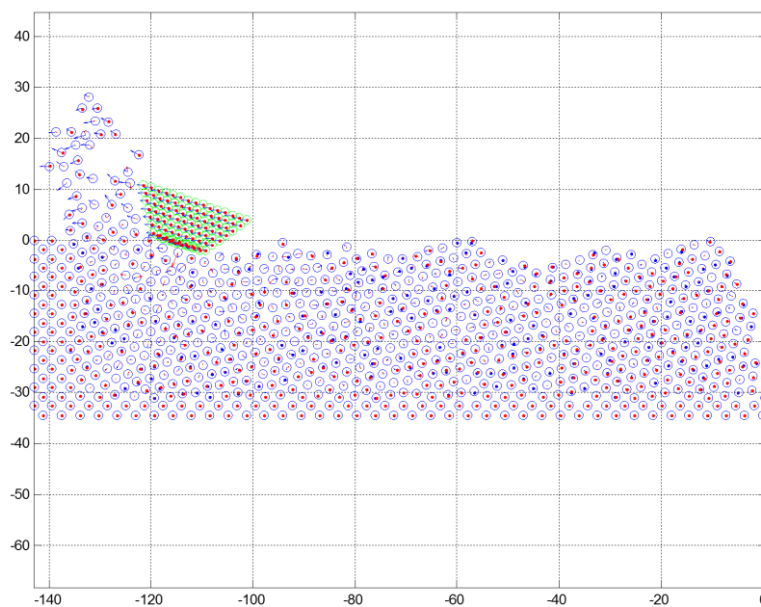




ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ

Διπλωματική Εργασία:

Αριθμητική διερεύνηση του ελάχιστου πάχους αποβλίττου στις
κατεργασίες αποβολής υλικού



Επιβλέπων καθηγητής: Άγγελος Μαρκόπουλος, Λέκτορας Ε.Μ.Π.

Φοιτητής: Βαρελτζής Δημήτρης
ΑΜ: 02102056

Περίληψη

Αντικείμενο της παρούσας διπλωματικής εργασίας είναι η διεξαγωγή κοπής νανοκλίμακας με τη βοήθεια των προσομοιώσεων Μοριακής Δυναμικής. Έτσι αρχικά τέθηκαν οι θεωρητικές βάσεις του μοντέλου της Μοριακής Δυναμικής και πιο συγκεκριμένα όλων των θεμελιωδών παραγόντων που το απαρτίζουν και το επηρεάζουν, όπως υπολογισμοί των τροχιών, η επιλογή ενέργειας δυναμικού ή/και ο καθορισμός της ταχύτητας κοπής.

Στη συνέχεια αναλύεται πιο ειδικά η χρήση της Μοριακής Δυναμικής στις νανοκοπές, τα πλεονεκτήματα, οι περιορισμοί της και οι παράμετροι διεργασίας που την επηρεάζουν, όπως το διατομικό δυναμικό που θα επιλεγεί για την προσομοίωση, η μεταβολή της γωνία κοπής του εργαλείου, το βάθος κοπής, η ακτίνα καμπυλότητας.

Επίσης, στο πλαίσιο της ολοκλήρωσης της βιβλιογραφικής ανασκόπησης αναφέρθηκαν μελέτες που εστίαζαν στη μεταβολή του βάθους κοπής και της ακτίνας καμπυλότητας, καθώς και ο τρόπος που συσχετίζονται με το ελάχιστο πάχος αποβλίττου.

Στη συνέχεια ακολουθεί το υπολογιστικό μέρος, όπου γίνεται αναφορά στον κώδικα Matlab που σχεδιάστηκε και στις προσθήκες που έγιναν ώστε να αναπαριστούν τη γωνία κοπής, το βάθος κοπής και τη μεταβολή της ακτίνας καμπυλότητας. Στη συνέχεια διεξήχθησαν προσομοιώσεις με τη μεταβολή των προαναφερθέντων παραμέτρων και διερεύνηση του ελάχιστου πάχους αποβλίττου. Τέλος, εξάγονται τα συμπεράσματα των προσομοιώσεων που διεξήχθησαν και αναφέρονται ορισμένες μελλοντικές προοπτικές για τη συνέχιση της έρευνας στον εν λόγω τομέα.

Λέξεις κλειδιά: *Μοριακή Δυναμική, Προσομοιώσεις, Κοπή νανοκλίμακας, Διατομικά δυναμικά, Γωνία κοπής, Υλικό κατεργασίας, Εργαλείο κοπής, Απόβλιττο*

Abstract

The Aim of this thesis is to conduct nanoscale cutting by means of molecular dynamics simulations. So initially the theoretical base of the model of Molecular Dynamics and specifically all its fundamental factors were presented, such as calculations of the atoms' trajectories, the selection of potential energy function and selection of the cutting speed.

In the next chapter, Molecular Dynamics in nanoscale cutting processes, its advantages, limitations and the main parameters, such as the selection of diatomic potential, the change in rake angle the cutting depth and the edge radius are analyzed. Also, in the context of the completion of the literature review, various studies that focused on variation of the cutting depth and edge radius, and the way they are associated with the minimum chip thickness., are presented.

The following chapter includes the computational part of this diploma thesis, which refers to the Matlab code and the additions made to incorporate the rake angle, cutting depth and the edge radius. Then simulations were conducted by varying the aforementioned parameters and investigate the minimum chip thickness. Finally, the conclusions from the simulations were drawn and some future prospects for the continuation of research in this area were listed.

Key words: *Molecular Dynamics, Simulations, Nanocutting, Interatomic potentials, Rake angle, Work material, Cutting tool, Chip*

Περιεχόμενα

Περίληψη	1
Abstract.....	2
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: Οι Μοριακές Προσομοιώσεις και η Μοριακή Δυναμική	11
1.1 Εισαγωγή.....	11
1.2 Πληροφορίες για τις προσομοιώσεις.....	11
1.2.1 Ορισμός.....	11
1.2.2 Ιστορική εξέλιξη των Μοριακών Προσομοιώσεων	12
1.3 Προσομοίωση Μοριακής Μηχανικής (MM).....	13
1.4 Προσομοίωση Monte Carlo (MC).....	14
1.5 Προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής	15
1.5.1 Θεωρία.....	15
1.6 Βασικές Αρχές.....	16
1.6.1 Τυπικός αλγόριθμος Μοριακής Δυναμικής (MD)	17
1.6.2 Εξισώσεις κίνησης.....	18
1.6.3 Περιοδικές οριακές συνθήκες	20
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: Χρήση της Μοριακής Δυναμικής στη Νανοκοπή	22
2.1 Ενσωμάτωση της ΜΔ στη Νανοκοπή	22
2.2 Κατηγορίες ατόμων.....	23
2.3 Σημαντικότερες παράμετροι κοπών νανοκλίμακας	25
2.3.1 Οι συναρτήσεις δυναμικού	25
2.3.2 Παράμετρος θερμοκρασίας αποβλίττου.....	27
2.3.3 Επαναπροσδιορισμός ταχυτήτων.....	28
2.4 Πλεονεκτήματα μεθόδου	29
2.5 Περιορισμοί μεθόδου	31
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: Βιβλιογραφική ανασκόπηση	34
3.1 Εισαγωγή.....	34
3.2 Μελέτη των Shi et al. για νανοκοπή πολυκρυσταλλικού χαλκού	36
3.2.1 Παρουσίαση του πειράματος.....	36
3.2.2 Επίδραση της γωνίας κοπής	37

3.3	Μελέτη των Komanduri et al. (1999) για τις παραμέτρους των κοπών νανοκλίμακας	40
3.3.1	Επίδραση της μεταβολής γωνίας κοπής.....	40
3.3.2	Ακτίνα καμπυλότητας και βάθος κοπής.....	46
3.3.3	Κρυσταλλογραφικός προσανατολισμός.....	50
3.4	Μελέτη των Fang et al. (2000) σε 3D μοντέλο νανοκοπής	55
3.4.1	Αποτελέσματα προσομοίωσης ΜΔ	56
3.4.2	Επίδραση του βάθους κοπής και της γωνίας κοπής του εργαλείου.....	57
3.5	Ελάχιστο πάχος αποβλίττου	58
3.5.1	Παράγοντες που επηρεάζουν το ΕΠΑ	59
3.6	Μελέτη προσομοίωσης ΜΔ των Oluwajobi και Chen (2011) για το όριο του ΕΠΑ.....	59
	Βιβλιογραφικές μελέτες σε σχέση με το ΕΠΑ	63
3.7	Συσχέτιση δύναμης πρόωσης με το ελάχιστο πάχος αποβλίττου	63
3.7.1	Συσχέτιση του φαινομένου κλίμακας με το ελάχιστο πάχος αποβλίττου	64
3.7.2	Συσχέτιση του ΕΠΑ με το φαινόμενο κλίμακας	65
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4:	Περιγραφή του κώδικα προσομοιώσεων νανοκοπής.....	67
4.1	Εισαγωγή.....	67
4.2	Ο αλγόριθμος και τα κύρια μέρη του	67
4.3	Ορισμός διαφορετικής γωνίας κοπής.....	71
4.4	Διαφορετική ακτίνα καμπυλότητας του κοπτικού εργαλείου	74
4.5	Αρχικοποίηση κώδικα νανοκοπής.....	77
4.5.1	Παράδειγμα προσομοίωσης.....	79
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5:	Παρουσίαση προσομοιώσεων και αποτελεσμάτων	80
5.1	Εισαγωγή.....	80
5.2	Γεωμετρία αποβλίττου ανάλογα με τη γωνία κοπής.....	80
5.2.1	Θετική Γωνία κοπής	80
5.2.2	Αρνητική γωνία κοπής	82
5.3	Διερεύνηση εμφάνισης ΕΠΑ.....	84
5.3.1	Βάθος κοπής 0,2 Å	84
5.3.2	Βάθος κοπής 0,5 Å	86

5.3.3	Βάθος κοπής 1 Å	87
5.3.4	Βάθος κοπής 2 Å	89
5.3.5	Βάθος κοπής 4 Å	90
5.4	Μεταβολή της συνολικής ενέργειας με το βάθος κοπής	93
5.5	Μεταβολή της δύναμης κοπής στην κατεύθυνση x με το βάθος κοπής ...	96
5.6	Μεταβολή της δύναμης κοπής στην κατεύθυνση y με το βάθος κοπής ...	99
5.7	Αποτελέσματα προσομοιώσεων για διαφορετική ακτίνα καμπυλότητας r 102	
5.8	Μεταβολή της δύναμης κοπής στην κατεύθυνση x με την ακτίνα καμπυλότητας.....	110
5.9	Μεταβολή της δύναμης κοπής στην κατεύθυνση y με την ακτίνα καμπυλότητας.....	112
	Συμπεράσματα	115
5.10	Μελλοντικές προοπτικές	116
	Βιβλιογραφία	117
	Παράρτημα	120

Ευρετήριο Εικόνων

Εικόνα 1.1: Σχηματική αναπαράσταση διασύνδεσης	11
Εικόνα 1.2: Αναπαράσταση των μορίων του νερού σε μία μοριακή προσομοίωση. .	12
Εικόνα 1.3: Η μέθοδος Monte Carlo συγκρίνει την ενέργεια ενός συστήματος.	15
Εικόνα 1.4: Σχηματική αναπαράσταση κύκλου Μοριακής Δυναμικής (MD).....	18
Εικόνα 1.5: Σχηματική απεικόνιση του περιοδικού κελιού προσομοίωσης.....	21
Εικόνα 2.1: Σχηματική παρουσίαση προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής κοπής νανοκλίμακας (Komanduri et al., 2001)	22
Εικόνα 2.2: Σχηματική αναπαράσταση των διαφόρων ζωνών ενός τεμαχίου κατά την προσομοίωση ΜΔ (Rareerap, 2008)	24
Εικόνα 3.1: Αναπαράσταση του μοντέλου κοπής νανοκλίμακας με προσομοίωση ΜΔ (Shi et al. 2013)	36
Εικόνα 3.2: Σχηματισμός αποβλίττου και κατανομή της αντίστοιχης τάσης για γωνία κοπής -30° , (a) απόσταση κοπής 30 \AA (b) απόσταση κοπής 120 \AA (c) απόσταση κοπής 240 \AA (Shi et al. 2013)	37
Εικόνα 3.3: Σχηματισμός αποβλίττου και κατανομή της αντίστοιχης τάσης για γωνία κοπής -0° , (a) απόσταση κοπής 30 \AA (b) απόσταση κοπής 120 \AA (c) απόσταση κοπής 240 \AA (Shi et al. 2013)	37
Εικόνα 3.4: Σχηματισμός αποβλίττου και κατανομή της αντίστοιχης τάσης για γωνία κοπής 30° , (a) απόσταση κοπής 30 \AA (b) απόσταση κοπής 120 \AA (c) απόσταση κοπής 240 \AA (Shi et al. 2013)	38
Εικόνα 3.5: Εξέλιξη της δύναμης κοπής για τις τρεις περιπτώσεις γωνιών κοπής (a) Εφαπτομενική δύναμη F_x (b) Δύναμη ώσης F_y (Shi et al. 2013).....	39
Εικόνα 3.6: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής χαλκού με χρήση εξαιρετικά αιχμηρού εργαλείου άπειρης σκληρότητας σε διαφορετικές αρνητικές γωνίες κοπής (0 ως 75°) (Komanduri et al. 1999)	42
Εικόνα 3.7: Μεταβολή της δύναμης κοπής και της δύναμης πρόωσης ανά μονάδα εύρους του λόγου της δύναμης πρόωσης προς τη δύναμη κοπής με τη μεταβολή της γωνίας κοπής (Komanduri et al. 1999)	43
Εικόνα 3.8: Μεταβολή της ειδικής ενέργειας με μεταβολή της γωνίας κοπής (Komanduri et al. 1999)	44
Εικόνα 3.9: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής του χαλκού με χρήση εξαιρετικά αιχμηρού εργαλείου άπειρης σκληρότητας σε διάφορες θετικές γωνίες κοπής εργαλείου (μέχρι 45°) (Komanduri et al. 1999).....	46
Εικόνα 3.10: Προσομοιώσεις ΜΔ νανοκοπής με εργαλείο στρογγυλού άκρου για λόγο d/r 0.1 και διάφορα βάθη κοπής ($0.362-2.172 \text{ nm}$) (Komanduri et al. 2001)....	48

