσικά δεν είναι περιορισμός όταν μελετούμε τη μηχανική της εκάστοτε νανοκατεργασίας. Ποσοτικά μπορούμε να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα της προσομοίωσης με πειραματικά αποτελέσματα.

Το πλήθος των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη στο κατεργαζόμενο υλικό είναι σχετικά μικρό (κυμαίνεται από μερικές εκατοντάδες ως μερικές χιλιάδες άτομα) και μερικές εκατοντάδες άτομα στο εργαλείο. Περίπου 1 × 106 άτομα είναι το ανώτατο όριο για το κατεργαζόμενο υλικό. Ο περιορισμός αυτός υπάρχει λόγω του υπολογιστικού χρόνου που απαιτείται, αν η ταχύτητα κοπής μειωθεί κοντά στη συμβατική, περίπου 2 m/s. Όμως, είναι εφικτό να προσομοιώσουμε μεγαλύτερο πλήθος, συνδυάζοντας τη Μοριακή Δυναμική με στατιστικές μηχανικές προσεγγίσεις, δηλαδή με μοντελοποίηση Monte Carlo.

Ο χρόνος προσομοίωσης είναι μεγάλος (μπορεί να φτάσει αρκετές εκατοντάδες ώρες για κάθε προσομοίωση). Αυτός είναι και ένας από τους πιο σημαντικούς λόγους για τους οποίους οι ταχύτητες κοπής που εφαρμόζονται είναι εξαιρετικά υψηλές (400m/s). Είναι αναμφίβολο ότι οι ταχύτητες κοπής που χρησιμοποιούνται στις προσομοιώσεις αυτές είναι κάποιες φορές μη ρεαλιστικές Ευτυχώς, με τη διαθεσιμότητα απομονωμένων και ταχέων σταθμών εργασίας χαμηλού κόστους (με χρήση παράλληλης επεξεργασίας, η ταχύτητα αυτή μπορεί να μειωθεί αισθητά και να φτάσει σε συμβατικές ταχύτητες κατεργασίας. Επίσης, βελτιστοποιώντας το μέγεθος του βήματος ολοκλήρωσης, είναι πιθανό να μεταβληθεί η ταχύτητα κατά 2-5 φορές.

Οι προσομοιώσεις MD εφαρμόζονται μόνο σε απλά συστήματα, όπως απλά στοιχεία για το υλικό κατεργασίας και τα εργαλείο. Υπάρχει όμως ένα σημαντικό πλήθος εφαρμογών νανοκατεργασιών μη σιδηρούχων υλικών, όπως ο χαλκός, το αλουμίνιο και τα ημιαγώγιμα υλικά, όπως το πυρίτιο και το γερμάνιο με ένα εργαλείο μονοκρυσταλλικού διαμαντιού. Παρομοίως, η φθορά του διαμαντιού στην κατεργασία του σιδήρου μπορεί να προσομοιωθεί. Επίσης, είναι εφικτή η πραγματοποίηση προσομοιώσεων MD σε κατεργαζόμενα υλικά που είναι κράματα, οι συνιστώσες των οποίων είναι το ίδιο διαλυτές τόσο σε υγρή όσο και σε στερεή κατάσταση, όπως τα κράματα νικελίου-χαλκού. Η κατανομή των ατόμων στο κατεργαζόμενο υλικό είναι ανάλογη του επί τοις εκατό ατομικού βάρους των αντίστοιχων στοιχείων. Κατά συνέπεια, η προσομοίωση MD εφαρμόζεται σε υλικά που δεν είναι καθαρά, καθώς περιέχουν ελαττώματα, όπως ρωγμές, όρια κόκκων, σωματίδια δεύτερης φάσης κ.λπ. Η πυκνότητα, το μέγεθος και το σχήμα των ελαττωμάτων μπορούν να ληφθούν υπόψη, με την ενσωμάτωση στατιστικών μηχανικών προσεγγίσεων, όπως η προσομοίωση Monte Carlo.[1,3,33,34,38]

# 2.7.2 Πλεονεκτήματα της χρήσης της Μοριακής Δυναμικής (MD) στις κατεργασίες νανοκλίμακας

Στο πρώτο κεφάλαιο έγινε μια εισαγωγή στη μέθοδο της MD και αναφέρθηκαν κάποια πλεονεκτήματά της, κυρίως σε μια αντιδιαστολή με τη μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων. Το σημαντικότερο από αυτά είναι το γεγονός ότι στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής οι κόμβοι και αποστάσεις μεταξύ τους δεν επιλέγονται αυθαίρετα,

αλλά με βάση τις πιο θεμελιώδεις μονάδες του υλικού, δηλαδή τα κέντρα των ατόμων επιλέγονται ως κόμβοι και οι διατομικές αποστάσεις ως απόσταση μεταξύ των κόμβων. Κατά συνέπεια, η δομή του πλέγματος είναι και το πλέγμα της Μοριακής Δυναμικής.

Η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής μπορεί να χρησιμοποιηθεί με πολύ αποδοτικό τρόπο για την προσομοίωση του μηχανισμού κοπής στη νανοκλίμακα. Αυτό συμβαίνει κυρίως διότι, από τη στιγμή που η ανάλυση επεκτείνεται στις θεμελιώδεις μονάδες του υλικού, μπορούμε από τα δεδομένα της προσομοίωσης να κατανοήσουμε τα θεωρητικά όρια του μηχανισμού της κοπής.

Τα βασικά πλεονεκτήματα της μεθόδου της MD (όπως και κάθε μοριακής προσομοίωσης) γίνονται εύκολα αντιληπτά με σύγκριση της MD με αντίστοιχες πειραματικές κατεργασίες. Στην περίπτωση των νανοκατεργασιών, η πειραματική εργασία απαιτεί ακριβά εργαλεία διαμαντιού μονοκρυστάλλου, προσεκτικό χαρακτηρισμό του εργαλείου και σημαντικό έλεγχο με μηχανή υπερακριβείας, τα οποία απαιτούν πολύ χρόνο και άφθονο χρήμα. Οι τεχνικές της Μοριακής Δυναμικής δεν απαιτούν τη χρήση ακριβού εξοπλισμού, όπως είναι για παράδειγμα ένας τόρνος λίαν υψηλής ακριβείας, κοπτικά εργαλεία από διαμάντι ή πολύπλοκος πειραματικός εξοπλισμός για την απόκτηση των πειραματικών δεδομένων. Έτσι, για παράδειγμα, είναι δυνατή η συστηματική μελέτη της επίδρασης του προσανατολισμού των κρυστάλλων του κοπτικού εργαλείου και του τεμαχίου στο μηχανισμό σχηματισμού του αποβλήτου, χωρίς το απαγορευτικό κόστος των υλικών και το μεγάλο χρόνο προετοιμασίας των δειγμάτων κατά την αντίστοιχη πειραματική διαδικασία.

Η επίδραση διαφόρων παραμέτρων, όπως η ακτίνα καμπυλότητας, γωνία αποβλήτου και το βάθος κοπής μπορούν να μεταβάλλονται αποτελεσματικά και χωρίς ιδιαίτερη δυσκολία στην προσομοίωση MD. Είναι εύκολο να μεταβάλουμε τις ιδιότητες του κατεργαζόμενου υλικού και του κοπτικού εργαλείου στις προσομοιώσεις. Για να μελετήσουμε την επίδραση της σχετικής σκληρότητας του εργαλείου ως προς το κατεργαζόμενο υλικό, οι τιμές της σκληρότητας, μπορούν απλά να προσδιοριστούν μέσω της προσομοίωσης, αντί να βρούμε εργαλεία της συγκεκριμένης σκληρότητας, το οποίο μπορεί να είναι από δύσκολο έως αδύνατο σε ορισμένες περιπτώσεις.

Σε αντίθεση με τη γενική αντίληψη ότι η Μοριακή Δυναμική μπορεί να εφαρμοσθεί μόνο σε ιδανικά υλικά και όχι σε πραγματικά, φαίνεται ότι ελαττωματικές δομές, όπως τα όρια των κόκκων, οι ρωγμές, τα σωματίδια δεύτερης φάσης κλπ., μπορούν να μοντελοποιηθούν με ακρίβεια, μολονότι σε περιορισμένη κλίμακα. Επίσης, οι αλληλεπιδράσεις εργαλείου- τεμαχίου που δε μπορούν να μελετηθούν βάσει της μεθόδου των Πεπερασμένων Στοιχείων, μπορούν να μελετηθούν με χρήση της Μοριακής Δυναμικής. Κατά συνέπεια, η φθορά, η πλαστική παραμόρφωση του εργαλείου παραμόρφωση του υποστρώματος υλικού και η του κατεργασίας, μπορούν να μελετηθούν για απλά συστήματα.

Οι προσομοιώσεις MD προσφέρουν εμφανώς μεγαλύτερη χρονική και χωρική διακριτική ικανότητα στην κατεργασία κοπής, σε σύγκριση με οποιαδήποτε άλλη τεχνική, συμπεριλαμβανομένης της προσέγγισης συνεχούς μέσου. Ως εκ τούτου, τα φυσικά φαινόμενα που δε λαμβάνονται υπόψη στη συνεχή ανάλυση λόγω περιορισμών μεγέθους, μπορούν να ερευνηθούν αποτελεσματικά μέσω των προσομοιώσεων Μοριακής Δυναμικής.[2,19,33,34]

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

# Βιβλιογραφική Ανασκόπηση Εφαρμογών Μοριακής Δυναμικής στις Κατεργασίες Νανοκλίμακας

## 3.1 Εισαγωγή

Το παρόν κεφάλαιο αποτελεί μία ανασκόπηση πολλών διαφορετικών εφαρμογών της προσομοίωσης MD στις κατεργασίες νανοκλίμακας. Αρχικά θα γίνει μια σύντομη αναφορά στις σημαντικότερες μελέτες που έχουν πραγματοποιηθεί μέχρι σήμερα, εξοικειώνοντας τον αναγνώστη με το πνεύμα και τη λογική της εφαρμογής των προσομοιώσεων MD στις νανοκατεργασίες.

Στις ενότητες που ακολουθούν θα πραγματοποιηθεί μία σχετικά ενδελεχής παρουσίαση κάποιων επιλεγμένων μελετών προσομοίωσης νανοκατεργασιών με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής. Αυτή η ανάλυση διαφορετικών εφαρμογών της προσομοίωσης MD στις κατεργασίες νανοκλίμακας αποσκοπεί στην καλύτερη κατανόηση των φαινομένων που διέπουν την κατεργασία, των παραμέτρων και της επίδρασης αυτών στην προσομοίωση (μοριακά δυναμικά, σταθερές υλικών, ταχύτητα κοπής κ.λπ.), καθώς και των διάφορων τρόπων διεξαγωγής των προσομοιώσεων MD, ανάλογα με το είδος της κατεργασίας που επιθυμούμε να μοντελοποιήσουμε. Ωστόσο, βασικός γνώμονας της επιλογής να παρουσιαστούν οι συγκεκριμένες μελέτες είναι η συνάφειά τους με την παρούσα διπλωματική εργασία.

# 3.2 Βασικές Εφαρμογές Προσομοιώσεων MD στις Κατεργασίες Νανοκλίμακας

Όπως αναφέρθηκε στο πρώτο κεφάλαιο, οι Belak et al. [20-23] στο Lawrence Livermore National Laboratories (LLNL) στις Ηνωμένες Πολιτείες διεξήγαν σημαντικές μελέτες στην προσομοίωση κοπής σε νανοκλίμακα για υλικό τεμαχίου χαλκό και κοπτικό εργαλείο από διαμάντι μέσω της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής. Οι Belak et al. [20,21,23] μελέτησαν τη νανοκοπή του χαλκού τόσο στις δύο όσο και στις τρεις διαστάσεις, χρησιμοποιώντας το embedded – atom δυναμικό, για ταχύτητα κοπής 100 m / sec και για διάφορες τιμές γωνίας αποβλήτου και βάθους κοπής. Τα άτομα του άνθρακα στο κοπτικό εργαλείο από διαμάντι παρέμεναν ακίνητα (δηλαδή το υλικό θεωρούνταν εξαιρετικά

σκληρό). Αυτό μπορεί να εξηγηθεί, αν σκεφτούμε ότι η σκληρότητα του χαλκού είναι πολύ μικρή συγκριτικά με τη σκληρότητα του διαμαντιού. Οι Belak et al. [22] επίσης μελέτησαν την κοπή του πυριτίου χρησιμοποιώντας κοπτικό εργαλείο από διαμάντι σε ταχύτητα κοπής 540 m/sec, με το εργαλείο σε αυτή την περίπτωση να μπορεί να παραμορφωθεί και να αλληλεπιδράσει με το τεμάχιο. Βρέθηκε ότι ένα πλήθος ατόμων από το τεμάχιο είχε μεταφερθεί στο εργαλείο [2].

Αυτό οδήγησε άλλους ερευνητές, κυρίως από την Ιαπωνία, να εξερευνήσουν και να επεκτείνουν τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής για χρήση στην προσομοίωση κοπής σε νανοκλίμακα. Δύο ομάδες από την Ιαπωνία, η μία υπό την καθοδήγηση του Ikawa, στο Osaka University, και η άλλη από τον Inamura στο Nagoya Institute of Technology, έχουν δραστηριοποιηθεί ενεργά στο συγκεκριμένο τομέα. Η δουλειά του Ikawa και των συναδέλφων του ήταν κυρίως επικεντρωμένη στη δισδιάστατη κοπή χαλκού σε νανοκλίμακα με κοπτικό εργαλείο από διαμάντι. Οι περισσότερες από τις δοκιμές τους πραγματοποιήθηκαν για ταχύτητα κοπής 200 m / sec, ενώ κάποιες πραγματοποιήθηκαν και σε ταχύτητα 20 m / sec, για λόγους σύγκρισης. Μελέτησαν την επίδραση του ελάχιστου βάθους κοπής και του λόγου του ελάχιστου βάθους κοπής προς την ακτίνα καμπυλότητας στο μηχανισμό σχηματισμού αποβλήτου, την παραμόρφωση επιφανείας και την ειδική ενέργεια κοπής.[24-28] Οι Inamura et al. [29-31]γρησιμοποίησαν πάλι γαλκό στις προσομοιώσεις τους και κοπτικό εργαλείο από διαμάντι. Το διαφορετικό ήταν ότι χρησιμοποίησαν μικρότερο αριθμό ατόμων για το τεμάχιο, κάτι που θα έπρεπε να οδηγήσει σε μικρότερους χρόνου υπολογισμού, αλλά σε δυσκολότερη ερμηνεία των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης. Επιπλέον, οι Inamura et al. [32] παρουσίασαν ένα μοντέλο για μετασχηματισμό από το ατομικό μοντέλο και τη νανοκοπή σε ένα ισοδύναμο συνεχές μοντέλο, που σχετίζεται με τις συμβατικές κατεργασίες κοπής [2].

Οι Maekawa και Itoh μελέτησαν το ρόλο της τριβής ανάμεσα στο χαλκό και κοπτικό εργαλείο από διαμάντι σε προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής σε δύο διαστάσεις (Εικόνα 3.1). Τα δυναμικά Morse και Born-Meyer χρησιμοποιήθηκαν για την εύρεση των αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα άτομα [53].

Οι Kim και Moon μελέτησαν το μηχανισμό κοπής χαλκού και αλουμινίου στη νανοκλίμακα στις δύο διαστάσεις, χρησιμοποιώντας τη Μοριακή Δυναμική και το δυναμικό Morse. Επίσης, ερεύνησαν τη διαφορετική συμπεριφορά των δύο υλικών για διάφορα βάθη κοπής και διαφορετικές ταχύτητες κοπής [54]. Στιγμιότυπα από τις προσομοιώσεις τους απεικονίζονται στην Εικόνα 3.2.

Επίσης, αναφέρουμε τους Zhang και Tanaka, οι οποίοι δημιούργησαν δισδιάστατο μοντέλο για προσομοίωση κοπής σε νανοκλίμακα μέσω της Μοριακής Δυναμικής, για μελέτη κυρίως της αναπτυσσόμενης τριβής ανάμεσα στο τεμάχιο και το κοπτικό εργαλείο [55].





Δεζιά: Διαφορετικές φάσεις της κατεργασίας για (a)20000 (b) 40000 (c) 60000. Αριστερά: Σχηματισμός αποβλήτου και μετάδοση θερμότητας με δυναμικό (a)Morse (b) Born-Meyer και από κάτω το μοντέλο προσομοίωσης πριν την κατεργασία.[53]



**Εικόνα 3.2**: Κοπή αλουμινίου με ταχύτητα κοπής 1000 m / sec και βάθος κοπής 1 nm [54].

Σημαντικές προσπάθειες στην προσομοίωση νανοκοπής με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής έχουν γίνει από τον Komanduri και τους συνεργάτες του. Οι Komanduri et al. χρησιμοποίησαν το δυναμικό Morse για την προσομοίωση κοπής λίαν υψηλής ακριβείας, χρησιμοποιώντας ως υλικό χαλκό. Επιπλέον, μελέτησαν την επίδραση της μορφής του κοπτικού εργαλείου στα αποτελέσματα της νανοκοπής [57]. Επίσης, μελέτησαν τις επιδράσεις της κατεύθυνσης των κρυστάλλων, της διεύθυνσης κοπής και της γωνίας αποβλήτου στην προσομοίωση κοπής σε νανοκλίμακα σε υλικό αλουμίνιο, χρησιμοποιώντας πάλι το δυναμικό Morse (Εικόνες 3.3-3.4) [58].



**Εικόνα 3.3**: Διαφορετικές φάσεις κοπής αλουμινίου με γωνία κοπής 10 μοίρες [58].



**Εικόνα 3.4**: Διαφορετικές φάσεις κοπής αλουμινίου με γωνία κοπής 40 μοίρες [58].

Ο Shimada χρησιμοποίησε τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής για την προσομοίωση κοπής χαλκού σε νανοκλίμακα στις δύο διαστάσεις για να μελετήσει το μηχανισμό σχηματισμού αποβλήτου, τις δυνάμεις κοπής και την ειδική ενέργεια κοπής [19].

Οι Pei, Lu, Fang και Wu προσομοίωσαν την κοπή χαλκού σε νανοκλίμακα στις δύο διαστάσεις, μελετώντας την επίδραση των διαφόρων παραμέτρων κοπής στις δυνάμεις κοπής. Επιπλέον, χρησιμοποίησαν δύο διαφορετικές συναρτήσεις δυναμικού, το Morse potential και το embedded – atom model για να κατανοήσουν την επίδραση των διαφορετικών συναρτήσεων στη μεταβολή των δυνάμεων κοπής [59]. Αποτελέσματα των προσομοιώσεών τους παρουσιάζονται στις Εικόνες 3.5-3.6-3.7.



Εικόνα 3.5: Μοντέλο προσομοίωσης ΜD[59]



Εικόνα 3.6: Διαφορετικές φάσεις κοπής νανοκλίμακας με 45 μοίρες γωνία κοπής, σε χρόνο (a) 35ps (b) 50ps (c) 65ps[59]



(c) Εικόνα 3.7: Διαφορετικές φάσεις κοπής νανοκλίμακας με 0 μοίρες γωνία κοπής, σε χρόνο (a) 35ps (b) 50ps (c) 65ps[59]

Μία πολύ σημαντική προσπάθεια προσομοίωσης στις τρεις διαστάσεις έγινε από τους Pei, Lu, Lee και Zhang και τα μοντέλα της προσομοίωσης απεικονίζονται στην Εικόνα 3.8. Στα δικά τους μοντέλα μάλιστα, ο αριθμός των ατόμων έφτανε μέχρι και μερικά εκατομμύρια [60].



Εικόνα 3.8: Μοντέλα προσομοίωσης με Μοριακή Δυναμική με τον αριθμό των ατόμων του τεμαχίου να είναι : (a) 2 εκατομμύρια (b) 4 εκατομμύρια και (c) 10 εκατομμύρια [60].

Ενώ οι πολύ αρνητικές γωνίες κοπής (>-150) χρησιμοποιούνται σπάνια στις κοπές, χρησιμοποιούνται κατά κανόνα στη λείανση. Ο Hahn εισήγαγε την υπόθεση του κόκκου στίλβωσης στη λείανση, σύμφωνα με την οποία κάποιοι κόκκοι εκτριβής (abrasive grains) μπορεί απλώς να τρίβουν την κατεργαζόμενη επιφάνεια, προκαλώντας αύξηση των δυνάμεων τριβής στην επιφάνεια ελευθερίας, αλλά καμία δύναμη κοπής στην επιφάνεια κοπής του εργαλείου, ενώ άλλοι κόκκοι εκτριβής συμμετέχουν στη διαδικασία διαμόρφωσης του αποβλήτου [61]. Σύμφωνα με τον Hahn, αν η διαδικασία είναι παρόμοια με το φρεζάρισμα αλλά σε μικροκλίμακα, δε θα ήταν διαφορετικός ο λόγος δυνάμεων στο φρεζάρισμα από ότι στην κοπή. Όμως, στην κοπή μετάλλων με θετική γωνία κοπής του εργαλείου, η δύναμη πρόωσης είναι σχεδόν η μισή σε σχέση με τη δύναμη κοπής, ενώ στη λείανση η δύναμη πρόωσης είναι διπλάσια της δύναμης κοπής. Ως εκ τούτου, η μελέτη των κατεργασιών με πολύ αρνητικές γωνίες κοπής εργαλείου διευκολύνει κατά πολύ την προσομοίωση της διαδικασίας λείανσης. Οι Ye et al. χρησιμοποίησαν το δυναμικό embedded - atom για την προσομοίωση κοπής χαλκού σε νανοκλίμακα με μεγάλες αρνητικές τιμές της γωνίας αποβλήτου. Βέβαια, στις δικές τους προσπάθειες προσομοίωσης χρησιμοποιήθηκαν κοπτικά εργαλεία από χαλκό, αντί για τα εργαλεία από διαμάντι, που κανονικά χρησιμοποιούνται. Αυτό που μελέτησαν ήταν η επίδραση των διαφορετικών ταχυτήτων κοπής στο μηχανισμό σχηματισμού του αποβλήτου και την ποιότητα της κατεργασμένης επιφανείας [62]. Η μελέτη αυτή θα παρουσιαστεί αναλυτικότερα στην παράγραφο 3.5.

Οι Komanduri et al [56] ασχολήθηκαν επίσης πολύ νωρίς με τις μεγάλες αρνητικές γωνίες αποβλήτου για την προσομοίωση της κατεργασίας της λείανσης. Ακόμη, οι Komanduri et al [63] καθώς και οι Fang και Wu [64], δούλεψαν με μεγάλες αρνητικές γωνίες αποβλήτου για την προσομοίωση κατεργασίας δημιουργίας εισχώρησης (indentation), σε τεμάχιο αλουμινίου και σε τεμάχιο πολλαπλών στρωμάτων αλουμινίου και νικελίου αντίστοιχα, με μονοκρυσταλλικό διαμάντι ως κοπτικό εργαλείο. Κάποια αποτελέσματα των προσομοιώσεών τους μπορούμε να παρατηρήσουμε στις Εικόνες 3.9-3.12.



**Εικόνα 3.9**: Μοντέλο προσομοίωσης με Μοριακή Δυναμική δημιουργίας εισχώρησης σε νανοκλίμακα (nanoindentation) [64].



Εικόνα 3.10:Πλαστική παραμόρφωση εισχώρησης γύρω από το σημείο επαφής στους 600 K.[64]



**Εικόνα 3.11:** Διαφορετικές φάσεις της κατεργασίας της εισχώρησης για χρόνο (a) 22ps (b) 30ps (c) 40ps (d) 50ps.[64]







**Εικόνα 3.12Β:**Διαφορετικές φάσεις της κατεργασίας της εισχώρησης-scratching με προσανατολισμό τεμαχίου-εργαλείου 111-211.[63]

Οι Inasaki et al [18], πριν 20 χρόνια, ήταν οι πρώτοι που ασχολήθηκαν με αυτές τις πρωτοπόρες μελέτες και χρησιμοποίησαν τα αποτελέσματά τους, για να προσομοιάσουν λειαντικές κατεργασίες στη νανοκλίμακα με επιτυχία. Η μελέτη τους ξεκαθάρισε τις διαφορές και τις ανάγκες των προσομοιώσεων MD για λειαντικές νανοκατεργασίες, σε σχέση με τις προσομοιώσεις νανοκοπών και νανοκατεργασιών εισχώρησης. Επίσης, προτάθηκαν καινοτόμα μοντέλα προσομοίωσης της λείανσης, με σκοπό να μειωθεί ο υπολογιστικός χρόνος της μεθόδου. Στην προσομοίωση χρησιμοποιήθηκαν τα δυναμικά Lennard – Jones και Morse, σε τεμάχιο χαλκού, με κοπτικό εργαλείο από διαμάντι. Κύριος στόχος της έρευνας είναι η μελέτη της διαδικασίας σχηματισμού αποβλήτου και της επίδρασης της θερμοκρασίας στο μηχανισμό αυτό. Ακόμη, οι Inasaki et al [18] ερεύνησαν την ακεραιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας, κατά τη διάρκεια λειαντικών νανοκατεργασιών και το μηχανισμό δημιουργίας αποβλήτου, με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής. Στη μελέτη αυτή περιγράφονται διαδικασίες δημιουργίας ρωγμών (crack initiation) και μετατοπίσεων υλικού (dislocations) και αναλύονται διεξοδικά η σκληρότητα της υπό κατεργασία επιφάνειας, καθώς και οι παραμένουσες τάσεις στο τεμάχιο. Εδώ γίνεται για πρώτη φορά προσομοίωση δημιουργίας ρωγμών με τη βοήθεια της Μοριακής δυναμικής. Τα αποτελέσματά τους αλλά και η έρευνά τους γενικότερα θεωρούνται θεμελιώδη για οποιαδήποτε μελέτη Μοριακής Δυναμικής λειαντικών κατεργασιών σε νανοκλίμακα (indentation, scratching, grinding, sliding).

Οι Lin and Wang [65] καθώς και οι Ye et al [66] εκπόνησαν πολλές αξιόλογες μελέτες που ασχολούνται με τη λείανση νανοκλίμακας σε μέταλλα με διαφορετικούς τρόπους (μία από αυτές παρουσιάζεται αναλυτικά σε επόμενη ενότητα), ενώ οι Murali et al [67] πραγματοποίησαν προσομοιώσεις MD σε νανοκατεργασίες με λειαντικούς κόκκους (abrasive grains). Οι Molinari and Junge [68] προσομοίασαν εκτριβή αλουμινίου σε νανοκλίμακα (απόξεση νανοκλίμακας, nano-scratching) με αδαμάντινο κόκκο, ως εργαλείο, και οι Noreyan et al [69] μελέτησαν επίσης την ίδια νανοκατεργασία, δουλεύοντας με ημιαγώγιμα υλικά, όπως το πυρίτιο( Εικόνα 3.13).



**Εικόνα 3.13:** Διαφορετικές φάσεις της προσομοίωσης nano-indentation σε nano-scratching (vavo-εισχώρηση σε vavo-εκτριβή ή vavo-aπόζεση).[69]

Οι παραπάνω είναι κάποιες από τις πιο σημαντικές προσπάθειες που έχουν γίνει για την προσομοίωση κατεργασιών σε νανοκλίμακα μέσω της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής. Λόγω περιορισμών στους επιθυμητούς χρόνους υπολογισμούς, τα περισσότερα μοντέλα που έχουν αναπτυχθεί είναι στις δύο διαστάσεις και αποτελούνται από μικρό αριθμό ατόμων (κάτω από 15000 άτομα). Η πλειοψηφία των ερευνητών στις προσπάθειες που έχουν κάνει, μελετούν κυρίως το μηχανισμό σχηματισμού αποβλήτου και τη μεταβολή των δυνάμεων κοπής συναρτήσει των διαφόρων παραμέτρων της κατεργασίας, καθώς και την επίδραση της θερμοκρασίας στη μορφή του αποβλήτου και της κατεργασμένης επιφάνειας. Είναι πασιφανές ότι η Μοριακή Δυναμική έχει ανοίξει καινούριους δρόμους για τη μελέτη των νανοκατεργασιών και έχουν ήδη τεθεί γερές βάσεις για την ανάπτυξη της συγκεκριμένης μεθόδου. Μολονότι πολλά από τα προβλήματα που αντιμετωπίζουμε στις κατεργασίες νανοκλίμακας ακόμα δεν έχουν διερευνηθεί σε βάθος, είμαστε αισιόδοξοι ότι η ραγδαία ανάπτυξη γενικότερα της τεχνολογίας, αλλά και ειδικότερα της υπολογιστικής ισχύος των επεξεργαστών, θα καταφέρει να παρουσιάσει λύσεις ικανοποιητικής ακρίβειας και νέους τρόπους και μοντέλα έρευνας για τις νανοκατεργασίες.

# 3.3 Μελέτη της νανοκοπής χαλκού με εργαλείο διαμαντιού μέσω προσομοίωσης MD

Η κοπή χαλκού από διαμάντι είναι η πιο συνηθισμένη εφαρμογή της MD στις νανοκατεργασίες. Οι Zhu et al [70] πραγματοποίησαν τρισδιάστατη προσομοίωση MD ώστε να διερευνήσουν τη νανοκοπή χαλκού με χρήση εργαλείου διαμαντιού. Από τους μελετήθηκε, μεταξύ άλλων, η επίδραση της θερμοκρασίας του κύριου όγκου του υλικού στη δύναμη κοπής και στον παραγόμενο όγκο αποβλήτου. Στην Εικόνα 3.14 παρουσιάζεται το μοντέλο MD της νανοκοπής χαλκού. Το μοντέλο αποτελείται από ένα κυβικό εδροκεντρωμένο (FCC) τεμάχιο μονοκρυστάλλου χαλκού και ένα άκαμπτο εργαλείο από διαμάντι.



Εικόνα 3.14:	Μοντέλο προσ	σομοίωσης ΜΔ
	[70]	

Υλικά	Τεμάχιο: χαλκό	Εργαλείο: διαμάντι
Διαστάσεις	50α×50α×25α, α (σταθερά πλέγματος)=0.3615m	Γωνία απβλ: -30°
Πλήθος ατόμων	250000	
Χρονικό βήμα	1 fs	

Αρχική θερμοκρασία	293 K	
Ταχύτητα κοπής	100 m/s	
Βάθος κοπής	1 nm	
Μήκος κοπής	11 nm	
Κατεύθυνση κοπής	[-1 0 0] στην επιφάνεια (0 0 1)	

Πίνακας 3.1: Υπολογιστικές παράμετροι της προσομοίωσης ΜΔ [70]

Ο Πίνακας 3.1 συνοψίζει τις υπολογιστικές παραμέτρους που χρησιμοποιούνται στις προσομοιώσεις ΜΔ. Το μέγεθος του τεμαχίου είναι  $50a \times 50a \times 25a$ , όπου α είναι η σταθερά του πλέγματος του χαλκού (α = 0.3615m). Το βάθος κοπής είναι 1.0 nm και η ταχύτητα κοπής είναι 100 m/s. Η γωνία αποβλήτου είναι -30°.

# 3.3.1 Επίδραση της θερμοκρασίας του κύριου όγκου του υλικού στον παραγόμενο όγκο αποβλήτου και στις δυνάμεις κοπής

Για να διερευνηθεί η θερμοκρασία του κύριου όγκου του υλικού, πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις ΜΔ σε διαφορετικές θερμοκρασίες όγκου υλικού. Στην Εικόνα 3.15 (a)-(d) φαίνονται διάφορες τομές του επιπέδου xz κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής για διαφορετικές θερμοκρασίες κυρίου όγκου υλικού 10K, 293K, 450K και 600K,αντίστοιχα.



Εικόνα 3.15: Στιγμιότυπα τομών του επιπέδου xz κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής για διαφορετικές θερμοκρασίες κύριου όγκου υλικού [70]

Φαίνεται ότι η αύξηση της θερμοκρασίας του κυρίου όγκου του υλικού, οδηγεί σε αύξηση του όγκου αποβλήτου μπροστά από το εργαλείο. Η συμπεριφορά προκύπτει από την εμφάνιση της θερμικής μαλάκυνσης [59]. Σε υψηλότερη θερμοκρασία κυρίου όγκου υλικού, τα άτομα του τεμαχίου δονούνται με μεγαλύτερη συχνότητα και οι αποστάσεις μεταξύ των ατόμων του τεμαχίου αυξάνονται. Κατά συνέπεια, η αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων του τεμαχίου γίνεται ασθενέστερη για υψηλότερη θερμοκρασία κύριου όγκου υλικού, το οποίο σημαίνει ότι το τεμάχιο μπορεί να κατεργαστεί πιο εύκολα. Κατά συνέπεια, σχηματίζονται περισσότερα απόβλητα μπροστά από το εργαλείο σε υψηλότερη θερμοκρασία κυρίου όγκου υλικού.

Οι μέσες δυνάμεις κοπής και οι κάθετες δυνάμεις για απόσταση κοπής 5-11 nm σε διαφορετικές θερμοκρασίες κύριου όγκου υλικού, φαίνονται στην Εικόνα 3.16. Είναι εμφανές ότι τόσο οι δυνάμεις κοπής όσο και οι κάθετες δυνάμεις μειώνονται με αύξηση της θερμοκρασίας κύριου όγκου υλικού. Πρέπει να σημειωθεί ότι η θερμική μαλάκυνση κάνει το τεμάχιο πιο εύκολα κατεργάσιμο, πράγμα το οποίο οδηγεί στη μείωση των δυνάμεων κοπής και των κάθετων δυνάμεων σε υψηλότερες θερμοκρασίες κύριου όγκου υλικού.

Όμως, ο μεγαλύτερος όγκος αποβλήτου σε υψηλότερες θερμοκρασίες αυξάνει την αντίσταση στην κίνηση, και έτσι απαιτείται μεγαλύτερη δύναμη κοπής για να υπερνικήσει την αντίσταση [60]. Οι επιδράσεις της θερμικής μαλάκυνσης και του όγκου του αποβλήτου στην δύναμη κοπής είναι αντικρουόμενες κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής. Η μείωση της δύναμης κοπής με αύξηση της θερμοκρασίας κύριου όγκου υλικού δείχνει ότι η θερμική μαλάκυνση παίζει σημαντικό ρόλο στον προσδιορισμό της δύναμης κοπής.





# 3.4 Μελέτη της νανοκοπής μονοκρυσταλλικού πυριτίου (Si) με χρήση προσομοίωσης MD

Το μονοκρυσταλλικό πυρίτιο (single crystal silicon) χρησιμοποιείται ευρύτατα σε εφαρμογές οπτικής υπέρυθρων και σε ηλεκτρονικές εφαρμογές, οι οποίες απαιτούν οπτικά ποιοτικές επιφάνειες και έχουν εν γένει πολύπλοκα χαρακτηριστικά (De 2003) [72]. Οι κατεργασίες υπερ-υψηλής Chiffrea et al., ακρίβειας uε εργαλεία διαμαντιού μπορούν να παράγουν νανο-επιφάνειες και πιθανή μορφή ακρίβειας σε επίπεδο μικροκλίμακας (Fang and Venkatesh, 1998) [73]. Για τη δημιουργία καλοφτιαγμένων τμημάτων, είναι απαραίτητη η μελέτη το μηχανισμού νανοκοπής μονοκρυσταλλικού πυριτίου, ειδικά η δύναμη κοπής, η οποία παίζει σημαντικό ρόλο στη φθορά του εργαλείου, στο φινίρισμα της επιφάνειας και στην ακρίβεια της μορφής του. Στις νανοκατεργασίες μονοκρυσταλλικών υλικών, η δύναμη μπορεί να προβλεφθεί, αν η μεταβολή του κρυσταλλογραφικού κοπής προσανατολισμού του υποστρώματος του υλικού σε σχέση με την κατεύθυνση κοπής είναι γνωστή (Lee, 1990) [75]. Παρόλα αυτά λίγα είναι γνωστά για τον πραγματικό ρόλο της δόνησης της δύναμης κοπής, οποία είναι ένας βασικός η παράγοντας στη φθορά του εργαλείου, ενώ λίγες μελέτες έχουν διεξαχθεί για την εύρεση του μηγανισμού δημιουργίας αποβλήτου, από την πλευρά της δύναμης κοπής.