Εικόνα 3.11: Διακύμανση της δύναμης κοπής και της δύναμης πρόωσης, και του λόγου πρόωσης προς κοπή, με την ακτίνα καμπυλότητας του εργαλείου για διαφορετικά βάθη κοπής (Komanduri et al. 2001)	49
Εικόνα 3.12: Διακύμανση της ειδικής ενέργειας με το βάθος κοπής για διαφορετικούς λόγους d/r, όπου φαίνεται αύξηση της ειδικής ενέργειας για μειούμενα βάθη κοπής (επίδραση κλίμακας) (Komanduri et al. 2001)	50
Εικόνα 3.13: Αποτελέσματα προσομοίωσης ΜΔ σε διάφορα στάδια νανοκοπής σε διαφορετικούς συνδυασμούς προσανατολισμών και κατευθύνσεις κοπής (Komanduri et al. 2001)	51
Εικόνα 3.14: Σχηματική απεικόνιση τριών τρόπων πλαστικής παραμόρφωσης στη ζώνη διάτμησης της νανοκοπής ενός μονοκρυστάλλου σε διαφορετικούς κρυσταλλικούς προσανατολισμούς και κατευθύνσεις κοπής (Komanduri et al. 2001)	53
Εικόνα 3.15: Μοντέλο προσομοίωσης ΜΔ (Fang et al. 2000).....	55
Εικόνα 3.16: Σχήμα διαφόρων τύπων δυναμικού Morse (Maekawa et al. 1995)	56
Εικόνα 3.17: Συσχέτιση μεταξύ της γωνίας κοπής του εργαλείου και της δύναμης για διαφορετικά βάθη κοπής (Fang et al. 2000)	57
Εικόνα 3.18: Περιπτώσεις κοπής που εμφανίζεται απόβλιττο αναλόγως τας βάθος κοπής (Oluwajobi και Chen 2011)	58
Εικόνα 3.19: Μεταβολή τα εφαπτομενικής δύναμης κοπής με το βάθος κοπής (0.01 nm-0.5 nm) (Oluwajobi και Chen 2011)	61
Εικόνα 3.20: Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για βάθος κοπής 0,2 nm (Oluwajobi και Chen 2011)	61
Εικόνα 3.21: Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για βάθος κοπής 0,25 nm (Oluwajobi και Chen 2011)	62
Εικόνα 3.22: Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για βάθος κοπής 0,3 nm(Oluwajobi και Chen 2011).....	62
Εικόνα 3.23: Συσχέτιση της δύναμης πρόωσης με το ελάχιστο πάχος απαραμόρφωτου αποβλιττου h (μm)	63
Εικόνα 3.24: Συσχέτιση της ειδικής δύναμης κοπής ως προς το λόγο του πάχους αποβλίττου προς την ακτίνα καμπυλότητας του εργαλείου (Shimada S. et al.1992)	65
Εικόνα 4.1: Περιστροφή του κοπτικού εργαλείου για το σχηματισμό θετικής γωνίας κοπής.....	72
Εικόνα 4.2: Περιστροφή του κοπτικού εργαλείου για το σχηματισμό αρνητικής γωνίας κοπής	72

Εικόνα 4.3: Αποφυγή αλληλεπικάλυψης των ατόμων του κοπτικού εργαλείου με το υλικό κατεργασίας για αρνητικές γωνίες κοπής	73
Εικόνα 4.4: Σχήμα του τραπεζίου για την προσθήκη ακτίνας καμπυλότητας στο κοπτικό εργαλείο	74
Εικόνα 4.5: Τελικό σχήμα του κοπτικού εργαλείου στο οποίο έχει γίνει προσθήκη ακτίνας καμπυλότητας	75
Εικόνα 4.6: Παραδείγματα κοπτικών εργαλείων με διαφορετικές ακτίνες καμπυλότητας, 4, 7 και 10.....	76
Εικόνα 4.7: Παράδειγμα αρχικού στιγμιότυπου προσομοίωσης νανοκοπής.....	79
Εικόνα 5.1: Στιγμιότυπο κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης	81
Εικόνα 5.2: Στιγμιότυπο κοπής στο τέλος της προσομοίωσης.....	81
Εικόνα 5.3: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για γωνία κοπής 10°	82
Εικόνα 5.4: Στιγμιότυπο κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης	82
Εικόνα 5.5: Στιγμιότυπο κοπής στο τέλος της προσομοίωσης.....	83
Εικόνα 5.6: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για γωνία κοπής - 10°	83
Εικόνα 5.7: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης	84
Εικόνα 5.8: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης	85
Εικόνα 5.9: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης	86
Εικόνα 5.10: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης	87
Εικόνα 5.11: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης	88
Εικόνα 5.12: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης	88
Εικόνα 5.13: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης	89
Εικόνα 5.14: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης	90
Εικόνα 5.15: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης	91
Εικόνα 5.16: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης	91
Εικόνα 5.17: Εξέλιξη του παραγόμενου αποβλίττου ως προς το λόγο του βάθους κοπής προς την ακτίνα καμπυλότητας	92
Εικόνα 5.18: Μεταβολή της συνολικής ενέργειας κοπής για $d/r=0,02$	93
Εικόνα 5.19: Μεταβολή της συνολικής ενέργειας κοπής για $d/r=0,05$	94
Εικόνα 5.20: Μεταβολή της συνολικής ενέργειας κοπής για $d/r=0,1$	94
Εικόνα 5.21: Μεταβολή της συνολικής ενέργειας κοπής για $d/r=0,2$	95

Εικόνα 5.22: Μεταβολή της συνολικής ενέργειας κοπής για $d/r=0,4$	95
Εικόνα 5.23: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για βάθος κοπής $0,2 \text{ \AA}$	96
Εικόνα 5.24: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για βάθος κοπής $0,5 \text{ \AA}$	97
Εικόνα 5.25: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για βάθος κοπής 1 \AA	97
Εικόνα 5.26: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για βάθος κοπής 2 \AA	98
Εικόνα 5.27: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για βάθος κοπής 4 \AA	98
Εικόνα 5.28: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για βάθος κοπής $0,2 \text{ \AA}$	99
Εικόνα 5.29: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για βάθος κοπής $0,5 \text{ \AA}$	100
Εικόνα 5.30: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για βάθος κοπής 1 \AA	100
Εικόνα 5.31: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για βάθος κοπής 2 \AA	101
Εικόνα 5.32: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για βάθος κοπής 4 \AA	101
Εικόνα 5.33: Στιγμιότυπο της κοπής κατά την έναρξη της προσομοίωσης	102
Εικόνα 5.34: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης	103
Εικόνα 5.35: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης	103
Εικόνα 5.36: Στιγμιότυπο της κοπής κατά την έναρξη της προσομοίωσης	104
Εικόνα 5.37: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης	105
Εικόνα 5.38: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης	105
Εικόνα 5.39: Στιγμιότυπο της κοπής κατά της έναρξη της προσομοίωσης	106
Εικόνα 5.40: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης	106
Εικόνα 5.41: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης	107
Εικόνα 5.42: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης	108
Εικόνα 5.43: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης	108
Εικόνα 5.44: Μεταβολή του αποβλίττου ως προς το λόγο d/r	109
Εικόνα 5.45: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για $d/r=0,5$...	110

Εικόνα 5.46: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για $d/r=0,2$...110

Εικόνα 5.47: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για $d/r=0,13$.111

Εικόνα 5.48: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για $d/r=0,1$...111

Εικόνα 5.49: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για $d/r=0,5$...112

Εικόνα 5.50: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για $d/r=0,2$...113

Εικόνα 5.51: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για $d/r=0,13$.113

Εικόνα 5.52: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για $d/r=0,1$...114

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: Οι Μοριακές Προσομοιώσεις και η Μοριακή Δυναμική

1.1 Εισαγωγή

Οι μοριακές προσομοιώσεις μπορούν να παίξουν πρωταρχικό ρόλο στο σχεδιασμό και τη μελέτη των υλικών προβλέποντας, από τη μοριακή τους δομή, τις ιδιότητες και τη συμπεριφορά τους. Μπορούν να αποτελέσουν σημαντικό μέσο στη μελέτη των μακροσκοπικών ιδιοτήτων των υλικών και να αποκαλύψουν τους μοριακούς μηχανισμούς που διέπουν τη συμπεριφορά τους, συνδέοντας έτσι το μικρόκοσμο (μοριακή δομή) με το μακρόκοσμο.

Στο κεφάλαιο αυτό επιχειρείται μια ανάλυση του θεωρητικού υποβάθρου πάνω στην προσομοίωση της Μοριακής Δυναμικής και γίνεται μια εισαγωγή στις βασικές έννοιές της, καθώς και τις κύριες μεθόδους μοριακής προσομοίωσης, όπως η Μοριακή Μηχανική και η Monte Carlo.

1.2 Πληροφορίες για τις προσομοιώσεις

1.2.1 Ορισμός

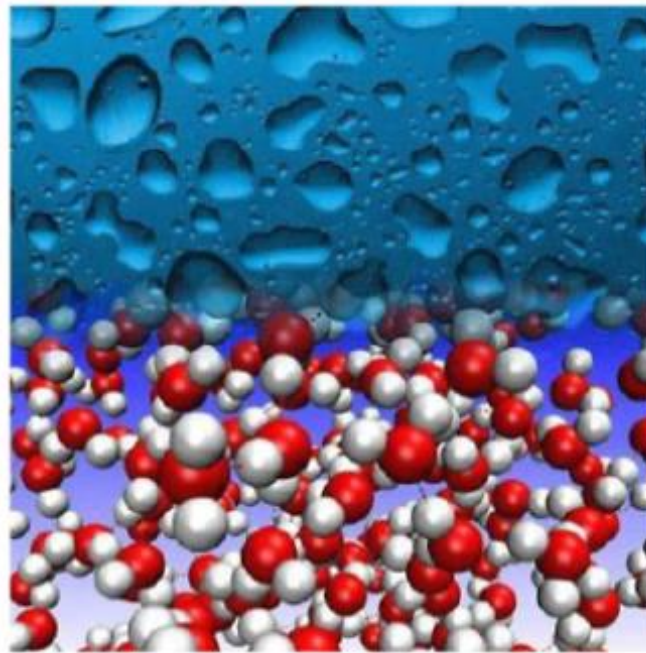
- Μια Μοριακή Προσομοίωση είναι η μαθηματική αναπαράσταση της αλληλεπίδρασης των μορίων ενός υλικού (στερεού, υγρού, αερίου), στην καταγραφή της χρονικής εξέλιξης των μικροσκοπικών φαινομένων και στον υπολογισμό μακροσκοπικών ιδιοτήτων ως στατιστικό άθροισμα των στιγμιαίων τιμών τους στη διάρκεια της προσομοίωσης. Έτσι ακολούθως φαίνεται μια σχηματική αναπαράσταση στην Εικόνα 1.1 της λειτουργίας των προσομοιώσεων.



Εικόνα 1.1: Σχηματική αναπαράσταση διασύνδεσης

Για συστήματα όπου οι πειραματικές μετρήσεις είναι δύσκολες (πχ. υψηλές θερμοκρασίες και πιέσεις, τοξικά ή εύφλεκτα συστατικά) η προσομοίωση μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως ψευδο-πειραματική πληροφορία.

- Η προσομοίωση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον έλεγχο της ορθότητας και της ακρίβειας μίας θεωρίας.
- Μέσω της προσομοίωσης είναι δυνατός ο ποσοτικός προσδιορισμός της επίδρασης κάποιων παραμέτρων στις ιδιότητες του συστήματος.



Εικόνα 1.2: Αναπαράσταση των μορίων του νερού σε μία μοριακή προσομοίωση.

1.2.2 Ιστορική εξέλιξη των Μοριακών Προσομοιώσεων

- 1953: πρώτη μοριακή προσομοίωση ρευστών από τους Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller & Teller χρησιμοποιώντας μία νέα στοχαστική μέθοδο (Metropolis Monte Carlo),
- 1957: Πρώτη προσομοίωση μοριακής δυναμικής από τον Alder,
- 1970s: Προσομοίωση θερμοδυναμικών και άλλων ιδιοτήτων απλών σχετικά συστημάτων (πχ. ρευστό Lennard-Jones),
- 1987: Ανάπτυξη από τον Panagiotopoulos μίας νέας μεθοδολογίας που επιτρέπει την άμεση προσομοίωση της ισορροπίας φάσεων,
- 1985 – 1990: Ανάπτυξη νέων «έξυπνων» κινήσεων για την προσομοίωση μεγαλομορίων (πολυμερή, βιολογικά μόρια κλπ.),

- 1995: Προσομοίωση της ισορροπίας φάσεων των καθαρών κ-αλκανίων από τους Smit, Karaborni & Siermann,
- Τέλη 1990: Μοριακή δυναμική συστημάτων για άνω των 100 ns.

1.3 Προσομοίωση Μοριακής Μηχανικής (MM)

Η Μοριακή Μηχανική (μέθοδος των δυναμικών πεδίων ή της δυναμικής ενέργειας) βασίζεται στην αρχή κατά την οποία το άθροισμα των φυσικών δυνάμεων, οι οποίες επενεργούν σε ένα μόριο, μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να περιγράψει την γεωμετρία και την ενέργεια του μορίου αυτού, η τελική δε διαμόρφωσή του μορίου αυτού στον χώρο είναι αυτή της ελάχιστης ολικής εσωτερικής ενέργειας. Ένα σύστημα μορίων, ως κλασσικό σύστημα της μοριακής μηχανικής, έχει αναφερθεί σε προηγούμενη παράγραφο. Η μοριακή μηχανική απαιτεί την κατασκευή μίας συνάρτησης, η οποία θα περιγράφει την δυναμική ενέργεια του συστήματος αυτού ως προς τις θέσεις (και συνεπώς και τις αποστάσεις) των ατόμων, που το απαρτίζουν. Οι ατομικές θέσεις λαμβάνονται από πειραματικά δεδομένα.

Στην μέθοδο της Μοριακής Μηχανικής η ενέργεια υπολογίζεται μόνον σαν συνάρτηση των θέσεων των πυρήνων των ατόμων, ενώ δεν λαμβάνονται υπόψη οι κινήσεις των ηλεκτρονίων. Έτσι μειώνεται σημαντικά ο αριθμός των σωματιδίων για τα οποία πρέπει να γίνονται υπολογισμοί συγκριτικά με τις κβαντομηχανικές μεθόδους. Για τον λόγο αυτό η μοριακή μηχανική χρησιμοποιείται κατά κανόνα για την περιγραφή συστημάτων που αποτελούνται από μεγάλο αριθμό ατόμων.

Τα διάφορα πεδία δυνάμεων (force fields) της μοριακής μηχανικής χρησιμοποιούν τις εξισώσεις της κλασσικής μηχανικής για να περιγράψουν τις επιφάνειες της δυναμικής ενέργειας και ορισμένες ιδιότητες των μορίων. Οι μέθοδοι αυτές συσχετίζουν την ενέργεια του συστήματος με ένδο- και διαμοριακές αλληλεπιδράσεις μέσα στο σύστημα οι οποίες καθορίζονται από τις μεταβολές μήκους δεσμών και μεγέθους γωνιών, περιστροφή δεσμών και μη δεσμικές αλληλεπιδράσεις ατόμων του συστήματος (ηλεκτροστατικές και Van der Waals αλληλεπιδράσεις). Ένα συστατικό του πεδίου αυτού είναι η ενέργεια που προέρχεται από τη συσπίρωση και την επιμήκυνση των δεσμών. Το συστατικό αυτό συχνά θεωρείται ότι έχει την μορφή αρμονικού ταλαντωτή και έτσι μπορεί να υπολογιστεί από τον νόμο του Hooke:

$$V_{\text{ελατηρίου}} = 1/2 K_r (r - r_o)^2 \quad (0.1)$$

όπου r , η απόσταση ατόμων στη θέση ισορροπίας και r_o , η μέγιστη απόσταση των ατόμων.

Ο δεσμός μεταξύ δύο ατόμων είναι ανάλογος με ένα ελατήριο που ενώνει τις δύο μάζες. Χρησιμοποιώντας αυτή την αναλογία, η Εξίσωση (1.1) δίνει τη δυναμική

ενέργεια του συστήματος των μαζών $V_{\text{ελατηρίου}}$ και την σταθερά του ελατηρίου K_r . Η απόσταση των ατόμων στη θέση ισορροπίας και το πλάτος της ταλάντωσης (μέγιστη απόσταση ελατηρίου) είναι r και r_0 αντίστοιχα. Τα K_r και r_0 είναι σταθερά για συγκεκριμένο σύστημα ατόμων που συνδέονται με ένα συγκεκριμένο ελατήριο και αποτελούν τις παραμέτρους του πεδίου δυνάμεων.

Η δυναμική ενέργεια ενός μοριακού συστήματος είναι συνάρτηση:

(α) του είδους των ατόμων που απαρτίζουν το μόριο

(β) του είδους των δεσμών που το συγκροτούν, και

(γ) των σχηματιζόμενων διέδρων γωνιών

Ο υπολογισμός της απόλυτης ενέργειας ενός μορίου στην μοριακή μηχανική δεν έχει φυσική σημασία. Χρησιμοποιείται όμως για τη σύγκριση των ενεργειακών καταστάσεων των μορίων. Ενέργειες με χρήση υπολογισμών ενός σημείου (single point calculations) σχετίζονται με την ενθαλπία του μορίου. Στην πραγματικότητα όμως δεν αποτελούν ενθαλπίες γιατί η θερμική κίνηση και η θερμοκρασία δεν υπολογίζονται στο άθροισμα των ενεργειακών όρων.

Αντίθετα με την κβαντομηχανική, η μοριακή μηχανική δεν επεξεργάζεται τα ηλεκτρόνια ξεχωριστά. Οι υπολογισμοί της μοριακής μηχανικής δεν μπορούν να περιγράψουν τον σχηματισμό των δεσμών, τη σχάση τους σε συστήματα στα οποία ο μη εντοπισμός των ηλεκτρονίων και οι αλληλεπιδράσεις των μοριακών τροχιακών παίζουν σημαντικό ρόλο στη δημιουργία της γεωμετρικής διαμόρφωσης των μορίων.

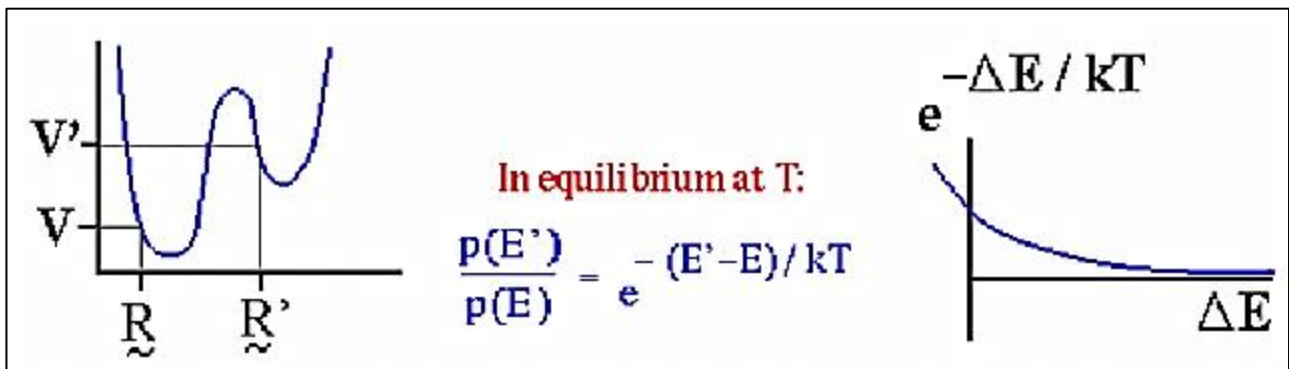
1.4 Προσομοίωση Monte Carlo (MC)

Κάθε σύστημα με αταξίες που συναντάται στη φύση είναι ένα πολύ περίπλοκο αντικείμενο. Για να αναλύσουμε τα χαρακτηριστικά αυτού του αντικειμένου, θα πρέπει να το αντικαταστήσουμε με το ισοδύναμο (ή το κοντινότερο ισοδύναμο) μαθηματικό μοντέλο. Αν και τις περισσότερες φορές τα θεωρητικά μοντέλα είναι υπέρ-απλουστευμένα, τα πιο πολλά δεν μπορούν να λυθούν χρησιμοποιώντας αναλυτικές μεθόδους. Αντίθετα στρεφόμαστε στην μέθοδο M.C. για να εκτελέσουμε «πειράματα» στον υπολογιστή πάνω στα μοντέλα συστημάτων. Το αποτέλεσμα κάθε τέτοιου αριθμητικού πειράματος μπορεί τότε να συγκριθεί με τα πειραματικά αποτελέσματα αλλά και τις προσεγγίσεις των αναλυτικών μεθόδων.

Η μέθοδος M.C. είναι κατά βάση μια αριθμητική μέθοδος, η οποία χρησιμοποιεί τυχαίες μεταβλητές για να φτάσει στην προσεγγιστική λύση ενός δεδομένου προβλήματος. Από τότε που χρησιμοποιήθηκε πρώτη φορά κατά τον πόλεμο κατά την εξέλιξη της ατομικής βόμβας, έχει βρει αναρίθμητες εφαρμογές όχι μόνο στη φυσική αλλά και στη βιολογία και στη χημεία. Όντως, μόνο μέσα στον τομέα της

φυσικής, έχει εφαρμοστεί επιτυχώς σε ένα ευρύ φάσμα προβλημάτων, από τα στοιχειώδη σωματίδια έως την αστρονομία.

Στην μέθοδο M.C. διαλέγουμε στην τύχη ένα πεπερασμένο σύνολο σημείων μέσα από το διάστημα ολοκλήρωσης. Η ανάγκη προσδιορισμού ολικού ενεργειακού ελαχίστου οδήγησε στην ανάπτυξη της μεθόδου Monte Carlo για στοχαστική διερεύνηση της επιφανειακής δυναμικής ενέργειας, τροποποιώντας τυχαία τη στερεοδιάταξη του μοριακού συστήματος. Η ενέργεια κάθε τυχαίας στερεοδιάταξης συγκρίνεται με την ενέργεια της προηγούμενης. Αν είναι χαμηλότερη τότε αυτή είναι η νέα διάταξη. Αν είναι υψηλότερη επιλέγεται τυχαία μία άλλη.



Εικόνα 1.3: Η μέθοδος Monte Carlo συγκρίνει την ενέργεια ενός συστήματος.

Ο λόγος των πιθανοτήτων δύο ενεργειακών καταστάσεων E, E' συσχετίζεται με την ενεργειακή διαφορά των στερεοδιατάξεων.

Το πλεονέκτημα της μεθόδου είναι ότι η στοχαστική διερεύνηση μπορεί να υπερβεί πολλά ενεργειακά φράγματα. Για μεγάλους χρόνους προσομοίωσης η μέθοδος Monte Carlo πρέπει να παράγει τα ίδια αποτελέσματα με τη Μοριακή Δυναμική. Αν για παράδειγμα θέλει κάποιος τώρα να υπολογίσει τη θερμοδυναμική της ρόφησης, μπορεί να το πετύχει χρησιμοποιώντας διάφορες τεχνικές Μοριακής προσομοίωσης []. Μια πρώτη προσέγγιση είναι ο υπολογισμός του ολοκληρώματος απεικονίσεων (configurational integral) για ένα μόριο. Η ολοκλήρωση Monte Carlo είναι μια χρήσιμη τεχνική για τον υπολογισμό αυτό. Ο όρος Monte Carlo, δόθηκε στη μέθοδο επειδή χρησιμοποιεί τυχαίους αριθμούς και θυμίζει παιχνίδι τύχης.

1.5 Προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής

1.5.1 Θεωρία

Οι αρχές στις οποίες βασίζεται η μοριακή δυναμική είναι τρεις. Η πρώτη είναι η βασική θερμοδυναμική υπόθεση, κατά την οποία ένα σύστημα οδηγείται αυθόρμητα σε κατάσταση χαμηλότερης ελεύθερης ενέργειας. Η προσθετικότητα

των δυναμικών είναι η δεύτερη αρχή. Οι δυνάμεις, οι οποίες επενεργούν στα άτομα εκφράζονται ως άθροισμα των δεσμικών και των μη δεσμικών δυνάμεων. Η τρίτη αρχή είναι αυτή της δυνατότητας μεταβίβασης των υπολογισθέντων από απλές αντιπροσωπευτικές δομές δυναμικών σε άλλα πολυπλοκότερα μόρια, τα οποία όμως αποτελούνται από τις ίδιες χημικές υπομονάδες, εισάγοντας με αυτό τον τρόπο την έννοια του τύπου ατόμου (atom type). Ο τύπος ατόμου απεικονίζει το περιβάλλον του κάθε ατόμου.

Η Μοριακή Δυναμική επιτρέπει την αλληλεπίδραση των ατόμων ενός μορίου για μία χρονική περίοδο και προβλέπει την μοριακή κίνηση σε ατομικό επίπεδο κατά την διάρκεια αυτής της περιόδου. Με την υπολογιστική μέθοδο των προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής υπολογίζεται η συμπεριφορά ενός μοριακού συστήματος συναρτήσει του χρόνου παρέχοντας λεπτομερή πληροφορία για τις διακυμάνσεις και τις αλλαγές διαμόρφωσης του υπό προσομοίωση μορίου.

Η μέθοδος των προσομοιώσεων μοριακής δυναμικής βασίζεται στον δεύτερο νόμο της κίνησης του Νεύτωνα (κλασική μηχανική). Σύμφωνα με αυτόν μπορούμε να προβλέψουμε την επιτάχυνση ενός αντικειμένου, δεδομένης της μάζας του και της συνολικής δύναμης η οποία εφαρμόζεται σε αυτό. Ο νόμος αυτός εκφράζεται με την εξίσωση $F=m*a$, όπου F είναι η συνολική δύναμη (δηλ το άθροισμα των ανυσμάτων των εφαρμοζόμενων στο σώμα δυνάμεων), m είναι η μάζα του σώματος και a η επιτάχυνσή του. Το ολοκλήρωμα της ανωτέρω εξίσωσης της κίνησης παράγει ένα τροχιακό (trajectory), το οποίο περιγράφει τις θέσεις, τις ταχύτητες και τις επιταχύνσεις των σωματιδίων του συστήματος σε όλη την διάρκεια του χρόνου προσομοίωσης. Από αυτό το τροχιακό μπορούν να καθοριστούν οι μέσες τιμές πολλών ιδιοτήτων του συστήματος. Στην κλασική μηχανική ισχύει η αιτιοκρατία (determinism). Εφόσον οι θέσεις και οι ταχύτητες όλων των ατόμων είναι γνωστές, η κατάσταση του απαρτιζόμενου από αυτά τα άτομα συστήματος μπορεί να προβλεφθεί επακριβώς σε οποιαδήποτε μελλοντική χρονική στιγμή. Και η χρονική στιγμή μπορεί να καθοριστεί, εφόσον ο χρόνος στην κλασική μηχανική είναι απόλυτος.

1.6 Βασικές Αρχές

Στο πρώτο βήμα του σχήματος 2.4 ο αλγόριθμος της μοριακής δυναμικής απαιτεί την γνώση της θέσης και της ταχύτητας κάθε σωματιδίου. Αυτό στην πράξη μεταφράζεται σε ένα ψηφιακό αρχείο όπου καταγράφονται οι συντεταγμένες της θέσης καθώς και οι συνιστώσες της ταχύτητας του κάθε σωματιδίου σε ένα σύστημα αναφοράς και απεικονίζει μια πιθανή διαμόρφωση του πραγματικού συστήματος στο χώρο. Η διαμόρφωση αυτή λέγεται αρχική απεικόνιση και είναι απαραίτητη για την εκκίνηση της προσομοίωσης. Η δημιουργία μιας αρχικής απεικόνισης μπορεί να είναι μια εύκολη διαδικασία αλλά και αρκετά επίπονη όταν

πρόκειται για πολύπλοκα συστήματα μεγάλων μορίων. Δεκάδες εμπορικοί αλγόριθμοι που υπάρχουν σήμερα έχουν αποκλειστικές λειτουργίες και αφορούν στην τοποθέτηση των ατόμων στο χώρο ενώ ταυτόχρονα υποχρεώνουν την διαμόρφωση τους να υπακούει στις συνθήκες που ορίζει το υπολογιστικό μοριακό μοντέλο. Εάν μια αρχική απεικόνιση βρίσκεται πολύ μακριά από την ισορροπία, οι δυνάμεις μπορεί να είναι υπερβολικά μεγάλες κάτι το οποίο θα οδηγήσει σε μεγάλη συνολική ενέργεια του συστήματος και η προσομοίωση MD μπορεί να αποτύχει. Στις περιπτώσεις αυτές, απαιτείται ελαχιστοποίηση της ενέργειας του συστήματος. Η ελαχιστοποίηση της ενέργειας απομακρύνει τα σωματίδια που λόγω κακής κατασκευής της αρχικής απεικόνισης έχουν έρθει “επικίνδυνα” κοντά μετατοπίζοντας τα, σύμφωνα με τα κριτήρια του εφαρμοσμένου μοντέλου το οποίο θα περιγραφεί αναλυτικά παρακάτω.