Για το λόγο αυτό η μελέτη που πραγματοποίησαν οι Chen, Fang, Zhang and Hu [71] είναι αρκετά αξιόλογη και χρήζει ιδιαίτερης προσοχής. Οι Chen, Fang, Zhang and Hu [71] μελέτησαν σε βάθος τη νανοκοπή μονοκρυσταλλικού πυριτίου, ερευνώντας τα αίτια της δόνησης της δύναμης κοπής, καθώς και της επίδρασής της στη θερμοκρασία και τη δημιουργία αποβλήτου. Η προσομοιωμένη διαδικασία κοπής εξηγήθηκε από την πλευρά της ολίσθησης (sliding) και της παραμόρφωσης του πλέγματος. Διεξήχθησαν προσομοιώσεις διαφόρων ακμών κοπής για διάφορα βάθη κοπής και δόθηκε το κατώφλι του βάθους κοπής για τη δημιουργία αποβλήτου.

### 3.4.1 Αρχικές Συνθήκες και Μέθοδος Προσομοίωσης MD

Το μοντέλο προσομοίωσης, το οποίο αποτελείται από ένα τρισδιάστατο εργαλείο διαμαντιού και μονοκρυσταλλικό πυρίτιο, τα οποία φαίνονται στην Εικόνα 3.17. Το τεμάχιο κατεργασίας έχει χωρισθεί σε τρία διαφορετικά στρώματα, το οριακό (συνοριακά άτομα), το θερμοστατικό (άτομα θερμοστάτες) και το στρώμα Newton (νευτώνεια άτομα). Το οριακό στρώμα χρησιμοποιείται για τη διατήρηση σταθερότητας του υλικού και για την αποφυγή μετακίνησης κατά την κοπή. Το θερμοστατικά στρώματα διατηρούν σταθερή θερμοκρασία στους 300 K, άγοντας την υψηλή παραγόμενη θερμότητα μακριά από την περιοχή κοπής. Τα άτομα στο στρώμα Newton αλληλεπιδρούν με το εργαλείο ακολουθώντας το νόμο του Νεύτωνα. Το τρισδιάστατο εργαλείο κοπής της προσομοίωσης μοντελοποιήθηκε με γωνία αποβλήτου 0° και γωνία ελευθερίας 12°.



Εικόνα 3.17: Σχέδιο του μοντέλο προσομοίωσης ΜΔ [71]

Υλικό κατεργασίας και παράμετροι προσομοίωσης						
Υλικό	Μονοκρυσταλλικού	Ακτίνα	1 1 5 2 1001 2 5 mm			
κατεργασίας	πυριτίου	εργαλείου	1, 1.3, 2 Kut 2.3 IIII			
Δομή υλικού	Κυβικό διαμαντιού	Δυναμικό	Morse και Tersoff			
Διαστάσεις	20a x 15a x 24a, a =	Κατεύθυνση	[100] = (100)			
υλικού	5.413 Å	κοπής	[100] 08 (100)			
Διαστάσεις	Ακτίνα εργαλείου =	Ταχύτητα	400 m/s			
εργαλείου	4 nm	κοπής	400 111/5			

Πίνακας 3.2: Υλικό κατεργασίας και συνθήκες προσομοίωσης [71]

Το υλικό κατεργασίας αποτελείται από 57600 άτομα, ενώ το εργαλείο αποτελείται από 4444 άτομα. Όλες οι συνοριακές συνθήκες είναι σταθερές για τις τρισδιάστατες προσομοιώσεις. Η αρχική θερμοκρασία του υλικού κατεργασίας είναι 300 K. Το βήμα χρόνου προσομοίωσης είναι 1 fs. Οι λεπτομέρειες για το υλικό κατεργασίας και τις συνθήκες προσομοίωσης συνοψίζονται στον Πίνακα 3.2.

Κατά τις διαδικασίες προσομοίωσης ΜΔ υπάρχουν τρεις διαφορετικές ατομικές αλληλεπιδράσεις: (1) η αλληλεπίδραση στο υλικό κατεργασίας, (2) η αλληλεπίδραση μεταξύ του υλικού και του εργαλείου κοπής, (3) η αλληλεπίδραση στο εργαλείο.

Στις προσομοιώσεις, εφαρμόστηκαν τα δυναμικά Tersoff για την αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων πυριτίου στο τεμάχιο κατεργασίας και δυναμικό Morse για την αλληλεπίδραση μεταξύ του εργαλείου διαμαντιού και του πυριτίου. Το εργαλείο θεωρείται ως άκαμπτο σώμα, ώστε τα άτομα στο εργαλείο να είναι σταθερά και χωρίς αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους. Οι παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν για τη δυναμική ενέργεια φαίνονται στον Πίνακα 3.3.

Παράμετροι δυναμικού Tersoff							
A (eV)	1.8308 x 10	β	1.1 x 10	Н	-5.9825 x 10 <sup>-1</sup>		
B (eV)	4.7118 x 10	n	7.834 x 10 <sup>-1</sup>	R (nm)	0.27		
$\lambda$ (nm)	24.799	с	1.0039 x 10 <sup>5</sup>	S (nm)	0.30		
μ (nm)	17.322	d	1.6217 x 10 <sup>1</sup>				
Παράμετροι δυναμικού Morse							
D (eV)		α (nm)		$r_0(nm)$			
0.423		4.6487		1.9475			

Πίνακας 3.3: Παράμετροι δυναμικού [71]

## 3.4.2 Αποτελέσματα και Διεξαγωγή Προσομοίωσης MD

Οι διαφορετικές φάσεις της προσομοίωσης της κοπής φαίνονται στην Εικόνα 3.18. Υπάρχει εμφανής ολίσθηση και παραμόρφωση πλέγματος για κάθε βήμα του εργαλείου και αλληλεπίδρασή του με το υλικό (Εικόνα 3.18a-c). Φαίνεται ότι η ενεργή γωνία αποβλήτου, η οποία είναι πάντα αρνητική (Fang et al., 2007) [74], παράγει υδροστατική πίεση, η οποία έχει σημαντική επίδραση στη δημιουργία αποβλήτου, στην παραμόρφωση κάτω από την επιφάνεια και στην παραγωγή κατεργασμένης επιφάνειας.

Η Εικόνα 3.18a δείχνει την αρχική αλληλεπίδραση μεταξύ του εργαλείου και του υλικού κατεργασίας. Το εργαλείο κοπής αρχικά εισήγαγε την υδροστατική πίεση κάτω από την ακμή του εργαλείου. Λόγω της εξώθησης αποβλήτου, συμβαίνει παραμόρφωση του πλέγματος στην περιοχή επαφής. Εν τω μεταξύ, η ζώνη της συμπίεσης οδηγεί σε ολίσθηση πλέγματος ισοδύναμης κλίμακας σε όλο το υλικό κατεργασίας. Όσο το εργαλείο κινείται, η ζώνη συμπίεσης κινείται προς τα εμπρός, το οποίο φαίνεται Στην Εικόνα 3.18b. Το σημείο συγκέντρωσης τάσης διαχωρίζει τα παραμορφωμένα άτομα πυριτίου να ρέουν προς διαφορετικές κατευθύνσεις και διαμορφώνει απόβλητα κοπής και κατεργασμένη επιφάνεια, αντίστοιχα. Η κατεργασμένη επιφάνεια παράγεται μετά την κοπή, η οποία είναι λεία και επαναφέρεται λόγω της χαλάρωσης του υλικού, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.18c.


**Εικόνα 3.18:** Τομή τρισδιάστατης διαδικασίας κοπής: (a) Αρχική αλληλεπίδραση μεταζύ εργαλείου και υλικού, (b) Δημιουργία αποβλήτου, (c) Κατεργασμένη επιφάνεια [71]

Η δύναμη που δρα σε ένα ανεξάρτητο άτομο υπολογίζεται, αθροίζοντας τις δυνάμεις που συμβάλλουν τα γειτονικά άτομα. Οι δυνάμεις βρίσκονται από τα διατομικά δυναμικά Morse. Η δύναμη κοπής εκφράζεται ως το άθροισμα της συνολικής δύναμης όλων των ατόμων του εργαλείου. Η Εικόνα 3.19 δείχνει τη δόνηση της δύναμης κοπής κατά τη διαδικασία κοπής. η Εικόνα 3.19a είναι οι τυπικές καμπύλες της εφαπτομενικής και της κάθετης δύναμης βάθους κοπής 2 nm, με ακμή κοπής του εργαλείου 2 nm. Το η Εικόνα 3.19b δείχνει τη συχνότητα δόνησης της δύναμης κοπής, όπου φαίνονται δυο κύριες συχνότητες, οι οποίες αντιπροσωπεύουν δόνηση μικρής κλίμακας και κωνική ημιτονοειδή ταλάντωση, αντίστοιχα.



Εικόνα 3.19: Δόνηση δύναμης κοπής: (a) Δύναμη κοπής (b) Συχνότητα της δύναμης κοπής [71]

Αρχικά, οι δυνάμεις κοπής είναι αρνητικές λόγω της έλξης που ασκεί η επιφάνεια του εργαλείου στα άτομα του υλικού, όταν το εργαλείο κοπής, αλλά χωρίς να έρχεται σε επαφή με το υλικό κατεργασίας. Όταν η ακμή του εργαλείου ασκεί υδροστατική πίεση στο υλικό, δημιουργείται θλιπτική τάση και ολίσθηση του πλέγματος. Επίσης αρχικά μπορεί να εμφανιστεί μικρή δόνηση. Η δύναμη κοπής αυξάνεται βαθμιαία, καθώς η διεπιφάνεια μεταξύ του εργαλείου και του υλικού μεγαλώνει, έως ότου η όψη του εργαλείου να εφάπτεται πλήρως με το υλικό. Όπως φαίνεται, η μικρή δόνηση οφείλεται στην αταξία του πλέγματος και στη ροή ατόμων στην παρακείμενη περιοχή του εργαλείου με το υλικό.

Η Εικόνα 3.20a είναι το σχέδιο για την αταξία του πλέγματος χρησιμοποιώντας Κεντρο-Συμμετρικές Παραμέτρους (CSP) (Tsuzuki et al., 2007) [76]. Οι CSP για κάθε άτομο καθορίζονται ακολούθως:

$$P = \sum_{t=1,n} |R_t + R_{t+n}|^2 \tag{3.1}$$

όπου  $R_i$  και  $R_{i+n}$  είναι τα διανύσματα που αντιστοιχούν στους κοντινά άτομα του πλέγματος του υλικού. Σε ένα κεντρο-συμμετρικό υλικό, κάθε άτομο έχει συγκεκριμένα ζεύγη ισοδύναμων και αντίθετων δεσμών, μεταξύ των γειτονικών ατόμων του. Όσο η παραμόρφωση του υλικού αυξάνεται, αυτοί οι δεσμοί θα αλλάξουν κατεύθυνση και/ή μήκος. Οι CSP είναι μηδέν για άτομα σε ένα τέλειο πλέγμα, αλλά έχουν διαφορετικές τιμές παραμόρφωσης.

Τα απόβλητα κοπής είναι σχεδόν άμορφα, λόγω της εξώθησης του εργαλείου που προκαλείται από την παραμόρφωση και την ολίσθηση του πλέγματος, τα οποία φαίνονται στην Εικόνα 3.20b, χρησιμοποιώντας μετρήσεις συνάρτησης ακτινικής κατανομής (RDF):

$$g(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \rho(\mathbf{r},\mathbf{r}')/\rho(\mathbf{r}) \tag{3.2}$$

όπου,  $\rho(r, r')$  είναι ο αριθμός των ατόμων σε  $r \rightarrow r + \Delta r$ ,  $\rho(r)$  είναι ο μέσος όρος της συνολικής παραμέτρου. Η RDF ποσοτικά αναλύει τις δομικές αλλαγές στο υλικό κατεργασίας σε μορφή ιστογράμματος, εκτιμώντας το τις στατιστικές πληροφορίες της διακύμανσης του μήκους του δεσμού. Τα αποτελέσματα της RDF είναι σε συμφωνία με τη φασματοσκοπία laser micro- Raman του πραγματικού αποβλήτου κοπής του πυριτίου, όπως φαίνονται στην Εικόνα 3.20c.

Η κωνική ημιτονοειδής ταλάντωση εμφανίζεται όταν η εξώθηση που προκαλείται από την ολίσθηση του πλέγματος εκτείνεται μέχρι το κατώφλι και το υλικό διατμείται στο στρώμα ολίσθησης του πλέγματος. Η ταλάντωση είναι ο κύριος λόγος για τη φθορά του εργαλείου και της θραύσης της επιφάνειας. Στη συνέχεια, επιτυγχάνεται νέα ισορροπία, μετά τη διάτμηση και μικρή ταλάντωση συμβαίνει, καθώς το εργαλείο κινείται μέσω εξώθησης που προκαλεί παραμόρφωση του υλικού και παραγωγή φινιρισμένης επιφάνειας. [71]



**Εικόνα 3.20:** Παραμόρφωση πλέγματος: (a) Σχέδιο για την παραμόρφωση πλέγματος, (b) RDF του αποβλήτου κοπής, (c) Φάσμα Raman του πραγματικού αποβλήτου κοπής [71]

Στην Εικόνα 3.21 φαίνονται οι προσομοιώσεις για διάφορα βάθη κοπής, χρησιμοποιώντας δυνάμεις κοπής για διάφορες ακμές κοπής του εργαλείου. Φαίνεται ότι όταν το βάθος κοπής είναι κάτω από μια συγκεκριμένη τιμή, όλες οι δυνάμεις είναι ομογενείς και χωρίς εμφανή αύξηση, δείχνοντας μηδενική διαμόρφωση αποβλήτου κοπής. Όσο το βάθος κοπής είναι πάνω από μια κρίσιμη τιμή, οι δυνάμεις κοπής αυξάνονται, φαίνεται η συσσώρευση αποβλήτων κοπής στην όψη του εργαλείου. Στην Εικόνα 3.22 είναι οι τυπικές καμπύλες δυνάμεων κοπής με και χωρίς δημιουργία αποβλήτου.



**Εικόνα 3.21:** Δυνάμεις κοπής για διάφορα βάθη, (a) ακμή κοπής 1 nm, (b) ακμή κοπής 1.5 nm, (c) ακμή κοπής 2 nm, (d) ακμή κοπής 2.5 nm [71]



Εικόνα 3.22: Δύναμη κοπής με και χωρίς δημιουργία αποβλήτου [71]

Όταν το βάθος κοπής είναι μεγαλύτερο από το κατώφλι δημιουργίας αποβλήτου, η δύναμη κοπής αυξάνεται βαθμιαία, όσο το απόβλητο συσσωρεύεται στην όψη του εργαλείου και στη συνέχεια εμφανίζει μικρή μείωση για την απομάκρυνση αποβλήτου. Παρόλα αυτά, όταν το βάθος κοπής είναι κάτω από το κατώφλι, τα παραμορφωμένα άτομα πυριτίου μπορούν να ρέουν μόνο κατά μήκος της ακμής κοπής, έτσι, η δύναμη κοπής δεν εμφανίζει αύξηση. Η Εικόνα 3.23 δείχνει ότι το κατώφλι δημιουργίας αποβλήτου για διάφορες ακμές εργαλείου. Η τιμή αυξάνεται σε ένα μικρό εύρος, όσο η τιμή της ακμής του εργαλείου αυξάνεται.

Γενικά, οι δυνάμεις κοπής μειώνονται όσο η τιμή της ακμής κοπής μειώνεται. Όσο το κατώφλι για τη δημιουργία αποβλήτου κοπής αυξάνεται, η συσσώρευση αποβλήτου γίνεται μικρότερη και η δύναμη κοπής μειώνεται ανάλογα.



Εικόνα 3.23: Κατώφλι βάθους κοπής για δημιουργία αποβλήτου [71]

# 3.5 Μελέτη της Νανοκατεργασίας Χαλκού με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής

Οι Ye, Biswas, Morris, Bastawros and Chandra [62] μελέτησαν με χαρακτηριστική επιμέλεια τη νανοκατεργασία του χαλκού. Ο χαλκός επιλέχθηκε λόγω της σημασίας του στις εφαρμογές επεξεργασίας νανοκλίμακας και επειδή είναι διασυνδετικό 3σ ημιαγωγών. Για την προσομοίωση νανοκατεργασιών του επιπέδου (001) τεχνολογίες του χαλκού, χρησιμοποιήθηκε πλάκα χαλκού, διαστάσεων 20α x 4α x 20α, αποτελούμενο από 6350 άτομα (Εικόνα 3.24), όπου το α είναι η σταθερά του πλέγματος του χαλκού (3.61 Å), παρόμοιο με το υλικό σε προηγούμενες προσομοιώσεις που διεξήχθησαν σε επιφάνειες αλουμινίου από τους Komanduri et al το 2000 [58]. Προσομοιώσεις διεξήχθησαν και σε μεγαλύτερα συστήματα 15000 ατόμων με παρόμοια αποτελέσματα. Αρχικά ερευνήθηκε η στίλβωση κατά την κατεύθυνση [100] της επιφάνειας (001) του χαλκού. Οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες διατηρούνται κατά την κατεύθυνση y, όχι όμως και προς τις κατευθύνσεις x και z. Τα άτομα στην όψη xz και στο κατώτερο επίπεδο xy (κάτω μέρος του υλικού κατεργασίας) διατηρούνται σταθερά. Όλα τα υπόλοιπα άτομα επιτρέπεται να κινούνται κατά τον αλγόριθμο MΔ. Ο αλγόριθμος πρόβλεψης-διόρθωσης Gear για τη χρονική ολοκλήρωση των ατομικών συντεταγμένων. Η θερμοκρασία ολόκληρου του συστήματος διατηρήθηκε σταθερή με ένα πρότυπο θερμοστάτη Nose.



Εικόνα 3.24: Αρχική διάταζη του τεμαχίου κατεργασίας και του εργαλείου με γωνία αποβλήτου -45°, πριν την νανοκοπή επιφάνειας (001) χαλκού. Το βάθος κοπής είναι 0.9 nm. Τα στρώματα στις πλευρές και στο κάτω μέρος του κελιού είναι άκαμπτα. Στο σχήμα φαίνεται το επίπεδο x-z των ατόμων (σταθερό επίπεδο y) [62]

Το απλό σχέδιο για την προσομοίωση του εργαλείου αποτελείται, με την αρχική τοποθέτηση του εργαλείου στο αριστερό άκρο του υλικού κατεργασίας (Εικόνα 3.24), προεξέχοντας πάνω από την επιφάνεια. Το εργαλείο κινείται άκαμπτα κατά μήκος του υλικού κατεργασίας, προσομοιώνοντας ικανοποιητικά τη διαδικασία απόξεσης (scratching) σταθερής κατάστασης νανοκλίμακας. Αυτό μοντελοποιεί τη μηχανική απόξεση και ομαλοποίηση μιας ανομοιομορφίας μιας μεταλλικής επιφάνειας.

Η εναλλακτική μέθοδος δημιουργίας εγκοπών σε διάφορα βάθη και ακολουθούμενη από άκαμπτη απόξεση του υλικού κατεργασίας, έδωσε ποιοτικά ίδια αποτελέσματα για την κοπή νανοκλίμακας με την πρώτη μέθοδο που παρουσιάστηκε. Παρόλα αυτά, σχετίζεται αρκετά με τη διαδικασία κατεργασίας σταθερής κατάστασης, και ακόμη περισσότερο με προσομοίωση της αρχικής διεργασίας εγκοπής.

Το εργαλείο αποτελείται από 300-600 άτομα χαλκού, ανάλογα τη γωνία αποβλήτου. Ο άξονας (001) του εργαλείου είναι παράλληλος με τον άξονα (001) του υποστρώματος. Χρησιμοποιήθηκαν εργαλεία που μοιάζουν με εγκοπές με αρνητικές γωνίες αποβλήτου. Το άτομα του εργαλείου τρίβουν τα σταθερά όρια των τοιχωμάτων των ατόμων του υλικού κατεργασίας. Στο υλικό δεν επιτρέπεται να συσσωρευθεί στις πλευρές του χαραγμένου καναλιού, όπως θα αναμενόταν σε μια τρισδιάστατη προσομοίωση. Εξάλλου η προσομοίωση τρισδιάστατης νανοκατεργασίας είναι πολύ απαιτητική υπολογιστικά, απαιτώντας σημαντικά μεγαλύτερες μοναδιαίες κυψελίδες, και είναι αντικείμενο περαιτέρω μελέτης. Τα σημεία κλειδιά της νανοκοπής μπορούν περιγραφούν την δισδιάστατη προσομοίωση από γεωμετρίας. То να εργαλείο/λειαντικό μέσο είναι άκαμπτο και κρατείται με καθοδική δύναμη ώθησης, παρόμοια με το ρόλο του μπλοκ κατά ην πίεση τραχιών σωματιδίων της επιφάνειας στη χημική – μηχανική στίλβωση (ΧΜΣ). Το εργαλείο μετατοπίζεται κατά μήκος της επιφάνειας κοπής, κατά την κατεύθυνση [001], με μικρό βήμα (Δx). Για κάθε θέση του εργαλείου, το σύστημα εξελίσσεται με τον αλγόριθμο της ΜΔ για ~50 χρονικά βήματα. Στη συνέχεια οι συντεταγμένες του εργαλείου προσαυξάνονται κατά την κατεύθυνση [100] κατά Δx, και η προσομοίωση της ΜΔ επαναλαμβάνεται. Καθώς η μετατόπιση γίνεται πρακτικά όσο μικρότερη γίνεται, η προσομοίωση προσεγγίζει σχεδόν συνεχείς διεργασίες.

Σε τυπικές συνθήκες κατεργασίας μετάλλου ή συνθήκες XMΣ, η μαλακή επιφάνεια του χαλκού κατεργάζεται με ένα σημαντικά σκληρότερο εργαλείο. Η σκληρότητα του διαμαντιού είναι 10, και του λειαντικού αλουμίνιου είναι 9, ενώ του χαλκού είναι σημαντικά μαλακότερος (σκληρότητα < 5), ανάλογα την προετοιμασία της επιφάνειας. Υπό αυτές τις συνθήκες είναι ορθή υπόθεση, να θεωρηθεί το εργαλείο ως άκαμπτο σώμα, το οποίο υιοθετήθηκε και σε αυτές τις προσομοιώσεις.

Η θερμοκρασία ελέγχεται διατηρώντας τα 8 κατώτατα στρώματα (1.2 nm) του υλικού στους 300 K. Αν η θερμοκρασία αποκλίνει περισσότερο από 10 K από την προσδιορισθείσα θερμοκρασία, γίνεται επαναπροσδιορισμός των ταχυτήτων των ατόμων στα οκτώ αυτά κατώτερα στρώματα. Αυτός ο αλγόριθμος επιτρέπει τη μεταφορά θερμότητας από την περιοχή κατεργασίας της επιφάνειας στον κύριο όγκο του υλικού, όμοια με το πείραμα. Είναι σημαντικό να μην μεταβληθούν οι ταχύτητες των ατόμων ή τα δυναμικά τους μέσα στην ενεργή περιοχή κατεργασίας. Επίσης ο έλεγχος θερμοκρασίας δεν είναι ευαίσθητος σε μικρές μεταβολές όσον αφορά την ανοχή θερμοκρασίας. [62]

Η πειραματική κατεργασία του χαλκού διεξάγεται με εργαλεία περιστροφής με ταχύτητες κατεργασίας της τάξεως 1-10 m/s (Shaw 1984) [78]. Στις διεργασίες ημιαγωγών, η περιστροφή της βάσης είναι 20-50 rpm στο βήμα της XMΣ παράγει ακόμη χαμηλότερες ταχύτητες κατεργασίας, της τάξεως 0.5-1 m/s (Steigerwald et al 1997) [79]. Για να μπορέσει να γίνει σύγκριση με αυτές τις ταχύτητες περιστροφής, προσομοιώθηκαν ιδιαίτερα χαμηλές ταχύτητες κατεργασίας 1.8 m/s, με πολύ μικρό βήμα προσαύξησης Δx = 0.0004 nm. Έτσι αυτή η ταχύτητα κατεργασίας είναι σημαντικά χαμηλότερη σε σχέση με προηγούμενες προσομοιώσεις. Προσεγγιστικά χρησιμοποιήθηκαν 1000 προσαυξήσεις μετατόπισης, όταν το εργαλείο διέσχισε απόσταση ~0.4 nm. Για τη μεγαλύτερη ταχύτητα κοπής 18 m/s, χρησιμοποιήθηκε Δx=0.004 nm. Μετά τη μηχανική κατεργασία, το υλικό αφέθηκε σε ηρεμία, κρατώντας το εργαλείο σε σταθερή φορτισμένη θέση και το υλικό κατεργασίας αφέθηκε για ~150000 γρονικά βήματα (120)ps). Αυτή χαλάρωση προκαλεί η αναδιοργάνωση του υποστρώματος μετά το ταχύ βήμα κατεργασίας, και είναι σημαντική για τη δημιουργία υλικού με ελάχιστες ατέλειες.

Οι διαφορετικές μεταβλητές που περιγράφουν τη διαδικασία στίλβωσης σε νανοκλίμακα είναι οι ακόλουθες:

(1) Ο προσανατολισμός της επιφάνειας του κρυστάλλου και η κατεύθυνση της κοπής

(2) Το βάθος κοπής d<sub>c</sub>

(3) Η ταχύτητα κοπής υ<sub>s</sub>

(4) Η γωνία αποβλήτου του εργαλείου α

(5) Η θερμοκρασία Τ του υποστρώματος

(6) Ο προσανατολισμός του κρυστάλλου του εργαλείου και η γωνία μεταξύ του εργαλείου και των αξόνων των κρυστάλλων του υλικού κατεργασίας

(7) Η ακαμψία του εργαλείου, η οποία μπορεί να είναι απείρως άκαμπτο ή παραμορφώσιμο

(8) Η χρονική κλίμακα για χαλάρωση και αναδιοργάνωση του υλικού μετά τη διαδικασία κατεργασίας.

#### 3.5.1 Αποτελέσματα Προσομοιώσεων

Αρχικά προσομοιώθηκε η νανοκατεργασία της επιφάνειας (001) του χαλκού, ως συνάρτηση της ταχύτητας κοπής υs, η οποία κυμάνθηκε από 1.8-180 m/s. Ο προσανατολισμός της κοπής ήταν κατά την κατεύθυνση (001). Οι παράμετροι της διαδικασίας και τα χαρακτηριστικά του υλικού κατεργασίας φαίνονται στον Πίνακα 3.4.

Το πρώτο σετ των προσομοιώσεων, που έγινε με εργαλείο με γωνία αποβλήτου -45°, έδειξε σημαντική αλληλεπίδραση της ταχύτητας υς και της φύσης της κατεργαζόμενης επιφάνειας. Η Εικόνα 3.25 δείχνει τη σύγκριση των αποτελεσμάτων για διάφορες ταχύτητες κατεργασίας, αφού η κοπή έχει προχωρήσει κατά ~2.7 nm.

Στην υψηλότερη ταχύτητα (180 m/s), η κατεργαζόμενη επιφάνεια πίσω από το εργαλείο είναι τραχιά σε ατομικό επίπεδο, αλλά ομαλοποιείται καθώς μειώνεται η ταχύτητα. Μπροστά από το εργαλείο, υπάρχει σημαντική αταξία και συμπίεση του υλικού κατεργασίας, για τις μεγαλύτερες ταχύτητες (180 και 18 m/s), που μειώνεται για  $v_s = 1.8$  m/s. Ένα ευμέγεθες απόβλητο διαμορφώνεται μπροστά από το εργαλείο για τις μεγαλύτερες ταχύτητες (180 και 18 m/s), αλλά είναι σημαντικά μικρότερο στη χαμηλότερη ταχύτητα, μιας και τα μετατοπιζόμενα άτομα έχουν

περισσότερο χρόνο να αναδιαταχθούν στη χαμηλότερη ταχύτητα. Οι μετατοπίσεις παράγονται και για τις τρεις ταχύτητες και εμφανίζονται βαθύτερα στο υπόστρωμα. Οι βρόγχοι μετατοπίσεων αποτελούνται από ζεύγη ελλειπόντων σειρών ατόμων.

Δυναμικό για προσομοιώσεις	EAM		
Υλικό κατεργασίας	Χαλκός		
Κρυσταλλική δομή υποστρώματος	FCC		
Διαστάσεις	20a x 4a x 20a	6350 άτομα	
υποστρώματος [100]	επιφάνεια (001)		
	α=3.61 Å	(1452 σταθερά άτομα)	
Διαστάσεις εργαλείου	(x) x 4α x 11α (001) x εξαρτάται από το $a_r$	304 άτομα	
Γωνία ελευθερίας α <sub>r</sub>	45°		
Γωνία αποβλίττου	45° έως -63°		
Κατευθύνσεις κοπής	[100] σε επιφάνεια (001)		
Βάθος κοπής	6α = 2.1 mm σε επιφάνεια (001)		
Ταχύτητα κοπής	1.8-180 m/s		
Θερμοκρασία υποστρώματος	300 K		
Βήμα χρόνου Μοριακής Δυναμικής	0.814 fs		

Πίνακας 3.4: Παράμετροι υλικού κατεργασίας και προσομοίωσης(αριστερή στήλη για το τεμάχιο, δεζιά στήλη για το εργαλείο) [62]

Πειραματικά, καθώς το εργαλείο διέρχεται από την κατεργασμένη περιοχή, υπάρχει ένας μακροσκοπικός χρόνος (~ms), όπου το εργαλείο έχει απομακρυνθεί από την περιοχή και η επιφάνεια αφήνεται σε ηρεμία. Βρέθηκε ότι το βήμα χαλάρωσης επιτρέπει στις παραμορφώσεις να επαναφερθούν, δίνοντας ένα υλικό κατεργασίας υψηλής ποιότητας.

Η χαλάρωση του υλικού κατεργασίας για 150000 χρονικά βήματα MD (120 ps) συγκρίνεται για τις τρεις ταχύτητες κατεργασίας, με το εργαλείο σε θέση φόρτισης (Εικόνα 3.26). Για  $v_s = 180$  m/s, η συμπίεση κάτω από το εργαλείο και οι βαθείς βρόγχοι μετατόπισης έχουν επαναφερθεί σημαντικά, αφήνοντας το υλικό σχεδόν χωρίς παραμορφώσεις. Παρόλα αυτά, παρόμοιες μετατοπίσεις παραμένουν μετά την επαναφορά και από τις ταχύτητες 18 και 1.8 m/s. Στην πραγματικότητα, οι μετατοπίσεις βαθαίνουν ελαφρώς κατά την επαναφορά του δείγματος για  $v_s = 18$  m/s. Σε κάθε περίπτωση η αταξία μπροστά από το εργαλείο μειώθηκε. Πίσω από το

εργαλείο, η επιφάνεια παραμένει τραχιά για ταχύτητα 180 m/s, αλλά ομαλοποιείται όσο η ταχύτητα μειώνεται σε 1.8 m/s. [62]



Εικόνα 3.25: Τελικές διαμορφώσεις μετά την προσομοίωση μοριακής δυναμικής κατά την νανοκοπή επιφάνειας (001) χαλκού με άκαμπτο εργαλείο γωνίας αποβλήτου -45ο, για ταχύτητες κοπής 180, 18 και 1.8 m/s. Το βάθος κοπής σε κάθε περίπτωση είναι 1 nm [62]



Εικόνα 3.26: Διαμόρφωση του υλικού κατεργασίας μετά τη χαλάρωση του, με το εργαλείο σε θέση φόρτισης, με χρόνο προσομοίωσης ΜΔ 120 ps (150000 βήματα), για ταχύτητες κοπής 180, 18 και 1.8 m/s. [62]

Η αξιοσημείωτη χαλάρωση συμβαίνει για  $v_s = 180$  m/s, λόγω της δημιουργίας μιας περιοχής υψηλής θερμοκρασίας (θερμό σημείο) κάτω από το εργαλείο, η οποία 85

εκτείνεται και στο απόβλητο μετά την κοπή (Εικόνα 3.27). Οι τοπικές κινητικές ενέργειες κάτω από το εργαλείο είναι ισοδύναμες σε θερμοκρασίες των 900 K και ακόμη υψηλότερες στο απόβλητο. Μιας και η θερμοκρασία τοπικά προσεγγίζει η θερμοκρασία τήξης του χαλκού (Cu), μπορεί να εμφανιστεί σημαντική ατομική αναδιοργάνωση. Η χαλάρωση επιτρέπει στην περισσευούμενη ενέργεια να αποβληθεί διαχυθεί, μέσω αγωγή με τον κύριο όγκο του υλικού, και να επαναφέρει τις υψηλά ενεργητικές και άτακτες ατομικές περιοχές.



Εικόνα 3.27: Χωρική κατανομή της τοπικής θερμοκρασίας (Κ) στο υλικό κατεργασίας, μετά την προσομοίωση κοπής, συγκρινόμενη με τις θερμοκρασίες του υλικού αφού αφέθηκε σε ηρεμία για 120 ps (διαμόρφωση από την Εικόνα 3.22). Φαίνονται τα ζεύγη αποτελεσμάτων για ταχύτητες κοπής 180, 18 και 1.8 m/s. Σε κάθε φωτογραφία η κλίμακα διαφέρει, ενώ φαίνονται και οι τιμές σταθερής θερμοκρασίας για κάθε περίγραμμα [62]

Μιας και η θερμοκρασία είναι αρκετά υψηλή για 180 m/s, η περίσσεια ενέργειας δεν έχει πλήρως διαχυθεί, μετά τα 120 ps, αν και υφίσταται σημαντική επαναφορά και η θερμοκρασία μειώνεται σε 600-1000 K, μπροστά από το εργαλείο (Εικόνα 3.27). Περαιτέρω επαναφορά για επιπρόσθετα 80 ps (δεν φαίνεται) μειώνει τη θερμοκρασία σε λιγότερο από 600 K σε όλο το υλικό κατεργασίας. Συγκριτικά, υπάρχει πολύ μικρότερη αύξηση θερμοκρασίας 200 K, μετά την κατεργασία για υ<sub>s</sub> =18 m/s (Εικόνα 3.27), το οποίο είναι ανεπαρκές για την επαναφορά των μετατοπίσεων. Κατά την προσομοίωση των 1.8 m/s, δεν υπάρχει καθόλου τοπική θέρμανση καθώς και αμελητέα επαναφορά. Η δυναμική ενέργεια του υλικού κατεργασίας μειώνεται σημαντικά του υλικού κατεργασίας μειώνεται κατά 0.1 eV/άτομο, κατά την επαναφορά, λόγω της μεγάλης δομικής χαλάρωσης (Πίνακας 3.5).