Η επιλογή της τεχνικής για την αναπαράσταση των μορίων του συστήματος εξαρτάται από την ερώτηση και τη δυνατότητα της μεθόδου να παρέχει αξιόπιστα αποτελέσματα με τα σημερινά δεδομένα. Έτσι στην περίπτωση των πολυμερικών συστημάτων η αναπαράσταση των μακρομορίων μπορεί να γίνει είτε με ατομιστικά είτε με μεσοσκοπικά μοντέλα.

1.6.1 Τυπικός αλγόριθμος Μοριακής Δυναμικής (MD)

1. Είσοδος Αρχικών συνθηκών

Δυναμικό αλληλεπίδρασης V σαν συνάρτηση των θέσεων των ατόμων

Θέσεις \vec{r} όλων των ατόμων στο σύστημα.

Ταχύτητες \vec{u} όλων των ατόμων στο σύστημα

Επανάληψη του 2ου ,3ου ,4ου βήματος για τον απαιτούμενο αριθμό βημάτων.

2. Υπολογισμός Δυνάμεων

Η δύναμη σε κάθε άτομο

$$\vec{f}_i = - \frac{\partial V}{\partial \vec{r}_i}$$

υπολογίζεται ως το άθροισμα των δυνάμεων που αναπτύσσονται μεταξύ μη συνδεδεμένων ζευγών ατόμων:

$$\vec{f}_i = \sum_j \vec{f}_{ij}$$

καθώς και των δυνάμεων που οφείλονται στις αλληλεπιδράσεις μεταξύ συνδεδεμένων ατόμων (οι οποίες μπορεί να εξαρτώνται από 1,2,3 ή 4 άλλα άτομα).

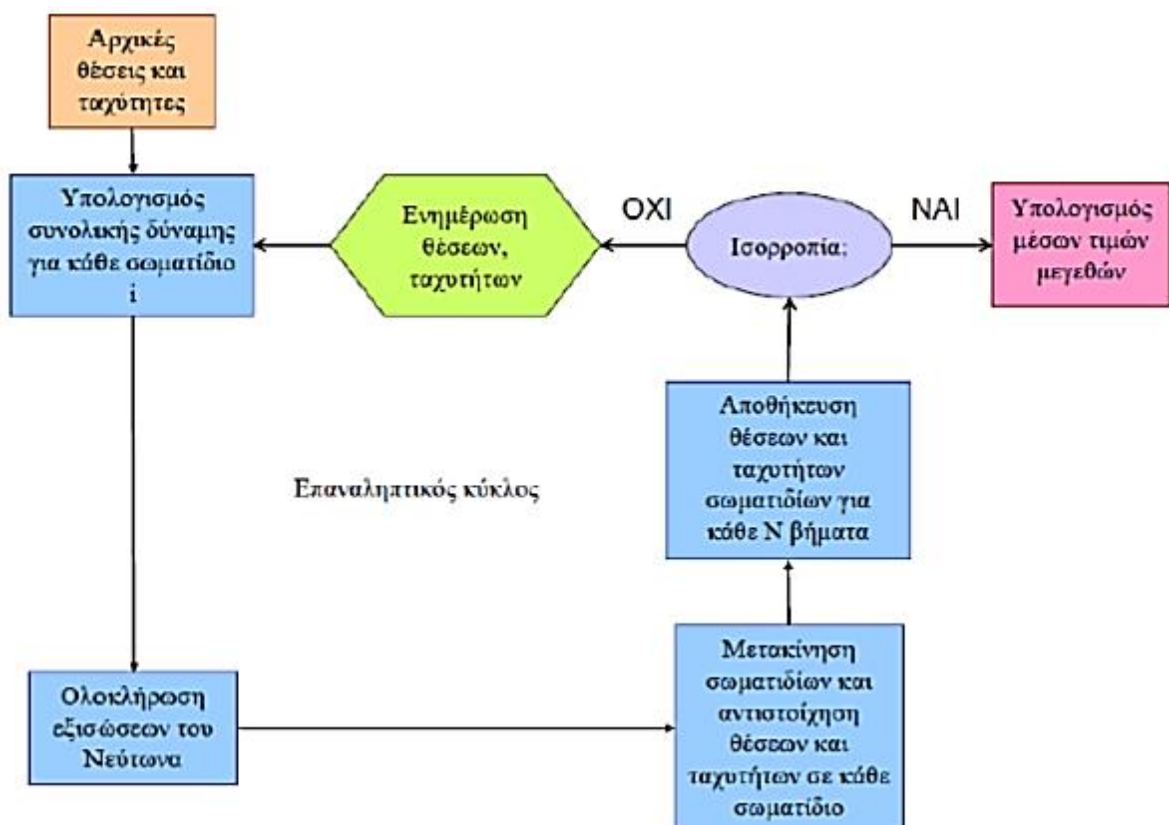
3. Ενημέρωση με νέες συντεταγμένες τη διαμόρφωση των ατόμων

Η κίνηση των ατόμων προσομοιώνεται από την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Νεύτωνα.

$$\frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} =$$

4. (Προαιρετικό) βήμα εξόδου

Καταγραφή θέσεων, ταχυτήτων, ενεργειών, θερμοκρασίας, πίεσης, κλπ.



Εικόνα 1.4: Σχηματική αναπαράσταση κύκλου Μοριακής Δυναμικής (MD)

1.6.2 Εξισώσεις κίνησης

Η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής βασίζεται στην Κλασική Μηχανική. Στη συνέχεια περιγράφεται η επίλυση των εξισώσεων κίνησης στα πλαίσια του

Λαγκρανζιανού, Χαμιλτονιανού και Νευτώνειου φορμαλισμού. Οι κλασικές εξισώσεις κίνησης υπακούουν σε δύο βασικές αρχές (α) την αρχή διατήρησης της ενέργειας και (β) την αρχή αντιστρεπτότητας στο χρόνο. Ας θεωρήσουμε ότι το εξεταζόμενο σύστημα αποτελείται από N σωματίδια με δυναμικό αλληλεπίδρασης V και γενικευμένες συντεταγμένες θέσης και ταχύτητας q και \dot{q} , αντίστοιχα.

- Έκφραση κατά Lagrange

Η συνάρτηση Lagrange (L) ορίζεται ως η διαφορά της δυναμικής (V) από την κινητική (K) ενέργεια ως εξής:

$$L(q, \dot{q}) = K(\dot{q}) - V(q) \quad (0.2)$$

Η τροχιά $q(t)$ διέπεται από τη διαφορική εξίσωση (0.3), όπου η γενικευμένη ορμή p ορίζεται από την εξίσωση (0.4).

$$\frac{d}{dx} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (0.3)$$

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \quad (0.4)$$

- Έκφραση κατά Hamilton

Ο ορισμός της Χαμιλτονιανής συνάρτησης (H) είναι ο ακόλουθος:

$$H(q, p) = \sum_i \dot{q}_i \cdot p_i - L(q, \dot{q}) \quad (0.5)$$

Στην έκφραση αυτή η διαφορική περιγραφή της τροχιάς των γενικευμένων συντεταγμένων διέπεται από τις εξισώσεις (0.6) και (0.7).

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad (0.6)$$

$$p = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (0.7)$$

Αν το δυναμικό V είναι ανεξάρτητο της ταχύτητας και του χρόνου, τότε η Χαμιλτονιανής συνάρτησης ισούται με την ολική ενέργεια του συστήματος (συντηρητικά συστήματα) ως εξής:

$$H(p, q) = K(p) + V(q) \quad (0.8)$$

- Έκφραση κατά Νεύτωνα

Σε καρτεσιανές συντεταγμένες, οι εξισώσεις κίνησης του Hamilton λαμβάνουν την παρακάτω μορφή

$$f_i = -\nabla_{q_i} V \equiv -\frac{\partial V}{\partial q_i} = p_i \quad \text{και} \quad \dot{q}_i = \frac{p_i}{m_i} \quad (0.9)$$

από όπου προκύπτει μια βασική εξίσωση, ο δεύτερος νόμος του Νεύτωνα

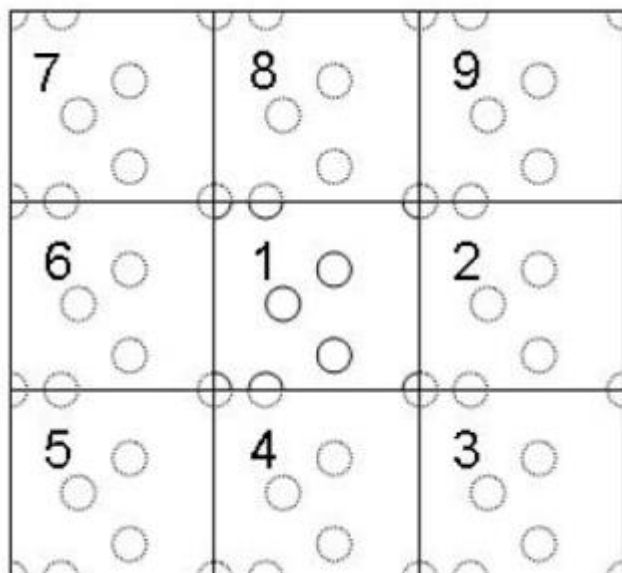
$$f_i = m_i \cdot \ddot{q}_i \quad (0.10)$$

όπου m_i , q_i και f_i είναι η μάζα, το διάνυσμα συντεταγμένων και η δύναμη που ασκείται στο σωματίδιο i . (Komanduri 2001, Rameeran 2008)

1.6.3 Περιοδικές οριακές συνθήκες

Η αρχή των περιοδικών οριακών συνθηκών (periodic boundaries conditions, pbc) χρησιμοποιείται ευρέως στις προσομοιώσεις, προκειμένου να αποφευχθούν τεχνητά οριακά φαινόμενα τα οποία δημιουργούν διεπιφάνειες στα όρια του συστήματος με το περιβάλλον του (κενό). Έτσι θεωρείται ότι το κελί της προσομοίωσης είναι περιοδικά συνεχές, γεγονός που σημαίνει ότι η δεξιά επιφάνειά του είναι απολύτως ίδια με την αριστερή, η μπροστά με την πίσω και ούτω καθεξής. Με αυτή τη θεώρηση μπορούν να κατασκευαστούν αντίγραφα του κελιού και να τοποθετηθούν δίπλα σε κάθε του έδρα χωρίς να δημιουργούνται διεπιφάνειες μεταξύ τους. Αυτή η κατασκευή μπορεί να προεκταθεί απεριόριστα ώστε να σχηματιστεί ένας μεγάλος όγκος υλικού που δεν παρουσιάζει όρια. Κατά συνέπεια, για τον υπολογισμό των ιδιοτήτων του εκάστοτε συστήματος είναι επαρκής η μελέτη ενός μικρού τμήματος, του βασικού κελιού και όχι η προσομοίωση ενός απείρου συστήματος.

Η κατασκευή του αποκαλούμενου περιοδικού κελιού, με περιοδικές οριακές συνθήκες, προϋποθέτει ότι ένα άτομο (ή κέντρο αλληλεπίδρασης) το οποίο ξεπερνά τα όρια του κελιού από τη μία πλευρά θα εισέρχεται σε αυτό από την αντίθετη κατεύθυνση (Εικόνα 1.5).



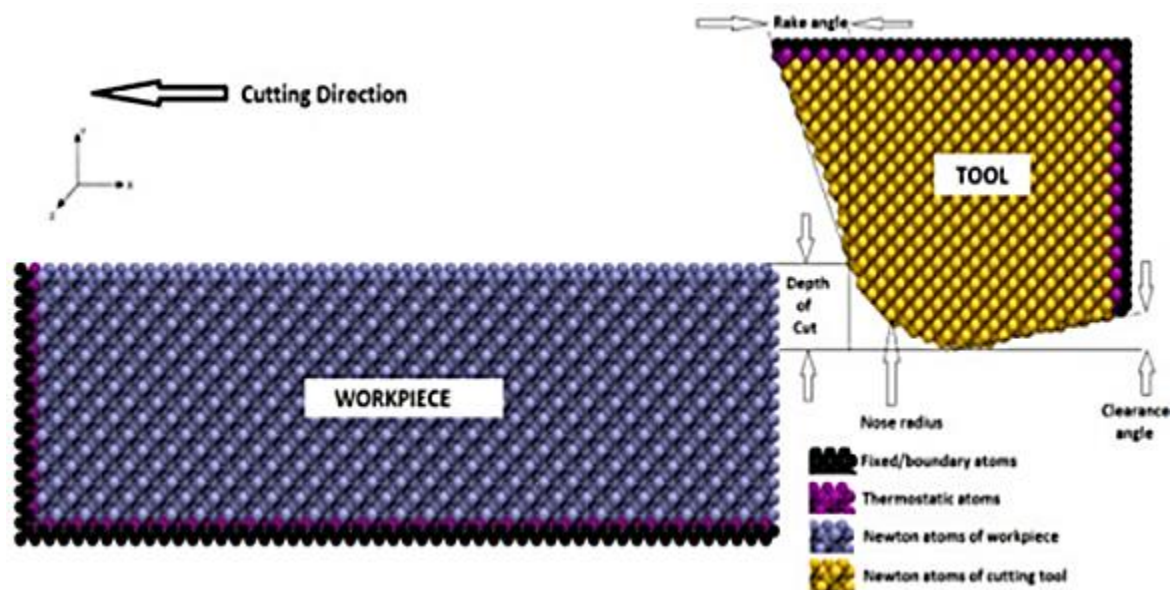
Εικόνα 1.5: Σχηματική απεικόνιση του περιοδικού κελιού προσομοίωσης

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: Χρήση της Μοριακής Δυναμικής στη Νανοκοπή

2.1 Ενσωμάτωση της ΜΔ στη Νανοκοπή

Από τα στοιχεία που αναλύθηκαν στο Κεφάλαιο 1, μπορούμε να συμπεράνουμε 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 αλληλεπιδρώντων ατόμων για μία συγκεκριμένη χρονική περίοδο. Καθ' όλη τη διάρκεια της χρονικής αυτής περιόδου γίνεται υπολογισμός των τροχιών και των ταχυτήτων των ατόμων.