Ταχύτητα υ <sub>s</sub> (m/s)	Δυναμική Ενέργεια μετά την κοπή (eV/άτομο)	Δυναμική Ενέργεια μετά και τη χαλάρωση (eV/άτομο)
180	-3.1296	-3.2358
18	-3.2019	-3.2140
1.8	-3.2164	-3.2170

Πίνακας 3.5: Δυναμικές ενέργειες	του υλικού	κατεργασίας	μετά την	κοπή,	αλλά και	μετά
	τη χαλάρω	ση [62]				

Οı δυναμικές ενέργειες ταχύτητες 1.8 18 m/s, για τις και μειώνεται ανεπαίσθητα κατά τη χαλάρωση, σύμφωνο και με την μικρότερη επαναφορά για αυτές τις ταχύτητες κατεργασίας. Οι χαμηλότερες ταχύτητες (1.8, 18 m/s) είναι απαραίτητες για τη δημιουργία ομαλής επιφάνειας, ενώ η υψηλή ταχύτητα (180 m/s) οδηγεί σε πιο τραχιά. Οι μετατοπίσεις σε χαμηλότερες ταχύτητες κατεργασίας μπορεί να είναι λιγότερο προβληματικές, αν χρησιμοποιηθούν πολυκρυσταλλικά υποστρώματα. Το γαρακτηριστικό, λοιπόν, που προσομοιώθηκε για πρώτη φορά, ήταν η περισσευούμενη ενέργεια μετά τη χαλάρωση κατά την νανοκοπή. Η περιοχή υψηλής θερμοκρασίας κάτω από το εργαλείο δείχνει τη δημιουργία πίεσης σε τοπικό επίπεδο, ένα χαρακτηριστικό που πρέπει να αντιμετωπιστεί για τη διεξαγωγή συνεχών προσομοιώσεων κατεργασίας.

Επίσης διεξήχθησαν νανοκατεργασίες αρκετά μεγαλύτερων συστημάτων της τάξεως 12000 ατόμων (Εικόνα 3.28) με τους ίδιους προσανατολισμούς υποστρώματος και εργαλείου, ενώ και η νανοκατεργασία πραγματοποιήθηκε σε αρκετά μεγαλύτερη απόσταση των 6.8 nm. Στο σχήμα φαίνεται η δημιουργία ζευγών μετατόπισης κάτω από το εργαλείο, μια άτακτη περιοχή κοντά στο εργαλείο και σημαντική δημιουργία αποβλήτου μπροστά από το εργαλείο. Τα αρχικά αποτελέσματα είναι παρόμοια με αυτά του μικρότερου συστήματος και καταδεικνύουν ότι τα μικρότερα

συστήματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την περιγραφή των βασικών φυσικών διαδικασιών κατά τη νανοκατεργασία.



Εικόνα 3.28: Προσομοίωση νανοκατεργασίας ενός σημαντικά μεγαλύτερου συστήματος με 12000 άτομα, με επιφάνεια κατεύθυνσης (001). Η διάταζη που φαίνεται είναι μετά την νανοκατεργασία απόστασης 6.8 nm με ταχύτητα 18 m/s [62]

# 3.5.2 Τριβή και δυνάμεις στο εργαλείο

Για τον υπολογισμό της κάθετης δύναμης (ή δύναμης ώσης) Fz και της δύναμης κοπής Fx, αθροίστηκαν οι δυνάμεις από τα εσωτερικά στρώματα του εργαλείου. Αμελώντας τη συνεισφορά δύναμης των εξωτερικών στρωμάτων του εργαλείου, τα οποία τρίβουν το υλικό, και είναι αντικείμενο της δισδιάστατης γεωμετρίας κοπής. Η σύσταση του πλέγματος μεταξύ του υλικού και του εργαλείου μπορεί να προκαλέσει μεγάλες περιοδικές διακυμάνσεις των δυνάμεων, το οποίο αποφεύγεται σε αυτή την προσομοίωση. Ο λόγος της δύναμης κοπής προς της δύναμη ώσης παρέχει το συντελεστή τριβής.

Η διακύμανση αυτών των δυνάμεων σε σχέση με την απόσταση κατεργασίας φαίνεται για το εργαλείο των 45°, βάθους 0.9 nm και  $v_s = 18$  m/s. Από τις μέσες χρονικά δυνάμεις, βρέθηκε μ = 0.64. Παρόμοιες διακυμάνσεις δυνάμεων και μ βρέθηκαν για το μεγαλύτερο σύστημα της Εικόνας 3.28. Μεγαλύτερες τιμές του μ αναμένονται για ξηρή κατεργασία μετάλλου – μετάλλου, όπου παράγονται μεγαλύτερες δυνάμεις κοπής. Όσο αυξάνεται το βάθος κοπής, και οι δυνάμεις ώσης και κοπής αυξάνονται σε μέγεθος, με παρόμοια ποιοτικά συμπεριφορά, άλλα το μ παραμένει κοντά σε αυτή την τιμή.

Η τιμή του μ που υπολογίστηκε συμφωνεί με τις πειραματικά μετρούμενους συντελεστές τριβής (Reese 2000) [80], για ξηρή χάλυβα σε χάλυβα 0.6 (στατικός συντελεστής) και 0.5 (κινητικός συντελεστής). Αναμένεται η τιμή του χαλκού να είναι παρόμοια με αυτή του χάλυβα. Δεν αποτελεί έκπληξη ότι η υπολογισθείσα τιμή του μ είναι μεγαλύτερη από το μετρούμενο συντελεστή κινητικής τριβής, μιας και η προσομοίωση περιλαμβάνει κατεργασία κάτω από την επιφάνεια. Η τιμή του μ εξαρτάται από την ομαλότητα της επιφάνειας.

#### 3.5.3 Σύγκριση με προηγούμενες μελέτες προσομοιώσεων

Ένα κρίσιμο χαρακτηριστικό, το οποίο προσομοιώθηκε από τους Ye, Biswas, Morris, Bastawros and Chandra [81], και δεν είχε ληφθεί υπόψη σε προηγούμενες προσομοιώσεις (Inamura *et al* 1993, 1994, Komanduri *et al* 2000a, 2000b, 2000c, Fang and Weng 2000) [77,31,32,58,63], ήταν η χαλάρωση του υλικού κατεργασίας μετά την πάροδο της κοπής. Αυτό επιτρέπει στην περισσευούμενη ενέργεια που παράγεται στην κατεργασμένη περιοχή να διαχυθεί μέσω αγωγής στον κύριο όγκο του υλικού και είναι κρίσιμο για την επαναφορά των παραμορφώσεων και των ζημιών. Οι υπερβολικές θερμοκρασίες στο υλικό κατεργασίας βρέθηκαν επίσης από τον Rentsch (2000) [82].

Η συμπίεση του υλικού κάτω από το εργαλείο κοπής και η δημιουργία αποβλήτου στις προσομοιώσεις, συμφωνούν με τα αποτελέσματα των Komanduri et al 2000a [58]. Επίσης η διεξαγωγή προσομοίωσης κοπής στην επιφάνεια χαλκού (111), δείχνει απουσία μετατοπίσεων στο υπόστρωμα, όπως και στους Komanduri et al 2000a [58]. Μιας και η επιφάνεια 111 είναι ένα φυσικό επίπεδο αποκοπής, η επιφάνεια κοπής είναι αρκετά επίπεδη και χωρίς παραμορφώσεις. Η εξάρτηση του συντελεστή τριβής μ με την κρυσταλλική γεωμετρία βρέθηκε επίσης από τους Komanduri, Chandrasekaran and Raff [63]. Συγκεκριμένα βρήκαν τιμές μ > 1 για εργαλεία με θετικές γωνίες αποβλήτου, και μ < 1 για εργαλείο με αρνητική γωνία αποβλήτου -450 (Komanduri et al 2000a, 2000b) [58].

Οι υπολογισθείσες δυνάμεις και το  $\mu < 1$  συμφωνούν με τα αποτελέσματα των Zhang και Tanaka (1997) [56] για ένα ολισθαίνον τραχύ διαμάντι σε επιφάνεια χαλκού (001). Οι Fang και Weng (2000) [77] βρήκαν μείωση του μ με τη γωνία του αποβλήτου για σημειακό εργαλείο σε τρισδιάστατες προσομοιώσεις MD, αποτέλεσμα αναμενόμενο με βάση τη μηχανική συνεχούς μέσου. Εξάλλου με τη βοήθεια της μεθόδου πολλών σωματιδίων (EAM), μπορούν να αναπαραχθούν αποτελέσματα σε συμφωνία με τις προηγούμενες προσεγγίσεις δυναμικού Morse. (Komanduri et al 2000a, 2000b,, Fang and Weng 2000, Zhang and Tanaka 1997) [77, 58, 63, 56]. Αυτό καταδεικνύει ότι τα αποτελέσματα των μελετητών είναι σχετικά ανεπηρέαστα στη συνάρτηση διατομικής δυναμικής ενέργειας που χρησιμοποιήθηκε.

Τέλος, στις πρόσφατες προσομοιώσεις νανοκατεργασίας χαλκού, συμπεριλήφθηκαν και οι διαδικασίες χάραξης επιφανειών, ως αποτέλεσμα της χημικής σύνθεσης της ιλύος CMP (Ye et al 2002) [81]. Εξάλλου, η διαδικασία χημικής χάραξης είναι σημαντική για την επίτευξη επίπεδης επιφάνειας.

# 3.6 Μελέτη της λείανσης σε νανοκλίμακα με τη βοήθεια της MD προσομοίωσης

Οι Lin, Yu and Wang [65] διεξήγαν προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής με σκοπό να ερευνήσουν βασικά χαρακτηριστικά της κατεργασίας της λείανσης με κόκκους εκτριβής. Ειδικότερα ασχολήθηκαν ιδιαίτερα με την απορρόφηση ενέργειας, την ανάλυση των δυνάμεων που αναπτύσσονται κατά την καταπόνηση του υλικού, τις παραμένουσες τάσεις του πλέγματος του υπό κατεργασία τεμαχίου και τη θερμοκρασία του ατομικού χώρου (όπως και τη διάχυση θερμότητας εντός του).

Οι προσομοιώσεις της λείανσης υπερ-ακρίβειας πραγματοποιήθηκαν χρησιμοποιώντας το μοντέλο της Εικόνας 3.29. Το τεμάχιο κατεργασίας είναι μονοκρυσταλλικό πυρίτιο με ομοιοπολικό δεσμό (silicon – Si) και το εργαλείο, το οποίο στην περίπτωσή μας ένας κόκκος λείανσης, είναι από διαμάντι. Το μέγεθος και οι διαστάσεις του κόκκου, όπως και το βάθος της εκτριβής καθορίστηκαν μέσω των πρακτικών απαιτήσεων των πειραματικών προσομοιώσεων. Για λόγους απλούστευσης, τα άτομα του εργαλείου θεωρούνται άκαμπτα, οπότε δεν υπάρχει παραμόρφωση και φθορά. Οι προσομοιώσεις MD διεξήχθησαν σε ένα 'μερικώς' τρισδιάστατο χωρικό μοντέλο, όπου οι υπολογισμοί γίνονται κυρίως κατά τις x και y συντεταγμένες, αλλά λαμβάνοντας υπόψη την επίδραση της διεύθυνσης z στις διευθύνσεις x και y.[65]



# **Εικόνα 3.29:** Μοντέλο προσομοίωσης MD νανοκατεργασίας με κόκκους λείανσης (abrasive grains)[65]

Όπως γνωρίζουμε, είναι απαραίτητο για τα αποτελέσματα της προσομοίωσης να επιλεχθεί ένα δυναμικό που να εκφράζει με ικανοποιητική ακρίβεια τους ατομικούς δεσμούς των κρυσταλλικών πλεγμάτων και τις αλληλεπιδράσεις τους, σε ένα πολύπλοκο σύστημα σωμάτων, όπως αυτό που εξετάζουμε. Επομένως, στις συγκεκριμένες προσομοιώσεις εφαρμόζεται το δυναμικό Tersoff για να περιγραφούν οι ομοιοπολικοί δεσμοί των κρυστάλλων πυριτίου-πυριτίου (silicon-silicon), άνθρακα-άνθρακα (carbon-carbon).[65, 83]

Μία σύνοψη της μεθόδου της προσομοίωσης MD για λείανση σε νανοκλίμακα που χρησιμοποιήθηκε μας παρέχει το διάγραμμα ροής (flowchart) της στην Εικόνα 3.30.



Εικόνα 3.30 : Διάγραμμα ροής της προσομοίωσης MD[65]

# 3.6.1 Αποτελέσματα και ανάλυση προσομοίωσης MD

Στην Εικόνα 3.31 μπορούμε να παρατηρήσουμε σε διαφορετικές χρονικές φάσεις της προσομοίωσης την παροδική κατάσταση του κατεργάσιμου τεμαχίου. Κατά τη συνεχή προώθηση του κόκκου λείανσης (abrasive grain), δημιουργούνται τάσεις μετατόπισης των ατόμων στο υλικό μπροστά από τον κόκκο λείανσης (Εικόνα 3.31 a). Οι μετατοπίσεις αυτές συσσωρεύονται όσο συνεχίζει να προωθείται ο κόκκος λείανσης και σχηματίζουν την πλαστική παραμόρφωση του κρυσταλλικού πλέγματος (Εικόνα 3.31 b) και c).



Εικόνα 3.31: Τρεις διαφορετικές φάσεις της λειαντικής διεργασίας.[65]

Το φαινόμενο γίνεται πολύ πιο έντονο όσο συνεχίζεται η πρόοδος του κόκκου επί της επιφάνειας του τεμαχίου. Στο τέλος της κατεργασίας τα άτομα συσσωρεύονται άτακτα μπροστά από τον κόκκο λείανσης, οδηγώντας στην εμφάνιση ενός μη-κρυσταλλικού στρώματος. Από τη στιγμή που ο κόκκος βρίσκεται ολόκληρος μέσα στο τεμάχιο

κόβοντάς το και έπειτα, η δύναμη κοπής σταθεροποιείται σε ένα επίπεδο. Όσο προχωράει ο κόκκος πάνω στο τεμάχιο, παρουσιάζονται δριμείς διακυμάνσεις της δύναμης κοπής γύρω από αυτό το επίπεδο. Οι διακυμάνσεις αυτές συμφωνούν με τα αποτελέσματα των διαφόρων τεστ εισχώρησης και σχετίζονται άμεσα με τις τάσεις μετατοπίσεων των ατόμων (atom dislocation) (Εικόνα 3.32).[65]

Οι μεταβολές της θερμοκρασίας κατά τη λείανση με ένα λειαντικό κόκκο είναι αρκετά μεγαλύτερες από αυτές κατά τη διεργασία εισχώρησης. Στην Εικόνα 3.33 παρατηρούμε ότι η μέση θερμοκρασία της ζώνης παραμόρφωσης είναι περί τους 440 Κ. Λαμβάνοντας υπόψη την επίδραση του αριθμού και της γεωμετρίας των λειαντικών κόκκων, συμπεραίνουμε πως η θερμοκρασία λείανσης δε θα πρέπει να αμελείται στις νανοκατεργασίες υψηλής ακρίβειας. [65, 84]



**Εικόνα 3.32:** Καμπύλη δύναμης κοπής σε συνάρτηση με το χρόνο. Παρατηρούμε τις διακυμάνσεις μετά το 400° βήμα, γύρω από την τιμή 0.5.[65]



Εικόνα 3.33: Διακύμανση της θερμοκρασίας λείανσης στο ατομικό πλέγμα κατά την κατεργασία.[65]

Στην Εικόνα 3.34 φαίνεται πως διανέμεται η θλιπτική τάση, κυρίως στο μπροστινό και στο κάτω τμήμα του λειαντικού κόκκου. Έτσι έχουμε παραμόρφωση του κρυσταλλικού πλέγματος και διαμόρφωση ενός μη κρυσταλλικού στρώματος κάτω από το εμπρόσθιο μέρος του κόκκου λείανσης. Για να προξενήσουμε τις ατομικές μετατοπίσεις σε κρύσταλλο ομοιοπολικού δεσμού, πρέπει πρώτα να ξεπεράσουμε το εμπόδιο της υψηλής δυναμικής ενέργειας των ατομικών δεσμών. Οι ατομικοί δεσμοί του κρυσταλλικού πλέγματος σπάνε υπό την επίδραση διατμητικών τάσεων (Εικόνα 3.35). Η παραμόρφωση, οι ατομικές μετατοπίσεις και η ανασύσταση του κρυσταλλικού πλέγματος δεν μπορούν να ικανοποιήσουν την ανάγκη απελευθέρωσης όλης της ενέργειας. Έτσι η απελευθέρωση της παραπάνω ενέργειας που γρειάζεται το σύστημα, πραγματοποιείται κατά τη διαμόρφωση του μη-κρυσταλλικού στρώματος κάτω από το μπροστινό μέρος του κόκκου λείανσης. Όσο διαρκεί η κατεργασία, τα μη-κρυσταλλικά άτομα του στρώματος αυτού θα συνδυαστούν με τους σπασμένους ατομικούς δεσμούς στην κατεργαζόμενη επιφάνεια για να σχηματίσουν ένα οριακό στρώμα στην κατεργασμένη επιφάνεια, που αποτελείται από ένα εξωτερικό μη-κρυσταλλικό στρώμα και ένα εσωτερικό κρυσταλλικό στρώμα παραμόρφωσης, όπως ακριβώς επιβεβαιώνει και η σχετική βιβλιογραφία πειραμάτων λείανσης υψηλής ακρίβειας. [65, 84, 17]



Εικόνα 3.34: Διακυμάνσεις των θλιπτικών τάσεων στο ατομικό πλέγμα κατά την κατεργασία.[65]



Εικόνα 3.35: Διακυμάνσεις των διατμητικών τάσεων στο ατομικό πλέγμα κατά την κατεργασία.[65]

# 3.6.2 Σημαντικά Συμπεράσματα

Οι Lin, Yu and Wang ερεύνησαν εντατικά προβλήματα που παρουσιάζονται κατά τη διάρκεια προσομοιώσεων MD λείανσης, όπως τα φυσικά και μηχανικά χαρακτηριστικά της λειαντικής διεργασίας, το μηχανισμό αποβολής υλικού και τη διαμόρφωση της υπό κατεργασία επιφάνειας στη μικροσκοπική ζώνη κοντά στο σημείο ενέργειας ενός κόκκου λείανσης. Η παρούσα μελέτη καταλήγει σε κάποια βασικά συμπεράσματα:

--Κατά την έναρξη της διεργασίας, η δύναμη κοπής της λείανσης αυξάνει συνεχώς, με έναν επαναλαμβανόμενο τρόπο που μοιάζει με ταλάντωση γύρω από μια διαρκώς αυξανόμενη τιμή. Όταν ο κόκκος βρεθεί ολόκληρος μέσα στο τεμάχιο και ενώ το κόβει, η δύναμη κοπής σταθεροποιείται σε ένα επίπεδο, γύρω από το οποίο συνεχίζονται οι διαρκείς διακυμάνσεις και αυξάνει σημαντικά το εύρος της ταλάντωσης της τιμής της δύναμης. Αυτές οι μεγάλες διακυμάνσεις είναι υπεύθυνες για τη διαμόρφωση της μετατόπισης των ατόμων και της πλαστικής παραμόρφωσης του κρυσταλλικού πλέγματος.

--Ο μηχανισμός αποβολής υλικού μελετήθηκε σε βάθος. Κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης παρατηρήσαμε πως τα άτομα του κρυσταλλικού πλέγματος ανασυγκροτούνται και μέρος των μη-κρυσταλλικών πλέον ατόμων συσσωρεύονται μπροστά στον κόκκο λείανσης. Το αποτέλεσμα της συνέχειας της κατεργασίας είναι η

αποβολή υλικού και η δημιουργία του αποβλήτου της διεργασίας της λείανσης. Ταυτόχρονα, υπό την πίεση θλιπτικών τάσεων, τα μη κρυσταλλικά άτομα συνδυάζονται με τους ελεύθερους ατομικούς δεσμούς του πλέγματος (που έσπασαν υπό την επίδραση των διατμητικών τάσεων) και ανασυγκροτούνται για να σχηματίσουν το εκφυλισμένο στρώμα της κατεργαζόμενης επιφάνειας, που αποτελείται από μία εξωτερική μη-κρυσταλλική ζώνη ατόμων και μία εσωτερική κρυσταλλική ζώνη παραμόρφωσης.

--Κατά τη διαμόρφωση των ατομικών μετατοπίσεων και την αύξηση της κινητικής ενέργειας των ατόμων, η θερμοκρασία του ατομικού κρυσταλλικού πλέγματος αυξάνει επίσης, γεγονός που εντατικοποιεί τη θερμική δόνηση του ατομικού κρυσταλλικού πλέγματος και βοηθάει την πλαστική παραμόρφωση του υλικού.

--Οι προσομοιώσεις MD μας παρέχουν έναν αποτελεσματικό και πολύ αποδοτικό τρόπο της μελέτης της θεωρίας της λείανσης σε νανοκλίμακα. Μολαταύτα, υπάρχουν ακόμα προβλήματα που συναντάμε κατά την εφαρμογή της μεθόδου MD, όπως ο σωστός ορισμός ενεργειακού δυναμικού, η κατάλληλη περιγραφή των υλικών και των αρχικών συνθηκών, ο πολύς χρόνος που χρειάζεται να απασχοληθούν συμβατικοί υπολογιστές για να πραγματοποιήσουν μια σειρά από αντίστοιχες προσομοιώσεις MD, καθώς και η διαδικασία φθοράς λειαντικού κόκκου από διαμάντι, η οποία πρέπει να μελετηθεί περισσότερο για να έχουμε πιο ασφαλή συμπεράσματα γύρω από την κατεργασία της λείανσης σε νανοκλίμακα.[65]

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

# Βασική Ανάλυση του Κώδικα Προσομοίωσης

# 4.1 Εισαγωγή

Στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει μία προσπάθεια ανάλυσης του βασικού κώδικα προσομοίωσης, καθώς και των προσθηκών και των τροποποιήσεων που έγιναν σε αυτόν για να επιτύχουμε την αποτελεσματική προσομοίωση της κατεργασίας της λείανσης με κόκκους σε νανοκλίμακα. Στις επόμενες ενότητες, θα παρουσιάσουμε καταρχήν μία σύντομη ανάλυση της δομής του αλγόριθμου και στη συνέχεια θα επιχειρήσουμε να περιγράψουμε διεξοδικά τον κώδικα προσομοίωσης MD. Με τη χρήση του υπολογιστικού πακέτου Matlab R2009b και στα πλαίσια του τροποποιημένου κώδικα, θα πραγματοποιηθεί μία σειρά προσομοιώσεων της λείανσης με κόκκους σε νανοκλίμακα με τη μεταβολή συγκεκριμένων παραμέτρων και εξαγωγή των επιθυμητών χαρακτηριστικών της κατεργασίας σε κάθε περίπτωση. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων αυτών θα παρουσιαστούν λεπτομερώς και θα αναλυθούν στα επόμενα κεφάλαια.

# 4.2 Γενική Δομή του Αλγόριθμου

Έχουμε διαπιστώσει επανειλημμένως στην τρέχουσα εργασία πως η θεμελιώδης φιλοσοφία της Μοριακής Δυναμικής και κατ' επέκταση και η δομή του κώδικα προσομοίωσης, είναι η επαναληπτική ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης του Νεύτωνα. Οι εξισώσεις κίνησης αφορούν συγκεκριμένο πλήθος ατόμων, που αποτελούν τα Νευτώνεια άτομα (Newtonian atoms). Από αυτές τις εξισώσεις, με χρήση της μεθόδου των βατραχοδρασκελισμών, θα γίνεται η αριθμητική ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης του

Για την ενσωμάτωση και τον υπολογισμό των εξισώσεων κίνησης των Νευτώνειων ατόμων στον κώδικά μας, θα χρησιμοποιήσουμε το δυναμικό Morse. Ο λόγος που χρησιμοποιούμε το συγκεκριμένο δυναμικό είναι ότι πρόκειται για ένα ιδιαίτερα εύχρηστο δυναμικό ενέργειας και μπορεί να περιγράψει ικανοποιητικά τα μεταλλικά υλικά, ειδικά τα υλικά δομής fcc όπως ο χαλκός. Το δυναμικό Morse είναι ίσως το πιο ευρέως διαδεδομένο και χρησιμοποιημένο δυναμικό, κυρίως εξαιτίας της ακρίβειας που προσφέρει και της δυνατότητας έκφρασης αλληλεπιδράσεων μεταξύ ατόμων για πολλά διαφορετικά υλικά. Αρκετές μελέτες που έχουν γίνει για την προσομοίωση κατεργασίας σε νανοκλίμακα με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής χρησιμοποιούν το εν λόγω δυναμικό, για να ελέγξουν τα αποτελέσματα πιο σύγχρονα εξελιγμένων δυναμικών καθώς και για την ανάπτυξη νέων. Επομένως, οι εξισώσεις μέσω των οποίων θα υπολογίσουμε τις δυνάμεις που αναπτύσσονται ανάμεσα στα άτομα του χαλκού (Cu-Cu), αλλά και ανάμεσα στα άτομα του τεμαχίου και του εργαλείου (κόκκου λείανσης), δηλαδή μεταξύ των ατόμων του χαλκού και των ατόμων του διαμαντιού (Cu-C) θα προκύψουν από το δυναμικό ενέργειας Morse. Θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε το δυναμικό ενέργειας Lennard – Jones 12 – 6. Το συγκεκριμένο δυναμικό έπαι του διαμαντιού επιτυχώς, καθώς δεν υπάρχουν οι απαραίτητες παράμετροι για το δυναμικό μέσω των αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα του χαλκού και το δυναμικό μεταξύ των αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα του χαλκού και το δυναμικό μέσω του διαμαντιού επιτυχώς, καθώς δεν υπάρχουν οι απαραίτητες παράμετροι για το δυναμικό Lennard – Jones 12 – 6 και θα πρέπει να γίνουν επιπλέον παραδοχές. Ακόμα, ενώ η περιγραφή των αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα άτομα του χαλκού μέσω του δυναμικού Lennard – Jones 12 – 6 είναι αρκετά ικανοποιητική, υπάρχουν αναφορές σε διάφορες μελέτες ότι το εν λόγω δυναμικό παρουσιάζει πολύ μεγαλύτερες τιμές δυνάμεων και ορατά χειρότερη επιφάνεια κατεργασίας. [17]

Όπως και με τους κώδικες που χρησιμοποιούν μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων, έτσι και στον δικό μας κώδικα, διακρίνουμε τρία στάδια. Το πρώτο στάδιο είναι αυτό της αρχικοποίησης των δεδομένων (Pre – Processor). Το ενδιάμεσο στάδιο και το πιο βασικό είναι η επίλυση (Solver). Το τελικό στάδιο είναι η εξαγωγή των αποτελεσμάτων και πιθανώς και η επεξεργασία τους (Post – Processor).

Όσον αφορά στο πρώτο τμήμα του κώδικα, αυτό της αρχικοποίησης των δεδομένων, γίνεται ένας πρώτος ορισμός των χαρακτηριστικών του συστήματός μας. Εν προκειμένω, τα χαρακτηριστικά που πρέπει να οριστούν είναι τα εξής: Αρχικά, ορίζονται τα χαρακτηριστικά του προς κατεργασία τεμαχίου. Αυτά είναι ο αριθμός των ατόμων που το απαρτίζουν, η διάταξη των ατόμων και οι αρχικές θέσεις που αυτά έχουν κατά την έναρξη της προσομοίωσης. Βέβαια, οι θέσεις αυτές σχετίζονται άμεσα με τη δομή του συγκεκριμένου υλικού το οποίο θέλουμε να μελετήσουμε. Στην περίπτωσή μας, το πλήθος των ατόμων που απαρτίζουν το τεμάχιο επιλέγεται ίσο με 800, που γωρίζονται σε νευτώνεια και συνοριακά (ακίνητα καθ' όλη τη διάρκεια της κατεργασίας) όπως γνωρίζουμε και θα δούμε και στη συνέχεια. Η τιμή αυτή θεωρείται αποδεκτή και ικανοποιητική για παρόμοιες παρομοιώσεις. Η διάταξη επιλέγεται βάσει του υλικού, το οποίο είναι ο χαλκός με δομή fcc. Στη συνέχεια, πρέπει να οριστούν οι αρχικές ταχύτητες των ατόμων του τεμαχίου κατά την έναρξη της προσομοίωσης. Αυτές εξαρτώνται από τη θερμοκρασία του τεμαχίου και επιλέγονται έτσι ώστε η συνολική ορμή του συστήματος να είναι μηδενική, δηλαδή το κέντρο μάζας να παραμένει σταθερό. Επιπλέον, ορίζονται οι αρχικές επιταχύνσεις των ατόμων, οι οποίες θεωρούμε ότι είναι μηδενικές.

Στη συνέχεια, η ίδια διαδικασία ακολουθείται για τον ορισμό των χαρακτηριστικών του εργαλείου, που στην προκειμένη περίπτωση είναι ένας λειαντικός κόκκος. Ορίζεται ο αριθμός των ατόμων που το απαρτίζουν, η διάταξή τους και η δομή ανάλογα με το

γρησιμοποιούμενο υλικό. Ουσιαστικά, ορίζονται οι αρχικές θέσεις των ατόμων του κόκκου λείανσης κατά την έναρξη της προσομοίωσης. Το υλικό του εργαλείου είναι το μονοκρυσταλλικό διαμάντι. Λόγω της συγκεκριμένης επιλογής υλικού, το εργαλείο θεωρείται άκαμπτο κατά τη διάρκεια της κατεργασίας. Το πλήθος των ατόμων του εργαλείου αρχικά επιλέγεται ίσο με 120, ώστε να είναι σε πραγματική αναλογία με τα άτομα του τεμαχίου. Κατά τη διεξαγωγή της σειράς προσομοιώσεων, ο αριθμός αυτός θα μεταβληθεί για τους σκοπούς της έρευνας της κατεργασίας και κυρίως θα μειωθεί για να μειωθεί αντίστοιχα και ο υπολογιστικός χρόνος. Στη φάση αυτή, θεωρούμε ότι βρισκόμαστε λίγο πριν από την έναρξη της διεργασίας, δηλαδή πριν ο λειαντικός κόκκος έρθει σε επαφή με το τεμάχιο, επομένως κατά την έναρξη της προσομοίωσης το εργαλείο μας βρίσκεται σε κάποια ορισμένη απόσταση από το τεμάχιο. Στη συνέχεια, γίνεται ορισμός των αργικών ταγυτήτων των ατόμων του εργαλείου, όπου στη συγκεκριμένη περίπτωση πρόκειται για μία συγκεκριμένη τιμή της ταχύτητας με κατεύθυνση τέτοια έτσι ώστε ο κόκκος λείανσης να τείνει να προσεγγίσει το τεμάχιο και να ξεκινήσει η κατεργασία. Οι αρχικές επιταχύνσεις των ατόμων του εργαλείου και εδώ θεωρούμε ότι είναι μηδενικές, με τη διαφορά ότι σε αυτή την περίπτωση θα παραμείνουν μηδενικές καθ' όλη τη διάρκεια της λείανσης, επειδή σε όλη τη σειρά προσομοιώσεων η ταχύτητα των ατόμων του εργαλείου θα διατηρείται σταθερή [33].

Στη συνέχεια, ακολουθεί το τμήμα της επίλυσης. Αυτό αποτελεί το βασικό τμήμα του προβλήματος, καθώς σε αυτό γίνεται η ενσωμάτωση και η ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης. Η διαδικασία αυτή είναι επαναληπτική. Η λογική σε κάθε επανάληψη του αλγορίθμου είναι η εξής: Πραγματοποιείται υπολογισμός της δύναμης αλληλεπίδρασης σε κάθε δομική μονάδα, δηλαδή σε κάθε ένα από τα άτομα. Για κάθε ένα άτομο, οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης που υπολογίζονται είναι αυτές που δέχεται το συγκεκριμένο άτομο από τα γειτονικά του άτομα. Στην δική μας περίπτωση δεν θα υπολογίζονται οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης για όλα τα ζεύγη ατόμων, αλλά θα οριστεί μία συγκεκριμένη απόσταση αποκοπής rc. Με άλλα λόγια, σε κάθε άτομο θα υπολογίζονται οι δυνάμεις αλληλεπίδρασης που δέχεται το συγκεκριμένο άτομο από όλα τα γειτονικά του άτομα που βρίσκονται σε απόσταση μικρότερη ή ίση από rc. Στη συνέχεια, για κάθε ένα άτομο, θα γίνεται άθροιση των συνισταμένων δυνάμεων που δέχεται. Αφού έχει ευρεθεί για κάθε άτομο η συνισταμένη του δύναμη τη συγκεκριμένη στιγμή, ακολουθεί ο υπολογισμός της στιγμιαίας του επιτάχυνσης μέσω των εξισώσεων κίνησης που εφαρμόζονται. Στη συνέχεια, ακολουθεί η μέθοδος της αριθμητικής ολοκλήρωσης που χρησιμοποιούμε, που συγκεκριμένη περίπτωση είναι στη αυτή των βατραχοδρασκελισμών. Εφόσον η επιτάχυνση είναι η πρώτη παράγωγος της ταχύτητας και με χρήση των επιταχύνσεων των ατόμων, γίνεται υπολογισμός της μεταβολής της ταχύτητας για το κάθε άτομο μέσα στο συγκεκριμένο διάστημα ολοκλήρωσης. Γνωρίζοντας αυτή τη συγκεκριμένη μεταβολή της ταχύτητας κάθε ατόμου και εφόσον η ταχύτητα είναι η πρώτη παράγωγος της θέσης, μπορεί να βρεθεί η μεταβολή στη θέση κάθε ατόμου, δηλαδή με άλλα λόγια η μετατόπιση κάθε δομικής μονάδας. Εν συνεχεία, ο αλγόριθμος επαναλαμβάνεται και βρίσκουμε νέες τιμές δυνάμεων αλληλεπίδρασης, ταχυτήτων και επιταχύνσεων.

Σε κάθε βήμα επανάληψης, η προσομοίωση της κοπής εξελίσσεται και ο κόκκος λείανσης αφαιρεί σταδιακά υλικό από το τεμάχιο. Η διαδικασία αυτή εξελίσσεται, έως ότου ολοκληρωθεί το σύνολο των επαναληπτικών βημάτων, που ορίζουμε στο πρώτο τμήμα του κώδικα, αυτό της αρχικοποίησης δεδομένων. Σε κάθε επανάληψη, ευρίσκονται και αποθηκεύονται οι τιμές όλων των μεγεθών που μας ενδιαφέρουν [33].

Στο τέλος, ακολουθεί η εξαγωγή και η επεξεργασία των αποτελεσμάτων, τα οποία θα δούμε αναλυτικά στην πορεία.

Εκτός από τα νευτώνεια και τα συνοριακά άτομα, υπάρχουν και τα θερμοστατικά άτομα. Τα θερμοστατικά άτομα επιτελούν, όπως μαρτυρά και το όνομά τους, τη διαδικασία της θερμοστάτησης, που είναι η ρύθμιση της θερμοκρασίας στην επιθυμητή τιμή. Στην ουσία, το σύστημα αφήνεται να εξελιχθεί για λίγο χωρίς περιορισμό θερμοκρασίας και σε τακτά χρονικά διαστήματα η θερμοκρασία επιβάλλεται να γίνει ίση με την επιθυμητή. Τα θερμοστατικά άτομα αλληλεπιδρούν με τα υπόλοιπα του συστήματος, επηρεάζοντας την κινητική τους ενέργεια. Ο τρόπος με τον οποίο την επηρεάζουν, οδηγεί σε κινητική ενέργεια, η οποία αντιστοιχεί στην επιθυμητή θερμοκρασία μέσω επαναπροσδιορισμού της ταχύτητας. Όταν η θερμοκρασία των θερμοστατικών ατόμων, κατά την προσομοίωση της λείανσης νανοκλίμακας, ξεπερνά την καθορισμένη θερμοκρασία για το υλικό κατά 3 βαθμούς, οι ταχύτητες ανακατατάσσονται βάσει συγκεκριμένων εξισώσεων.

Παρόλο που ο βασικός αλγόριθμος προσφέρει τα πλαίσια και για τρισδιάστατη μελέτη του φαινομένου, η μοντελοποίηση γίνεται σε δύο διαστάσεις, για να μειωθεί σημαντικά η υπολογιστική πολυπλοκότητα και ο χρόνος της προσομοίωσης. Και πάλι, ένας ηλεκτρονικός υπολογιστής με 16Gb μνήμης RAM και quad-quatro (τετραπύρηνος) επεξεργαστή, όπως αυτός που έχουμε στη διάθεσή μας για την πραγματοποίηση των προσομοιώσεων, θέλει τουλάχιστον 8 με 10 ώρες για να εκτελέσει μία προσομοίωση.

# 4.3 Περιγραφή του Κώδικα Προσομοίωσης MD

Στην ενότητα αυτή, θα προχωρήσουμε στην περιγραφή του κώδικα, ο οποίος αναπτύχθηκε με βάση το σκεπτικό που παρουσιάστηκε προηγουμένως. Σε πρώτη φάση, ορίζονται κάποια αρχικά δεδομένα για τον κώδικα, όπως είναι οι διαστάσεις του υπό περιγραφή συστήματος, το χρονικό βήμα, η θερμοκρασία και συγκεκριμένες παράμετροι για την εξέλιξη του φαινομένου, όπως για παράδειγμα ο ρυθμός εξαγωγής των επιθυμητών αποτελεσμάτων. Σε αυτό το αρχικό στάδιο ορίζονται και οι χρησιμοποιούμενες μονάδες μέτρησης.

# 4.3.1 Χρησιμοποιούμενες Μονάδες Μέτρησης

Λόγω του ότι η λείανση λαμβάνει χώρα στη νανοκλίμακα και οι μεταβλητές λαμβάνουν εξαιρετικά μικρές τιμές, είναι απαραίτητη η επιλογή εύχρηστων μονάδων μέτρησης των διαφόρων μεγεθών. Για το λόγο αυτό χρησιμοποιούνται αδιάστατες μονάδες μέτρησης.

Η μονάδα μέτρησης μήκους είναι :

$$[L] = 1 \times 10^{-1} nm = 1 \times 10^{-10} m = 1 \text{ Å}$$
(4.1)

Η μονάδα μέτρησης ενέργειας είναι :

$$[E] = 1eV = 1.602176 \times 10^{-19} J \tag{4.2}$$

Η μονάδα μέτρησης δύναμης είναι :

$$[F] = [a][D] = \frac{[E]}{[L]} = \frac{eV}{A} = \frac{1.602176 \times 10^{-19}}{10^{-10}m} = 1.602176 \times 10^{-9}N$$
(4.3)

Η μονάδα μέτρησης μάζας είναι :

$$[m] = \frac{[M]}{[M_{\rm F}]} = \frac{62.93 \times 10^{-26}}{6.022} kg = 1.045 \times 10^{-25} kg \tag{4.4}$$

Η μονάδα μέτρησης χρόνου είναι :

$$[\ddot{r}] = \frac{[F]}{[m]} = \frac{[L]}{[L]^2} \to [L] = \sqrt{\frac{[L][m]}{[F]}} = 80.76 \times 10^{-15} \text{s} = 80.76 \text{ fs}$$
(4.5)

Η μονάδα μέτρησης θερμοκρασίας είναι :

$$[T] = \frac{[L]^2[m]}{[L]^2[k_B]} = \frac{[L]^2[m]}{[L][m][r]^{-1}[k_B]} = 11604.505 K$$
(4.6)

Το χρονικό βήμα ολοκλήρωσης επιλέγεται ίσο με :

$$dt = 10 \, fs = 0.123 \, t_{unit,MD} \tag{4.7}$$

Η θερμοκρασία προσομοίωσης είναι :

$$T = 293 K = \frac{29}{11 \dots .5} 11604.505 K = 0.0252 T_{un} MD$$
(4.8)

101

#### 4.3.2 Ορισμός Αρχικών Συνθηκών και Βασικών Μεταβλητών

Στη συνέχεια, καλείται η συνάρτηση SetParams, στην οποία ορίζονται μεταβλητές απαραίτητες για την προσομοίωση, στις αντίστοιχες βέβαια κάθε φορά μονάδες της Μοριακής Δυναμικής, πέρα από αυτές που ορίστηκαν προηγουμένως. Η πιο σημαντική μεταβλητή που ορίζεται στη συνάρτηση αυτή είναι η rCut, η οποία αντιπροσωπεύει την απόσταση αποκοπής για τη μέθοδο του υπολογισμού αλληλεπιδράσεων που εφαρμόζουμε. Στη δική μας περίπτωση, επιλέγουμε να είναι rCut = 10, πάντα σε μονάδες Μοριακής Δυναμικής, που εν προκειμένω είναι 10 Angstrom. Ο λόγος που διαλέγουμε μία μεγαλύτερη γενικά τιμή είναι για να έχουμε περισσότερο αντιπροσωπευτικά αποτελέσματα για το σύστημα που θέλουμε να μελετήσουμε, λαμβάνοντας υπόψη το μέγεθός του. Αυτό σημαίνει ότι ο υπολογισμός των αλληλεπιδράσεων θα γίνεται μόνο για ζεύγη ατόμων τα οποία απέχουν μεταξύ τους απόσταση μικρότερη ή ίση από 10 Å, ενώ για μεγαλύτερες αποστάσεις, οι δυνάμεις θα θεωρούνται μηδενικές.

Έπειτα, καλείται η συνάρτηση SetupJob, στην οποία γίνεται αρχικοποίηση βασικών μεταβλητών και ορισμός του υπό περιγραφή συστήματος. Ορίζουμε λοιπόν σε αυτή τη συνάρτηση τον αριθμό ατόμων στο τεμάχιο και το λειαντικό κόκκο και τη διάταξή τους στο επίπεδο, που καθορίζει τη μορφή του τεμαχίου και του κόκκου. Για να μπορούμε να διακρίνουμε τα είδη των ατόμων, ορίζουμε τη μεταβλητή moltype και ουσιαστικά δίνουμε μία διαφορετική τιμή στη μεταβλητή αυτή ανάλογα με το είδος των ατόμων που έχουμε. Η μεταβλητή αυτή είναι ένα διάνυσμα – γραμμή, με τόσες στήλες όσο είναι το συνολικό πλήθος των ατόμων στο μοντέλο μας. Έτσι, για τα άτομα του κοπτικού εργαλείου, δηλαδή του κόκκου διαμαντιού στην περίπτωσή μας, ορίζουμε :

$$moltype(1, tool) = 1$$
 (4.9)

Για τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου δίνουμε :

$$moltype(1, partNewton) = 2$$
 (4.10)

Για τα Θερμοστατικά άτομα του τεμαχίου έχουμε :

$$moltype(1, partThermo) = 3$$
 (4.11)

Οπότε για τα Συνοριακά άτομα του τεμαχίου έχουμε :

$$moltype(1, partBoundary) = 4$$
 (4.12)

Με βάση λοιπόν τη μεταβλητή moltype και τις μεταβλητές tool, part, partNewton και partBoundary, γίνεται ακριβής ορισμός και διάκριση των διαφορετικών ατόμων του συστήματός μας. Για το εργαλείο ορίζουμε στην αρχική του μορφή να αποτελείται από 120 άτομα, ενώ τα 800 άτομα του τεμαχίου χωρίζονται σε 576 Νευτώνεια, 108 Θερμοστατικά και 116 Συνοριακά.

Αφού έγινε ο ορισμός του πλήθους των ατόμων και διάκρισή τους, ακολουθεί ο ακριβής ορισμός των θέσεων τους. Οι θέσεις των ατόμων στον κώδικά μας περιγράφονται από τη μεταβλητή r. Μέσα λοιπόν στη συνάρτηση *SetupJob*, καλείται αρχικά η συνάρτηση *InitCoordsPart*. Σε αυτήν ορίζονται οι αρχικές συντεταγμένες των ατόμων του τεμαχίου στο επίπεδο (x, y), οι οποίες εξαρτώνται από την δομή του υλικού, δηλαδή του χαλκού, όπως έχουμε προαναφέρει. Όπως είδαμε, ο χαλκός έχει δομή *fcc* και τα άτομά του απέχουν μεταξύ τους απόσταση 3.62 Å. Σύμφωνα λοιπόν με αυτά τα δεδομένα και την επιθυμητή μορφή του τεμαχίου, ορίζουμε τις συντεταγμένες που έχουν κατά την έναρξη της προσομοίωσης τα άτομά του. Θεωρούμε ότι το τεμάχιο στο επίπεδο (x, y) έχει ορθογωνική μορφή.

Στη συνέχεια, με τον ίδιο ακριβώς τρόπο, καλείται η συνάρτηση *InitCoordsTool*, στην οποία τώρα γίνεται ορισμός των αρχικών συντεταγμένων των ατόμων του κόκκου λείανσης. Για να γίνει αυτό λαμβάνεται υπόψη η δομή του διαμαντιού και το γεγονός ότι οι διατομικές αποστάσεις σε αυτό είναι 1.54 Å. Σε μία πρώτη προσπάθεια, ο λειαντικός κόκκος θεωρούμε ότι έχει την πιο απλή μορφή.

Αφού οριστούν οι αρχικές συντεταγμένες των ατόμων του συστήματός μας, σειρά έχει ο ορισμός των αρχικών ταχυτήτων των ατόμων, οι οποίες περιγράφονται από τη μεταβλητή rv. Επομένως, στη συνέχεια, καλείται η συνάρτηση InitVelsPart, στην οποία γίνεται ορισμός των αρχικών ταχυτήτων που έχουν τα άτομα του τεμαχίου. Βέβαια, οι αρχικές αυτές ταχύτητες αφορούν μόνο τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου, καθώς τα Συνοριακά άτομα, όπως έχουμε δει, παραμένουν ακίνητα καθ' όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης και επομένως οι ταχύτητές τους, τόσο στην αρχή όσο και σε όλη την εξέλιξη του φαινομένου, είναι μηδενικές. Αναφορικά λοιπόν με τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου, αυτά έχουν αρχικές ταχύτητες, οι οποίες εξαρτώνται άμεσα από τη θερμοκρασία και επιλέγονται με τέτοιο τρόπο έτσι ώστε η ορμή του συστήματος να είναι μηδενική, δηλαδή το κέντρο μάζας του τεμαχίου να παραμένει σταθερό. Έτσι λοιπόν, ορίζεται η μεταβλητή velMag η οποία αντιπροσωπεύει το μέτρο της αρχικής ταχύτητας των ατόμων του τεμαχίου, και η οποία περιγράφεται από τη σχέση :

$$velMag = (2 \times (1 - 1/nMolNewton) \times T)^{0.5}$$
(4.13)

όπου η μεταβλητή *nMolNewton* εκφράζει το πλήθος των Νευτώνειων ατόμων του τεμαχίου και η μεταβλητή *T* εκφράζει τη θερμοκρασία της προσομοίωσης, που δίνεται από τη σχέση (4.8). Επομένως, κατά την έναρξη της προσομοίωσης, ορίζεται ότι όλα τα 103

Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου έχουν την παραπάνω ταχύτητα κατά μέτρο και τυχαία κατεύθυνση.[33]

Παρόμοια ορίζεται η αρχική ταχύτητα των ατόμων του λειαντικού κόκκου, η οποία είναι κοινή για όλα τα άτομά του και σταθερή καθ' όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης. Είναι η ταχύτητα με την οποία ο κόκκος τρίβει το τεμάχιο και αντιπροσωπεύει την ταχύτητα της λειαντικής διεργασίας στην προσομοίωση. Αυτή εισάγεται μέσω της συνάρτησης *InitVelsTool* και στη συγκεκριμένη μελέτη, ορίζουμε :

$$V_{I} = 0.1 \frac{L_{un I,MD}}{L_{un MD}} = 0.1 \frac{10^{-10} m}{80.76 \times 10^{-15} m} = 123 m/m$$
(4.14)

η οποία είναι γενικά μία αποδεκτή και συχνά χρησιμοποιούμενη και από άλλους ερευνητές τιμή ταχύτητας της λειαντικής διεργασίας. Στη βιομηχανία αλλά και στις πειραματικές έρευνες, οι πιο συνηθισμένες ταχύτητες λείανσης που συναντώνται είναι της τάξεως των 5 με 15 για λείανση υψηλής ακρίβειας, 25 με 85 για τις περισσότερες λειαντικές κατεργασίες και 180 με 250 για τις λειάνσεις υψηλών ταχυτήτων (high speed grinding)[17,33,51,84,85,86]. Επομένως, είμαστε αισιόδοξοι ότι η συγκεκριμένη τιμή της ταχύτητας της λείανσης ανταποκρίνεται επαρκώς στην πειραματική πραγματικότητα και θεωρούμε, έχοντας συνεχώς στο νου μας και τη μείωση του χρόνου προσομοίωσης (προσομοίωση με ταχύτητα λείανσης 10 m/s, θα λίγες μέρες να ολοκληρωθεί), πως αυτή η τιμή για την ταχύτητα λείανσης της προσομοίωσης είναι αρκετά κατάλληλη. Η μεταβλητή που στον κώδικα αντιπροσωπεύει αυτή την τιμή της ταχύτητας λείανσης είναι η veltool και στον κώδικά μας δίνεται ως veltool = [-0,1, 0, 0], σε μονάδες Μοριακής Δυναμικής βεβαίως. Παρατηρούμε ότι η *veltool* έχει συνιστώσα μόνο κατά τη διεύθυνση x, οπότε ο κόκκος θα κινείται μόνο κατά τη διεύθυνση x προκειμένου να τρίψει το τεμάχιο. Αυτό θα συμβαίνει, όπως θα δούμε στο επόμενο κεφάλαιο, μόνο σε κάποιες περιπτώσεις της σειράς προσομοιώσεων που θα ακολουθήσει. Στις υπόλοιπες, η ταχύτητα λείανσης θα έχει συνιστώσες και κατά x και κατά y, και το μέτρο της θα κυμαίνεται σε τάξεις μεγέθους αντίστοιχες της τιμής που βρέθηκε στην εξίσωση (4.14).[33,51]

Έπειτα από τον ορισμό των θέσεων και των ταχυτήτων των ατόμων του συστήματος κατά την έναρξη της προσομοίωσης, ακολουθεί και ο ορισμός των αρχικών επιταχύνσεων των ατόμων, οι οποίες περιγράφονται από τη μεταβλητή *ra*. Αυτές ορίζονται καλώντας τη συνάρτηση *InitAccels* και θεωρούμε ότι τόσο για τα άτομα του τεμαχίου όσο και για αυτά του λειαντικού κόκκου, αυτές είναι μηδενικές κατά την έναρξη της προσομοίωσης (για τον κόκκο λείανσης παραμένουν μηδενικές μέχρι το πέρας της προσομοίωσης).

Πέρα από τον ορισμό των αρχικών θέσεων, ταχυτήτων και επιταχύνσεων μας ενδιαφέρει και ο ορισμός της αρχικής κινητικής και συνολικής ενέργειας του

συστήματος, καθώς είναι δύο από τα σημαντικά μεγέθη που μας ενδιαφέρει να μετρήσουμε. Η μεταβλητή *kinEnergy* αναφέρεται στην κινητική ενέργεια και ορίζεται στον κώδικα ως :

$$kinEnergy.val = 0.5*vvSum / nmol$$
(4.15)

όπου η μεταβλητή vvSum αφορά το άθροισμα των τετραγώνων των ταχυτήτων ενός χρονικού βήματος και η μεταβλητή totEnergy αναφέρεται στη συνολική ενέργεια και ορίζεται ως εξής :

$$totEnergy.val = kinEnergy.val + uSum / nmol$$
(4.16)

όπου η μεταβλητή *uSum* αφορά στη συνολική δυναμική ενέργεια που προκύπτει από το χρησιμοποιούμενο δυναμικό για κάθε χρονική επανάληψη. Η αρχική κινητική και συνολική ενέργεια του συστήματος πρέπει επίσης να είναι μηδενικές.

#### 4.3.3 Κύριο Μέρος του Κώδικα και Ροή Στοιχειωδών Συναρτήσεων

Η συνάρτηση που υπολογίζει τις μέσες και τυπικές αποκλίσεις των μεγεθών που θέλουμε να υπολογίσουμε, όπως η συνολική και η κινητική ενέργεια, είναι η *AccumProps*, η οποία καλείται στη συνέχεια για την αρχικοποίηση τόσο της στιγμιαίας τιμής όσο και του αθροίσματος των τιμών που ανανεώνονται σε κάθε χρονική επανάληψη και για τα δύο παραπάνω μεγέθη. Αφού λοιπόν ορίσουμε ότι τόσο η στιγμιαία τιμή, όσο και η τιμή του αθροίσματος, θα είναι μηδενικές για τη συνολική ενέργεια και την κινητική ενέργεια κατά την έναρξη της προσομοίωσης, κλείνει ουσιαστικά η συνάρτηση *SetupJob*.

Μετά λοιπόν από αυτή τη φάση των αρχικοποιήσεων, κατά την οποία εισάγονται στο πρόγραμμα διάφορες παράμετροι και άλλα δεδομένα και αρχικοποιούνται, εισάγεται στο πρόγραμμα ένας επαναληπτικός βρόγχος. Κάθε επανάληψη του βρόγχου αναβαθμίζει το πρόγραμμα κατά ένα χρονικό βήμα και για το λόγο αυτό η αντίστοιχη συνάρτηση ονομάζεται *SingleStep*. Η συνάρτηση αυτή τερματίζει όταν η μεταβλητή *stepLimit* φτάσει σε μία καθορισμένη τιμή. Στη συγκεκριμένη συνάρτηση, που αποτελεί και το κύριο μέρος του κώδικα, περιλαμβάνονται κλήσεις σε άλλες συναρτήσεις, οι οποίες αφορούν την ενσωμάτωση των εξισώσεων κίνησης, την εκτίμηση των αναπτυσσόμενων δυνάμεων και τη μέτρηση των επιθυμητών μεγεθών, όπως θα δούμε στη συνέχεια [33].

Στη συνέχεια, καλείται η συνάρτηση *LeapfrogStep* για πρώτη φορά στον κώδικα, η οποία, όπως θα φανεί, καλείται και δεύτερη φορά στο πρόγραμμα στη συνέχεια. Η συνάρτηση αυτή γενικά ενσωματώνει τη μέθοδο που χρησιμοποιούμε για την 105

ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης, η οποία είναι η μέθοδος των βατραχοδρασκελισμών. Όπως έχουμε ήδη αναφέρει, το πρώτο βήμα της μεθόδου περιλαμβάνει τον υπολογισμό των ταχυτήτων για μισό χρονικό βήμα, χρησιμοποιώντας τις παλιές τιμές των επιταχύνσεων και τον υπολογισμό των συντεταγμένων για ένα ολόκληρο χρονικό βήμα, χρησιμοποιώντας τις ενδιάμεσες τιμές των ταχυτήτων που μόλις υπολογίστηκαν για το μισό χρονικό βήμα.

Έπειτα, ακολουθεί η κλήση της συνάρτησης *ComputeForces*, η οποία είναι υπεύθυνη για τον υπολογισμό των αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα άτομα. Στο σημείο αυτό, εισάγονται οι σχέσεις για τον υπολογισμό των δυνάμεων αλληλεπίδρασης ανάμεσα στα άτομα του χαλκού μεταξύ τους και ανάμεσα στα άτομα του χαλκού και του διαμαντιού. Στον κώδικα, η μεταβλητή που χρησιμοποιείται για να περιγράψει τη δύναμη αλληλεπίδρασης είναι η *fcVal*. Από τον υπολογισμό των δυνάμεων αλληλεπίδρασης υπολογίζονται στη συνέχεια κάθε φορά οι καινούριες επιταχύνσεις που προκύπτουν για τα άτομα, από τον δεύτερο νόμο του Νεύτωνα.

Ύστερα, ακολουθεί η δεύτερη κλήση της συνάρτησης *LeapfrogStep*, η οποία αφορά το δεύτερο τμήμα της μεθόδου των βατραχοδρασκελισμών και στο οποίο αφού έχουν χρησιμοποιηθεί οι καινούριες συντεταγμένες που προέκυψαν από το πρώτο βήμα για να υπολογιστούν οι καινούριες δυνάμεις και κατ' επέκταση οι καινούριες επιταχύνσεις, υπολογίζονται πλέον οι ταχύτητες προσθέτοντας και το υπόλοιπο μισό χρονικό βήμα.

Με αυτόν τον τρόπο, καταφέρνουμε σε κάθε χρονικό βήμα να γίνεται υπολογισμός των καινούριων δυνάμεων αλληλεπίδρασης και των καινούριων επιταχύνσεων, όπως επίσης και των καινούριων ταχυτήτων και θέσεων στα διάφορα άτομα του συστήματος, χρησιμοποιώντας κάθε φορά τις προηγούμενες τιμές των μεγεθών αυτών. Με τον τρόπο αυτό καταφέρνουμε να έχουμε πλήρη αντίληψη της χρονικής εξέλιξης της προσομοίωσης και κατ' επέκταση της λείανσης, τόσο από την άποψη της γνώσης των διαφόρων τιμών όσο και από την άποψη της γραφικής απεικόνισης της προσομοίωσης. Θα πρέπει εδώ να αναφέρουμε ότι η συνάρτηση που δημιουργεί την προσομοίωση γραφικά είναι η graphOut, η οποία σχεδιάζει τα άτομα του τεμαχίου και του κοπτικού εργαλείου με βάση τις ορισμένες συντεταγμένες, οι οποίες αλλάζουν σε κάθε χρονική επανάληψη του κώδικα, με αποτέλεσμα να μπορούμε να παρατηρούμε τη διαδικασία της λείανσης και τη διαδικασία σχηματισμού του αποβλήτου. Επιπλέον, για κάθε άτομο μπορούμε να βλέπουμε τη στιγμιαία ταχύτητα και επιτάχυνσή του. Με την ανανέωση λοιπόν σε κάθε επανάληψη των τιμών των συντεταγμένων, των ταχυτήτων και των επιταχύνσεων, μπορούμε να έχουμε πλήρη εικόνα της χρονικής εξέλιξης του φαινομένου.

Συνεχίζοντας λοιπόν να βρισκόμαστε εντός της συνάρτησης *SingleStep*, αφού έχουν πραγματοποιηθεί όλοι οι προηγούμενοι υπολογισμοί για ένα συγκεκριμένο βήμα, καλείται η συνάρτηση *EvalProps* για τον υπολογισμό του αθροίσματος των ταχυτήτων,

του αθροίσματος των τετραγώνων των ταχυτήτων, της τιμής της συνολικής ενέργειας και της τιμής της κινητικής ενέργειας του συστήματος για το συγκεκριμένο χρονικό βήμα. Η μεταβλητή που περιγράφει το άθροισμα των ταχυτήτων είναι η *vSum* και αφορά τον υπολογισμό του αθροίσματος των ταχυτήτων όλων των ατόμων του χαλκού για το συγκεκριμένο χρονικό βήμα. Η συνολική και κινητική ενέργεια υπολογίζονται σύμφωνα με τους ορισμούς που δόθηκαν στην προηγούμενη ενότητα (4.15), (4.16).

Αφού λοιπόν υπολογιστούν για τη συγκεκριμένη χρονική επανάληψη τα προηγούμενα μεγέθη, καλείται εκ νέου η συνάρτηση *AccumProps*, η οποία αυτή τη φορά αθροίζει τις τιμές που υπολογίστηκαν από τη συγκεκριμένη επανάληψη και ύστερα υπολογίζει τις τελικές εκτιμώμενες μέσες τιμές, οι οποίες αντικαθιστούν τις προηγούμενες τιμές. Μετά την πραγματοποίηση των επιθυμητών πράξεων και αφού έχουν υπολογιστεί όλα τα απαιτούμενα μεγέθη, ακολουθεί η κλήση της συνάρτησης *PrintSummary*, η οποία εξάγει και τυπώνει τα επιθυμητά αποτελέσματα στη μορφή που θέλουμε, με τη βοήθεια της συνάρτησης *PropEst*. Από τη στιγμή που έχουν εξαχθεί λοιπόν όλα τα επιθυμητά αποτελέσματα, καλείται ξανά η συνάρτηση *AccumProps* προκειμένου να μηδενιστούν οι αντίστοιχες μεταβλητές για να ξεκινήσει ο υπολογισμός της επόμενης χρονικής επανάληψης.

Έτσι, σταματάει η κλήση της συνάρτησης *SingleStep* για το συγκεκριμένο χρονικό βήμα και ξεκινάει η κλήση της για την επόμενη χρονική επανάληψη, μέχρις ότου πραγματοποιηθεί ο συνολικός αριθμός των χρονικών επαναλήψεων για τη λήξη της προσομοίωσης και την ολοκλήρωση της κατεργασίας της λείανσης [33].

# 4.3.4 Η Θερμοκρασία στην Προσομοίωση

Ο προσδιορισμός της θερμοκρασίας λείανσης γίνεται σύμφωνα με την παρακάτω εξίσωση :

$$Temperature.val = 11604.505*(nmol/800)*(2*Mcu*kinEnergy.val)/3*Kb)$$
 (4.17)

Παρατηρούμε ότι η μεταβλητή της θερμοκρασίας λείανσης υπολογίζεται από την κινητική ενέργεια των ατόμων του υλικού. Πιο συγκεκριμένα προκύπτει από το μέσο όρο των κινητικών ενεργειών των ατόμων, άρα υπολογίζεται επακόλουθα σύμφωνα με την παραπάνω εξίσωση και η μέση θερμοκρασία λείανσης :

$$Temperature.val=11604.505*(2*Mcu*kinEnergy.val)/3*Kb)$$
(4.18)

όπου Mcu είναι η μάζα των ατόμων του χαλκού (υλικό κατεργασίας) και Kb είναι η σταθερά Boltzmann ίση με 1,38 ×10<sup>-23</sup> J/K.

Στον υπολογισμό της μέσης θερμοκρασίας λείανσης (η οποία είναι συσωρευτική και υπολογίζεται μέσω της συνάρτησης *Temperature.val*) δε λαμβάνεται υπόψη η ταχύτητα του εργαλείου. Λόγω του ότι η ταχύτητα του κόκκου είναι μεγάλη (123 m/s), εμφανίζει και μεγάλη θερμοκρασία, η οποία όμως δεν είναι η θερμοκρασία των ατόμων του τεμαχίου. Η ανακατανομή ταχυτήτων στα άτομα του τεμαχίου γίνεται μέσω συνάρτησης γεννήτριας τυχαίων αριθμών. Αυτό σημαίνει ότι δεν μπορούν να προσδιοριστούν επακριβώς τα άτομα με τη μέγιστη θερμοκρασία, διότι τα άτομα κοντά στο εργαλείο που περιμένουμε ότι θα είναι τα θερμότερα, δεν μπορούμε να προβλέψουμε ότι θα αποκτήσουν τις μεγαλύτερες ταχύτητες, λόγω της τυχαίας κατανομής τους.

Για να επιτύχουμε την απεικόνιση της χωρικής κατανομής των θερμοκρασιών κοπής αλλά και τη θερμοκρασία κάθε ατόμου χρησιμοποιούμε τη μεταβλητή tt. Η μεταβλητή tt αντιστοιχίζει τις ταχύτητες των μορίων του υλικού κατεργασίας και του κόκκου λείανσης με τις θερμοκρασίες τους. Η αντιστοίχιση γίνεται με βάση το θεώρημα ισοκατανομής της ενέργειας. Σύμφωνα με το θεώρημα αυτό, κάθε ανεξάρτητος όρος της ενέργειας ενός κλασσικού συστήματος είναι ανάλογος του τετραγώνου μιας συντεταγμένης και έχει μέση τιμή ίση με  $\frac{1}{2} kT$ , όπου k είναι η σταθερά του Boltzmann και T η απόλυτη θερμοκρασία. Θεωρούμε 3 βαθμούς ελευθερίας, καθώς η κινητική ενέργεια του εκάστοτε ατόμου είναι άθροισμα τριών όρων που είναι ανάλογοι των τετραγώνων των τριών συνιστωσών της ταχύτητας (ορμής), οπότε προκύπτει ο όρος 3/2kT. Η αντιστοίχιση βέβαια δεν είναι απόλυτα αυστηρή, παρέχεται όμως μια άποψη για τις αναπτυσσόμενες θερμοκρασίες κατά την λείανση σε νανοκλίμακα, οι οποίες δίνονται από την εξίσωση :

$$Mol.tt = abs(11604.505^{*}(Mcu^{*}v2/(3^{*}Kb)))$$
(4.19)

Η tt ανατίθεται στη συνέχεια στη μοριακή δομή των ατόμων.

Επιπλέον, υπάρχει η δυνατότητα θερμικής απεικόνισης των αναπτυσσόμενων θερμοκρασιών κατά την λειαντική διεργασία σε όλο τον όγκο του υλικού κατεργασίας. Ακόμη, φαίνεται και η θερμοκρασιακή διακριτοποίηση των σωματιδίων του υλικού που μετέχουν στην δομή του (Νευτώνεια, Θερμοστατικά και Συνοριακά).

Επίσης, μπορούμε να εμφανίζουμε όλους τους συνδυασμούς απεικόνισης των ατόμων ή και να εστιάσουμε σε μια συγκεκριμένη ομάδα ατόμων. Για μπορούμε να επιλέγουμε οποιασδήποτε από τα άτομα του τεμαχίου και να υπολογίζουμε τη θερμοκρασία τους, χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση *mol\_mask*. Όταν η συνάρτηση αυτή παίρνει την τιμή 1, υπολογίζεται ο μέσος όρος των θερμοκρασιών των ατόμων στα οποία εφαρμόζεται, ενώ όταν εισάγεται τιμή 0 δεν λαμβάνει υπόψη τα άτομα της συνάρτησης. Έτσι μας δίνεται η δυνατότητα να επιλέζουμε οποιαδήποτε σημείο επιθυμούμε να μελετήσουμε, σε σχέση με τις θερμοκρασίες που αναπτύσσονται.
$$mol \; mask \; (745:800) = 1 \tag{4.20}$$

$$mol \ mask \ (665:700) = 0$$
 (4.21)

Επίσης μιας και στο υλικό κατεργασίας έχουμε 800 άτομα, κάθε ένα έχει μια ξεχωριστή θέση στο πλέγμα του τεμαχίου. Έτσι οι θέσεις τους ορίζονται όπως φαίνονται στην Εικόνα 4.1 (για τις 4 γωνίες του τεμαχίου κατεργασίας) και από αυτές επιλέγουμε ποιο άτομο ή ομάδα ατόμων θα μελετήσουμε σε σχέση με τις θερμοκρασίες που αναπτύσσονται κατά την λείανση.



Εικόνα4.1: Κατανομή θέσεων των ατόμων στο πλέγμα του υλικού κατεργασίας.

# Κεφάλαιο 5

# Αποτελέσματα και Ανάλυση Προσομοιώσεων

## 5.1 Εισαγωγή

Στο προηγούμενο κεφάλαιο έγινε μία βασική περιγραφή του κώδικα προσομοίωσης που τροποποιήσαμε για να μοντελοποιήσουμε τη διεργασία της λείανσης με κόκκους στη νανοκλίμακα με τη βοήθεια της Μοριακής Δυναμικής. Σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα της σειράς προσομοιώσεων που διεξήχθησαν με χρήση του συγκεκριμένου κώδικα. Ειδικότερα, σε κάθε περίπτωση προσομοίωσης διεργασία της λείανσης, όπου παρουσιάζονται κάποια στιγμιότυπα από τη απεικονίζεται γραφικά ο σχηματισμός του αποβλήτου ανάλογα με τις συνθήκες της κατεργασίας. Έπειτα, δίνονται διαγράμματα των μεγεθών που μας απασχολούν και μας ενδιαφέρει η εξέλιξή τους, όπως οι δυνάμεις λείανσης (όπως η δύναμη κοπής του λειαντικού κόκκου), η μέση θερμοκρασία όλων των ατόμων του πλέγματος ή μέρους αυτών, η δυναμική και κινητική ενέργεια του συστήματος σωμάτων. Για κάθε προσομοίωση θα μελετηθεί κυρίως ο τρόπος επίδρασης των διαφόρων συνθηκών της λείανσης (όπως γεωμετρία κόκκου, ταγύτητα, γωνία αποβλήτου) τόσο στο μηγανισμό σχηματισμού αποβλήτου, όσο και στην ποιότητα της κατεργαζόμενης επιφάνειας και στα μετρούμενα μεγέθη που είναι υπεύθυνα.

## 5.2 Πρώτη Σειρά Προσομοιώσεων

Σε αυτή την πρώτη σειρά προσομοιώσεων που πραγματοποιήσαμε ξεκινώντας τις προσπάθειές μας, παρουσιάζεται λείανση τεμαχίου χαλκού με κόκκο διαμαντιού ορθογωνικής γεωμετρίας, που αποτελεί την απλούστερη μορφή γεωμετρίας κόκκου λείανσης. Οι προσομοιώσεις έλαβαν χώρα για τρία διαφορετικά βάθη λείανσης. Η γωνία αποβλήτου διατηρείται στις 0° σε όλη τη σειρά προσομοιώσεων, η ταχύτητα μεταβάλλεται για κάθε βάθος λείανσης με στόχο την ορθότερη προσομοίωση της κατεργασίας και σε κάθε περίπτωση παρακολουθούμε την εξέλιξη των θερμοκρασιών συγκεκριμένων ομάδων ατόμων για μία πιο επαρκή περιγραφή του φαινομένου.

## 5.2.1 Προσομοίωση 1a

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 1a φαίνονται στον Πίνακα 5.1 και ακολουθούν τα διαγράμματα που αφορούν τα μετρούμενα μεγέθη.

Προσομοίωση 1a		
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)	
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	Διαμάντι	
ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ	Morse	
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ	0°	
ΒΑΘΟΣ ΚΟΠΗΣ	4 Å	
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΚΟΠΗΣ	123 m / sec	
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800	
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120	
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	80 fsec	

Πίνακας 5.	<b>Ι:</b> Παράμετροι	προσομοίωσης	1a
------------	----------------------	--------------	----

Στις Εικόνες 5.1-5.5 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της κατεργασίας.



Εικόνα 5.1 : Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 160 psec



Εικόνα 5.2 : Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 360 psec



Εικόνα 5.3 : Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 560 psec



Εικόνα 5.4 : Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 760 psec



Εικόνα 5.5 : Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 1000 psec

Από τις παραπάνω εικόνες των φάσεων της κατεργασίας, μπορούμε να συμπεράνουμε ότι το υλικό κατεργασίας παραμορφώνεται μπροστά από τον λειαντικό κόκκο, πράγμα το οποίο συναντάται γενικά και στις συμβατικές κατεργασίες λείανσης. Παρατηρούμε ότι η κατεργασία υπό αυτές τις συνθήκες θυμίζει πολύ νανοκοπή. Καθώς εξελίσσεται η προσομοίωση, το απόβλητο μετακινείται προς τα επάνω, παράλληλα με την επιφάνεια του εργαλείου κοπής και με τον τρόπο αυτό διαμορφώνεται και η κατεργασμένη επιφάνεια. Η ομοιότητα αυτή οφείλεται κυρίως στη μηδενική γωνία αποβλήτου η οποία μπορεί να χαρακτηρίσει αρκετές περιπτώσεις νανοκοπής και έχει να κάνει με τη γεωμετρία του κόκκου λείανσης. Στη γεωμετρία του κόκκου επίσης χρωστάμε την πιο ομαλή κατεργασμένη επιφάνεια, από ότι σε αντίστοιχες νανοκοπές, κάτι που έχει να κάνει με το πλάτος του κόκκου, δηλαδή τη σειρές των 12 ατόμων του εργαλείου στον άξονα των x. Επιπλέον, στην κατεργασμένη επιφάνεια του τεμαχίου είναι εμφανής η πλαστική παραμόρφωση και η ελαστική επαναφορά του υλικού. Το υλικό που βρίσκεται μακριά από το κοπτικό εργαλείο δεν επηρεάζεται σχεδόν καθόλου από την κατεργασία.