Μία σχηματική παράσταση προσομοίωσης κοπής σε νανοκλίμακα μέσω της Μοριακής Δυναμικής φαίνεται στο σχήμα που ακολουθεί. (Εικόνα 2.1)



Εικόνα 2.1: Σχηματική παρουσίαση προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής κοπής νανοκλίμακας (Komanduri et al., 2001)

Το τεμάχιο, όπως επίσης και το κοπτικό εργαλείο, αντιπροσωπεύεται από ένα σύνολο $N \times M$ 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 χρησιμοποιηθεί κρυσταλλική δομή κυβικού εδροκεντρωμένου συστήματος (fcc), ενώ αν πρόκειται για σίδηρο ή μολυβδαίνιο, 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 και το διαμάντι.

Τα άτομα στο τεμάχιο ή και στο εργαλείο διακρίνονται σε Νευτώνια 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 κλασικών 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 νευτώνια άτομα του εργαλείου κινούν ολόκληρο το εργαλείο προς το τεμάχιο, επιτρέποντας έτσι τη διαδικασία της κοπής. (Komanduri et al. 2001, Rapaport 2004)

2.2 Κατηγορίες ατόμων

Σε μια προσομοίωση MD τα άτομα που λαμβάνουν μέρος διακρίνονται σε νευτώνια και οριακά, ενώ συνήθως υπάρχουν και τα θερμοστατικά άτομα, ο ρόλος των οποίων αναλύεται ακολούθως.

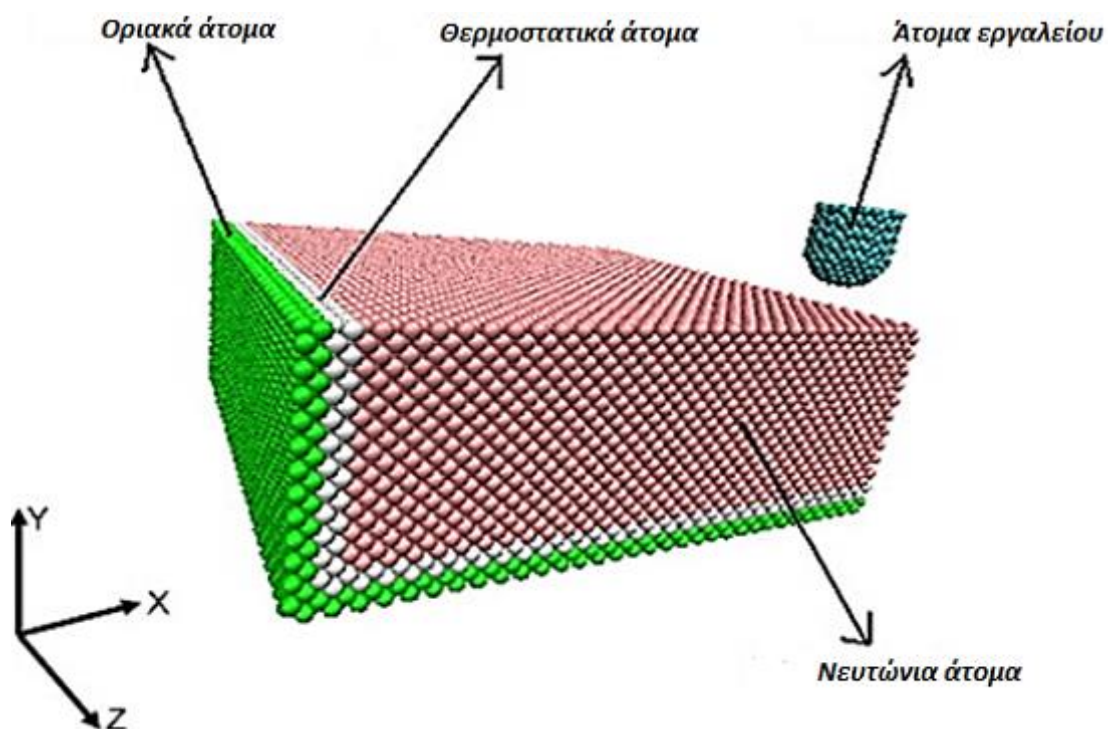
- Νευτώνια άτομα ονομάζονται το σύνολο των ατόμων για τα οποία ολοκληρώνονται οι κλασικές εξισώσεις του Νεύτωνα. Το αποτέλεσμα της προσομοίωσης είναι οι τροχιές των ατόμων, καθώς και οι ταχύτητές τους.

Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής διεξάγονται μέσω μιας σειράς χρονικών βημάτων, τα οποία αποτελούνται από:

- (α) άθροιση των ζευγών δυνάμεων για κάθε άτομο,
- (β) υπολογισμός των νέων ταχυτήτων και μετατοπίσεων σε κάθε βήμα,
- (γ) προσδιορισμός των νέων θέσεων των ατόμων, και
- (δ) έλεγχος διατήρησης της ενέργειας.

- Οριακά άτομα τα οποία 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 ανάμεσα στο εργαλείο και το τεμάχιο. Επομένως, οι θέσεις των ατόμων αυτών παραμένουν σταθερές και ίδιες καθ' όλη τη διάρκεια της κοπής.
- Θερμοστατικά άτομα τα οποία έχουν σκοπό τη ρύθμιση της θερμοκρασίας στην επιθυμητή τιμή, η οποία γίνεται με τη 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. (Raparort 2004)

Τα προηγούμενα φαίνονται παραστατικά στην Εικόνα 2.2 ακολούθως.



Εικόνα 2.2: Σχηματική αναπαράσταση των διαφόρων ζωνών ενός τεμαχίου κατά την προσομοίωση ΜΔ (Rareeran, 2008)

2.3 Σημαντικότερες παράμετροι κοπών νανοκλίμακας

Όσον αφορά την επίδραση παραμέτρων στις νανοκοπές, τόσο οι πειραματικές εργασίες όσο και οι προσομοιώσεις ΜΔ είναι περιορισμένες. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων ΜΔ στην επίδραση ορισμένων παραμέτρων, δηλαδή, της γωνίας κοπής, της ακτίνας καμπυλότητας και του βάθους κοπής παρουσιάζονται παρακάτω. Πρέπει όμως να γίνει αντιληπτό, ότι το πιο ουσιώδες βήμα για μια προσομοίωση ΜΔ είναι η επιλογή συναρτήσεων δυναμικού που να περιγράφουν ικανοποιητικά το φαινόμενο που μελετάται. Αν τα δυναμικά δεν μοντελοποιούν επαρκώς τη συμπεριφορά των ατόμων, τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την προσομοίωση θα είναι μη αντιπροσωπευτικά. Για το λόγο αυτό, θα παρουσιαστεί στην επόμενη υποενότητα η προσομοίωση της νανοκοπής τεμαχίου χαλκού με εργαλείο διαμαντιού μέσω τριών διαφορετικών εκφράσεων δυναμικού.

2.3.1 Οι συναρτήσεις δυναμικού

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η προσομοίωση ΜΔ αποτελείται από την αριθμητική βήμα προς βήμα επίλυση των κλασικών εξισώσεων της κίνησης βάσει του δευτέρου νόμου του Newton. Για ένα σύνολο N σωματιδίων ή ατόμων

$$F_i = m_i \cdot a_i \quad (1.1)$$

όπου m_i είναι η μάζα του ατόμου i , $a_i = \frac{d^2 r_i}{dt^2}$ είναι η επιτάχυνση του ατόμου i και F_i είναι η δύναμη που δρα στο άτομο i . (Οι δυνάμεις προκύπτουν συνήθως ως η κλίση της συνάρτησης δυναμικής ενέργειας).

Οι Rentsch και Inasaki (1994) μοντελοποίησαν ένα τεμάχιο χαλκού και ένα εργαλείο διαμαντιού με χρήση της συνάρτησης δυναμικού Lennard-Jones (LJ) για τις αλληλεπιδράσεις των ατόμων χαλκού. Θεώρησαν ότι τα σύνορα και το εργαλείο είναι άκαμπτα και παρατήρησαν ένα φαινόμενο συσσώρευσης ύστερα από 25000 βήματα.

Οι Komanduri et al. (1999) χρησιμοποίησαν ένα τεμάχιο χαλκού και ένα εργαλείο βολφραμίου άπειρης σκληρότητας για την προσομοίωσή τους. Χρησιμοποίησαν τα δυναμικά Morse και μια ταχύτητα κοπής 500 m/s. Επίσης άλλοι ερευνητές μελέτησαν την χημικομηχανική στίλβωση του χαλκού από ένα σωματίδιο απόξεσης, με χρήση του δυναμικού πολλών σωματιδίων (EAM).

Οι Lin et al. (2004) μελέτησαν τα χαρακτηριστικά της αποβολής ενέργειας λείανσης, την τάση λείανσης, την κατάσταση παραμόρφωσης, τη θερμοκρασία λείανσης, το μηχανισμό αποβολής υλικού σε νανοκλίμακα και την παραγωγή επιφάνειας. Χρησιμοποίησαν πυρίτιο τόσο στο τεμάχιο όσο και στο υλικό κατεργασίας. Οι

Brinksmeimier et al. (2006) πραγματοποίησαν μια τρισδιάστατη προσομοίωση ΜΔ της κατεργασίας λείανσης με χρήση του δυναμικού EAM. Μοντελοποίησαν δύο αποξεστικά τα οποία κόβουν το τεμάχιο των 100000 ατόμων σε όλο το μήκος του. με ταχύτητα 100 m/s.

Οι Pei et al.(2006) και οι Promyoo et al.(2008) πραγματοποίησαν νανοκοπή του χαλκού με εργαλείο διαμαντιού. Μελέτησαν την επίδραση της γωνίας αποβλίττου και των διατομικών δυναμικών (Morse και EAM) στη διεργασία. Οι Pei et al. (2006) βρήκαν ότι δεν υπάρχει μεγάλη διαφορά στην προσομοιωμένη διαδικασία σχηματισμού αποβλίττου, αλλά το δυναμικό Morse καταλήγει σε περίπου 5-70% υψηλότερες δυνάμεις κοπής από το δυναμικό EAM. Και οι δύο κατέληξαν στο ότι το δυναμικό EAM είναι καλύτερο για τις προσομοιώσεις σε σύγκριση με το Morse. Η μελέτη τους βασίστηκε σε δισδιάστατα μοντέλα, αλλά η απόδοση των τρισδιάστατων προσομοιώσεων παραμένει άγνωστη.

2.3.1.1 Συναρτήσεις Δυναμικού Μοριακής Δυναμικής

Η ενέργεια N αλληλεπιδρώντων σωματιδίων μπορεί να γραφεί ως [45,46]

$$E = \sum_i V_1(r_i) + \sum_{i<j} V_2(r_i r_j) + \sum_{i<j<k} V_3(r_i r_j r_k) + \dots \quad (1.2)$$

όπου r_n είναι η θέση του n -οστού σωματιδίου και οι συναρτήσεις $V_1, V_2, V_3 \dots$ είναι τα δυναμικά των m σωματιδίων.

Ο δεύτερος όρος στην εξίσωση (3.2) είναι το δυναμικό δύο σωμάτων ή ζεύγους και ο τρίτος όρος είναι το δυναμικό τριών σωμάτων. Οι υψηλότεροι όροι παραλείπονται διότι θεωρείται ότι το δεξί μέλος της εξίσωσης έχει ταχεία σύγκλιση και είναι δύσκολο να ληφθεί υπόψη στους υπολογισμούς.

Άρα συνεπάγεται ότι το δυναμικό ενός συστήματος $V(r_1, r_2, \dots, r_n)$ μπορεί να θεωρηθεί ως το άθροισμα των ενεργών ζευγών δυναμικού $V(r_{ij})$ ως

$$V = \sum_i \sum_{j<i} V(r_{ij}) \quad (1.3)$$

όπου r_{ij} είναι η απόσταση μεταξύ των σωματιδίων i και j .

Το δυναμικό ζεύγους LJ είναι το πιο κοινά χρησιμοποιούμενο μοντέλο αλληλεπίδρασης. Το δυναμικό Morse είναι επίσης ένα παράδειγμα δυναμικού ζεύγους, το οποίο είναι κατάλληλο για τη μοντελοποίηση κυβικών μετάλλων. Το δυναμικό EAM είναι ένα δυναμικό πολλών σωμάτων, το οποίο χρησιμοποιείται σε ένα μεγάλο εύρος υλικών.

Δυναμικό Lennard-Jones (LJ)

$$V_{ij} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1.4)$$

όπου σ και ε είναι σταθερές που εξαρτώνται από τις φυσικές ιδιότητες του υλικού.

Δυναμικό Morse

$$V_{ij} = D \{ \exp[-2a(r_{ij} - r_e)] - 2 \exp[-a(r_{ij} - r_e)] \} \quad (1.5)$$

όπου

r_e και r_{ij} = απόσταση ισορροπίας και στιγμιαία απόσταση μεταξύ των ατόμων i και j , αντίστοιχα

D και a = σταθερές που προσδιορίζονται βάσει των φυσικών ιδιοτήτων του υλικού

Δυναμικό πολλών σωμάτων (EAM)

Για το δυναμικό πολλών σωμάτων θα χρησιμοποιηθεί μια τροποποιημένη έκφραση σε σύγκριση με την αντίστοιχη του Κεφαλαίου 2

$$E_{tot} = \sum_i G_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{i,j}(r_{ij}) \quad (1.6)$$

όπου $\rho_{h,i}$ είναι η ολική πυκνότητα ηλεκτρονίων στο άτομο i λόγω των υπολοίπων ατόμων του συστήματος, G_i είναι η ενέργεια ενσωμάτωσης για την τοποθέτηση ενός ατόμου μέσα στην ηλεκτρονιακή πυκνότητα, V_{ij} είναι η αλληλεπίδραση ζεύγους μικρού εύρους που αναπαριστά την απώθηση δύο πυρήνων και r_{ij} είναι η απόσταση των ατόμων i και j . (Komanduri 2001)

2.3.2 Παράμετρος θερμοκρασίας αποβλίττου

Μια πρώτη προσέγγιση της θερμοκρασίας αποβλίττου μπορεί να γίνει μέσω της μέτρησης της κινητικής ενέργειας σε μια επαρκώς μεγάλη περιοχή κατά μήκος του πάχους του αποβλίττου και της χρήσης της εξίσωσης καταμερισμού ενέργειας:

$$\frac{3}{2} NK_B T = \frac{1}{2} \sum_i^N m_i \|v_i\|^2 \quad (1.7)$$

Στην παραπάνω εξίσωση N είναι το πλήθος των ατόμων σε ένα υποσύστημα τριών διαστάσεων, K_B είναι η κλασική σταθερά Boltzmann, το T παριστάνει τη θερμοκρασία και τα m_i και v_i αναπαριστούν αντίστοιχα τη μάζα και την ταχύτητα κάθε ατόμου στο σύστημα. Όμως, η εκτίμηση της θερμοκρασίας στο απόβλιττο από μια προσομοίωση ΜΔ σχετικά μικρής κλίμακας ενός κινούμενου σώματος απαιτεί κάποια προσοχή, καθώς πρέπει κάποιος να γνωρίζει τόσο την αναπτυσσόμενη στατιστική φύση των τοπικών ατομικών ταχυτήτων αλλά και τη συνολική ταχύτητα του αποβλίττου, η οποία προφανώς δε μπορεί να είναι μέρος της κινητικής ενέργειας που συνεισφέρει στη θερμοκρασία του αποβλίττου.