Σε όλα τα στιγμιότυπα, τα μπλε βέλη παριστάνουν τις ταχύτητες των ατόμων και τα κόκκινα τις αντίστοιχες επιταχύνσεις. Με την εξέλιξη του φαινομένου, μεγαλώνουν και οι ταχύτητες των ατόμων, πράγμα το οποίο αντιστοιχεί και σε αύξηση των θερμοκρασιών του υλικού κατεργασίας. Παρακάτω έχουμε τα διαγράμματα των δυνάμεων που αναπτύσσονται.



Εικόνα 5.6 : Μεταβολή της δύναμης στον άζονα y συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.7 : Μεταβολή της δύναμης στον άζονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.8 : Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άζονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.9 : Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άζονα y συναρτήσει του χρόνου

Από τα διαγράμματα των δυνάμεων κατά τους άξονες x και y (Εικόνες 5.6-5.9), είναι αντιληπτό ότι οι δυνάμεις παρουσιάζουν έντονη διακύμανση, όπως αναμενόταν. Οι τιμές των δυνάμεων είναι γενικά μεγαλύτερες κατά τον οριζόντιο άξονα x σε σύγκριση με τον κατακόρυφο y, ενώ η τάση όλων των δυνάμεων και του εύρους των διακυμάνσεων είναι γενικά αυξητική. Τα παραπάνω ισχύουν για όλες τις σειρές προσομοιώσεων. Στην προκειμένη περίπτωση, οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης παρουσιάζουν μέγιστες τιμές κατά x και y, τις  $Fx_{max} = 42.45 \ nN$  και  $Fy_{max} = 24.35 \ nN$ , αντίστοιχα. Επίσης, οι μέσες τιμές κατά x και y, είναι  $F_{x\mu} = 18.82 \ nN$  και  $F_{y\mu} = 8.09 \ nN$ , αντιστοίχως.

Στις Εικόνες 5.10 και 5.11 μπορούμε να παρατηρήσουμε τη μεταβολή της κινητικής και της ολικής ενέργειας του συστήματος συναρτήσει του χρόνου. Παρατηρούμε ότι τόσο η συνολική όσο και η κινητική ενέργεια του συστήματος αυξάνονται κατά τη διάρκεια της κοπής. Γενικά, η εξέλιξή τους πραγματοποιείται με ομαλό τρόπο, σε αντίθεση με τις δυνάμεις κοπής που χαρακτηρίζονται από έντονες διακυμάνσεις στις τιμές τους. Από αυτά τα διαγράμματα μπορούμε να βγάλουμε κάποια συμπεράσματα και για τη δυναμική ενέργεια στην προσομοίωση. Διαπιστώνουμε λοιπόν, ότι η δυναμική ενέργεια αποτελεί γενικά ένα αρκετά μεγάλο ποσοστό της συνολικής ενέργειας του συστήματος. Στην Εικόνα 5.12, έχουμε το διάγραμμα του αθροίσματος των ταχυτήτων. Εδώ παρατηρούμε μία πιο ομαλή διακύμανση, σε σχέση με τις διακυμάνσεις των δυνάμεων, που δείχνει ότι τείνει να μειώνεται και να συγκλίνει σε ένα σημαντικά μικρότερο εύρος τιμών, όσο εξελίσσεται η διεργασία της λείανσης.



Εικόνα 5.10 : Μεταβολή της κινητικής ενέργειας συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.11 : Μεταβολή της ολικής ενέργειας συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.12 : Μεταβολή του αθροίσματος ταχυτήτων συναρτήσει του χρόνου

Από το σύνολο των προσομοιώσεων που πραγματοποιήσαμε, παρατηρήθηκε, όπως άλλωστε και με τις δυνάμεις κοπής, ότι η μορφή των παραπάνω διαγραμμάτων, πάντα ποιοτικά, παραμένει η ίδια, ανεξαρτήτως των συνθηκών κοπής που επιλέξαμε για τις προσομοιώσεις αυτές. Βέβαια, κάτι τέτοιο εννοείται ότι δεν συμβαίνει και με τις τιμές των μεγεθών αυτών. Για το λόγο αυτό, στα παρακάτω, δε θα παρουσιάζονται σε κάθε περίπτωση τα αντίστοιχα διαγράμματα, καθώς ουσιαστικά δε προσφέρουν κάποια χρήσιμη πληροφορία. Στο εξής λοιπόν, θα παρουσιάζονται μόνο οι προκύπτουσες δυνάμεις κοπής και η εξάρτησή τους από τις εκάστοτε συνθήκες κοπής, καθώς γενικά στις κατεργασίες αποβολής υλικού, οι δυνάμεις κοπής είναι αυτές για τις οποίες ενδιαφερόμαστε. Επιπλέον, η μεταβολή της συνολικής ενέργειας του συστήματος ακολουθεί γενικά τον τρόπο μεταβολής των δυνάμεων κοπής συναρτήσει των συνθηκών κοπής, επομένως θεωρούμε ότι η παρουσίαση των τιμών της ενέργειας για κάθε περίπτωση προσομοίωσης δεν μας προσφέρει κάποια επιπλέον κρίσιμη πληροφορία για την κατανόηση της εξέλιξης του φαινομένου στη νανοκλίμακα.

Στο διάγραμμα της Εικόνα 5.13 απεικονίζεται η σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού. Ο υπολογισμός των θερμοκρασιών των ατόμων γίνεται μέσω της συνάρτησης *PropAccum* του κώδικα. Η συνάρτηση αυτή για να δώσει την τρέχουσα τιμή του μεγέθους, βρίσκει σε κάθε χρονικό βήμα το μέσο όρο όλων των προηγούμενων τιμών, υπολογίζει τη διασπορά τους και στη συνέχεια για να βρει την τρέχουσα τιμή αφαιρεί από την τιμή της διασποράς την τιμή του τελευταίου βήματος. Άρα, η συνάρτηση αυτή μας δείχνει τη συσσώρευση θερμοκρασίας που προκύπτει ως προς το προηγούμενο χρονικό βήμα.



Εικόνα 5.13 : Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας



Εικόνα 5.14 : Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.15 : Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.16 : Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων συναρτήσει του χρόνου

Παρατηρούμε ότι η σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κυμαίνεται σε ένα εύρος από 60 μέχρι 72 °C, με μικρές διακυμάνσεις από αρκετά νωρίς, για το μεγαλύτερο μέρος της προσομοίωσης. Στην Εικόνα 5.14 έχουμε την εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων κατά τη λείανση. Παρατηρούμε μία σχετικά ομαλή αύξηση από τους 20 στους 23.3 °C. Στο διάγραμμα αυτό είναι φανερή η σημαντική λειτουργεία των Θερμοστατικών ατόμων. Η μέση θερμοκρασία των θερμοστατών φαίνεται στην Εικόνα 5.15 και παρουσιάζει πολύ μικρές διακυμάνσεις γύρω από τους 20 °C. Τέλος, στην Εικόνα 5.16, δίνεται η μέση θερμοκρασία της ομάδας ατόμων που επιλέξαμε να μελετήσουμε, η οποία σε αυτή την περίπτωση είναι οι 2 ανώτερες σειρές των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας, που είναι συνολικά 72 (θέσεις 765-800 και 725-760). Παρατηρείται συνεχής αύξηση της μέσης θερμοκρασίας των επιλεγμένων ατόμων, με μικρές διακυμάνσεις, από τους 21 ως τους 33 °C.

## 5.2.2 Προσομοίωση 1b

<i>Προσομοίωση</i> 1b		
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)	
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	Διαμάντι	
ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ	Morse	
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ	0°	
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	8 Å	
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	123 m / sec	
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800	
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120	
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	80 fsec	

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 1b φαίνονται στον Πίνακα 5.2

Πίνακας 5.2: Παράμετροι προσομοίωσης 1b

Αν και, όπως φαίνεται στον παραπάνω πίνακα, το μέτρο της ταχύτητας λείανσης (ταχύτητα κοπής κόκκου λείανσης) παραμένει το ίδιο με προηγουμένως, στην περίπτωση αυτή αλλάζουμε την διεύθυνσή της έτσι ώστε να σχηματίζει γωνία 4° με τον άξονα των x. Λειτουργούμε κατά αυτόν τον τρόπο με σκοπό να επιτύχουμε μία όσο το δυνατόν ορθότερη προσομοίωση της λείανσης με κόκκους. Όπως γνωρίζουμε ήδη για την εξέλιξη της συγκεκριμένης διαδικασίας, οι λειαντικοί κόκκοι δεν κόβουν το τεμάχιο κατεργασίας μόνο κατά τον άξονα των x [84,85,87,88]. Παρόλα αυτά, στις προσομοιώσεις σε νανοκλίμακα, θεωρείται πολλές φορές επαρκής η έρευνα μόνο κατά τον x προσανατολισμό, καθώς η διαφορά μεγέθους μεταξύ του κόκκου και του

λειαντικού τροχού (που φέρει τον κόκκο), που έχει την κυκλική ταχύτητα, είναι τεράστια και επομένως αμελείται η επίδρασή του στη διεύθυνση της ταχύτητας του κόκκου. Με τη λογική αυτή λειτουργούμε για τη διεξαγωγή των (a) περιπτώσεων των δύο πρώτων σειρών προσομοιώσεων. Στις υπόλοιπες περιπτώσεις (όπως στην παρούσα) όπου έχουμε και μεγαλύτερα βάθη κοπής του κόκκου, η διεύθυνση της ταχύτητας κοπής του κόκκου παίρνει μικρές κλίσεις ούτως ώστε να προσπαθήσουμε να μελετήσουμε τι συμβαίνει καθώς ο κόκκος αναγκάζεται να βγει από το υλικό κατεργασίας, εξαιτίας της κυκλικής κίνησης του τροχού λείανσης. Με κατάλληλες αλλαγές στη διεύθυνση της ταχύτητας λείανσης και μεταβολές στη γεωμετρία του κόκκου (που θα γίνουν στη συνέχεια) μπορούμε να προσομοιάσουμε αρκετά ικανοποιητικά και με μεγαλύτερη ακρίβεια, όχι μόνο τη μορφή της κατεργασμένης επιφάνειας, αλλά και τη μορφή του σχηματιζόμενου αποβλήτου, πάντα σε σύμπνοια με τις υπόλοιπες αντίστοιχες μελέτες που έχουν εκπονηθεί. Έτσι καταφέρνουμε μία πιο ολοκληρωμένη περιγραφή του φαινομένου στη νανοκλίμακα. [17,53,62,65,84-88]

Στις Εικόνες 5.17-5.21 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της κατεργασίας.



Εικόνα 5.17 : Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 800 fsec (έναρξη κατεργασίας)



Εικόνα 5.18 : Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 280 psec



Εικόνα 5.19 : Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 600 psec



Εικόνα 5.20: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 840 psec



Εικόνα 5.21: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 1080 psec

Από τα στιγμιότυπα της προσομοίωσης, παρατηρούμε ότι καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται, αυξάνεται και η έκταση της πλαστικής παραμόρφωσης μπροστά από το κοπτικό εργαλείο. Όπως εξελίσσεται η διεργασία, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας φαίνεται να είναι εφάμιλλη με αυτήν της προηγούμενης περίπτωσης. Όμως, προς το τέλος της προσομοίωσης και καθώς ο κόκκος βγαίνει από το τεμάχιο κατεργασίας, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας μειώνεται σε μικρό βαθμό και παρατηρούμε ότι δημιουργούνται κενά και εξαρθρώσεις ατόμων. Λόγω των δυσμορφιών που προκύπτουν, οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα γίνονται ακόμη πιο έντονες, με αποτέλεσμα κατά τη λήξη της προσομοίωσης, να είναι πιο έντονη η ανωμαλία στη μορφή της κατεργασμένης επιφάνειας, όπως επίσης και η αύξηση της τραχύτητας. Ακόμα όμως και στην ακατέργαστη επιφάνεια, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι κατά τη διάρκεια της κατεργασίας, σταδιακά τα άτομα αρχίζουν να μετατοπίζονται με πιο έντονο ρυθμό και να τείνουν να φύγουν από τις αρχικές τους θέσεις πιο γρήγορα σε σχέση με την προσομοίωση με μικρότερο βάθος κοπής. Αυτό μπορεί να φανεί καλύτερα αν παρατηρήσουμε τις ταχύτητες και τις επιταχύνσεις των ατόμων κατά τη διάρκεια της κοπής. Βλέπουμε ότι αυτές αυξάνονται με μεγαλύτερο βαθμό σε σχέση με την προηγούμενη προσομοίωση και επίσης αυτό συμβαίνει για μεγαλύτερο αριθμό ατόμων. Επομένως, λαμβάνοντας υπόψη τη μικρή κλίση της ταχύτητας κοπής και κυρίως το μεγαλύτερο αριθμό ατόμων που εμπλέκονται στη διαδικασία, δικαιολογείται η ελαφρά μείωση της ποιότητας της κατεργασμένης επιφάνειας. Η κλίση των 4° της ταχύτητας, όπως παρατηρούμε, μας προσφέρει μία πιο ικανοποιητική άποψη για το φαινόμενο της εξόδου του κόκκου από το τεμάχιο κατεργασίας. Το σχήμα του αποβλήτου σε αυτή την περίπτωση μοιάζει περισσότερο με θραύσμα αποκοπής που δημιουργείται (chip formation) κατά την κατεργασία της λείανσης με κόκκους, παρά με συνεχές απόβλητο κοπής. Εκτός από το σχηματισμό του αποβλήτου, και η ελαφρώς κεκλιμένη κατεργασμένη επιφάνεια (με διακριτά καλύτερη ποιότητα από κατεργασμένες επιφάνειες αντίστοιχων μελετών κοπής) είναι γαρακτηριστικά της κατεργασίας της λείανσης με κόκκους και των μηγανισμών με τους οποίους αυτή εξελίσσεται.

Σε αυτή την περίπτωση προσομοίωσης, οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης παρουσιάζουν μέγιστες τιμές κατά x και y, τις  $F_{xmax} = 45.65 \ nN$  και  $F_{ymax} = 32.84 \ nN$ , αντίστοιχα. Επίσης, οι μέσες τιμές κατά x και y, είναι  $F_{x\mu} = 20.79 \ nN$  και  $F_{y\mu} = 10.41 \ nN$ , αντιστοίχως. Παρατηρούμε ότι η δύναμη κοπής  $F_x$  εξακολουθεί να είναι μεγαλύτερη από τη δύναμη κοπής  $F_y$ , κάτι που συμβαίνει σε όλες τις προσομοιώσεις μας. Επιπλέον, παρατηρούμε ότι οι δυνάμεις κοπής, με την αύξηση του βάθους κοπής, έχουν αυξηθεί. Συγκεκριμένα, για τη δύναμη κοπής  $F_x$  η αύξηση είναι (20.79 – 18.82) / 20.79 = 0.0947, δηλαδή της τάξης του 9.47%, ενώ για την  $F_y$  η αύξηση είναι (10.41 – 8.09) / 10.41 = 0,2228, δηλαδή της τάξης του 22.28%. Ενώ λοιπόν και οι δύο δυνάμεις κοπής αυξάνονται, η αύξηση της δύναμης κοπής κατά την κατακόρυφη διεύθυνση  $F_y$  είναι αρκετά μεγαλύτερη από την αντίστοιχη της δύναμης κοπής κατά την σριζόντια διεύθυνση  $F_x$ , κάτι που αναμενόταν καθώς, σε αντίθεση με την περίπτωση 1a, εδώ ο κόκκος κινείται και κατά την y διεύθυνση.

Στην Εικόνα 5.22 παρατηρούμε την εξέλιξη της της σωρευτικής θερμοκρασίας των ατόμων του υλικού κατεργασίας. Αυτή τη φορά η μέγιστη σωρευτική θερμοκρασία φτάνει τους 80 °C, περίπου κατά 10 βαθμούς μεγαλύτερη από την περίπτωση 1a.



Εικόνα 5.22: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας



Εικόνα 5.23: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.24: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.25: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης

Στην Εικόνα 5.23 έχουμε την εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων κατά τη συγκεκριμένη περίπτωση λείανσης. Παρατηρούμε μία σχετικά ομαλή αύξηση,

όπως και στην προηγούμενη προσομοίωση, από τους 20.5 στους 24.5 °C αυτή τη φορά (μόλις 1.5 βαθμό αύξηση σε σχέση με προηγούμενη περίπτωση). Η μέση θερμοκρασία των θερμοστατών φαίνεται στην Εικόνα 5.24 και παρουσιάζει πολύ μικρές διακυμάνσεις γύρω από τους 20.1 °C. Στο τέλος του διαγράμματος αυτού παρατηρούμε μία κάπως μεγαλύτερη αύξηση η οποία δεν παρατηρήθηκε πριν και μπορεί να οφείλεται στο μεγαλύτερο βάθος και την εμπλοκή περισσότερων ατόμων.

Τέλος, στην Εικόνα 5.25, δίνεται η μέση θερμοκρασία της ομάδας ατόμων που επιλέξαμε να μελετήσουμε, η οποία σε αυτή την περίπτωση είναι οι 3 κατακόρυφες στήλες των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας που βρίσκονται δεξιά, ακριβώς μπροστά στον κόκκο λείανσης, που είναι συνολικά 21 (θέσεις 798-800, 758-760, 718-720, 678-680, 638-640, 598-600, 558-560). Σε αντίθεση με την πρώτη περίπτωση προσομοίωσης, όπου είχαμε ομαλή αύξηση της θερμοκρασίας με μικρές διακυμάνσεις για τις 2 πάνω σειρές του τεμαχίου, εδώ έχουμε ένα μεγαλύτερο εύρος θερμοκρασιών από 22 °C έως τους 42 °C και δεν παρουσιάζεται κάποια ομαλότητα στο διάγραμμα, καθώς κάποια από τα επιλεγμένα άτομα, συμμετέχουν από την αρχή ενεργά στη διαδικασία και κάποια άλλα όχι.

Γενικά παρουσιάζονται μεγαλύτερες θερμοκρασίες σε σύγκριση με την περίπτωση με βάθος κοπής 4 Å, λόγω των μεγαλύτερων ταχυτήτων που αποκτούν τα άτομα του τεμαχίου και των περισσότερων ατόμων που εμπλέκονται στην κατεργασία.

## 5.2.3 Προσομοίωση 1c

Προσομοίωση 1c		
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)	
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	Διαμάντι	
ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ	Morse	
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ	0°	
ΒΑΘΟΣ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	12 Å	
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΛΕΙΑΝΣΗΣ	123 m / sec	
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800	
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	120	
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	80 fsec	

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 1b φαίνονται στον Πίνακα 5.3

Πίνακας 5.3: Παράμετροι προσομοίωσης 1c

Και σε αυτή την περίπτωση το διάνυσμα της ταχύτητας έχει κλίση τεσσάρων μοιρών, όπως και προηγουμένως. Στις Εικόνες 5.26-5.30 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της κατεργασίας.



Εικόνα 5.26 : Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 800 fsec (έναρξη κατεργασίας)



Εικόνα 5.27 : Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 280 psec



Εικόνα 5.28: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 600 psec



Εικόνα 5.29: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 840 psec



Εικόνα 5.30: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 1080 psec

Όπως παρατηρούμε, με περαιτέρω αύξηση του βάθους κοπής, η πλαστική παραμόρφωση του υλικού είναι πολύ πιο έντονη και μειώνεται αισθητά η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας κατά τη διάρκεια της κατεργασίας. Παρόλα αυτά, στο τελευταίο στιγμιότυπο η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας παρουσιάζει μια σχετικά ικανοποιητική ομαλότητα, αναφορικά με τη μηδενική γωνία αποβλήτου και την διεύθυνση της ταχύτητας. Άλλωστε, από το δεύτερο κιόλας στιγμιότυπο, φαίνεται ότι τα άτομα αποκτούν μεγαλύτερες ταχύτητες από ότι προηγουμένως, οι οποίες μάλιστα αυξάνονται με μεγαλύτερο βαθμό και για μεγαλύτερο πλήθος ατόμων. Οι ταχύτητες αυτές λοιπόν αυξάνονται αισθητά κατά τη διάρκεια της κατεργασίας και σε ορισμένες περιπτώσεις οδηγούν σε αποκολλήσεις ατόμων. Σε κάποιες φάσεις μάλιστα, φαίνεται να δημιουργούνται τάσεις να παρουσιαστούν στο τεμάχιο κενά υλικού, όμως καθώς τα άτομα του υλικού ηρεμούν αφού απομακρυνθεί ο κόκκος από το χώρο τους και δεν επηρεάζονται από την κατεργασία άμεσα, το πλέγμα παραμένει συμπαγές, παρά το ότι έχουμε ελάχιστες εξαρθρώσεις ατόμων. Στο τελευταίο στιγμιότυπο παρατηρούμε, όπως και στην προηγούμενη περίπτωση, ότι ο σχηματισμός του αποβλήτου είναι συνεχής, έως ότου εξέλθει ο κόκκος λείανσης από το τεμάχιο και έχουμε αποκόλληση του αποβλήτου και δημιουργία θραύσματος (ρινίσματος). Μέχρι τότε ο σχηματισμός του αποβλήτου είναι συνεχής, αλλά μεταβάλλεται αισθητά σε όγκο και σε σχήμα, σε σχέση με την περίπτωση 1b.

Όσον αφορά στις δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης που προκύπτουν με περαιτέρω αύξηση του βάθους λείανσης, αυτές συνεχίζουν να αυξάνουν και παρουσιάζουν μέγιστες τιμές κατά x και y, τις  $F_{xmax}$ = 63.27 nN και  $F_{ymax}$ = 27.23 nN, αντίστοιχα. Επίσης, οι μέσες τιμές κατά x και y, είναι  $F_{x\mu}$ =28.43 nN και  $F_{y\mu}$ =11.05 nN, αντιστοίχως. Όπως και προηγουμένως, παρατηρούμε ότι οι δυνάμεις κοπής, με την αύξηση του βάθους κοπής, έχουν αυξηθεί. Συγκεκριμένα, για τη δύναμη κοπής F<sub>x</sub> η αύξηση είναι (28.43 – 20.79) / 28.43 = 0.2687, δηλαδή της τάξης του 26.87%, ενώ για την F<sub>y</sub> η αύξηση είναι (11.05 – 10.41) / 11.05 = 0,0579, δηλαδή της τάξης του 5.79%. Ενώ λοιπόν και οι δύο δυνάμεις κοπής αυξάνονται, η αύξηση της δύναμης κοπής κατά την οριζόντια διεύθυνση F<sub>x</sub> είναι αρκετά μεγαλύτερη από την αντίστοιχη της δύναμης κοπής κατά την κατακόρυφη διεύθυνση F<sub>y</sub>, σε αντίθεση με την περίπτωση 1b.

Στην Εικόνα 5.31 παρατηρούμε την εξέλιξη της της σωρευτικής θερμοκρασίας των ατόμων του υλικού κατεργασίας. Αυτή τη φορά η μέγιστη σωρευτική θερμοκρασία ξεπερνά οριακά τους 100 °C, περίπου κατά 20 βαθμούς μεγαλύτερη από την περίπτωση 1b. Η μέση θερμοκρασία των θερμοστατών φαίνεται στην Εικόνα 5.32 και παρουσιάζει πολύ μικρές διακυμάνσεις γύρω από τους 20.1 °C. Στο τέλος του διαγράμματος αυτού παρατηρούμε μία αρκετά μεγαλύτερη αύξηση η οποία παρατηρήθηκε και προηγουμένως σε μικρότερο βαθμό και οφείλεται στο μεγαλύτερο βάθος και την εμπλοκή περισσότερων ατόμων. Στην Εικόνα 5.33 έχουμε την εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων κατά τη συγκεκριμένη περίπτωση λείανσης. Παρατηρούμε μία σχετικά ομαλή αύξηση, όπως και στην προηγούμενη προσομοίωση, από τους 20.5 στους 27.2 °C αυτή τη φορά (+2.7 °C σε σχέση με την προσομοίωση 1b).



Εικόνα 5.31: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας



Εικόνα 5.32: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.33: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.34: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης

Τέλος, στην Εικόνα 5.34, δίνεται η μέση θερμοκρασία της ομάδας ατόμων που επιλέξαμε να μελετήσουμε, η οποία σε αυτή την περίπτωση είναι οι 2 ανώτερες σειρές των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας, που είναι συνολικά 72 (θέσεις 765-800 και 725-760), καθώς και οι 3 δεξιά στήλες, ακριβώς μπροστά στον κόκκο λείανσης, που είναι συνολικά 21 (θέσεις 798-800, 758-760, 718-720, 678-680, 638-640, 598-600, 558-560). Παρατηρείται συνεχής αύξηση της μέσης θερμοκρασίας των επιλεγμένων ατόμων, με μικρές διακυμάνσεις, από τους 21 ως τους 36 °C.

## 5.2.4 Παρατηρήσεις

Με το πέρας της πρώτης σειράς προσομοιώσεων, αξίζει να σημειώσουμε κάποια πράγματα. Καταρχήν, θα πρέπει να διευκρινίσουμε ότι τα Συνοριακά άτομα παραμένουν σταθερά κ διατηρούν τη θερμοκρασία τους σταθερή στους 20 °C, όπως βλέπουμε στην Εικόνα 5.35. Επίσης, η θερμοκρασία των ατόμων του κοπτικού εργαλείου – λειαντικού κόκκου εξαρτάται από την ταχύτητά του, η οποία όμως διατηρείται σταθερή κατά μέτρο σε όλες τις προσομοιώσεις μας. Επομένως, στην Εικόνα 5.36 μπορούμε να δούμε ότι τα άτομα του λειαντικού κόκκου διατηρούν σταθερή τη θερμοκρασία τους και ίση με 29.5 °C. Τα παραπάνω ισχύουν σε κάθε προσομοίωση.



Εικόνα 5.35: Μέση θερμοκρασία των Συνοριακών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.36: Μέση θερμοκρασία των ατόμων του κόκκου κατά τη διάρκεια της λείανσης

### 5.3 Δεύτερη Σειρά Προσομοιώσεων

Στη συγκεκριμένη σειρά προσομοιώσεων παρουσιάζεται λείανση τεμαχίου χαλκού με κόκκο διαμαντιού διαφορετικής γεωμετρίας από αυτή της πρώτης περίπτωσης. Από εδώ και στο εξής, μεταβάλλουμε τη γεωμετρία του λειαντικού κόκκου και για λόγους υπολογιστικού χρόνου διαμορφώνουμε και παρουσιάζουμε στην προσομοίωση μόνο τα άτομα της πλευράς του κόκκου που εμπλέκονται ενεργά στην κατεργασία, θεωρώντας ότι πίσω από τη σειρά ατόμων που έρχεται σε επαφή με το τεμάχιο κατεργασίας, υπάρχουν διαδοχικές σειρές ατόμων, που αποτελούν και τον κύριο όγκο του κοπτικού εργαλείου από διαμάντι. Οι προσομοιώσεις έλαβαν χώρα για τρία διαφορετικά βάθη λείανσης. Η γωνία αποβλήτου διατηρείται σταθερή στις -45° σε όλη τη σειρά προσομοιώσεων, η ταχύτητα μεταβάλλεται για κάθε βάθος λείανσης με στόχο την ορθότερη προσομοίωση της κατεργασίας (όπως στην πρώτη σειρά προσομοιώσεων) και σε κάθε περίπτωση παρακολουθούμε την εξέλιξη των δυνάμεων και των θερμοκρασιών συγκεκριμένων ομάδων ατόμων για μία πιο επαρκή περιγραφή του φαινομένου.

### 5.3.1 Προσομοίωση 2a

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2a φαίνονται στον Πίνακα 5.4 και ακολουθούν τα διαγράμματα που αφορούν τα μετρούμενα μεγέθη.

Προσομοίωση 2a		
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)	
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	Διαμάντι	
ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ	Morse	
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ	-45°	
ΒΑΘΟΣ ΚΟΠΗΣ	4 Å	
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΚΟΠΗΣ	123 m / sec	
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800	
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	40	
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	80 fsec	

Στις Εικόνες 5.37-5.41 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της κατεργασίας.



Εικόνα 5.37: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 800 fsec (έναρξη κατεργασίας)



Εικόνα 5.38: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 280 psec



Εικόνα 5.39: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 600 psec



Εικόνα 5.40: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 840 psec



Εικόνα 5.41: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 1080 psec

Στις παραπάνω εικόνες παρατηρούμε μία ελαφρά μείωση στην ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας, σε σχέση πάντα με την προσομοίωση 1a (ίδιο βάθος λείανσης), καθώς και πολλές περιπτώσεις εξάρθρωσης ατόμων, κυρίως από το απόβλητο αλλά και από το τεμάχιο κατεργασίας. Σε αυτή την περίπτωση προσομοίωσης, με απλή παρατήρηση και σύγκριση με τα στιγμιότυπα των προηγούμενων περιπτώσεων, μπορούμε να κατανοήσουμε πλήρως τον κυρίαρχο ρόλο που παίζει η γεωμετρία του κόκκου (κοπτικού εργαλείου) στη λείανση νανοκλίμακας. Ενώ ο μηγανισμός σχηματισμού αποβλήτου σε σχέση με τον κόκκο παραμένει στην ουσία ο ίδιος, η σταθερά προσαρμοσμένη γωνία αποβλήτου στους -45° καθορίζει ενεργά το σχήμα του αποβλήτου και το κάνει εντελώς διαφορετικό από τις προηγούμενες περιπτώσεις. Ο λειαντικός κόκκος, καθώς «προχωράει» πάνω στο τεμάχιο, περισσότερο το «σπρώγνει», το πιέζει και τρίβεται επάνω του, παρά το κόβει. Εξαιτίας της συγκεκριμένης γεωμετρίας του λειαντικού κόκκου, τα άτομα της υπό κατεργασία επιφάνειας, κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, ανασυγκροτούνται και συσσωρεύονται μπροστά και από κάτω, όπως ακριβώς είδαμε και στη παράγραφο 3.6. Έτσι έχουμε σαν αποτέλεσμα την χαρακτηριστική μορφή αποβλήτου λείανσης.[17,62,65,84,87,88] Η ελαφρώς χειρότερη ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας οφείλεται κατά κύριο λόγο στις πολύ μεγαλύτερες δυνάμεις κοπής του λειαντικού κόκκου που εμφανίζονται. Αυτές, με τη σειρά τους, οφείλονται στα περισσότερα άτομα που εμπλέκονται ενεργά στη διεργασία και στη μεγάλη γωνία αποβλήτου. Οι δυνάμεις που εμφανίζονται κατά τη διεύθυνση γ είναι ακόμα μικρότερες από αυτές που εμφανίζονται κατά τη διεύθυνση x, και τα διαγράμματά τους (όπως και αυτά των ενεργειών) δε μας προσφέρουν κάποια επιπλέον πληροφορία, οπότε παραλείπονται όπως έχει προαναφερθεί. Αυτή τη φορά βέβαια, η διαφορά μεταξύ των δυνάμεων κοπής κατά x και y είναι πολύ μικρότερη.

Οι δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης που προκύπτουν λοιπόν, παρουσιάζουν μέγιστες τιμές κατά x και y, τις  $F_{xmax}$ = 72.09 nN και  $F_{ymax}$ = 67.28 nN, αντίστοιχα. Επίσης, οι μέσες τιμές κατά x και y, είναι  $F_{x\mu}$ =20.43 nN και  $F_{y\mu}$ =18.77 nN, αντιστοίχως. Οι τιμές, ειδικά οι μέγιστες όπως διαπιστώνουμε, είναι κατά πολύ μεγαλύτερες από τις αντίστοιχες στην πρώτη σειρά προσομοιώσεων. Στην περίπτωση των μέσων δυνάμεων κοπής κατά τον άξονα των y, η αύξηση είναι τεράστια, παραπάνω από 50%. Η αύξηση αυτή οφείλεται εξ ολοκλήρου στη νέα γεωμετρία και τη μεγάλη γωνία αποβλήτου, όπως προαναφέρθηκε. Ο συνδυασμός των παραπάνω με το γεγονός ότι τα άτομα του αποβλήτου «στριμώχνονται» μεταξύ του κόκκου και των άκαμπτων συνοριακών ατόμων στο τέλος της προσομοίωσης, δικαιολογεί απόλυτα τις πολύ μεγάλες μέγιστες τιμές που συναντούμε στις αναπτυσσόμενες δυνάμεις κοπής.

Στην Εικόνα 5.42 παρατηρούμε την εξέλιξη της της σωρευτικής θερμοκρασίας των ατόμων του υλικού κατεργασίας. Αυτή τη φορά η μέγιστη σωρευτική θερμοκρασία ξεπερνάει οριακά τους 80 °C, περίπου κατά 10 βαθμούς μεγαλύτερη από την περίπτωση 1a. Η μέση θερμοκρασία των θερμοστατών φαίνεται στην Εικόνα 5.43 και παρουσιάζει πολύ μικρές διακυμάνσεις γύρω από τους 20.1 °C. Στο τέλος του διαγράμματος αυτού παρατηρούμε μία αρκετά μεγαλύτερη αύξηση η οποία παρατηρήθηκε και προηγουμένως 140 σε μικρότερο βαθμό και οφείλεται στην εμπλοκή περισσότερων ατόμων, υψηλότερων ενεργειών κατά το τέλος της διεργασίας. Στην Εικόνα 5.44 έχουμε την εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων κατά τη συγκεκριμένη περίπτωση λείανσης. Παρατηρούμε μία σχετικά ομαλή αύξηση, από τους 20.5 στους 24.5 °C αυτή τη φορά (+1 °C σε σχέση με την προσομοίωση 1a).



Εικόνα 5.42: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας



Εικόνα 5.43: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.44: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.45: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης

Τέλος, στην Εικόνα 5.45, δίνεται η μέση θερμοκρασία της ομάδας ατόμων που επιλέξαμε να μελετήσουμε, η οποία σε αυτή την περίπτωση είναι οι 2 ανώτερες σειρές των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας, που είναι συνολικά 72 (θέσεις 765-800 και 725-760). Παρατηρείται συνεχής αύξηση της μέσης θερμοκρασίας των επιλεγμένων ατόμων, με μικρές διακυμάνσεις, από τους 21 ως τους 40 °C, δηλαδή 4 βαθμούς περισσότερο από την περίπτωση 1a.

## 5.3.2 Προσομοίωση 2b

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2b φαίνονται στον Πίνακα 5.5 και ακολουθούν τα διαγράμματα που αφορούν τα μετρούμενα μεγέθη.

Προσομοίωση 2b		
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)	
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	Διαμάντι	
ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ	Morse	
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ	-45°	
ΒΑΘΟΣ ΚΟΠΗΣ	8 Å	
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΚΟΠΗΣ	123 m / sec	
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800	
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	40	
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	80 fsec	

Πίνακας 5.5: Παράμετροι προσομοίωσης 2b

Σε αυτή την περίπτωση, η ταχύτητα σχηματίζει κλίση 4 μοιρών με την οριζόντιο, διατηρώντας σταθερό το μέτρο της, όπως ακριβώς στην περίπτωση 1b. Στις Εικόνες 5.46-5.50 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της κατεργασίας.