Εδώ, η συνολική ταχύτητα του αποβλίττου άκαμπτου σώματος προσδιορίζεται υπολογίζοντας τη μέση ατομική ταχύτητα σε μια περιοχή ενδιαφέροντος που περιέχει N άτομα.

$$v_c^* = \frac{1}{N} \sum_i^N v_i \quad (1.8)$$

Η ταχύτητα αυτή χρησιμοποιείται για τον υπολογισμό μιας τροποποιημένης κινητικής ενέργειας όπου το πεδίο ολικής ταχύτητας του αποβλίττου άκαμπτου σώματος προκύπτει από το πεδίο συνολικής ταχύτητας. Κατά συνέπεια, σε οποιοδήποτε χρονικό βήμα μπορεί να υπολογιστεί μια χωρική προσέγγιση της θερμοκρασίας (T_c) σε μια περιοχή εντός του αποβλίττου που περιέχει N άτομα, όπως διατυπώνεται παρακάτω.

$$T_c = \frac{2}{3NK_B} \left\{ \frac{1}{2} \sum_i^N m_i \|v_i - v_c^*\|^2 \right\} \quad (1.9)$$

Αν $|T - T_c| \leq 3$ τότε η συνθήκη ικανοποιείται, διαφορετικά απαιτείται ανάθεση νέων ταχυτήτων. T_d είναι η επιθυμητή θερμοκρασία. Εάν η απόλυτη διαφορά μεταξύ της μετρούμενης θερμοκρασίας και αυτής που επιθυμείται 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.

2.3.3 Επαναπροσδιορισμός ταχυτήτων

Καθώς η πλαστική παραμόρφωση στη ζώνη διάτμησης και η τριβή στη διεπιφάνεια αποβλίττου- εργαλείου μετατρέπονται σε θερμότητα, η θερμότητα αυτή πρέπει να αποβάλλεται διαρκώς. Στις πραγματικές κατεργασίες, μεγάλο μέρος της θερμότητας απομακρύνεται με το απόβλιττο 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. Η διαδικασία αυτή επιτρέπει τις στατιστικές διακυμάνσεις γύρω από μια θερμοκρασία ισορροπίας.

Για να εφαρμοσθεί η μέθοδος αυτή, τα N άτομα του πλέγματος πρέπει να χωρισθούν σε τρεις ζώνες. Η πρωτεύουσα ζώνη (P- ζώνη) περιέχει τα νευτώνια 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. Η συνάρτηση θερμοποίησης για τη x συνιστώσα της ταχύτητας του i -οστού ατόμου του πλέγματος δίνεται από τη σχέση:

$$V_{x_i}^n = (1-w)^{1/2} V_{x_i}^o + w^{1/2} V_{x_i}^r(\xi, T) \quad (1.10)$$

όπου $V_{x_i}^n$ είναι η νέα x συνιστώσα της ταχύτητας για το άτομο i τη χρονική στιγμή t_n και $V_{x_i}^o$ είναι η παλιά του ταχύτητα. Η $V_{x_i}^r(\xi, T)$ είναι η τυχαία ταχύτητα που επιλέγεται από την κατανομή Boltmann 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 Δt . Η χρήση της Εξίσωσης (1.10) προσομοιώνει με ακρίβεια τα φαινόμενα μεταφοράς ενέργειας του υλικού και επιτρέπει τον ακριβή υπολογισμό της θερμοκρασιακής κλίσης κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής.

2.4 Πλεονεκτήματα μεθόδου

Ξεκινώντας από τα πλεονεκτήματα που παρουσιάζει η μέθοδος αυτή, μπορούμε να παρατηρήσουμε τα εξής:

- ✓ Σε αντίθεση με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων, στις προσομοιώσεις με χρήση της Μοριακής Δυναμικής, οι κόμβοι και οι μεταξύ τους αποστάσεις δεν επιλέγονται τυχαία, αλλά στη βάση των θεμελιωδών μονάδων του υλικού, δηλαδή ως κόμβοι θεωρούνται τα κέντρα των ατόμων και ως αποστάσεις ανάμεσα στους κόμβους, οι διατομικές αποστάσεις.
- ✓ Οι προσομοιώσεις με χρήση της Μοριακής Δυναμικής προσφέρουν υψηλότερη χρονική και χωρική ανάλυση της διαδικασίας κοπής σε σχέση με

οποιαδήποτε άλλη μέθοδο, περιλαμβανομένης και της μεθόδου του συνεχούς μέσου. Επομένως, κάθε φυσικό φαινόμενο που δε μπορεί να ληφθεί υπ' όψιν με τη μέθοδο του συνεχούς μέσου λόγω περιορισμών μεγέθους, μπορεί να μελετηθεί αποδοτικά μέσω της προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής.

- ✓ Η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής μπορεί να χρησιμοποιηθεί με πολύ αποδοτικό τρόπο για την προσομοίωση του μηχανισμού κοπής στη νανοκλίμακα.
- ✓ Οι τεχνικές της Μοριακής Δυναμικής δεν απαιτούν τη χρήση ακριβού εξοπλισμού, όπως είναι για παράδειγμα ένας τόννος λίαν υψηλής ακριβείας, κοπτικά εργαλεία από διαμάντι ή πολύπλοκος πειραματικός εξοπλισμός για την απόκτηση των πειραματικών δεδομένων.
- ✓ Με τις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, 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.
- ✓ Η επίδραση διαφόρων μεταβλητών, όπως είναι η ακτίνα καμπυλότητας, η γωνία αποβλίττου και το βάθος κοπής μπορεί να μελετηθεί με εύκολο και αποδοτικό τρόπο στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής. Η αντίστοιχη πειραματική δουλειά απαιτεί ακριβή κοπτικά εργαλεία από διαμάντι, προσεκτική μελέτη των χαρακτηριστικών του εργαλείου και πολλές δοκιμές σε μηχανή λίαν υψηλής ακριβείας, τα οποία όπως καταλαβαίνουμε είναι τόσο χρονοβόρα όσο και εξαιρετικά ακριβά. Στις αντίστοιχες προσομοιώσεις, απλά γίνεται ορισμός των επιθυμητών παραμέτρων και εξάγονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα.
- ✓ Στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, είναι εύκολο να μεταβάλλονται τα υλικά τόσο των τεμαχίων όσο και των εργαλείων. Για παράδειγμα, προκειμένου να μελετηθεί η επίδραση της σκληρότητας του εργαλείου σε κάποιο συγκεκριμένο υλικό τεμαχίου, μπορούν απλά να ορίζονται οι επιθυμητές τιμές σκληρότητας και να γίνεται η αντίστοιχη προσομοίωση. Αντίθετα, εάν επιθυμούμε να γίνει κάτι τέτοιο πειραματικά, είναι πολύ δύσκολο, αν όχι και ακατόρθωτο, να βρεθούν εργαλεία με τις συγκεκριμένες επιθυμητές τιμές σκληρότητας.

- ✓ Παρ' όλο που υπάρχει γενικά η αντίληψη ότι μέσω της Μοριακής Δυναμικής μπορούν να προσομοιώνονται μόνο ιδεατά υλικά και όχι πραγματικά, έχει αποδειχτεί ότι ελαττωματικές δομές, όπως κενά και τοπικές παραμορφώσεις, μπορούν επίσης να μοντελοποιηθούν, αν και αυτό μπορεί να γίνει μόνο σε περιορισμένη κλίμακα.
- ✓ Οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στο εργαλείο και το τεμάχιο, οι οποίες δε μπορούν να μελετηθούν με χρήση μεθόδων που χρησιμοποιούν πεπερασμένα στοιχεία, μπορούν να ερευνηθούν μέσω της Μοριακής Δυναμικής. Βέβαια, πλαστικές παραμορφώσεις στο εργαλείο και η παραμόρφωση της επιφάνειας του τεμαχίου μπορούν να μελετηθούν για σχετικά απλά συστήματα.
- ✓ Η επίδραση του προσανατολισμού των κρυστάλλων του κοπτικού εργαλείου και του τεμαχίου στο μηχανισμό σχηματισμού του αποβλίττου μπορεί να μελετηθεί με συστηματικό τρόπο. Αντίστοιχη πειραματική εργασία θα ήταν πολύ ακριβή εξαιτίας του πολύ υψηλού κόστους των αντίστοιχων υλικών και του μεγάλου χρόνου προετοιμασίας των δειγμάτων.

2.5 Περιορισμοί μεθόδου

- ❖ 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 1×10^6 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.
- ❖ Η προσομοίωση εφαρμόζεται κυρίως στη νανοκοπή, δηλαδή σε επίπεδο νανόμετρου και όχι στην ευρεία περιοχή κατεργασιών. Αυτό φυσικά δεν είναι περιορισμός όταν μελετούμε τη μηχανική της νανοκοπής. Ποσοτικά μπορούμε να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα της προσομοίωσης με πειραματικά αποτελέσματα.

- ❖ Οι ταχύτητες κοπής που εφαρμόζονται είναι εξαιρετικά υψηλές (500m/s) λόγω των μεγάλων χρόνων κατεργασίας. Είναι αναμφίβολο ότι οι ταχύτητες κοπής που χρησιμοποιούνται στις προσομοιώσεις αυτές είναι κάποιες φορές μη ρεαλιστικές. Όμως, με την εισαγωγή απομονωμένων και ταχέων σταθμών εργασίας 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 αυξηθεί η ταχύτητα κατά 2-5 φορές.
- ❖ Οι προσομοιώσεις ΜΔ εφαρμόζονται μόνο σε απλά συστήματα, όπως απλά στοιχεία για το υλικό κατεργασίας και τα εργαλείο. Υπάρχει όμως ένα σημαντικό πλήθος εφαρμογών ναοκοπής μη σιδηρούχων υλικών, όπως ο χαλκός, το αλουμίνιο και τα ημιαγωγικά 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 ΜΔ 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 ΜΔ εφαρμόζεται σε υλικά που δεν είναι καθαρά, καθώς περιέχουν ελαττώματα, όπως ρωγμές, όρια κόκκων, σωματίδια δεύτερης φάσης κ.λ.π. Η πυκνότητα, το μέγεθος και το σχήμα των ελαττωμάτων μπορούν να ληφθούν υπόψη, με την ενσωμάτωση στατιστικών μηχανικών προσεγγίσεων, όπως η προσομοίωση Monte Carlo.
- ❖ Ο χρόνος προσομοίωσης είναι μεγάλος (μπορεί να φτάσει αρκετές εκατοντάδες ώρες για κάθε προσομοίωση). Ευτυχώς, με τη διαθεσιμότητα σταθμών εργασίας χαμηλού κόστους με μεγάλες υπολογιστικές ταχύτητες και σημαντική μνήμη, η προσομοίωση μπορεί να διεξαχθεί χωρίς την ανθρώπινη παρουσία κατά τη μεγαλύτερη περίοδο.
- ❖ Η προσομοίωση ΜΔ εφαρμόζεται κυρίως σε ψευδο-δισδιάστατες (επίπεδες) κοπές. Μια ψευδο-τριδιάστατη κοπή μπορεί να διεξαχθεί ακόμα και αν απαιτεί πολύ περισσότερο χρόνο επεξεργασίας αφού είναι πιο αντιπροσωπευτική της πραγματικής διαδικασίας.

- ❖ 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 μπορεί να απλουστευθεί, όμως οι παράμετροι διεπιφάνειας μπορούν να αναπτυχθούν για τη συνάρτηση δυναμικού.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: Βιβλιογραφική ανασκόπηση

3.1 Εισαγωγή

Για πολύ καιρό, ο τομέας των κατεργασιών ήταν ένας εμπειρικός ερευνητικός τομέας, ως προς την τεράστια ποικιλία των κατεργαζόμενων υλικών και των πολλών παραμέτρων των κατεργασιών κοπής. Ακόμα και σήμερα, γίνεται εκτενής πειραματική εργασία πάνω στην κοπή των μετάλλων, ώστε να βρεθούν οι βέλτιστες συνθήκες κοπής, να συλλεχθούν δεδομένα για τη διάρκεια ζωής των εργαλείων κ.λπ. Η διαδικασία αυτή είναι εξαιρετικά δαπανηρή και χρονοβόρα. Κατά συνέπεια, είναι απαραίτητο να χρησιμοποιηθούν εναλλακτικές μέθοδοι που θα βελτιώσουν την κατανόησή μας πάνω στις κατεργασίες κοπής, ελαχιστοποιώντας το πειραματικό κόστος.

Στα τέλη της δεκαετίας του 80, με την εισαγωγή των προσομοιώσεων της Μοριακής Δυναμικής (ΜΔ) , για τη μοντελοποίηση της νανοκοπής και των κατεργασιών υπερακριβείας. Λέγοντας Μοριακή Δυναμική εννοούμε μια τεχνική προσομοίωσης με υπολογιστή, στην οποία ακολουθείται η χρονική εξέλιξη ενός συστήματος αλληλεπιδρώντων ατόμων, με την αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησής τους. Σε αντίθεση με τη Μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων, στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, οι κόμβοι και οι αποστάσεις μεταξύ τους δεν επιλέγονται αυθαίρετα, αλλά βάσει της θεμελιώδους δομής του υλικού. Δηλαδή, τα κέντρα των ατόμων επιλέγονται ως κόμβοι , οπότε το κρυσταλλικό πλέγμα είναι το αντίστοιχο του πλέγματος στη Μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων και οι διατομικές αποστάσεις, ως οι αποστάσεις μεταξύ των κόμβων. Κατά συνέπεια, η ανάλυση της διεργασίας μπορεί να αναχθεί στις βασικές μονάδες της. Επίσης, οι τεχνικές Μοριακής Δυναμικής παρέχουν μεγαλύτερη χρονική και χωρική διακριτική ικανότητα στη διαδικασία κοπής, σε σύγκριση με αυτή που μπορεί να επιτευχθεί από μια προσέγγιση συνεχούς μηχανικής. Άρα, κάποια φαινόμενα, τα οποία αμελήθηκαν κατά τη συνεχή ανάλυση, μπορούν να ερευνηθούν αποτελεσματικά μέσω της Μοριακής Δυναμικής. Όμως, αφού κάθε σύνθετος υλικό αποτελείται από ένα τεράστιο αριθμό ατόμων, είναι απαραίτητο να λάβουμε υπόψη τις αλληλεπιδράσεις αρκετών εκατοντάδων ατόμων στην προσομοίωση των κατεργασιών μέσω της Μοριακής Δυναμικής. Η προσομοίωση αυτή απαιτεί φυσικά ηλεκτρονικούς υπολογιστές με πολύ μεγάλη μνήμη.