Εικόνα 5.46: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 800 fsec (έναρζη κατεργασίας)



Εικόνα 5.47: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 280 psec


Εικόνα 5.48: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 600 psec



Εικόνα 5.49: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 840 psec



Εικόνα 5.50: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 1080 psec

Από τα στιγμιότυπα της προσομοίωσης, παρατηρούμε ότι καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται, αυξάνεται και η έκταση της πλαστικής παραμόρφωσης μπροστά από το κοπτικό εργαλείο. Όπως εξελίσσεται η διεργασία, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας φαίνεται να είναι εφάμιλλη με αυτήν της προηγούμενης περίπτωσης. Όμως, προς το τέλος της προσομοίωσης και καθώς ο κόκκος βγαίνει από το τεμάχιο κατεργασίας, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας μειώνεται σε μικρό βαθμό και παρατηρούμε ότι δημιουργούνται κενά και εξαρθρώσεις ατόμων. Σε αυτό το στάδιο της προσομοίωσης παρατηρούμε και πάλι ένα είδος φαινομένου "bottle-neck" (λαιμός μπουκαλιού). Ο κόκκος σε αυτή τη φάση πιέζει τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου έναντι στα Συνοριακά του άτομα, με αποτέλεσμα την ανάπτυξη μεγάλων δυνάμεων κοπής, ακριβώς όπως στην προηγούμενη περίπτωση. Λόγω των δυσμορφιών που προκύπτουν, οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα γίνονται ακόμη πιο έντονες, με αποτέλεσμα κατά τη λήξη της προσομοίωσης, να είναι πιο έντονη η ανωμαλία στη μορφή της κατεργασμένης επιφάνειας, όπως επίσης και η αύξηση της τραχύτητας. Ακόμα όμως και στην ακατέργαστη επιφάνεια, μπορούμε να παρατηρήσουμε ότι κατά τη διάρκεια της κατεργασίας, σταδιακά τα άτομα αρχίζουν να μετατοπίζονται με πιο έντονο ρυθμό και παρουσιάζονται πολλές περιπτώσεις εξάρθρωσης ατόμων, κυρίως από το απόβλητο αλλά και από το τεμάχιο κατεργασίας.. Αυτό μπορεί να φανεί καλύτερα αν παρατηρήσουμε τις ταχύτητες και τις επιταχύνσεις των ατόμων κατά τη διάρκεια της κοπής. Βλέπουμε ότι αυτές αυξάνονται με μεγαλύτερο βαθμό σε σχέση με την προηγούμενη προσομοίωση και επίσης αυτό συμβαίνει για μεγαλύτερο αριθμό ατόμων. Κατά τα άλλα ο μηχανισμός σχηματισμού αποβλήτου λειτουργεί όπως πριν. Ο λειαντικός κόκκος, καθώς «προχωράει» πάνω στο τεμάχιο, περισσότερο το

«σπρώχνει», το πιέζει και τρίβεται επάνω του, παρά το κόβει. Εξαιτίας της συγκεκριμένης γεωμετρίας του κοπτικού εργαλείου (λειαντικού κόκκου), τα άτομα της υπό κατεργασία επιφάνειας, κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, ανασυγκροτούνται και συσσωρεύονται μπροστά και από κάτω. Έτσι έχουμε σαν αποτέλεσμα την χαρακτηριστική μορφή αποβλήτου λείανσης. Το απόβλητο στο τέλος της κατεργασίας τείνει να αποκολληθεί από το τεμάχιο και να γίνει θραύσμα αποκοπής (chip formation). Η κλίση των 4° της ταχύτητας, όπως παρατηρούμε, μας προσφέρει μία πιο ικανοποιητική άποψη για το φαινόμενο της εξόδου του κόκκου από το τεμάχιο και κυρίως το μεγαλύτερο αριθμό ατόμων που εμπλέκονται στη διαδικασία, δικαιολογείται η ελαφρά μείωση της ποιότητας της κατεργασμένης επιφάνειας. Εκτός από το σχηματισμό του αποβλήτου, και η ελαφρώς κεκλιμένη κατεργασμένη επιφάνεια είναι χαρακτηριστικά της κατεργασίας της λείανσης με κόκκους και των μηχανισμών με τους οποίους αυτή εξελίσσεται.

Oi δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης που προκύπτουν, παρουσιάζουν μέγιστες τιμές κατά x και y, τις  $F_{xmax} = 95.31 \text{ nN}$  και  $F_{ymax} = 82.49 \text{ nN}$ , αντίστοιχα. Επίσης, οι μέσες τιμές κατά x και y, είναι  $F_{x\mu} = 25.63 \text{ nN}$  και  $F_{y\mu} = 23.22 \text{ nN}$ , αντίστοιχως. Oi τιμές, ειδικά oi μέγιστες όπως και προηγουμένως, είναι κατά πολύ μεγαλύτερες από τις αντίστοιχες στην πρώτη σειρά προσομοιώσεων. Στην περίπτωση των μέσων δυνάμεων κοπής κατά τον άξονα των y, η αύξηση είναι τεράστια, ενώ κατά x πολύ μικρότερη. Η αύξηση αυτή οφείλεται εξ ολοκλήρου στη νέα γεωμετρία και τη μεγάλη γωνία αποβλήτου, όπως προαναφέρθηκε. Επιπλέον, σχετικά με τις δυνάμεις κοπής της περίπτωσης 2a, με την αύξηση είναι (25.63 – 20.43) / 25.63 = 0.2028 , δηλαδή της τάξης του 20.28%, ενώ για την F<sub>y</sub> η αύξηση είναι (23.22 – 18.77) / 23.22 = 0,2371 , δηλαδή της τάξης του 23.71%. Ενώ λοιπόν και οι δύο δυνάμεις κοπής αυξάνονται, η αύξηση της δύναμης κοπής κατά την κατακόρυφη διεύθυνση F<sub>y</sub> είναι λίγο μεγαλύτερη από την αντίστοιχη της δύναμης κοπής κατά την περίπτωση 2a, εδώ ο κόκκος κινείται και κατά την y διεύθυνση.

Στην Εικόνα 5.51 παρατηρούμε την εξέλιξη της της σωρευτικής θερμοκρασίας των ατόμων του υλικού κατεργασίας. Αυτή τη φορά η μέγιστη σωρευτική θερμοκρασία φτάνει οριακά τους 89 °C, περίπου κατά 7 βαθμούς μεγαλύτερη από την περίπτωση 2a (και +9 °C από την 1b,όπου είχαμε αντίστοιχο βάθος λείανσης). Η μέση θερμοκρασία των θερμοστατών φαίνεται στην Εικόνα 5.52 και παρουσιάζει πολύ μικρές διακυμάνσεις γύρω από τους 20.1 °C. Στο τέλος του διαγράμματος αυτού παρατηρούμε μία αρκετά μεγαλύτερη αύξηση η οποία παρατηρήθηκε και προηγουμένως σε μικρότερο βαθμό και οφείλεται στην εμπλοκή περισσότερων ατόμων, υψηλότερων ενεργειών και το φαινόμενο μορφής «bottle-neck", που περιεγράφηκε, κατά το τέλος της διεργασίας. Στην Εικόνα 5.53 έχουμε την εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων κατά τη συγκεκριμένη περίπτωση λείανσης. Παρατηρούμε μία σχετικά ομαλή αύξηση, από τους 20.5 στους 25.3 °C αυτή τη φορά (+0.8 °C σε σχέση με την προσομοίωση 2a, αλλά και με την περίπτωση 1b).



Εικόνα 5.51: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας



Εικόνα 5.52: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη λείανση



Εικόνα 5.53: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Thermal distribution on Specific lines of Part

Εικόνα 5.54: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης

Τέλος, στην Εικόνα 5.54, δίνεται η μέση θερμοκρασία της ομάδας ατόμων που επιλέξαμε να μελετήσουμε, η οποία σε αυτή την περίπτωση είναι οι 3 κατακόρυφες στήλες των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας που βρίσκονται δεξιά, ακριβώς μπροστά στον κόκκο λείανσης, που είναι συνολικά 21 (θέσεις 798-800, 758-760, 718-720, 678-680, 638-640, 598-600, 558-560). Σε αντίθεση με την πρώτη περίπτωση προσομοίωσης, όπου είγαμε ομαλή αύξηση της θερμοκρασίας με μικρές διακυμάνσεις για τις 2 πάνω σειρές του τεμαχίου, εδώ έχουμε ένα μεγαλύτερο εύρος θερμοκρασιών από 20.5 °C έως τους 30 °C και δεν παρουσιάζεται κάποια ομαλότητα στο διάγραμμα, καθώς κάποια από τα επιλεγμένα άτομα, συμμετέχουν από την αρχή ενεργά στη διαδικασία και κάποια άλλα όχι. Το μόνο που θα μπορούσαμε να πούμε είναι ότι φαίνεται πως, όσο πλησιάζουμε προς το τέλος της προσομοίωσης, η θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων μειώνεται αισθητά, κάτι που δε συνέβη στην αντίστοιχη περίπτωση, ίδιου βάθους κοπής και ταχύτητας, 1b. Αυτό μπορεί να οφείλεται σε πιο ομαλή ανασυγκρότηση των ατόμων που συμμετέχουν κάθε στιγμή στην κατεργασία. Γενικά παρουσιάζονται μεγαλύτερες θερμοκρασίες σε σύγκριση με την περίπτωση με βάθος κοπής 4 Å, λόγω των μεγαλύτερων ταχυτήτων που αποκτούν τα άτομα του τεμαχίου και των περισσότερων ατόμων που εμπλέκονται στην κατεργασία.

## **5.3.3 Προσομοίωση 2c**

Προσομοίωση 2c	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	Διαμάντι
ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ	Morse
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ	-45°
ΒΑΘΟΣ ΚΟΠΗΣ	12 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΚΟΠΗΣ	123 m / sec
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	40
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	80 fsec

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 2c φαίνονται στον Πίνακα 5.6 και ακολουθούν τα διαγράμματα που αφορούν τα μετρούμενα μεγέθη.

#### Πίνακας 5.6: Παράμετροι προσομοίωσης 2c

Και σε αυτή την περίπτωση, η ταχύτητα σχηματίζει κλίση 4 μοιρών με την οριζόντιο, διατηρώντας σταθερό το μέτρο της, όπως ακριβώς στην περίπτωση 1c. Στις Εικόνες 5.55-5.59 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της κατεργασίας.



Εικόνα 5.55: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 800 fsec (έναρζη κατεργασίας)



Εικόνα 5.56: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 280 psec



Εικόνα 5.57: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 600 psec



Εικόνα 5.58: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 840 psec



Εικόνα 5.59: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 1080 psec

Όπως έχουμε διαπιστώσει και προηγουμένως, καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται, αυξάνεται και η έκταση της πλαστικής παραμόρφωσης μπροστά από το κοπτικό εργαλείο. Όπως εξελίσσεται η διεργασία, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας φαίνεται να είναι παρόμοια με αυτήν της προηγούμενης περίπτωσης. Όμως, προς το τέλος της προσομοίωσης και καθώς ο κόκκος βγαίνει από το τεμάχιο κατεργασίας, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας μειώνεται αρκετά και παρατηρούμε ότι δημιουργούνται κενά και εξαρθρώσεις ατόμων. Σε αυτό το στάδιο της προσομοίωσης παρατηρούμε και εδώ το ίδιο είδος φαινομένου "bottle-neck" (λαιμός μπουκαλιού). Ο κόκκος πιέζει τα Νευτώνεια άτομα του τεμαχίου έναντι στα Συνοριακά του άτομα, με αποτέλεσμα την ανάπτυξη μεγάλων δυνάμεων κοπής, ακριβώς όπως στην προηγούμενη περίπτωση. Οι θλιπτικές τάσεις που αναπτύσσονται σε αυτή τη φάση είναι πολύ μεγάλες και αναγκάζουν τα χαμηλότερα στρώματα ατόμων, που δεν επηρεάζονται άμεσα από την κατεργασία, να ανασυνταχτούν μέσα στο πλέγμα και να δημιουργηθούν δυσμορφίες στα χαμηλά στρώματα ατόμων κάτω από τον λειαντικό κόκκο και αντίθετα από τη φορά της κίνησής του. Λόγω των δυσμορφιών που προκύπτουν, οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα γίνονται ακόμη πιο έντονες, με αποτέλεσμα κατά τη λήξη της προσομοίωσης, να είναι πιο έντονη η ανωμαλία στη μορφή της κατεργασμένης επιφάνειας, όπως επίσης και η αύξηση της τραχύτητας. Ο μηχανισμός σχηματισμού αποβλήτου λειτουργεί όπως πριν. Ο λειαντικός κόκκος, καθώς «προχωράει» πάνω στο τεμάχιο, το «σπρώχνει», το πιέζει και τρίβεται επάνω του. Εξαιτίας της συγκεκριμένης γεωμετρίας του κοπτικού εργαλείου (λειαντικού κόκκου), τα άτομα της υπό κατεργασία επιφάνειας, κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, ανασυγκροτούνται και συσσωρεύονται μπροστά και από

κάτω του. Έτσι έχουμε σαν αποτέλεσμα την χαρακτηριστική μορφή αποβλήτου λείανσης. Το απόβλητο στο τέλος της κατεργασίας τείνει να αποκολληθεί από το τεμάχιο και να γίνει θραύσμα αποκοπής (chip formation). Επομένως, λαμβάνοντας υπόψη τη μικρή κλίση της ταχύτητας κοπής, τις μεγάλες θλιπτικές τάσεις που αναπτύσσονται, ιδιαίτερα κατά το τέλος της προσομοίωσης και κυρίως το μεγαλύτερο αριθμό ατόμων που εμπλέκονται στη διαδικασία, δικαιολογείται η μείωση της ποιότητας της κατεργασμένης επιφάνειας. Εκτός από το σχηματισμό του αποβλήτου, και η ελαφρώς κεκλιμένη κατεργασμένη επιφάνεια είναι χαρακτηριστικά της κατεργασίας της λείανσης με κόκκους και των μηχανισμών με τους οποίους αυτή εξελίσσεται.

Oi δυνάμεις κοπής του κόκκου λείανσης που προκύπτουν, παρουσιάζουν μέγιστες τιμές κατά x και y, τις  $F_{xmax}$ = 99.42 nN και  $F_{ymax}$ = 88.51 nN, αντίστοιχα. Επίσης, οι μέσες τιμές κατά x και y, είναι  $F_{x\mu}$ =32.84 nN και  $F_{y\mu}$ =29.43 nN, αντίστοιχως. Oi τιμές, ειδικά oi μέγιστες όπως και προηγουμένως, είναι κατά πολύ μεγαλύτερες από τις αντίστοιχες στην πρώτη σειρά προσομοιώσεων. Στην περίπτωση των μέσων δυνάμεων κοπής κατά τον άζονα των y, η αύξηση είναι τεράστια, ενώ κατά x πολύ μικρότερη. Η αύξηση αυτή οφείλεται εξ ολοκλήρου στη νέα γεωμετρία και τη μεγάλη γωνία αποβλήτου, όπως προσομοίωση, σχετικά με τις μέσες δυνάμεις κοπής της περίπτωσης 2b, αυξάνουν με την αύξηση του βάθους κοπής,. Συγκεκριμένα, για τη δύναμη κοπής F<sub>x</sub> η αύξηση είναι (32.84 – 25.63) / 32.84 = 0.2195, δηλαδή της τάξης του 21.95%, ενώ για την F<sub>y</sub> η αύξηση είναι οι δύο δυνάμεις κοπής αυξήση της δύναμης κοπής κατά την κατακόρυφη διεύθυνση F<sub>y</sub> είναι ελαφρώς μεγαλύτερη από την αντίστοιχη της δύναμης κοπής κατά την κατακόρυφη διεύθυνση F<sub>y</sub>.



Εικόνα 5.60: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας



Εικόνα 5.61: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.62: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.63: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης

Στην Εικόνα 5.60 παρατηρούμε την εξέλιξη της της σωρευτικής θερμοκρασίας των ατόμων του υλικού κατεργασίας. Αυτή τη φορά η μέγιστη σωρευτική θερμοκρασία φτάνει οριακά τους 108 °C, περίπου κατά 15 βαθμούς μεγαλύτερη από την περίπτωση 2b και σχεδόν ίδια με την περίπτωση 1c (όπου είχαμε αντίστοιχο βάθος λείανσης). Η μέση θερμοκρασία των θερμοστατών φαίνεται στην Εικόνα 5.61 και παρουσιάζει πολύ μικρές διακυμάνσεις γύρω από τους 20.1 °C. Στο τέλος του διαγράμματος αυτού παρατηρούμε μία αρκετά μεγαλύτερη αύξηση η οποία παρατηρήθηκε και προηγουμένως σε μικρότερο βαθμό και οφείλεται στην εμπλοκή περισσότερων ατόμων, υψηλότερων ενεργειών και το φαινόμενο μορφής «bottle-neck», που περιεγράφηκε, κατά το τέλος της διεργασίας. Στην Εικόνα 5.62 έχουμε την εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων κατά τη συγκεκριμένη περίπτωση λείανσης. Παρατηρούμε μία σχετικά ομαλή αύξηση, από τους 20.5 στους 26.9 °C αυτή τη φορά (+1.6 °C σε σχέση με την 2b, αλλά περίπου ίση με την αντίστοιχη θερμοκρασία στην περίπτωση 1b).

Τέλος, στην Εικόνα 5.63, δίνεται η μέση θερμοκρασία της ομάδας ατόμων που επιλέξαμε να μελετήσουμε, η οποία σε αυτή την περίπτωση είναι οι 3 κατακόρυφες στήλες των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας που βρίσκονται δεξιά, ακριβώς μπροστά στον κόκκο λείανσης, που είναι συνολικά 21 (θέσεις 798-800, 758-760, 718-720, 678-680, 638-640, 598-600, 558-560), καθώς και οι 2 ανώτερες σειρές των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας, που είναι συνολικά 72 (θέσεις 765-800 και 725-760). Παρατηρείται συνεχής αύξηση της μέσης θερμοκρασίας των

επιλεγμένων ατόμων, με μικρές διακυμάνσεις, από τους 21 ως τους 40 °C, δηλαδή 4 βαθμούς περισσότερο από την περίπτωση 1c.

# 5.4 Τρίτη Σειρά Προσομοιώσεων

Στις προηγούμενες σειρές προσομοιώσεων παρακολουθήσαμε την επίδραση του βάθους λείανσης, της γωνίας αποβλήτου και της διεύθυνσης της ταχύτητας κοπής στο μηχανισμό σχηματισμού αποβλήτου και την ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας, καθώς και στις δυνάμεις και τις θερμοκρασίες που αναπτύσσονται, κατά τη λείανση τεμαχίου χαλκού με κόκκο διαμαντιού. Στην τρίτη και τελευταία σειρά προσομοιώσεων ερευνήσαμε το κατά πόσο επηρεάζονται τα μεγέθη που μας ενδιαφέρουν και η κατεργασία γενικότερα, από μεταβολές στο μέτρο της ταχύτητας κοπής και από τη χρήση διαφορετικής έκφρασης δυναμικού ενέργειας.

## 5.4.1 Προσομοίωση 3a

Στην παρούσα περίπτωση προσομοίωσης χρησιμοποιούμε τη γεωμετρία κόκκου της δεύτερης σειράς προσομοιώσεων, αλλά αυτή φορά διπλασιάζουμε το μέτρο της ταχύτητας, έτσι ώστε να πλησιάζει τις ταχύτητες που εφαρμόζονται και πειραματικά σε διεργασίες όπως λειάνσεις υψηλών ταχυτήτων (high speed grinding). [17,85,86]

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3a φαίνονται στον Πίνακα 5.7 και ακολουθούν τα διαγράμματα που αφορούν τα μετρούμενα μεγέθη.

Προσομοίωση 3a	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	Διαμάντι
ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ	Morse
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ	-45°
ΒΑΘΟΣ ΚΟΠΗΣ	12 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΚΟΠΗΣ	246 m / sec
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	40
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	80 fsec

Πίνακας 5.7: Παράμετροι προσομοίωσης 3α

Η ταχύτητα σχηματίζει κλίση 4 μοιρών με την οριζόντιο, διατηρώντας σταθερό το μέτρο της, όπως σε περιπτώσεις που προηγήθηκαν. Στις Εικόνες 5.64-5.68 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της κατεργασίας.



Εικόνα 5.64: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 800 fsec (έναρξη κατεργασίας)



Εικόνα 5.65: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 160 psec



Εικόνα 5.66: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 360 psec



Εικόνα 5.67: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 480 psec



Εικόνα 5.68: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 600 psec

Από τις παραπάνω εικόνες είναι φανερό ότι η πλαστική παραμόρφωση του υλικού είναι πολύ πιο έντονη και μειώνεται σε μεγάλο βαθμό η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας κατά τη διάρκεια της κατεργασίας. Το απόβλητο που παράγεται φαίνεται να διασπάται αρκετά συχνά και σχετικά εύκολα κάτω από αυτές τις συνθήκες, προκαλώντας και θραύσματα (chip formation), ενώ διατηρεί τη μορφή που ικανοποιεί τις προσομοιώσεις λείανσης (όπως και η  $2^{\eta}$  σειρά προσομοιώσεων). Τα άτομα αποκτούν μεγαλύτερες ταχύτητες από ότι στις προηγούμενες περιπτώσεις, οι οποίες μάλιστα αυξάνονται με μεγαλύτερο βαθμό και για μεγαλύτερο πλήθος ατόμων. Οι ταχύτητες αυτές λοιπόν αυξάνονται αισθητά κατά τη διάρκεια της κατεργασίας και σε συνδυασμό με τις μεγάλες δυνάμεις κοπής που αναπτύσσονται, οδηγούν σε αποκολλήσεις ατόμων. Έτσι, από πολύ νωρίς στην προσομοίωση, παρουσιάζονται κενά υλικού στο τεμάχιο κατεργασίας, ενώ έχουμε συνεχείς αποκολλήσεις και εξαρθρώσεις ατόμων, τόσο από τον λειαντικό κόκκο, όσο και από το τεμάχιο. Ο μηχανισμός σχηματισμού αποβλήτου λειτουργεί όπως και στη δεύτερη σειρά προσομοιώσεων, με τη μόνη διαφορά, ότι οι θλιπτικές τάσεις που αναπτύσσονται αυτή τη φορά είναι πολύ μεγαλύτερες και πιέζουν μέχρι και τα χαμηλότερα στρώματα ατόμων του τεμαχίου, προκαλώντας από πολύ νωρίς στην προσομοίωση σημαντική διαρροή υλικού, στο δεξί μπροστινό άκρο (θέση 40), καθ' όλη τη διάρκεια της κατεργασίας. Στις Εικόνες 5.69-5.70 έχουμε τα διαγράμματα των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου.



Εικόνα 5.69 : Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άζονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.70: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άζονα y συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.71: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας



Εικόνα 5.72: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.73: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.74: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης

Στην Εικόνα 5.71 παρατηρούμε την εξέλιξη της της σωρευτικής θερμοκρασίας των ατόμων του υλικού κατεργασίας. Αυτή τη φορά η μέγιστη σωρευτική θερμοκρασία φτάνει οριακά τους 170 °C, πολύ μεγαλύτερη από κάθε άλλη περίπτωση, κάτι που μαρτυρά από μόνο του τη σχέση της ταχύτητας του εργαλείου κοπής με τις θερμοκρασίες που αναπτύσσονται. Η μέση θερμοκρασία των θερμοστατών φαίνεται στην Εικόνα 5.72. Αυξάνεται συνεχώς από τους 20.05 μέχρι τους 20.7 °C παρουσιάζοντας πολύ μεγαλύτερες διακυμάνσεις, σε σχέση με τις άλλες προσομοιώσεις. Στην Εικόνα 5.73 έχουμε την εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων κατά τη συγκεκριμένη περίπτωση λείανσης. Παρατηρούμε μία ομαλή αύξηση, από τους 20.5 στους 40 °C αυτή τη φορά (+10 °C από την περίπτωση 2c). Τέλος, στην Εικόνα 5.74, δίνεται η μέση θερμοκρασία της ομάδας ατόμων που επιλέξαμε να μελετήσουμε, η οποία σε αυτή την περίπτωση είναι οι 3 κατακόρυφες στήλες των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας που βρίσκονται δεξιά, ακριβώς μπροστά στον κόκκο λείανσης, που είναι συνολικά 21 (θέσεις 798-800, 758-760, 718-720, 678-680, 638-640, 598-600, 558-560), καθώς και οι 2 ανώτερες σειρές των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας, που είναι συνολικά 72 (θέσεις 765-800 και 725-760). Παρατηρείται συνεχής αύξηση της μέσης θερμοκρασίας των επιλεγμένων ατόμων, από τους 20 ως τους 90 °C, δηλαδή 50 βαθμούς περισσότερο από την περίπτωση 2c!

Συγκρίνοντας την παρούσα περίπτωση προσομοίωσης με τις προηγούμενες, εκτός από την άμεση και πολύ σοβαρή επίδραση της ταχύτητας κοπής στη θερμοκρασία, είναι εύκολο να κατανοήσουμε και το θεμελιώδη ρόλο που παίζουν τα Θερμοστατικά άτομα στις προσομοιώσεις μας.

#### 5.4.2 Προσομοίωση 3b

Στη συγκεκριμένη και τελευταία περίπτωση προσομοίωσης χρησιμοποιούμε τη γεωμετρία κόκκου της δεύτερης σειράς προσομοιώσεων, αλλά αυτή φορά χρησιμοποιούμε την έκφραση δυναμικού ενέργειας Lennard – Jones 12 – 6, αντί του Morse, για να εκφράσουμε τις δυνάμεις που αναπτύσσονται μεταξύ των ατόμων χαλκού (Cu - Cu), αλλά και μεταξύ των ατόμων του κόκκου (διαμάντι) και αυτών του τεμαχίου κατεργασίας (C – Cu).

Τα βασικά χαρακτηριστικά της προσομοίωσης 3b φαίνονται στον Πίνακα 5.8 και ακολουθούν τα διαγράμματα που αφορούν τα μετρούμενα μεγέθη.

Προσομοίωση 3b	
ΥΛΙΚΟ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	Χαλκός (Cu)
ΥΛΙΚΟ ΚΟΠΤΙΚΟΥ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	Διαμάντι
ΣΥΝΑΡΤΗΣΗ ΔΥΝΑΜΙΚΟΥ	Lennard-Jones
ΓΩΝΙΑ ΑΠΟΒΛΙΤΤΟΥ	-45°
ΒΑΘΟΣ ΚΟΠΗΣ	12 Å
ΤΑΧΥΤΗΤΑ ΚΟΠΗΣ	123 m / sec
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΤΕΜΑΧΙΟΥ	800
ΠΛΗΘΟΣ ΑΤΟΜΩΝ ΕΡΓΑΛΕΙΟΥ	40
ΧΡΟΝΙΚΟ ΒΗΜΑ ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗΣ	80 fsec

Πίνακας 5.8: Παράμετροι προσομοίωσης 3b

Η ταχύτητα σχηματίζει κλίση 4 μοιρών με την οριζόντιο, διατηρώντας σταθερό το μέτρο της, όπως προηγουμένως. Στις Εικόνες 5.75-5.79 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την προσομοίωση κατά την εξέλιξη της κατεργασίας.



Εικόνα 5.75: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 800 fsec (έναρξη κατεργασίας)



Εικόνα 5.76: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 280 psec



Εικόνα 5.77: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 480 psec



Εικόνα 5.78: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 720 psec



Εικόνα 5.79: Στιγμιότυπο της προσομοίωσης σε χρόνο 960 psec

Από τα στιγμιότυπα αυτά παρατηρούμε ότι η επιφάνεια που παράγεται χαρακτηρίζεται από πολλές ατέλειες και κενά υλικού, ακόμα και σε μεγάλα βάθη, ενώ η ποιότητά της

είναι εμφανώς αρκετά χειρότερη από αντίστοιχες περιπτώσεις όπου χρησιμοποιήθηκε το με το δυναμικό Morse. Το απόβλητο που σχηματίζεται δεν είναι καθόλου συμπαγές και δείχνει να θρυμματίζεται από την αρχή της διαδικασίας, ενώ παρατηρούμε τις περισσότερες εξαρθρώσεις ατόμων από κάθε άλλη προσομοίωση που πραγματοποιήσαμε.

Στα διαγράμματα των Εικόνων 5.80 - 5.81 παρουσιάζονται οι δυνάμεις κοπής του λειαντικού κόκκου κατά τον x και τον y άξονα αντιστοίχως. Παρατηρούμε ότι οι δυνάμεις παρουσιάζουν μεγαλύτερη διασπορά σε σύγκριση με τις δυνάμεις που εμφανίζονται με χρήση του δυναμικού Morse, πράγμα το οποίο εξηγεί γιατί το απόβλητο που εμφανίζεται δεν είναι το ίδιο συμπαγές και γιατί η παραγόμενη επιφάνεια παρουσιάζει ατέλειες. Αυτό οφείλεται εν μέρει και στο ότι οι δυνάμεις κοπής στην προκειμένη περίπτωση είναι κατά πολύ μεγαλύτερες από τις δυνάμεις που εμφανίζονται με χρήση του δυναμικού Morse. Έτσι εξηγούνται και οι ιδιαίτερα πολλές εξαρθρώσεις ατόμων που παρατηρούνται καθ' όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης. Παρά τη μεγαλύτερη διασπορά, τα διαγράμματα παρουσιάζουν κάποια ομοιομορφία και ίσως μία μορφή συμμετρίας ως προς τον άξονα των x.



Εικόνα 5.80 : Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άζονα x συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.81: Μεταβολή της δύναμης κοπής στον άζονα y συναρτήσει του χρόνου



Εικόνα 5.82: Σωρευτική θερμοκρασία των ατόμων του υλικού κατεργασίας

Στην Εικόνα 5.82 παρουσιάζεται η μεταβολή της θερμοκρασίας του υλικού κατά την εξέλιξη της κοπής, η οποία εμφανίζει αμελητέες διαφορές σε σύγκριση με την αντίστοιχη περίπτωση όπου χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Morse, ξεπερνώντας οριακά τους 110 ° C. Η μέση θερμοκρασία των θερμοστατών φαίνεται στην Εικόνα 5.83 και παρουσιάζει μικρές διακυμάνσεις γύρω από τους 20.1 °C. Στην Εικόνα 5.84 έχουμε την εξέλιξη της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων κατά τη συγκεκριμένη περίπτωση λείανσης. Παρατηρούμε μία ομαλή αύξηση, από τους 20.5 στους 28 °C αυτή τη φορά. Τέλος, στην Εικόνα 5.85, δίνεται η μέση θερμοκρασία της ομάδας ατόμων που επιλέξαμε να μελετήσουμε, η οποία σε αυτή την περίπτωση είναι οι 3 κατακόρυφες στήλες των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας που βρίσκονται δεξιά, ακριβώς μπροστά στον κόκκο λείανσης, που είναι συνολικά 21 (θέσεις 798-800, 758-760, 718-720, 678-680, 638-640, 598-600, 558-560), καθώς και οι 2 ανώτερες σειρές των Νευτώνειων ατόμων του υλικού κατεργασίας, που είναι συνολικά 72 (θέσεις 765-800 και 725-760). Παρατηρείται συνεχής αύξηση της μέσης θερμοκρασίας των επιλεγμένων ατόμων, από τους 20 ως τους 46 °C. Σε σχέση με την αντίστοιχη περίπτωση προσομοίωσης 2c, παρατηρούμε ότι αναπτύσσονται ελαφρώς μεγαλύτερες θερμοκρασίες με τη χρήση του δυναμικού Lennard – Jones 12 – 6, εκτός από την περίπτωση των επιλεγμένων ατόμων, όπου η διαφορά είναι αρκετά μεγάλη για να θεωρηθεί αμελητέα.



Εικόνα 5.83: Μέση θερμοκρασία των Θερμοστατικών ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.84: Μέση θερμοκρασία των Νευτώνειων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης



Εικόνα 5.85: Μέση θερμοκρασία των επιλεγμένων ατόμων κατά τη διάρκεια της λείανσης

#### 5.5 Σύγκριση Αποτελεσμάτων Προσομοιώσεων

Στη συγκεκριμένη παράγραφο θα γίνει μία προσπάθεια συγκέντρωσης και συνοπτικής παρουσίασης των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων που προηγήθηκαν. Επιπλέον, θα προχωρήσουμε σε γραφικές συγκρίσεις των μέγιστων και των μέσων τιμών των μεγεθών που μας απασχόλησαν.

Αρχικά, στις Εικόνες 5.86 – 5.91, μπορούμε να παρατηρήσουμε τις δυνάμεις και τις θερμοκρασίες που αναπτύσσονται για κάθε προσομοίωση. Πιο συγκεκριμένα, στα διαγράμματα αυτά παρουσιάζονται οι μέγιστες (Fcx<sub>max</sub> και Fcy<sub>max</sub>) και οι μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου (Fcx<sub>μ</sub> και Fcy<sub>μ</sub>), κατά τους x και y άξονες, καθώς και οι μέγιστες τιμές της σωρευτικής θερμοκρασίας του υλικού και της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων, για κάθε περίπτωση προσομοίωσης. Όλες οι δυνάμεις εκφράζονται σε nN και οι θερμοκρασίες σε °C.



Εικόνα 5.86: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων κοπής για την 1<sup>η</sup> σειρά προσομοιώσεων



Εικόνα 5.87: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων κοπής για την 2<sup>η</sup> σειρά προσομοιώσεων



Εικόνα 5.88: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων κοπής για την 3<sup>η</sup> σειρά προσομοιώσεων



**Εικόνα 5.89**: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για την 1<sup>η</sup> σειρά προσομοιώσεων



**Εικόνα 5.90**: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για την 2<sup>η</sup> σειρά προσομοιώσεων



Εικόνα 5.91: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για την 3<sup>η</sup> σειρά προσομοιώσεων

Εύκολα παρατηρούμε πως οι δυνάμεις κοπής του κόκκου, ιδιαίτερα οι θλιπτικές (κατά y), επηρεάζονται άμεσα από τη γεωμετρία του εργαλείου. Πιο συγκεκριμένα, με την αύξηση της γωνίας αποβλήτου έχουμε αύξηση των όλων των δυνάμεων, με τη μεγαλύτερη να παρατηρείται κατά τον άξονα των y. Παρόλα αυτά, οι διαφορές στην θερμοκρασία είναι πολύ μικρές και η επίδραση της γωνίας αποβλήτου σε αυτή μπορεί να θεωρηθεί αμελητέα. Επίσης, με τη χρήση του δυναμικού Lennard – Jones 12-6, έχουμε πολύ μικρές μεταβολές στη θερμοκρασία, αν και οι μέγιστες τιμές των δυνάμεων κοπής είναι πολύ μεγαλύτερες. Η ταχύτητα του κοπτικού εργαλείου (λειαντικού κόκκου) είναι η παράμετρος που, σύμφωνα με τα παραπάνω διαγράμματα, επηρεάζει κατά πολύ τη θερμοκρασία του υλικού μας καταρχήν και κατ' επέκταση της κατεργασίας.

Παρακάτω παραθέτουμε τα ίδια μεγέθη, ανάλογα με το βάθος της λείανσης, για πιο εύκολη σύγκριση και πιο ολοκληρωμένη κατανόηση των παραμέτρων που τα επηρεάζουν.