Η μελέτη της Μοριακής Δυναμικής ξεκίνησε στα τέλη της δεκαετίας του 50 στο Εργαστήριο Ακτινοβολίας Lawrence (LRL) στις Η.Π.Α από τους Alder και Wainwright στο πεδίο της στατιστικής μηχανικής ισορροπίας και μη ισορροπίας, ώστε να υπολογιστεί η απόκριση αρκετών εκατοντάδων αλληλεπιδράσεων κλασικών σωματιδίων . Έκτοτε, η Μοριακή Δυναμική εφαρμόστηκε σε ένα ευρύ πεδίο που περιλαμβάνει την ανάπτυξη κρυστάλλων, την οδόντωση, την τριβολογία, τη

σύνθεση διαμαντιού σε χαμηλή πίεση και τις αλληλεπιδράσεις με laser κ.λπ. Η Μοριακή Δυναμική μπορεί να θεωρηθεί μια ώριμη μέθοδος, από την άποψη ότι έχουν γραφεί πολλές μελέτες και βιβλία πάνω στο αντικείμενο. Όμως, 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.

Ο Belak (1990) διεξήγαγε πρωτότυπες μελέτες στην προσομοίωση μέσω Μοριακής δυναμικής της νανοκοπής του χαλκού με κοπτικό εργαλείο από διαμάντι. Αυτό οδήγησε άλλους επιστήμονες, κυρίως στην Ιαπωνία, να ερευνήσουν και να επεκτείνουν την προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής στις νανοκοπές. Ο Belak (1993) μελέτησαν τόσο τη διδιάστατη όσο και την τρισδιάστατη κοπή του χαλκού με χρήση της μεθόδου πολλών ατόμων σε ταχύτητα κοπής 100 m/s με εργαλεία διαφορετικής ακτίνας καμπυλότητας και σε διαφορετικά βάθη κοπής. Τα άτομα του άνθρακα στο εργαλείο διαμαντιού δεν έχουν δυνατότητα μετακίνησης (εργαλείο άπειρης σκληρότητας) στην περίπτωση της κοπής του χαλκού. Αυτό είναι λογικό, καθώς η σκληρότητα του χαλκού είναι μόνο ένα μικρό κλάσμα της σκληρότητας του εργαλείου διαμαντιού. Ο Belak (1994) μελέτησε επίσης την κατεργασία του πυριτίου με χρήση εργαλείου διαμαντιού στα 540 m/s, με εργαλείο, στο οποίο επιτρέπεται η δυνατότητα παραμόρφωσης και η αλληλεπίδραση με το υλικό του τεμαχίου. Βρέθηκε ότι ένα στρώμα ατόμων μεταφέρθηκε στο εργαλείο διαμαντιού. Ο Belak (1994) ανέφεραν επίσης ότι το υλικό του πυριτίου στο απόβλιττο και στα λίγα πρώτα στρώματα της νέας επιφάνειας που προέκυψε από την κοπή φαινόταν άμορφο. Βρέθηκε ότι απαιτείται λιγότερη ενέργεια για να μετατραπεί ο κρύσταλλος σε άμορφο στερεό, σε σύγκριση με την ενέργεια που απαιτείται για να διατμηθεί ο κρύσταλλος. Οι παρατηρήσεις αυτές είναι πολύ σημαντικές, όταν επιχειρήθηκε η κατανόηση των μηχανισμών αποβολής υλικού σε ημιαγωγικά υλικά.

Την περασμένη δεκαετία έγιναν ερευνητικές προσπάθειες από ομάδες Ιαπώνων επιστημόνων στο αντικείμενο της διδιάστατης νανοκοπής του χαλκού με κοπτικό εργαλείο από διαμάντι. Πολλές από τις δοκιμές προσομοιώθηκαν στα 200 m/s, ενώ κάποιες έγιναν στα 20 m/s για λόγους σύγκρισης. Εξέτασαν την επίδραση του ελάχιστου βάθους κοπής και το λόγο του ελάχιστου βάθους προς την ακτίνα της ακμής του αποβλίττου κατά τη διαδικασία διαμόρφωσης, την παραμόρφωση του υποστρώματος και την ειδική ενέργεια κοπής.

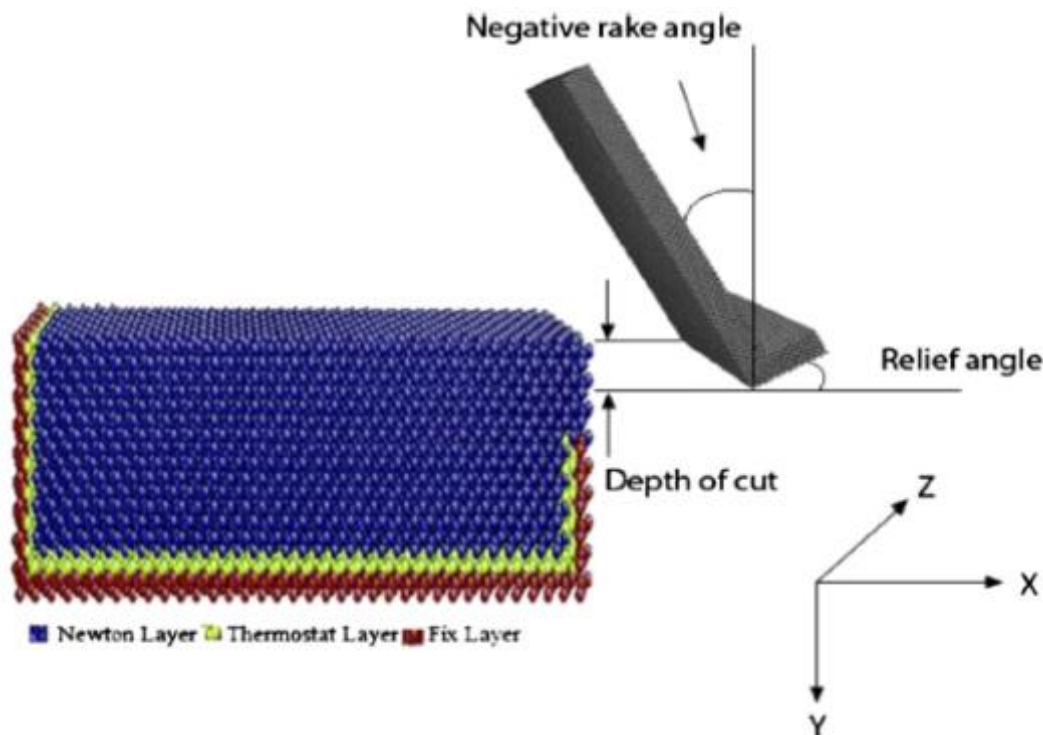
Παρόλο που το πλήθος των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη στην προσομοίωση είναι της τάξης των μερικών χιλιάδων και οι προσομοιώσεις περιορίζονται σε μερικά απλά συστήματα (καθαρά μέταλλα στην περίπτωση των μεταλλικών συστημάτων και όχι πολύπλοκα κράματα για μηχανοτεχνικές εφαρμογές), η *ικανότητα εισαγωγής ελαττωματικής δομής*, όπως ρωγμές, μετατοπίσεις και όρια κόκκων και οι ικανοποιητικά καλές εξισώσεις δυναμικού για διαφορετικά υλικά, κάνουν δυνατή την ανάλυση υλικών απλής νανοδομής, η οποία δε μπορεί να επιτευχθεί εύκολα με οποιαδήποτε άλλη μέθοδο, σε τέτοιο επίπεδο.

3.2 Μελέτη των Shi et al. για νανοκοπή πολυκρυσταλλικού χαλκού

Στη συγκεκριμένη μελέτη των Shi et al. (2013) παρουσιάστηκε μια διερεύνηση κατεργασίας νανοκλίμακας σε υλικό πολυκρυσταλλικού χαλκού μέσω προσομοίωσης ΜΔ. Μια από τις παραμέτρους που εξετάστηκαν ήταν και η επίδραση της γωνίας κοπής στην κατεργασιμότητα και στον σχηματισμό αποβλίττου.

3.2.1 Παρουσίαση του πειράματος

Στην Εικόνα 3.1 δείχνει το συνολικό μοντέλο προσομοίωσης που χρησιμοποίησαν οι Shi et al. (2013) Το κοπτικό εργαλείο θεωρήθηκε ότι είναι διαμάντι και ότι είναι άκαμπτο, με γωνίες κοπής του εργαλείου -30° , 0° , 30° . Όπως φαίνεται στην εικόνα η αρχική γωνία κοπής είναι αρνητική. Επίσης διακρίνονται και τα τρία είδη ατόμων που θεωρήθηκαν για το υλικό κατεργασίας, δηλ. σταθερά (οριακά), θερμοστατικά και νευτώνια. Όπως έχει προαναφερθεί τα θερμοστατικά άτομα χρησιμοποιήθηκαν για τη σταθεροποίηση της θερμοκρασίας του συστήματος κατά τη διάρκεια της κοπής. Οι διαστάσεις του τεμαχίου ήταν $432 \times 216 \times 216 \text{ \AA}$. Η προσομοίωση διεξήχθη με τη βοήθεια του προγράμματος LAMMPS.

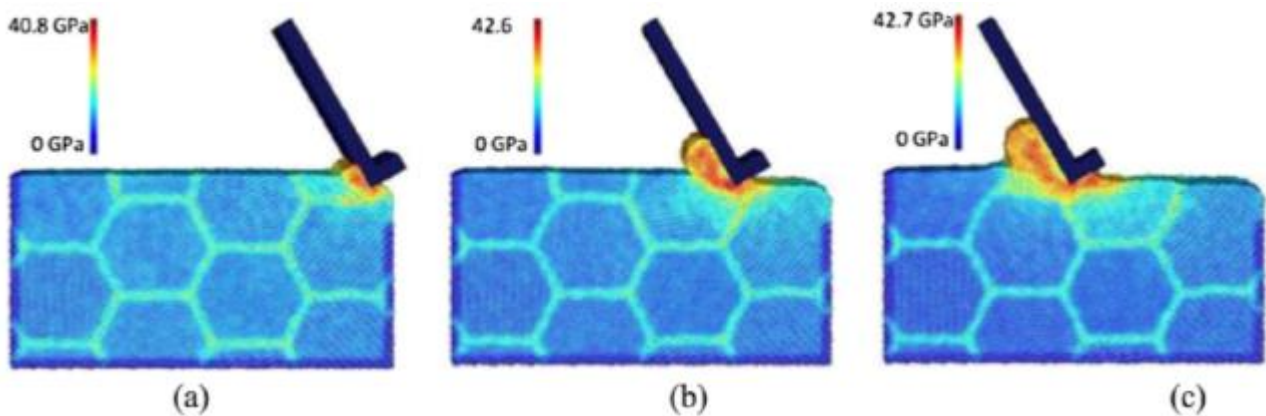


Εικόνα 3.1: Αναπαράσταση του μοντέλου κοπής νανοκλίμακας με προσομοίωση ΜΔ (Shi et al. 2013)

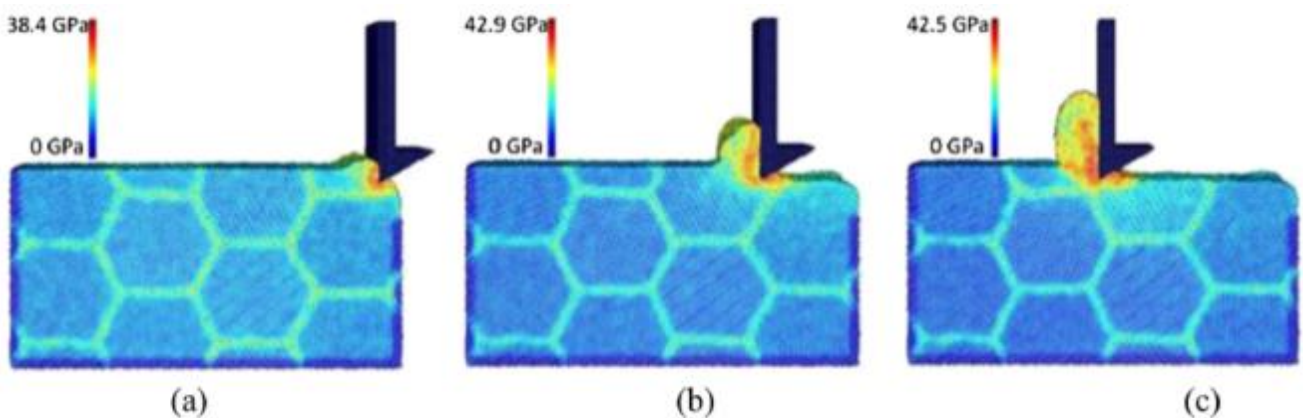
Επιπλέον, το δυναμικό που θεωρήθηκε για την αναπαράσταση των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων χαλκού και κοπτικού εργαλείου διαμαντιού ήταν το Morse. Επίσης, το δυναμικό για την αναπαράσταση των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων χαλκού του υλικού κατεργασίας ήταν το EAM, η οποία είναι μια συνάρτηση δυναμικού πολλών σωμάτων.