Εικόνα 5.92: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων για βάθος λείανσης 4 Å



Εικόνα 5.93: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων για βάθος λείανσης 8 Å



Εικόνα 5.94: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων για βάθος λείανσης 12 Å



Εικόνα 5.95: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για βάθος λείανσης 4 Å



**Εικόνα 5.96**: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για βάθος λείανσης 8 Å



Εικόνα 5.97: Σωρευτική και μέση θερμοκρασία για βάθος λείανσης 12 Å

Όσον αφορά τις δυνάμεις, παρατηρείται βαθμιαία αύξηση των δυνάμεων κοπής του κόκκου, με αύξηση του βάθους λείανσης. Αυτό συμβαίνει γιατί το εργαλείο κοπής έρχεται σε επαφή με περισσότερα άτομα υλικού πράγμα που οδηγεί σε περισσότερη παραμόρφωση του υλικού και μεγαλύτερους όγκους αποβλήτου. Αυτό πρακτικά οδηγεί σε ανάπτυξη μεγαλύτερων δυνάμεων κοπής. Επίσης για το δυναμικό Lennard - Jones γνωρίζουμε ότι ανήκει στην κατηγορία των "soft models" και παράγει απωθητικές δυνάμεις στις μικρές αποστάσεις, ελκτικές δυνάμεις στις μεσαίες αποστάσεις και ελαχιστοποιείται στο μηδέν, καθώς οι αποστάσεις μεγαλώτερες αναπτυχθείσες δυνάμεις κοπής του κόκκου και εξηγεί γιατί και στη συγκεκριμένη προσομοίωση έχουμε και τις μεγαλύτερες αναπτυχθείσες δυνάμεις κοπής σε σχέση με το δυναμικό Morse, ενώ δεν έχουμε τις μέγιστες μέσες τιμές δυνάμεων κοπής, που παρουσιάζονται στην 3α περίπτωση προσομοίωσης. Ακόμα, για το ίδιο βάθος λείανσης, παρουσιάζονται μεγαλύτερες θερμοκρασίες για μεγαλύτερη γωνία αποβλήτου. Η διαφορά αυτή δε γίνεται τόσο αισθητή αν παρατηρήσουμε τις

μέσες μέγιστες θερμοκρασίες των Νευτώνειων ατόμων, όσο με την παρατήρηση της συμπεριφοράς της σωρευτικής θερμοκρασίας του κατεργάσιμου υλικού.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα συγκεντρωτικά διαγράμματα για τις μέγιστες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου κατά x (Εικόνα 5.98) και κατά y (Εικόνα 5.99), για τις μέγιστες μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου κατά x (Εικόνα 5.100) και κατά y (Εικόνα 5.101), για τις μέγιστες τιμές της σωρευτικής θερμοκρασίας του υλικού κατεργασίας (Εικόνα 5.102) και για τις μέγιστες τιμές της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων (Εικόνα 5.103), για κάθε περίπτωση προσομοίωσης.



Εικόνα 5.98: Μέγιστες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου κατά x για κάθε προσομοίωση



Εικόνα 5.99: Μέγιστες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου κατά y για κάθε προσομοίωση



Εικόνα 5.100: Μέγιστες μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου κατά x για κάθε προσομοίωση



**Εικόνα 5.101**: Μέγιστες μέσες τιμές των δυνάμεων κοπής του λειαντικού κόκκου κατά γ για κάθε προσομοίωση



Εικόνα 5.102: Μέγιστες τιμές της σωρευτικής θερμοκρασίας του υλικού κατεργασίας για κάθε προσομοίωση



Εικόνα 5.103: Μέγιστες τιμές της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων για κάθε προσομοίωση

Τέλος, στις Εικόνες 5.104 – 5.105 παρουσιάζονται συγκεντρωτικά όλες οι δυνάμεις και οι θερμοκρασίες ενδιαφέροντος αντιστοίχως, ώστε να είναι ακόμη πιο εμφανείς οι διαφορές και να γίνει πιο εύκολα η σύγκριση μεταξύ των προσομοιώσεων και των αποτελεσμάτων τους.



Εικόνα 5.104: Μέσες και μέγιστες τιμές δυνάμεων για κάθε προσομοίωση



**Εικόνα 5.105**: Μέγιστες τιμές σωρευτικής θερμοκρασίας υλικού και μέγιστες μέσες τιμές θερμοκρασίας Νευτώνειων ατόμων για κάθε προσομοίωση
### Κεφάλαιο 6

# Συμπεράσματα και Προτάσεις για περεταίρω Μελέτη

#### 6.1 Συμπεράσματα

Από τις προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν και τη σύγκριση των αποτελεσμάτων μπορούμε να εξάγουμε κάποια βασικά συμπεράσματα για τις δυνάμεις κοπής του κόκκου, τις αναπτυσσόμενες θερμοκρασίες του τεμαχίου κατεργασίας, την ποιότητα της κατεργαζόμενης επιφάνειας και το μηχανισμό σχηματισμού αποβλήτου κατά τη διάρκεια λείανσης τεμαχίου χαλκού με κόκκους από διαμάντι. Επιπλέον, τα αποτελέσματα των σειρών προσομοιώσεων που παρουσιάστηκαν εκτενώς στις προηγούμενες ενότητες, παρουσιάζουν χαρακτηριστικές ποιοτικές και ποσοτικές ομοιότητες με τα αντίστοιχα άλλων ερευνητών που μελέτησαν τη λείανση σε νανοκλίμακα.[17,18,26-28,55-59,65,67-69]

Σχετικά με τις δυνάμεις κοπής του λειαντικού κόκκου, παρατηρήθηκε ότι, με αύξηση του βάθους λείανσης, έχουμε αύξηση όλων των δυνάμεων, εξ' αιτίας της επαφής του κόκκου με περισσότερα άτομα του υλικού. Κατά την έναρξη της διεργασίας, η δύναμη κοπής του λειαντικού κόκκου αυξάνει συνεχώς, με έναν επαναλαμβανόμενο τρόπο που μοιάζει με ταλάντωση γύρω από μια διαρκώς αυξανόμενη τιμή. Όταν ο κόκκος βρεθεί ολόκληρος μέσα στο τεμάχιο και ενώ το κόβει, η δύναμη κοπής σταθεροποιείται σε ένα επίπεδο, γύρω από το οποίο συνεχίζονται οι διαρκείς διακυμάνσεις και αυξάνει σημαντικά το εύρος της ταλάντωσης της τιμής της δύναμης. Αυτές οι μεγάλες διακυμάνσεις είναι υπεύθυνες για τη διαμόρφωση της μετατόπισης των ατόμων και της πλαστικής παραμόρφωσης του κρυσταλλικού πλέγματος.

Συγκρίνοντας τα αποτελέσματα που βρέθηκαν για ίδια βάθη λείανσης, διαπιστώνουμε πως, μειώνοντας τη γωνία αποβλήτου (από 0° σε -45°), οδηγούμαστε σε μεγάλη αύξηση της κάθετης συνιστώσας της δύναμης κοπής του κόκκου  $F_{cy}$ , ενώ η αύξηση της οριζόντιας συνιστώσας  $F_{cx}$  είναι πολύ μικρή, συγκριτικά σχεδόν αμελητέα. Ο λόγος  $F_{cy}/F_{cx}$  αυξάνεται συνεχώς και στις περιπτώσεις με γωνία αποβλήτου -45° τείνει προς τη μονάδα. Με αύξηση του μέτρου της ταχύτητας λείανσης, έχουμε αντίστοιχη αύξηση όλων των δυνάμεων ανεξαιρέτως, με το λόγο  $F_{cy}/F_{cx}$  να παραμένει σταθερός. Η μικρή κλίση των 4° που δόθηκε στην ταχύτητα, για καλύτερη προσομοίωση της εξόδου του κόκκου από το υλικό, δε φαίνεται να επηρεάζει ιδιαίτερα τις δυνάμεις, αν και ίσως να είναι ο λόγος που στις προσομοιώσεις μας η  $F_{cy}$  δεν ξεπέρασε ποτέ την  $F_{cx}$ , όπως έχει συμβεί σε κάποιες έρευνες [17,59], αλλά κινήθηκαν στα ίδια επίπεδα. Η χρησιμοποίηση του δυναμικού Lennard – Jones 12-6, αντί του δυναμικού Morse, οδήγησε σε πολύ

μεγάλη αύξηση των δυνάμεων κοπής του κόκκου. Χαρακτηριστική ήταν η διαφορά μεγέθους της αύξησης των μέγιστων τιμών σε σχέση με αυτή των μέσων τιμών. Ενώ οι μέσες τιμές τους αυξήθηκαν περί τα 11 nN, οι μέγιστες (και ελάχιστες) παρουσίασαν αύξηση πάνω από 230 nN.

Όσο αφορά στις θερμοκρασίες που αναπτύσσονται, παρατηρήθηκε ότι αυξάνονται με αύξηση του βάθους της λείανσης, καθώς η αύξηση του βάθους λείανσης οδηγεί σε μεγαλύτερες ταχύτητες και επιταχύνσεις των ατόμων του υλικού, οι οποίες βάσει του μοντέλου που χρησιμοποιήθηκε, μεταφράζονται σε μεγαλύτερες θερμοκρασίες στο υλικό. Η μεταβολή της γωνίας αποβλήτου και της γεωμετρίας του λειαντικού κόκκου γενικότερα, δε φαίνεται να επηρεάζει ιδιαίτερα τις αναπτυσσόμενες θερμοκρασίες του υλικού, αν και αυτό το οφείλουμε εν μέρει στη λειτουργία των Θερμοστατικών ατόμων του τεμαχίου. Επίσης διαπιστώσαμε ότι οι θερμοκρασίες πρακτικά δε μεταβλήθηκαν όταν χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Lennard - Jones, αντί για το δυναμικό Morse, απλά παρουσίασαν μία πολύ μικρή, έως αμελητέα αύξηση. Στην περίπτωση όπου διπλασιάσαμε το μέτρο της ταχύτητας λείανσης, είχαμε πολύ μεγάλη αύξηση της σωρευτικής θερμοκρασίας του υλικού (+63°C) και κάπως μικρότερη αύξηση της μέσης θερμοκρασίας των Νευτώνειων ατόμων (+13°C).

Σε αυτό το σημείο αξίζει να αναφέρουμε πως τα αποτελέσματά της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι κυρίως ποιοτικά όσον αφορά τις θερμοκρασίες, μιας και η προσέγγισή μας, που έγινε βάσει κλασικής μηχανικής, δεν μοντελοποιεί με μεγάλη ακρίβεια τη μεταφορά θερμότητας για μέταλλα. Η ατομιστική ανάλυση μεταφοράς θερμότητας στο ήδη υπάρχον κλασικό μοντέλο Μοριακής Δυναμικής.

Σημαντικά συμπεράσματα εξήχθησαν και ως προς το μηχανισμό σχηματισμού αποβλήτου και την ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας. Παρατηρήσαμε ότι, σε κάθε περίπτωση προσομοίωσης, όσο το βάθος της λείανσης αυξανόταν, τα αποτελέσματα ήταν λιγότερο ποιοτικά, καθώς οι δυνάμεις αυξάνονται και εμπλέκονται περισσότερα άτομα στην κατεργασία. Διατηρώντας σταθερές τις συνθήκες της κατεργασίας και με αύξηση της ταχύτητας λείανσης, η ποιότητα της κατεργασμένης επιφανείας μειωνόταν σημαντικά, καθώς δημιουργούνταν πολλά κενά στο υλικό, εξαρθρώσεις ατόμων και πολλές επιφανειακές παραμορφώσεις. Αντίστοιχα αποτελέσματα είχαμε και με τη χρήση του δυναμικού Lennard – Jones, λόγω των μεγαλύτερων δυνάμεων που παρουσιάζονται.

Ακόμα, διαπιστώσαμε ειδοποιείς διαφορές στο μηχανισμό σχηματισμού αποβλήτου, οι οποίες έχουν άμεση σχέση με τη γεωμετρία του λειαντικού κόκκου, και πιο συγκεκριμένα με τη γωνία αποβλήτου. Στην πρώτη σειρά προσομοιώσεων, όπου είχαμε την πιο απλή μορφή γεωμετρίας κόκκου με γωνία αποβλήτου 0°, παρατηρούμε ότι το υλικό κατεργασίας παραμορφώνεται μπροστά από τον λειαντικό κόκκο, δημιουργώντας

σταδιακά την κυρίως μάζα του αποβλήτου, του οποίου η μορφή είναι συνεχής και κινείται προς τα επάνω, παράλληλα με την επιφάνεια του λειαντικού κόκκου, ενώ ταυτόχρονα διαμορφώνεται η κατεργασμένη επιφάνεια. Η κατεργασία υπό αυτές τις συνθήκες θυμίζει πολύ νανοκοπή και η ομοιότητα αυτή οφείλεται κυρίως στη μηδενική γωνία αποβλήτου η οποία μπορεί να χαρακτηρίσει αρκετές περιπτώσεις νανοκοπής (και λείανσης με κόκκους) και έχει να κάνει με τη γεωμετρία του κόκκου λείανσης. Στη γεωμετρία του κόκκου επίσης χρωστάμε την πιο ομαλή κατεργασμένη επιφάνεια, από ότι σε αντίστοιχες νανοκοπές, καθώς το οριζόντιο κομμάτι του λειαντικού κόκκου, δηλαδή οι σειρές των 12 ατόμων του εργαλείου στον άξονα των x, φαίνεται να παίζει ενεργό ρόλο στη μείωση της τριβής και επομένως της τραχύτητας, στην κατεργασμένη επιφάνεια. Στις περιπτώσεις 1b και 1c, όπου το διάνυσμα της ταχύτητας παίρνει κλίση 4°, παρατηρούμε σταδιακή μείωση του όγκου του αποβλήτου και τάση για αποκόλληση μέρους του και διαμόρφωση θραύσματος, καθώς ο λειαντικός κόκκος τείνει να εξέλθει από το τεμάχιο κατεργασίας. Να σημειωθεί ότι το μέρος του υλικού που βρίσκεται μακριά από τον λειαντικό κόκκο δεν επηρεάζεται σχεδόν καθόλου από την κατεργασία.

Κατά τη δεύτερη και τρίτη σειρά προσομοιώσεων είχαμε διαφορετική γεωμετρία του λειαντικού κόκκου (γωνία αποβλήτου -45°), που ενδείκνυται γενικά σε προσομοιώσεις λείανσης με κόκκους. [17,56,65] Ο μηγανισμός αποβολής υλικού μελετήθηκε σε βάθος και εντοπίστηκαν χαρακτηριστικές διαφορές με την πρώτη περίπτωση προσομοιώσεων. Κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων, ο λειαντικός κόκκος, εξαιτίας της συγκεκριμένης γεωμετρίας του, καθώς «προγωράει» πάνω στο τεμάγιο, περισσότερο το «σπρώχνει», το πιέζει και τρίβεται επάνω του, παρά το κόβει. Τα άτομα του κρυσταλλικού πλέγματος, υπό την πίεση μεγάλων θλιπτικών τάσεων, ανασυγκροτούνται και μέρος των μη-κρυσταλλικών πλέον ατόμων συσσωρεύονται μπροστά και κάτω από τον κόκκο λείανσης. Κάποια από αυτά τα μη κρυσταλλικά άτομα, με την εξέλιξη της κατεργασίας, διαμορφώνουν το χαρακτηριστικό σχήμα αποβλήτου λείανσης με κόκκους και ταυτόχρονα, κάποια άλλα (κυρίως αυτά που συσσωρεύονται κάτω από τον κόκκο) συνδυάζονται με τους ελεύθερους ατομικούς δεσμούς του πλέγματος (που έσπασαν υπό την επίδραση των διατμητικών τάσεων) και ανασυγκροτούνται για να σχηματίσουν το εκφυλισμένο στρώμα της κατεργαζόμενης επιφάνειας. [17,65] Οι θλιπτικές τάσεις που αναπτύσσονται σε αυτές τις περιπτώσεις είναι πολύ μεγάλες και αναγκάζουν τα ακόμη χαμηλότερα στρώματα ατόμων, που δεν επηρεάζονται άμεσα από την κατεργασία, να ανασυνταχθούν μέσα στο πλέγμα και να δημιουργηθούν δυσμορφίες στα χαμηλά στρώματα ατόμων κάτω από τον λειαντικό κόκκο και αντίθετα από τη φορά της κίνησής του. Λόγω των δυσμορφιών που προκύπτουν, οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα γίνονται ακόμη πιο έντονες με αποτέλεσμα να είναι πιο έντονη η ανωμαλία στη μορφή της κατεργασμένης επιφάνειας, όπως επίσης και η αύξηση της τραχύτητας. Ειδικά κατά την τρίτη σειρά προσομοιώσεων, η μεγάλη αύξηση των θλιπτικών τάσεων φαίνεται να είναι υπεύθυνη για σοβαρές διαρροές υλικού στο δεξί μπροστινό άκρο (θέση 40) από πολύ νωρίς, καθώς και για τις πολλές εξαρθρώσεις ατόμων, από το τεμάχιο και από το απόβλητο, κατά τη διάρκεια της κατεργασίας. Τέλος, στις περιπτώσεις όπου το διάνυσμα της ταχύτητας παίρνει κλίση 4°, παρατηρούμε σταδιακή μείωση του όγκου του αποβλήτου, τάση για αποκόλληση μέρους του και δημιουργία θραύσματος (chip formation), καθώς ο λειαντικός κόκκος τείνει να εξέλθει από το τεμάχιο κατεργασίας.

### 6.2 Προτάσεις για περεταίρω Μελέτη

Οι προσομοιώσεις MD μας παρέχουν έναν αποτελεσματικό και πολύ αποδοτικό τρόπο της μελέτης της θεωρίας της λείανσης σε νανοκλίμακα. Παρόλα αυτά, υπάρχουν ακόμα προβλήματα που συναντάμε κατά την εφαρμογή της μεθόδου MD και πρέπει να αντιμετωπιστούν. Επίσης, υπάρχουν τμήματα της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής (έτσι όπως παρουσιάστηκε) που μπορούν να βελτιωθούν και να προσφέρουν πολύ μεγαλύτερη ακρίβεια και μία αρκετά πιο ολοκληρωμένη προσομοίωση της διεργασίας.

Καταρχήν, η μετάβαση στις τρεις διαστάσεις και η εφαρμογή περιοδικών συνοριακών συνθηκών στη z διάσταση, καθώς και η μελέτη μεγαλύτερων μοντέλων (τεμάχιο κατεργασίας δεκάδων χιλιάδων ατόμων), με συμμετοχή περισσότερων του ενός λειαντικών κόκκων ταυτόχρονα στην κατεργασία, έχουν ήδη αρχίσει να μελετώνται από αρκετούς ερευνητές και τα πρώτα αποτελέσματα είναι πολύ ενθαρρυντικά. Επίσης, πολλές προσπάθειες γίνονται τελευταία για την ορθότερη απεικόνιση των μετάλλων κατά τη νανοκατεργασία, συνδυάζοντας διαφορετικές εκφράσεις δυναμικών ενέργειας πολλών σωμάτων (many-body potentials). [13,17, 89, 90, 91, 92, 93]

Επιπλέον, μία σημαντική βελτίωση θα αφορούσε την πιο ρεαλιστική απεικόνιση του λειαντικού κόκκου και τη μελέτη της επίδρασης της μεταβολής της ακτίνας καμπυλότητας στα αποτελέσματα της προσομοίωσης. Επίσης, το κοπτικό εργαλείο θα μπορούσε να θεωρηθεί ότι δέχεται παραμορφώσεις, προκειμένου να υπολογιστούν οι δυνάμεις που αναπτύσσονται σε αυτό και η παραμόρφωσή του. Ακόμη, θα μπορούσαν να αλλαχθούν οι κρυσταλλικές διευθύνσεις στα υλικά, προκειμένου να μελετηθεί η επίδρασή τους στα διάφορα αποτελέσματα. Βέβαια, σημαντική εξέλιξη θα ήταν η αλλαγή του υλικού του τεμαχίου για την εύρεση της συμπεριφοράς και άλλων υλικών κατά τη λείανση στη νανοκλίμακα. [17,28]

Πρέπει ακόμη να σημειωθεί ότι, όσον αφορά την ταχύτητα λείανσης της συγκεκριμένης προσομοίωσης (123 m/s), αλλά και γενικά των προσομοιώσεων Μοριακής Δυναμικής, οι ταχύτητες που χρησιμοποιούνται είναι αρκετά υψηλές και σε ορισμένες περιπτώσεις μη ρεαλιστικές, κυρίως λόγω του γεγονότος ότι μειώνουν τους απαιτούμενους χρόνους προσομοίωσης. Η πρακτική αυτή έχει ως αποτέλεσμα να μην συμπεριλαμβάνεται στο μοντέλο ο πραγματικός χρόνος χαλάρωσης και άρα η προσομοίωση να οδηγεί σε υλικό με περισσότερες παραμορφώσεις σε σύγκριση με την πραγματικότητα. Παρόλο που με τον τρόπο αυτό βέβαια οι ερευνητές βρίσκονται από την ασφαλή πλευρά των αποτελεσμάτων, η έρευνα πρέπει να στραφεί σε υιοθέτηση ταχυτήτων λείανσης πιο κοντά στις πραγματικές (5-10 m/s), πράγμα που θα βοηθήσει να εξαλειφθούν και οι πιθανές παραμορφώσεις του υλικού, αφού θα δίνεται επιπλέον χρόνος χαλάρωσης στα άτομα και οι προσομοιώσεις θα προσεγγίζουν με μεγαλύτερη ακρίβεια την πραγματικότητα. Βέβαια μέχρι σήμερα για ταχύτητα π.χ. 5 m/s, ένας οκταπύρηνος επεξεργαστής χρειάζεται 5 ημέρες προσομοίωσης. [17,36,86]

Τέλος, θα πρέπει να αναφέρουμε πως, ακόμα και οι πιο εξελιγμένες εφαρμογές της θεωρίας της Μοριακής Δυναμικής και οι πιο προχωρημένες μελέτες προσομοιώσεων MD, δεν λαμβάνουν υπόψη τα ρευστά στους υπολογισμούς τους. Έτσι, οι προσομοιώσεις λαμβάνουν χώρα σε περιβάλλον απόλυτου κενού, χωρίς καμία συναγωγή θερμότητας και επομένως η επέκταση των προσομοιώσεων MD νανοκατεργασιών με την ενσωμάτωση μοντέλων μοριακής ρευστομηχανικής (Μοριακή Δυναμική Ρευστών) μπορεί να μας προσφέρει μία ευκαιρία να αντιληφθούμε ένα πλήρες ενεργειακό ισοζύγιο και να ερευνήσουμε την επίδραση των στρωμάτων προσρόφησης και αντίδρασης του ρευστού, καθώς και τη συνεισφορά τους στην τριβολογία επαφής, πέραν των «στεγνών» νανοκατεργασιών σε υψηλό κενό αέρος.[17]

## Βιβλιογραφία

- 1. Meyer, M. and Pontikis, V., (1991), "Computer Simulation in Materials Science", NATO ASI series, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, the Netherlands, Vol 205.
- 2. R. Komanduri and L. M. Raff. A review on the molecular dynamics simulation of machining at the atomic scale. Proc. Instn Mech. Engrs, Part B, Journal of Engineering Manufacture, 215(B): 1639 1672, 2001.
- **3.** D. Frenkel, B. Smit, and M. A. Ratner. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, volume 50. Published by Academic Press, United States of America, 1997.
- 4. Feynman, R. P., Leiglhon, R. B. and Sands, M., (1964), "Feynman Lectures on Physics", Addison-Wesley.
- 5. N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, E. Teller, J.Chem. Phys., 1953, 21, 1087-1092
- **6** Adler, B. J. and Wainwright, T. E., (1959), "Studies in Molecular Dynamics General Method", Journal of Chemical Physics, Vol. 31, p. 459.
- 7. Παναγιώτης Γ. Σταυρόπουλος, Πειραματική και θεωρητική ανάλυση με τη χρήση Μοριακής δυναμικής του μηχανισμού φωτοαποδόμησης μεταλλικών υλικών προκαλούμενης από ακτίνες laser, Πανεπιστήμιο Πατρών, Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών, Εργαστήριο συστημάτων παραγωγής & αυτοματισμού / δυναμικής & θεωρίας μηχανών, Πάτρα 2007.
- **&** H. Goldstein. Classical Mechanics. Addison Wesley, Reading, Massachusetts, 1965.
- **9.** Frenkel, D. and Smit, B., (1996), "Understanding Molecular Simulation: from algorithms to applications", Academic Press: San Diego.
- 10. Η. Ηλιόπουλος, Εισαγωγή στη Μοριακή Προσομοίωση, Μοριακή Αναγνώριση, ΓΠΑ 2001.
- I. Κυρίκου, Α. Κάπου, Θ. Μαυρομούστακος, Κ. Πούλος, Μοριακά Μοντέλα: Ένα Ανεκτίμητο Εργαλείο στον Ορθολογιστικό Σχεδιασμό Φαρμάκων, Άρθρο Επισκόπηση Φαρμακευτική 14, ΙΙΙ, 109-123, 2001, Ινστιτούτο Οργανικής και Φαρμακευτικής Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, Αθήνα.
- 12. Σπανίδης Δημήτρης, Ανάλυση βάσεων για την εφαρμογή της μεθόδου Monte Carlo, Α.Π.Θ., Φεβρουάριος 2005
- Belak, J., Stowers, I. F., 1991, The Indentation and Scraping of a Metal Surface: A Molecular Dynamics Study, Fundamentals of Friction: Macroscopic and Microscopic, Eds.: Singer, Pollock, ASI Series E, 220: 1-10.

- 14. Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H., Ohmori, G., 1991. An Atomistic Analysis of Nanometric Chip Removal as Affected by Tool-Work Interaction in Diamond Turning, Annals of the CIRP, 40/1: 551-554.
- Hoover, W. G., De Groot, A. J., 1990, Large-Scale Elastic-Plastic Indentation Simulations via Nonequilibrium Molecular Dynamics, Phys. Rev. A 10/42: 5844 - 5853.
- *16.* Landman, U., Luedtke, W. D., Nitzan, A., 1989, Dynamics of Tip-Substrate Interactions in Atomic Force Microscopy, Surface Science 210: 177-184.
- 17. E. Brinksmeier, J. C. Aurich, E. Govekar, C. Heinzel, H.-W. Hoffmeister, F. Klocke, J. Peters, R. Rentsch, D. J. Stephenson, E. Uhlmann, K. Weinert, M. Wittmann. Advances in Modeling and Simulation of Grinding Processes, 2006, DOI: 10.1016/j.cirp.2006.10.003, Published by Elsevier Ltd.
- 18. I. Inasaki, R. Rentsch, Molecular Dynamics Simulation for Abrasive Processes Keio University, Yokohama, Japan Received on January 12,1994
- 19. Rapeepan Promyoo, Dr. Hazim El-Mounayri. Molecular Dynamics Simulation of Nanometric Machining Under Realistic Cutting Conditions Using LAMMPS. Thesis Presentation, Department of Mechanical Engineering Purdue School of Engineering and Technology, IUPUI, 2008.
- 20. Belak, J. and Stowers, I. F. A molecular dynamics model of the orthogonal cutting process. In Proceedings of the ASPE Annual Conference, Rochester, New York, 1990, p. 76.
- Stowers, I. F., Belak, J., Lucca, D. A., Komanduri, R., Rhorer, R. L., Moriwaki, T., Okuda, K., Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H., Dow, T. A. and Drescher, J. D. Molecular dynamics simulation of the chip forming process in single crystal copper and comparison with experimental data. In Proceedings of the ASPE Annual Conference, 1991, pp. 100-103.
- 22. Belak, J., Boercker, D. B. and Stowers, I. F. Simulation of nanometer-scale deformation of metallic and ceramic surfaces. MRS Bull., May 1993, 21(2), 55-60.
- 23. Belak, J. Nanotribology: modeling atoms when surfaces collide. Energy and Technology Review, Lawrence Liver- more National Laboratories (LLNL), August-September 1994, pp. 13-24.
- 24. Ikawa, N., Donaldson, R., Komanduri, R., Konig, W., McKeown, P. A., Moriwaki, T. and Stowers, I. Ultra precision metal cutting—the past, the present, and the future. Ann. CIRP, 1991, 40(2), 587-594.
- 25. Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H. and Ohmori, G. An atomistic analysis of nanometric chip removal as affected by tool-work interaction in diamond turning. Ann. CIRP, 1991, 40(1), 551-554.

- 26. Shimada, S., Ikawa, N., Ohmori, G. and Tanaka, H. Molecular dynamics analysis as compared with experimental results of micromachining. Ann. CIRP, 1992, 41(1), 117-120.
- 27. Shimada, S., Ikawa, N., Tanaka, H., Ohmori, G., Uchikoshi, J. and Yoshinaga, H. Feasibility study on ultimate accuracy in microcutting using molecular dynamics simulation. Ann. CIRP, 1993, 42(1), 91-94.
- 28. Shimada, S., Ikawa, N., Tanaka, H. and Uchikoshi, J. Structure of micromachined surface simulated by molecular dynamics analysis. Ann. CIRP, 1994, 43(1), 51-54.
- **29.** Inamura, T., Suzuki, H. And Takezawa, N. Cutting experiments in a computer using atomic models of a copper crystal and a diamond tool. Int. J. Jap. Soc. Precision Engng, 1991, 25(4), 259-266.
- *30.* Inamura, T., Takezawa, N. and Taniguchi, N. Atomic- scale cutting in a computer using crystal models of copper and diamond. Ann. CIRP, 1992, 41(1), 121-124.
- *31.* Inamura, T., Takezawa, N. and Kumaki, Y. Mechanics and energy dissipation in nanoscale cutting. Ann. CIRP, 1993, 42(1), 79-82.
- **32.** Inamura, T., Takezawa, N., Kumaki, Y. And Sata, T. On a possible mechanism of shear deformation in nanoscale cutting. Ann. CIRP, 1994, 43(1), 47-50.
- *33.* D. C. Rapaport, The Art of Molecular Dynamics Simulation, 2nd edition, Cambridge University Press, 2004
- 34. Torrens, I. M. Interatomic Potentials, 1972 (Academic Press, New York).
- 35. S. Nose'. A molecular dynamics method for simulations in the canonical ensemble. Molecular Physics, 52(2):255–268, 1984.
- 36. P.A. Romero a, G. Anciaux a, A. Molinari b, J.-F. Molinari a, ↑, Insights into the thermo-mechanics of orthogonal nanometric machining, Computational Materials Science 72 (2013) 116–126.
- 37. Brenner, D. W. and Garrison, B. J. Dissociative valence force field potential for silicon. Phys. Rev. B, July 1986, 34(2), 1304-1307.
- 38. Stillinger, F. H. and Weber, T. A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. Phys. Rev. B, April 1985, 31(8), 5262-5271.
- *39.* Biswas, R. and Hamann, D. R. Interatomic potentials for silicon structural energies. Phys. Rev. Lett., November 1985, 55(19), 2001-2004.
- 40. Bolding, B. C. and Anderson, H. C. Interatomic potential for silicon clusters, crystals, and surfaces. Phys. Rev. B, 1990, 41, 10 568-10 585.
- 41. Tersoff, J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. Phys. Rev. B, April 1988, 37(12), 6991-6999.

- 42. Brenner, D. W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. Phys. Rev. B, November 1990, 42(15), 9458-9471.
- 43. Voter, A. F. Interatomic potentials for atomic simulations. MRS Bull., 1996, 21(2), 17-18.
- 44. Morse, P. M. Diatomic molecules according to the wave mechanics II vibrational levels. Phys. Rev., 1929, 34, 57-64.
- 45. Girifalco, L. A. and Weizer, V. G. Application of the Morse potential function to cubic materials. Phys. Rev., 1959, 114, 687-690.
- R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff. Molecular dynamics (MD) simulation of uniaxial tension of some single crystal cubic metals at nanolevel. Int. J. Mech. Sci., 43: 2237 2260, 2001.
- 47. Lennard-Jones, J. E. Forces between atoms and ions. Proc. R. Soc. (Lond.) A, 1925, 109, 584.
- **48.** Foiles, S. M. Embedded-atom and related methods for modeling metallic systems. MRS Bull., 1996, 21(2), 24-28.
- 49. Agrawal, P. M., Raff, L. M. and Thompson, D. L. Surface Science, 1988, 188, 402.
- *50.* Baskes, M. I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities. Phys. Rev. B, 1992, 46, 2727-2742.
- 51. K. Maekawa and A. Itoh. Friction and tool wear in nano scale machining a molecular dynamics approach. Wear, 188: 115 122, 1995.
- **52.** Chryssolouris, G., (2006), "Manufacturing Systems: Theory and Practice, 2<sup>nd</sup> Edition", Springer, New York.
- 53. K. Maekawa, A. Itoh. Friction and tool wear in nano-scale machining-a molecular dynamics approach. Department of Mechanical Engineering. Ibaraki University, 4-12-l Nakanarusawa, Hitachi 316, Japan Wear 188 (1995) 115-122
- Jeong Du Kim and Chan Hong Moon. A Study on the Cutting Mechanism of Microcutting using Molecular Dynamics. Int. J. Adv. Manuf. Technol., 11: 319 – 324, 1996.
- 55. L. Zhang and H. Tanaka. Towards a deeper understanding of wear and friction on the atomic scale a molecular dynamics analysis. Wear, 211: 44 53, 1997.
- 56. R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff. Some aspects of machining with negative rake tools simulating grinding: an MD simulation approach. Phil. Mag. B., 79:955 968, 1999.
- 57. R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff. Effect of tool geometry in nanometric cutting: a molecular dynamics simulation approach. Wear, 219: 84 97, 1998.

- 58. R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff. MD simulation of nanometric cutting of single crystal aluminum: effect of crystal orientation and direction of cutting. Wear, 242: 60 88, 2000.
- 59. Q. X. Pei, C. Lu, F. Z. Fang, H. Wu. Nanometric cutting of copper: A molecular dynamics study. Computational Materials Science, 37: 434 441, 2006.
- 60. Q. X. Pei, C. Lu, H. P. Lee and Y. W. Zhang. Study of Materials Deformation in Nanometric Cutting by Large scale Molecular Dynamics Simulations. Nanoscale Res Lett, 4: 444 451, 2009.
- *61.* Hahn, R. S. The relation between grinding conditions and thermal damage in the workpiece. Trans. ASME, 1956, 78, 807-810.
- 62. Y. Y. Ye, R. Biswas, J. R. Morris, A. Bastawros and A. Chandra. Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper. Department of Physics and Microelectronics Research Center, Iowa State University, Nanotechnology, 14: 390 – 396, 2003.
- R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L.M. Raff. MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum. Mechanical and Aerospace Engineering, Oklahoma State University, 218 Engineering North, Stillwater, OK 74078, USA. Wear 240 2000. 113–143.
- 64. Te-Hua Fang, Jia-Hung Wu. Molecular dynamics simulations on nanoindentation mechanisms of multilayered films. Institute of Mechanical and Electromechanical Engineering, National Formosa University, Yunlin 632, Taiwan. Computational Materials Science 43 (2008) 785–790.
- 65. B. Lin, S.Y. Yu, S.X. Wang. An experimental study on molecular dynamics simulation in nanometer grinding. School of Mechanical Engineering, Tianjin University, Tianjin, China Journal of Materials Processing Technology 138 (2003) 484–488.
- 66. Y Y Ye, R Biswas, J R Morris, A Bastawros and A Chandra, Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper, Department of Physics and Microelectronics Research Center, Iowa State University, USA, Nanotechnology 14 (2003) 390–396.
- 67. Sagil James, Murali M. Sundaramn. A molecular dynamics study of the effect of impact velocity, particle size and angle of impact of abrasive grain in the Vibration Assisted Nano Impact-machining by Loose Abrasives. School of Dynamic Systems, University of Cincinnati, OH45221,USA. September2012.
- Till Junge, Jean-Francois Molinari. Molecular dynamics nano-scratching of aluminium: a novel quantitative energy-based analysis method. E'cole Polytechnique Fe'de'rale de Lausanne (EPFL), School of Architecture, Civil and Environmental Engineering (ENAC), Computational Solid Mechanics Laboratory (LSMS), 1015 Lausanne, Switzerland. Procedia IUTAM 3 (2012) 192 204.

- 69. A. Noreyan, J.G. Amar. Molecular dynamics simulations of nanoscratching of 3C SiC. Department of Mechanical, Automotive, and Materials Engineering, University of Windsor, Windsor ON N9B3P4, Canada Department of Physics & Astronomy, University of Toledo, Toledo OH 43606, USA 5 April 2006.
- 70. Peng-zhe Zhu, Yuan-zhong Hu, Tian-bao Ma, Hui Wang. Study of AFM-based nanometric cutting process using molecular dynamics. State Key Laboratory of Tribology, Tsinghua University, Chengfu Road, Beijing 100084, PR China. Applied Surface Science 256 (2010) 7160–7165.
- 71. Y.H. Chen, F.Z. Fang, X.D. Zhang and X.T. Hu, Molecular Dynamics Investigation of Cutting Force in Nanometric Cutting of Monocrystalline Silicon, State Key Laboratory of Precision Measuring Technology and Instruments, Tianjin University, China, American Journal of Nanotechnology 1 (2): 62-67, 2010.
- 72. De Chiffrea, L., H. Kunzmannb, G.N. Peggsc and D.A. Lucca, 2003. Surfaces in precision engineering, microengineering and nanotechnology. CIRP Annals-Manuf. Technol., 52: 561-577.
- 73. Fang, F.Z. and V.C. Venkatesh, 1998. Diamond cutting of silicon with nanometric finish. CIRP Ann. Manuf. Technnol., 47: 45-49.
- 74. Fang, F.Z., H. Wu, W. Zhou and X.T. Hu, 2007. A study on mechanism of nano-cutting single crystal silicon. J. Mater. Process. Technol., 184: 407-410.
- 75. Lee, W.B., 1990. Prediction of microcutting force variation in ultra- precision machining. Precis. Eng., 12: 25-28.
- **76.** Tsuzuki, H., P.S. Branicio and J.P. Rino, 2007. Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood. Comput. Phys. Commun., 177: 518-523.
- 77. Fang T and Weng C-I 2000 Three-dimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale Nanotechnology 11 148–53.
- 78. ShawMC(ed) 1984 Metal Cutting Principles (Oxford: Oxford University Press).
- **79.** Steigerwald J M, Murarka S P and Gutmann R J 1997 Chemical Mechanical Planarization of Microelectronic Materials (New York: Wiley).
- *80.* Reese R L 2000 University Physics (New York: Brooks–Cole).
- *81.* Ye Y, Biswas R, Bastawros A and Chandra A 2002 Simulation of chemical mechanical planarization of copper with molecular dynamics Appl. Phys. Lett. 81 1875.
- Rentsch R 2000 Atomistic Simulation and Experimental Investigation of Ultra Precision Cutting Processes (MRS Proc. vol 578) (Pittsburgh, PA: Materials Research Society) pp 261–6.

- **83.** J. Tersoff, Phys. Rev. 39 (8) (1989) 5566–5568.
- E. Brinksmeier, Y. Mutlugunes, F. Klocke, J.C. Aurich, P. Shore, H. Ohmori. Ultra-precision grinding. CIRP Annals - Manufacturing Technology 59 (2010) 652–671.
- **85.** J. Shimizu, L.B. Zhou, H. Eda. Simulation and experimental analysis of super high-speed grinding of ductile material. Journal of Materials Processing Technology 129 (2002) 19-24
- I. Inasaki , H. K. Tonshoff, T. D. Howes. Abrasive Machining in the Future. CIRP Annals - Manufacturing Technology Volume 42, Issue 2, 1993, Pages 723–732.DOI: 10.1016/S0007-8506(07)62535-9
- **87.** J.S. Colton Grinding Processes and Analysis. GIT 2009 ME 6222: Manufacturing Processes and Systems. Georgia Institute of Technology.
- E.h. F. Klocke Cutting with geometrically undefined cutting edges Fundamentals and techniques. Manufacturing Technology I, Lecture 9.
   Laboratory for Machine Tools and Production Engineering Chair of Manufacturing Technology. WZL/Fraunhofer IPT
- Boercker, D. B., Belak, J., Stowers, I. F., Donaldson, R. R., Siekhaus, W. J., 1992, Simulation of Diamond Turning of Silicon Surfaces, Proc. of ASPE, Oct. 1992, Florida, USA: 45-48.
- *90.* Chen, H., Zhang, D., Hagiwara, I., 2004, Parallel Molecular Dynamics Simulation of Nanoscale Grinding, Proc. of the 4th int. euspen conference May 31st-June 2nd: 163-164.
- *91.* Rentsch, R., 2004, Molecular Dynamics for abrasive process simulation, chapter 7 in Tribology of abrasive machining processes, eds. Marinescu, Rowe, Dimitrow, Inasaki, William Andrew Publ., NY, USA: 239-264.
- 92. Rentsch, R., Brinksmeier, E., 2005, Tribology aspects in state of the art MD cutting simulations, 8th. CIRP Int. Workshop on Modeling of Machining Operations, Chemnitz, Germany May 2005: 401 408
- 93. Shimizu, J., Zhou, L., Eda, H., 2003, Molecular Dynamics Simulation of Material Removal Mechanism beyond Propagation Speed of Plastic Wave, LEM21, JSME: 309-314.

#### Παράρτημα

Κώδικας Matlab των προσομοιώσεων

```
؞
% Modified Rapaport2 coee for supporting Temperature estimation
during cutting process
*****
function [] = rapaport2 thermo()
clc
%addpath('C:\Users\Mitsurug1\Desktop\Diplo\vnorm');
%addpath('C:\Users\Mitsurug1\Desktop\Diplo\normvec');
addpath('C:\Users\Mitsurug1\Desktop\Diplo\vnorm');
addpath('C:\Users\Mitsurug1\Desktop\Diplo\normvec');
%Input
NDIM = 3;
%[L] = e - 10 m = 1 Angstrom
%[t] = 80e - 15 s = 80 femto second
%[T] = 11,600. K
%[E] = 1 eV = 1.602e - 13 J
dt = 0.0123;
density = 0.13;
stepAvg = 10;
stepEquil = 0;
stepLimit = 10000;
T = 0.02525;
%Init
%GetNameList(argc, argv);
[rCut] = SetParams;
[mol, stepCount, totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey,
cutforcex, cutforcey, Temperature] = SetupJob (NDIM, T);
%Main Loop
[ax] = graphOut(NDIM, mol);
drawnow
tic
while stepCount < stepLimit</pre>
   [stepCount, timeNow, mol, totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex,
forcey, cutforcey, cutforcey, Temperature] = ...
      SingleStep(NDIM, stepCount, dt, mol, rCut,...
                totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey,
cutforcex, cutforcey, density, stepAvg, ax, T, Temperature);
   %tcalc = toc;
   %toc
   %disp(['Estimate remaining time: 'num2str(tcalc * (stepLimit /
stepCount
   %- 1) / 3600)' hours'])
```

```
refreshdata(ax(1), 'caller')
end
save res1
function [ax] = graphOut(NDIM, Mol)
qc = Mol.r;
v = Mol.rv;
a = Mol.ra;
tt = abs(Mol.tt);
close all;
figure;
ax(1) = gca;
hold on
xlabel('x Grid of material');
ylabel('y Grid of material');
tool = find(Mol.type == 1);
part = find(Mol.type ~= 1);
if NDIM == 3
    h = plot3(qc(1,part), qc(2,part), qc(3,part), 'bo');
    set(h, 'XDataSource', 'mol.r(1,mol.part)')
set(h, 'YDataSource', 'mol.r(2,mol.part)')
    set(h, 'ZDataSource', 'mol.r(3,mol.part)')
    h = plot3(qc(1,tool), qc(2,tool), qc(3,tool), 'go');
    set(h, 'XDataSource', 'mol.r(1,mol.tool)')
set(h, 'YDataSource', 'mol.r(2,mol.tool)')
    set(h, 'ZDataSource', 'mol.r(3,mol.tool)')
    h = quiver3(qc(1,:), qc(2,:), qc(3,:), v(1,:), v(2,:), v(3,:), 0.5,
'b');
    set(h, 'XDataSource', 'mol.r(1,:)')
    set(h, 'YDataSource', 'mol.r(2,:)')
    set(h, 'ZDataSource', 'mol.r(3,:)')
    set(h, 'UDataSource', 'mol.rv(1,:)')
set(h, 'VDataSource', 'mol.rv(2,:)')
    set(h, 'WDataSource', 'mol.rv(3,:)')
    h = quiver3(qc(1,:), qc(2,:), qc(3,:), a(1,:), a(2,:), a(3,:), 0.5,
'r');
    set(h, 'XDataSource', 'mol.r(1,:)')
    set(h, 'YDataSource', 'mol.r(2,:)')
    set(h, 'ZDataSource', 'mol.r(3,:)')
    set(h, 'UDataSource', 'mol.ra(1,:)')
    set(h, 'VDataSource', 'mol.ra(2,:)')
set(h, 'WDataSource', 'mol.ra(3,:)')
end
if NDIM == 2
    h = plot(qc(1, part), qc(2, part), 'bo');
    set(h, 'XDataSource', 'Mol.r(1,Mol.part)')
```

```
set(h, 'YDataSource', 'Mol.r(2,Mol.part)')
    h = plot(qc(1, tool), qc(2, tool), 'go');
    set(h, 'XDataSource', 'Mol.r(1,Mol.tool)')
    set(h, 'YDataSource', 'Mol.r(2,Mol.tool)')
    h = quiver(qc(1,:), qc(2,:), v(1,:), v(2,:), 0.5, 'b');
    set(h, 'XDataSource', 'Mol.r(1,:)')
    set(h, 'YDataSource', 'Mol.r(2,:)')
    set(h, 'UDataSource', 'Mol.rv(1,:)')
    set(h, 'VDataSource', 'Mol.rv(2,:)')
    h = quiver(qc(1,:), qc(2,:), a(1,:), a(2,:), 0.5, 'r');
    set(h, 'XDataSource', 'Mol.r(1,:)')
set(h, 'YDataSource', 'Mol.r(2,:)')
    set(h, 'UDataSource', 'Mol.ra(1,:)')
    set(h, 'VDataSource', 'Mol.ra(2,:)')
end
axis equal
grid on
box on
figure;
ax(2) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Velocity Sum');
figure;
ax(3) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Total Energy');
figure;
ax(4) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Kinetic Energy');
figure;
ax(5) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Pressure');
figure;
ax(6) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Force on x direction');
figure;
ax(7) = gca;
```

```
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Force on y direction');
figure;
ax(8) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Cut Force on x direction');
figure;
ax(9) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Cut Force on y direction');
drawnow
figure;
ax(10) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Average Particles Temperature (oC)');
drawnow
figure;
ax(11) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Particle Temperature');
title('Thermal distribution on part/tool');
drawnow
figure;
ax(12) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Tool mols Temperature');
title('Thermal distribution on tool');
drawnow
figure;
ax(13) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Newtonian Parts Temperature');
title('Thermal distribution on Newtonian Parts');
drawnow
figure;
ax(14) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Thermo Parts Temperature');
title('Thermal distribution on Thermo Parts');
drawnow
figure;
ax(15) = gca;
hold on
```

```
xlabel('Time');
ylabel('Boundary Parts Temperature');
title('Thermal distribution on Boundary Parts');
drawnow
figure;
ax(16) = gca;
hold on
xlabel('Time');
ylabel('Selected mols Temperature');
title('Thermal distribution on Specific lines of Part');
drawnow
function [stepCount, timeNow, mol, totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex,
forcey, cutforcey, cutforcey, Temperature] = ...
    SingleStep(NDIM, stepCount, deltaT, mol, rCut,...
               totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey, cutforcex,
cutforcey, density, stepAvg, ax, T, Temperature)
region = [];
nMol = mol.nMol;
stepCount = stepCount + 1;
timeNow = stepCount * deltaT;
mol = LeapfrogStep(1, mol, deltaT, T, Temperature);
ApplyBoundaryCond(mol, region);
[mol, uSum, virSum] = ComputeForces(NDIM, mol, rCut, region);
mol = LeapfrogStep(2, mol, deltaT, T, Temperature);
[totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey, cutforcex, cutforcey,
vSum, Temperature] = .
    EvalProps(NDIM, nMol, mol, uSum, virSum, ...
              density, totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey,
cutforcex, cutforcey, Temperature);
[totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey, cutforcex, cutforcey,
Temperature] = ...
    AccumProps(1, totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey,
cutforcex,cutforcey, stepAvg, Temperature);
if mod(stepCount, stepAvg) == 0
    kk=floor(stepCount./stepAvg);
    [totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey, cutforcex, cutforcey,
Temperature] = ...
        AccumProps(2, totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey,
cutforcex, cutforcey, stepAvg, Temperature);
   PrintSummary1(1, stepCount, timeNow, vSum, nMol,...
                totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey,
cutforcex, cutforcey, Temperature);
   PrintSummary2(1, timeNow, vSum, nMol, ax(2));
   PrintSummary3(1, timeNow, totEnergy, ax(3));
   PrintSummary4(1, timeNow, kinEnergy, ax(4));
   PrintSummary5(1, timeNow, pressure, ax(5));
   PrintSummary6(1, timeNow, forcex, ax(6));
   PrintSummary7(1, timeNow, forcey, ax(7));
   PrintSummary8(1, timeNow, cutforcex, ax(8));
   PrintSummary9(1, timeNow, cutforcey, ax(9));
   PrintSummary10(1, timeNow, Temperature, ax(10));
```

```
PrintSummary11(1, timeNow, mol, ax(11));
   PrintSummary12(1, timeNow, mol, ax(12));
   PrintSummary13(1, timeNow, mol, ax(13));
   PrintSummary14(1, timeNow, mol, ax(14));
   PrintSummary15(1, timeNow, mol, ax(15));
   PrintSummary16(1, timeNow, mol, ax(16));
   [totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey, cutforcex, cutforcey,
Temperature] = AccumProps(0,...
            totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey, cutforcex,
cutforcey, stepAvg, Temperature);
   %% Save history
   hmol.r(kk,:,:) = mol.r;
   hmol.rv(kk,:,:) = mol.rv;
   hmol.ra(kk,:,:) = mol.ra;
   %hmol.tt(kk,:,:) = mol.tt;
   hmol.ac(kk,:,:) = mol.ac;
   hmol.totEnergy(kk) = totEnergy;
   hmol.kinEnergy(kk) = kinEnergy;
   hmol.pressure(kk) = pressure;
   hmol.forcex(kk) = forcex;
   hmol.forcey(kk) = forcey;
   hmol.cutforcex(kk) = cutforcex;
   hmol.cutforcey(kk) = cutforcey;
   hmol.Temperature(kk) = Temperature;
   save res2 hmol
end
%disp(['Completed step = ' num2str(stepCount)])
function [mol, uSum, virSum] = ComputeForces(NDIM, mol, rCut, region)
nMol = mol.nMol;
tool = mol.tool;
part boundary = mol.partBoundary;
part = mol.part;
raold = mol.ra;
rrCut = rCut^{2};
mol.ac = zeros(NDIM, nMol);
mol.ra = zeros(NDIM, nMol);
mol.tt = zeros(NDIM, nMol);
uSum = 0;
virSum = 0;
for j1 = 1: (nMol - 1)
    for j2 = (j1 + 1): (nMol - 1)
        dr(:,1) = mol.r(:,j1) - mol.r(:,j2);
        %dr = VWrapAll(dr, region);
        rr = norm(dr, 2)^2;
        r = norm(dr, 2);
        if (rr < rrCut)</pre>
            %Force
            rri = 1 ./ rr;
            rri3 = rri .^ 3;
            %Lennard-Jones
```

```
fcVal = 48 * rri3 * (rri3 - 0.5) * rri;
            %Morse
            %C-C -> rigid
            %Cu−C
            De = 0.087;
            a = 5.14;
            %re = 2.05;
            if ((mol.type(1,j1) == 1) && (mol.type(1,j2) ~= 1)) ||...
               ((mol.type(j1) ~=1) && (mol.type(j2) == 1))
               fcVal = 48 * rri3 * (rri3 - 0.5) * rri;
          %fcVal = 0.89436 * (exp(-10.3 * (r - 2.05)) - exp(-5.14 * (r -
2.05))); %eV/Angstrom
               if mol.type(1,j1) == 1
               mol.ac(:,j1) = mol.ac(:,j1) + fcVal .* dr(:,1) / r;
%eV/Angstrom
               end
               if mol.type(1, j2) == 1
               mol.ac(:,j2) = mol.ac(:,j2) + fcVal .* dr(:,1) / r;
%eV/Angstrom
               end
            end
            %Cu-Cu
            %De = 0.343;
            %a = 1.3588;
            %re = 2.866;
            if ((mol.type(1,j1) ~= 1) && (mol.type(1,j2) ~= 1))
               fcVal = 48 * rri3 * (rri3 - 0.5) * rri;
                %fcVal = 0.93186504 * (exp(-2.7176 * (r - 2.78)) -
exp(-1.3588 * (r - 2.78))); %eV/Angstrom
            end
            %fcVal = 2 * a * De * (exp(-2 * a * (r - re)) - exp(-a * (r -
            %re)));
            %Acceleration contribution from this interaction
            mol.ra(:,j1) = mol.ra(:,j1) + fcVal .* dr(:,1) / r;
%eV/Angstrom
            mol.ra(:,j2) = mol.ra(:,j2) - fcVal .* dr(:,1) / r;
%eV/Angstrom
            %Virial sum
            uSum = uSum + 4 * rri3 * (rri3 - 1) + 1;
            virSum = virSum + fcVal * rr;
        end
    end
end
mol.ra(:, part boundary) = raold(:, part boundary);
mol.ra(:, tool) = raold(:, tool);
function [v] = VWrap(v, a)
idx1 = v >= 0.5 * a;
idx2 = v < -0.5 * a;
v(idx1 == 1) = v(idx1 == 1) - a;
v(idx2 == 1) = v(idx2 == 1) + a;
```

```
function [v] = VWrapAll(v, region)
for i = 1:size(v,1)
    v(i,:) = VWrap(v(i,:), region(i,1));
end
function [mol] = LeapfrogStep(part, mol, deltaT, T, Temperature)
T=T*11604.505-273;
partThermo=find(mol.type == 3);
if part == 1
   mol.rv = mol.rv + 0.5 .* deltaT .* mol.ra;
   mol.r = mol.r + deltaT .* mol.rv;
   if ((Temperature.val>(T+3)) | (Temperature.val<(T-3)))
% Velocity needs calibration!
     mol.rv(1:2, partThermo)=mol.rv(1:2, partThermo)*((Temperature.val
+ 273)/(T + 273))^0.5;
   end;
else
  mol.rv = mol.rv + 0.5 .* deltaT .* mol.ra;
end
v2=mol.rv.*mol.rv;
Mcu=63.546*1.66053892*10^(-27);
                                        % Mass of Cu atom
Kb=1.3806488*10^(-23);
                                    % Boltzmann constant
mol.tt=abs(11604.505*(Mcu*v2/(3*Kb)));
function [mol] = ApplyBoundaryCond(mol, region)
%mol.r = VWrapAll(mol.r, region);
%Init
function [rCut] = SetParams
rCut = 10; %2 ^ (1 / 6);
%region = 1 / density .^ 0.5 .* initUcell;
%nMol = prod(initUcell);
function [mol, stepCount, totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey,
cutforcex, cutforcey, Temperature] = SetupJob(NDIM, T)
stepCount = 0;
nMolTool = 120;
crystalPart = [40, 20, 1]';
nMolPart = prod(crystalPart);
nMol = nMolPart + nMolTool;
nx = crystalPart(1, 1);
ny = crystalPart(2, 1);
part = 1:nMolPart;
tool = (nMolPart + 1):nMol;
moltype = zeros(1, nMol);
moltype(1, tool) = 1;
moltype(1, part) = 2;
%Part Fixed Boundary
```

```
%lower 2 layers
for j = 1:2
    for i = 1:nx
        moltype(i + (j - 1) * nx) = 4;
    end
end
for j = 3:4
    for i = 3:nx
       moltype(i + (j - 1) * nx) = 3;
    end
end
%left 2 layers
for i = 1:2
    for j= 1:ny
       moltype(i + (j - 1) * nx) = 4;
    end
end
for i = 3:4
    for j= 3:ny
        moltype(i + (j - 1) * nx) = 3;
    end
end
%Molecule Types
%1 = tool, 2 = part-newtonian, 3 = part-thermostat, 4=part-boundary
tool = find(moltype == 1);
partNewton = find(moltype == 2);
partThermo = find(moltype == 3);
partBoundary = find(moltype == 4);
nMolNewton = numel(partNewton);
nMolThermo = numel(partThermo);
%Positions
r = zeros(NDIM, nMol);
r(:, part) = InitCoordsPart(NDIM, crystalPart);
r(:, tool) = InitCoordsTool(NDIM, nMolTool);
%Velocities
rv = zeros(NDIM, nMol);
velMag = (2 * (1 - 1 / nMolNewton) * T) ^ 0.5;
rv(1:2, partNewton) = InitVelsPart(2, nMolNewton, velMag, T);
velMagThermo = (2 * (1 - 1 / nMolThermo) * T) ^ 0.5;
rv(1:2, partThermo) = InitVelsPart(2, nMolThermo, velMagThermo, T);
veltool = [-0.8, 0.04545, 0]'; %0.1
rv(:, tool) = InitVelsTool(NDIM, nMolTool, veltool);
ra = InitAccels(NDIM, nMol);
ac = zeros(NDIM, nMol);
```

```
tt = zeros(NDIM, nMol);
[totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey, cutforcex, cutforcey,
Temperature] = AccumProps(0, [], [], [], [], [], [], [], []);
%Molecules Structure
mol.nMolTool = nMolTool;
mol.nMolPart = nMolPart;
mol.nMol = nMol;
mol.r = r;
mol.rv = rv;
mol.ra = ra;
mol.ac = ac;
mol.tt = tt;
mol.type = moltype;
mol.tool = tool;
mol.part = part;
mol.partNewton = partNewton;
mol.partThermo = partThermo;
mol.partBoundary = partBoundary;
function [r] = InitCoordsPart(NDIM, pos)
nmol = prod(pos);
upright = [0, 0, 0]';
gap = [3.62, 3.62 / 2, 1]';
n = 1;
r = zeros(NDIM, nmol);
for nz = 1:pos(3, 1)
    for ny = 1: pos(2, 1)
        for nx = 1:pos(1,1)
            r(:,n) = [(nx + mod(ny,2) * 0.5), ny, nz]';
            n = n + 1;
        end
    end
end
r = r - 1;
r = bsxfun(@times, gap, r);
lowleft = upright - max(r, [], 2);
r = bsxfun(@plus, lowleft, r);
function [r] = InitCoordsTool(NDIM, nmol)
lowerleft = [23, -12, 0]';
crystal = [3, 40, 1]';
n = 1;
r = zeros(NDIM, nmol);
for ny = 1:crystal(2,1)
    for nx = 1:crystal(1,1)
        for nz = 1:crystal(3,1)
            r(:,n) = [-(11/3)*(ny.^0.45); (ny.^0.8), nz]';
            n = n + 1;
```

```
end
    end
end
r = r - 1;
gap = 1.54 .* ones(NDIM, 1);
for i = 1:NDIM
    r(i,:) = lowerleft(i,1) + gap(i,1) .* r(i,:);
end
function [rv] = InitVelsPart(NDIM, nmol, velMag, T)
rv = 2 .* rand([NDIM, nmol]) - 1;
rv = velMag .* normvec(rv);
vSum = sum(rv, 2);
rv = bsxfun(@minus, rv, -1 ./ nmol .* vSum);
function [rv] = InitVelsTool(NDIM, nmol, vel)
rv = zeros(NDIM, nmol);
for i = 1:NDIM
    rv(i,:) = vel(i,1);
end
function [ra] = InitAccels(NDIM, nmol)
ra = zeros(NDIM, nmol);
%Auxiliary
function [totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey, cutforcex,
cutforcey, vSum, Temperature] = ...
    EvalProps(NDIM, nmol, mol, uSum, virSum, density, totEnergy,
kinEnergy, pressure, forcex, forcey, cutforcex, cutforcey, Temperature)
Mcu=63.546*1.66053892*10^(-27);
                                       % Mass of Cu atom
Kb=1.3806488*10^(-23);
                                    % Boltzmann constant
tmpvel=mol.rv;
part = find(mol.type ~= 1);
vSum = sum(mol.rv(1:2, part), 2);
vvSum = sum(vnorm(mol.rv(1:2,part), 1, 2), 2);
aSum = sum(mol.ra, 2);
aaSum = sum(vnorm(mol.ra, 1, 2), 2);
acSum = sum(mol.ac, 2);
acacSum = sum(vnorm(mol.ac, 1, 2), 2);
kinEnergy.val = 0.5 * vvSum / nmol;
totEnergy.val = kinEnergy.val + uSum / nmol;
pressure.val = density * (vvSum + virSum) / (nmol * NDIM);
forcex.val = aSum(1,:)./(0.62*10^(9));
forcey.val = aSum(2,:)./(0.62*10^{(9)});
cutforcex.val = acSum(1,:)./(0.62*10^{(9)});
cutforcey.val = acSum(2,:)./(0.62*10^(9));
Temperature.val = 11604.505*(2*Mcu*kinEnergy.val)/(3*Kb);
```

```
function [totEnergy, kinEnergy, pressure, forcex, forcey, cutforcex,
cutforcey, Temperature] = AccumProps(icode, totEnergy, ...
                              kinEnergy, pressure, forcex, forcey,
cutforcex, cutforcey, stepAvg, Temperature)
if (icode == 0)
    totEnergy = PropZero([]);
    kinEnergy = PropZero([]);
   pressure = PropZero([]);
    forcex = PropZero([]);
    forcey = PropZero([]);
    cutforcex = PropZero([]);
    cutforcey = PropZero([]);
    Temperature = PropZero([]);
elseif (icode == 1)
    totEnergy = PropAccum(totEnergy);
    kinEnergy = PropAccum(kinEnergy);
    pressure = PropAccum(pressure);
    forcex = PropAccum(forcex);
    forcey = PropAccum(forcey);
    cutforcex = PropAccum(cutforcex);
    cutforcey = PropAccum(cutforcey);
    Temperature = PropAccum(Temperature);
elseif (icode == 2)
    totEnergy = PropAvg(totEnergy, stepAvg);
    kinEnergy = PropAvg(kinEnergy, stepAvg);
    pressure = PropAvg(pressure, stepAvg);
    forcex = PropAvg(forcex, stepAvg);
    forcey = PropAvg(forcey, stepAvg);
    cutforcex = PropAccum(cutforcex);
    cutforcey = PropAccum(cutforcey);
    Temperature = PropAccum(Temperature);
end
function [v] = PropZero(v)
v.sum = [0; 0];
v.val = 0;
function [v] = PropAccum(v)
v.sum = v.sum + [v.val; v.val ^ 2];
function [v] = PropAvg(v, n)
v.sum = [v.sum(1, 1) / n; max([v.sum(2, 1) / n - v.sum(1, 1) ^ 2, 0])];
function [] = PrintSummary1(fp, stepCount, timeNow, vSum, nmol, totEnergy,
. . .
                           kinEnergy, pressure, forcex, forcey,
cutforcex, cutforcey, Temperature)
vCM = sum(vSum, 1) / nmol;
E = PropEst(totEnergy);
K = PropEst(kinEnergy);
P = PropEst(pressure);
fx = PropEst(forcex);
fy = PropEst(forcey);
fcx = PropEst(cutforcex);
fcy = PropEst(cutforcey);
tempt = PropEst(Temperature);
disp(['stepCount = ' num2str(stepCount)])
```

```
disp(['timeNow = ' num2str(timeNow)])
disp(['vCM = 'num2str(vCM)])
disp(['U + K = ' num2str(E)])
disp(['K = ' num2str(K)])
disp(['p = ' num2str(P)])
disp(['fx = ' num2str(fx)])
disp(['fy = ' num2str(fy)])
disp(['fcx = ' num2str(fcx)])
disp(['fcy = ' num2str(fcy)])
disp(['Temp = ' num2str(tempt(1,1))])
function [] = PrintSummary2(fp, timeNow, vSum, nmol, ax)
vCM = sum(vSum, 1) / nmol;
%xlabel('x Grid of material');
%ylabel('y Grid of material');
plot(ax, timeNow, vCM, 'Color', 'r', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary3(fp, timeNow, totEnergy, ax)
E = PropEst(totEnergy);
%xlabel('Time');
%ylabel('Total Energy');
plot(ax, timeNow, E(1), 'Color', 'b', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary4(fp, timeNow, kinEnergy, ax)
K = PropEst(kinEnergy);
%xlabel('Time');
%ylabel('Kinetic Energy');
plot(ax, timeNow, K(1), 'Color', 'g', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary5(fp, timeNow, pressure, ax)
P = PropEst(pressure);
%xlabel('Time');
%ylabel('Pressure');
plot(ax, timeNow, P(1), 'Color', 'c', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary6(fp, timeNow, forcex, ax)
fx = PropEst(forcex);
%xlabel('Time');
%ylabel('Force on x direction');
plot(ax, timeNow, fx(1), 'Color', 'm', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary7(fp, timeNow, forcey, ax)
fy = PropEst(forcey);
%xlabel('Time');
%ylabel('Force on y direction');
plot(ax, timeNow, fy(1), 'Color', 'k', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary8(fp, timeNow, cutforcex, ax)
fcx = PropEst(cutforcex);
%xlabel('Time');
%ylabel('Cut Force on x direction');
plot(ax, timeNow, fcx(1), 'Color', 'm', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary9(fp, timeNow, cutforcey, ax)
fcy = PropEst(cutforcey);
%xlabel('Time');
%ylabel('Cut Force on y direction');
plot(ax, timeNow, fcy(1), 'Color', 'k', 'Marker', 'o')
```

```
function [] = PrintSummary10(fp, timeNow, Temperature, ax)
Tmp = PropEst(Temperature);
%xlabel('Time');
%ylabel('Newtonian Partciles Temperature');
plot(ax, timeNow, Tmp(1), 'Color', 'g', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary11(fp, timeNow, mol, ax)
tool = find(mol.type == 1);
part = find(mol.type ~= 1);
partNewton = find(mol.type == 2);
partThermo = find(mol.type == 3);
partBoundary = find(mol.type == 4);
partNewton Thermo = find(mol.type == 2 | mol.type == 3);
partNewton_Boundary = find(mol.type == 2 | mol.type == 4);
partThermo Boundary = find(mol.type == 3 | mol.type == 4);
mol tt ave 3d=20+mol.tt(1,part(763))+mol.tt(2,part(763));
plot(ax, timeNow, mol tt ave 3d, 'Color', 'k', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary12(fp, timeNow, mol, ax)
tool = find(mol.type == 1);
part = find(mol.type ~= 1);
partNewton = find(mol.type == 2);
partThermo = find(mol.type == 3);
partBoundary = find(mol.type == 4);
partNewton Thermo = find(mol.type == 2 | mol.type == 3);
partNewton Boundary = find(mol.type == 2 | mol.type == 4);
partThermo Boundary = find(mol.type == 3 | mol.type == 4);
% Definition of Tool average Temperature
no tool=0;
mol_tt_ave_tool=0;
for i=1:1:920
  if (mol.type(i)==1)
     no tool=no tool+1;
     mol tt ave tool=mol tt ave tool+mol.tt(1,i)+mol.tt(2,i);
  end;
end;
mol_tt_ave_tool=20+mol_tt_ave_tool/(2*no_tool);
% Graphical plots of average Temperature
                                    2****
plot(ax, timeNow, mol tt ave tool, 'Color', 'k', 'Marker', 'o')
```

function [] = PrintSummary13(fp, timeNow, mol, ax)

```
tool = find(mol.type == 1);
part = find(mol.type ~= 1);
partNewton = find(mol.type == 2);
partThermo = find(mol.type == 3);
partBoundary = find(mol.type == 4);
partNewton Thermo = find(mol.type == 2 | mol.type == 3);
partNewton_Boundary = find(mol.type == 2 | mol.type == 4);
partThermo Boundary = find(mol.type == 3 | mol.type == 4);
2
  Definition of Newton Parts average Temperature
no_partNewton=0;
mol_tt_ave_partNewton=0;
for i=1:1:920
  if (mol.type(i)==2)
    no_partNewton=no_partNewton+1;
mol tt ave partNewton=mol tt ave partNewton+mol.tt(1,i)+mol.tt(2,i);
  end:
end;
mol tt ave partNewton=20+mol tt ave partNewton/(2*no partNewton);
% Graphical plots of average Temperature
%**
                      **********
                                 plot(ax, timeNow, mol tt ave partNewton, 'Color', 'k', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary14(fp, timeNow, mol, ax)
tool = find(mol.type == 1);
part = find(mol.type ~= 1);
partNewton = find(mol.type == 2);
partThermo = find(mol.type == 3);
partBoundary = find(mol.type == 4);
partNewton_Thermo = find(mol.type == 2 | mol.type == 3);
partNewton Boundary = find(mol.type == 2 | mol.type == 4);
partThermo Boundary = find(mol.type == 3 | mol.type == 4);
Definition of Thermo Parts average Temperature
2
no_partThermo=0;
mol_tt_ave_partThermo=0;
for i=1:1:920
  if (mol.type(i)==3)
    no partThermo=no partThermo+1;
mol tt ave partThermo=mol tt ave partThermo+mol.tt(1,i)+mol.tt(2,i);
  end;
end:
mol tt ave partThermo=20+mol tt ave partThermo/(2*no partThermo);
```

```
% Graphical plots of average Temperature
plot(ax, timeNow, mol tt ave partThermo, 'Color', 'k', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary15(fp, timeNow, mol, ax)
tool = find(mol.type == 1);
part = find(mol.type ~= 1);
partNewton = find(mol.type == 2);
partThermo = find(mol.type == 3);
partBoundary = find(mol.type == 4);
partNewton Thermo = find(mol.type == 2 | mol.type == 3);
partNewton Boundary = find(mol.type == 2 | mol.type == 4);
partThermo Boundary = find(mol.type == 3 | mol.type == 4);
% Definition of Boundary Parts average Temperature
no partBoundary=0;
mol tt ave partBoundary=0;
for i=1:1:920
  if (mol.type(i)==4)
    no partBoundary=no partBoundary+1;
    mol tt ave partBoundary=mol tt ave partBoundary+mol.tt(2,i);
  end;
end;
mol tt ave partBoundary=20+mol tt ave partBoundary/no partBoundary;
% Graphical plots of average Temperature
plot(ax, timeNow, mol_tt_ave partBoundary, 'Color', 'k', 'Marker', 'o')
function [] = PrintSummary16(fp, timeNow, mol, ax)
tool = find(mol.type == 1);
part = find(mol.type ~= 1);
partNewton = find(mol.type == 2);
partThermo = find(mol.type == 3);
partBoundary = find(mol.type == 4);
partNewton Thermo = find(mol.type == 2 | mol.type == 3);
partNewton_Boundary = find(mol.type == 2 | mol.type == 4);
partThermo Boundary = find(mol.type == 3 | mol.type == 4);
% Definition of any part sequence for average Temperature
% Define mol mask(i). 0<=i<=920</pre>
% When set 1 -> mol included in temperature average
% When set 0 -> mol not included in temperature average
```

```
% Initialization mol mask
mol mask(1:920)=0;
% Define mol mask
mol mask(798:800)=1;
mol_mask(758:760)=1;
mol mask(718:720)=1;
mol mask(678:680)=1;
mol mask(638:640)=1;
mol_mask(598:600)=1;
mol_mask(558:560)=1;
mol_mask(281:320)=0;
mol_mask(765:800)=1;
mol_mask(725:760)=1;
no partseq=0;
mol tt ave partseq=0;
for i=1:1:920
  if (mol mask(i) == 1)
     no_partseq=no_partseq+1;
     mol_tt_ave_partseq=mol_tt_ave_partseq+mol.tt(1,i)+mol.tt(2,i);
  end;
end;
mol tt ave partseq=20+mol tt ave partseq/(2*no partseq);
% Graphical plots of average Temperature
°*****
plot(ax, timeNow, mol_tt_ave_partseq, 'Color', 'k', 'Marker', 'o')
function [str] = PropEst(v)
str = [v.sum(1, 1), v.sum(2, 1)];
%saruman lives
```