3.2.2 Επίδραση της γωνίας κοπής

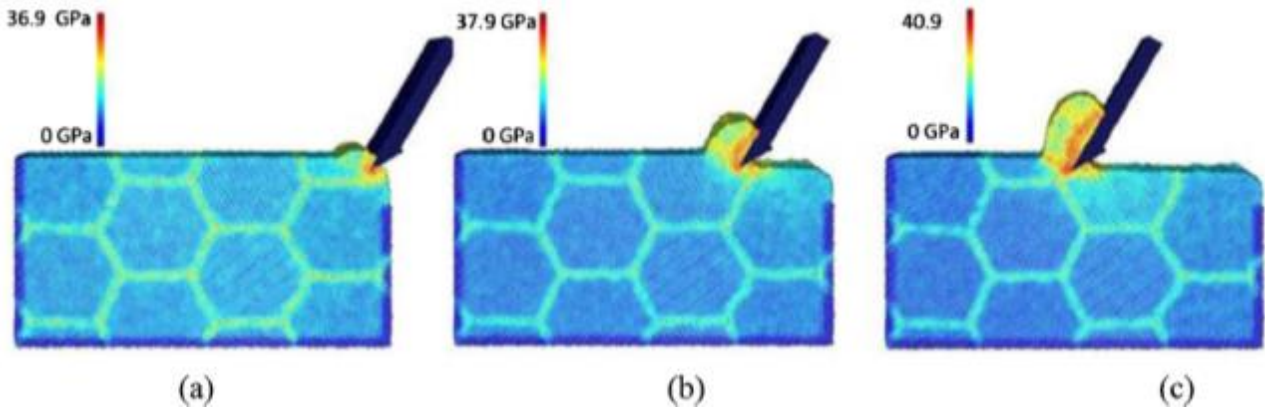
Οι ακόλουθες εικόνες αναπαριστούν την επίδραση της μεταβολής γωνίας κοπής σε σχέση με το σχηματισμό του αποβλίττου καθώς και την αντίστοιχη κατανομή της τάσης. Επίσης, τα στιγμιότυπα της νανοκοπής φαίνονται για απόσταση κοπής που έχει διανύσει το εργαλείο 30, 120, 240 Å.



Εικόνα 3.2: Σχηματισμός αποβλίττου και κατανομή της αντίστοιχης τάσης για γωνία κοπής -30° , (a) απόσταση κοπής 30 Å (b) απόσταση κοπής 120 Å (c) απόσταση κοπής 240 Å (Shi et al. 2013)

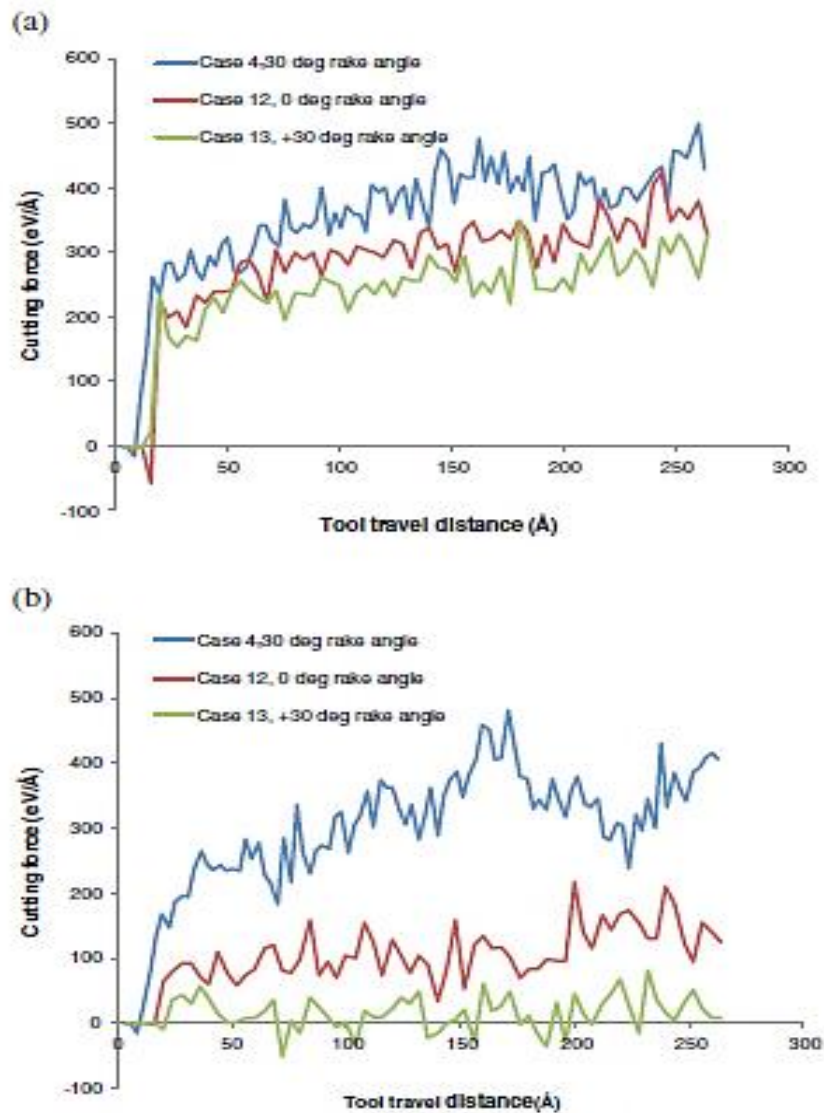


Εικόνα 3.3: Σχηματισμός αποβλίττου και κατανομή της αντίστοιχης τάσης για γωνία κοπής -0° , (a) απόσταση κοπής 30 Å (b) απόσταση κοπής 120 Å (c) απόσταση κοπής 240 Å (Shi et al. 2013)



Εικόνα 3.4: Σχηματισμός αποβλίττου και κατανομή της αντίστοιχης τάσης για γωνία κοπής 30° , (a) απόσταση κοπής 30 \AA (b) απόσταση κοπής 120 \AA (c) απόσταση κοπής 240 \AA (Shi et al. 2013)

Όπως φαίνεται, η γωνία κοπής καθορίζει το σχηματισμό/ροή του αποβλίττου, ενώ και η γεωμετρία του αποβλίττου μεταβαλλόταν στις 3 περιπτώσεις γωνίας κοπής. Παρατηρώντας τις τρεις περιοχές κατανομής τάσης για τις διάφορες ζώνες, διαπιστώνεται ότι η πρωταρχική ζώνη διάτμησης γίνεται πιο ξεκάθαρη από το δευτερογενή ζώνη, όσο η γωνία μεταβάλλεται από αρνητική σε θετική. Επίσης, η ανεπηρέαστη ζώνη μπροστά από το κοπτικό εργαλείο γίνεται πιο «ρηχή» όσο η γωνία κοπής μεταβάλλεται από αρνητική σε θετική, γεγονός που υποδεικνύει την επίδραση της συμπίεσης στην ανεπηρέαστη ζώνη κοπής.



Εικόνα 3.5: Εξέλιξη της δύναμης κοπής για τις τρεις περιπτώσεις γωνιών κοπής (a) Εφαπτομενική δύναμη F_x (b) Δύναμη ώσης F_y (Shi et al. 2013)

Παρομοίως, εξετάστηκε και υπολογίστηκε η εξέλιξη των δυνάμεων κοπής σε σχέση με τη γωνία κοπής, όπως παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.5. Όπως φαίνεται με τη μεταβολή της γωνίας κοπής από -30° σε 0° και στη συνέχεια σε 30° , και η εφαπτομενική δύναμη F_x και η δύναμη ώσης F_y μειώνονται, με τη μείωση της δύναμης ώσης να είναι η πιο σημαντική. Οι μέσες εφαπτομενικές δυνάμεις είναι 412.16, 338.73, και 280.80 eV/Å. ενώ οι μέσες δυνάμεις ώσης είναι 353.59, 132.68, και 19.43 eV/Å αντίστοιχα. Ο λόγος της εφαπτομενικής προς τη δύναμη ώσης F_x/F_y αυξάνεται από 1,17 σε 14,45 όσο η γωνία κοπής μεταβάλλεται από αρνητική σε θετική. Ξεκάθαρα η επίδραση συμπίεσης γίνεται περισσότερο αισθητή μεταξύ του εργαλείου και του υλικού κατεργασίας όταν η γωνία κοπής είναι αρνητική, μιας και δημιουργεί πολύ μεγαλύτερη δύναμη ώσης σε σχέση με τις άλλες περιπτώσεις. Όσο η γωνία κοπής γίνεται πιο αρνητική, η δύναμη ώσης χρειάζεται να αυξηθεί σε σχέση με την εφαπτομενική δύναμη, ώστε να υπερνικήσει την αντίσταση πλαστικής παραμόρφωσης του υλικού κατεργασίας κάτω από την άκρη του εργαλείου.

Τα αποτελέσματά τους ήταν σύμφωνα με τη βιβλιογραφία και τις μελέτες άλλων ερευνητών.

Συμπερασματικά λοιπόν, η μελέτη των Shi et al. (2013) σχετικά με την επίδραση της γωνίας κοπής, αλλά και του βάθους κοπής (3 διαφορετικές περιπτώσεις από 10 έως 20 Å), σε σχέση με τις παραμέτρους κατεργασιμότητας και απόδοσης κοπής πολυκρυσταλλικού χαλκού έδειξε ότι:

Η γωνία κοπής έχει σημαντική επίδραση στις παραμέτρους κοπής. Η μεταβολή της γωνίας κοπής από -30° σε $+30^\circ$ οδηγεί σε μείωση της εφαπτομενικής και της δύναμης ώσης κατά 47% και 1,666% αντίστοιχα. Επίσης αξίζει να επισημανθεί ότι η δύναμη ώσης είναι πιο ευαίσθητη στις μεταβολές της γωνίας κοπής. Τέλος, η χρήση μη αρνητικών γωνιών κοπής μειώνει τη συγκέντρωση τάσης σε σχηματισμένο απόβλιττο.

3.3 Μελέτη των Komanduri et al. (1999) για τις παραμέτρους των κοπών νανοκλίμακας

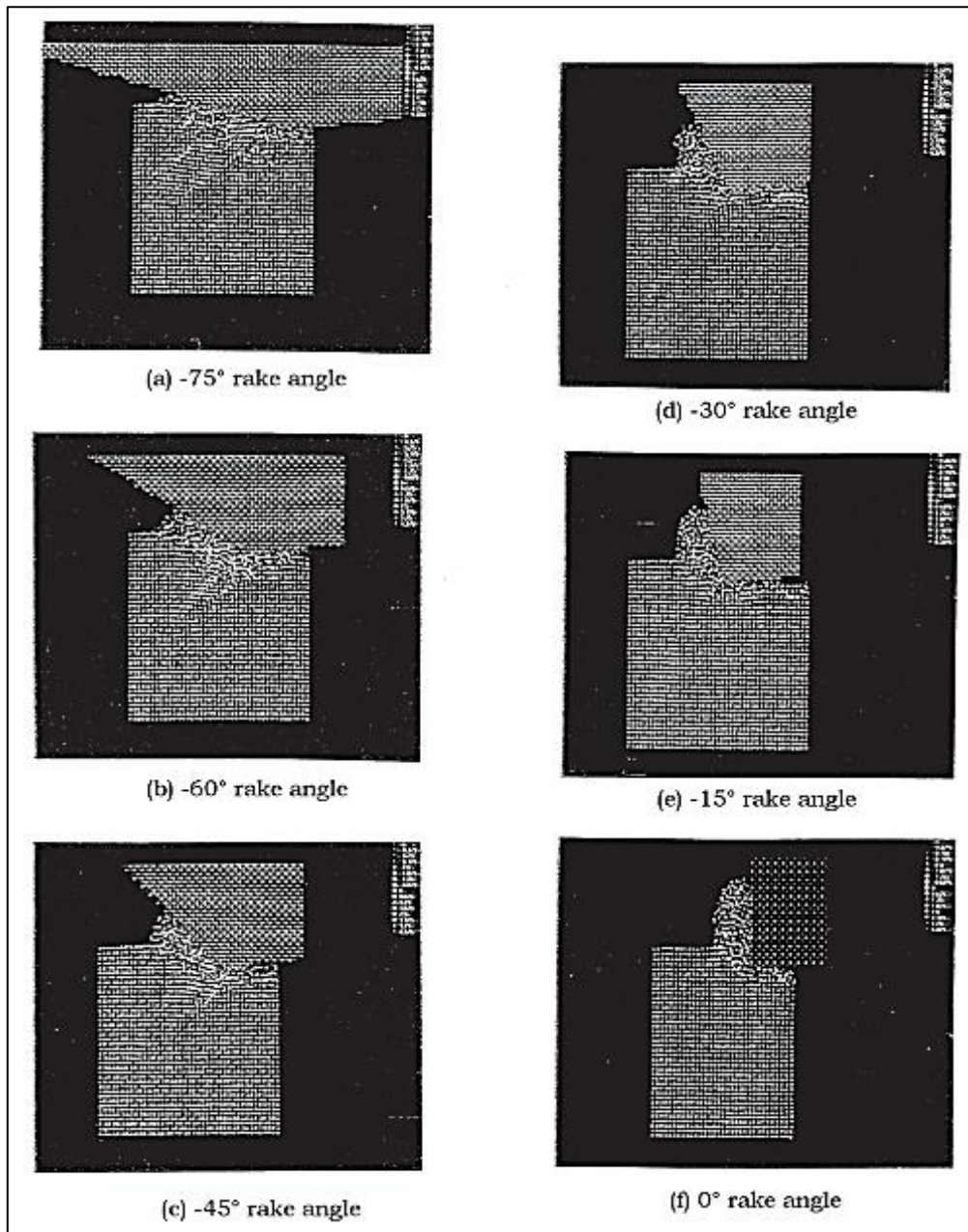
Στην περιοχή της επίδρασης παραμέτρων στις νανοκοπές, τόσο η πειραματική εργασία όσο και οι προσομοιώσεις ΜΔ είναι περιορισμένες. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων ΜΔ στην επίδραση ορισμένων παραμέτρων, δηλαδή, της γωνίας κοπής, της ακτίνας καμπυλότητας και του βάθους κοπής παρουσιάζονται παρακάτω. Πρέπει όμως να γίνει αντιληπτό, ότι το πιο ουσιώδες βήμα για μια προσομοίωση ΜΔ είναι η επιλογή συναρτήσεων δυναμικού που να περιγράφουν ικανοποιητικά το φαινόμενο που μελετάται. Αν τα δυναμικά δεν μοντελοποιούν επαρκώς τη συμπεριφορά των ατόμων, τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την προσομοίωση θα είναι μη αντιπροσωπευτικά. Για το λόγο αυτό, θα παρουσιαστεί στην επόμενη υποενοότητα η προσομοίωση της νανοκοπής τεμαχίου χαλκού με εργαλείο διαμαντιού με χρήση τριών διαφορετικών συναρτήσεων δυναμικού, η οποία διεξήχθη από τους Komanduri et al. (1999).

3.3.1 Επίδραση της μεταβολής γωνίας κοπής

✓ Αρνητικές γωνίες κοπής

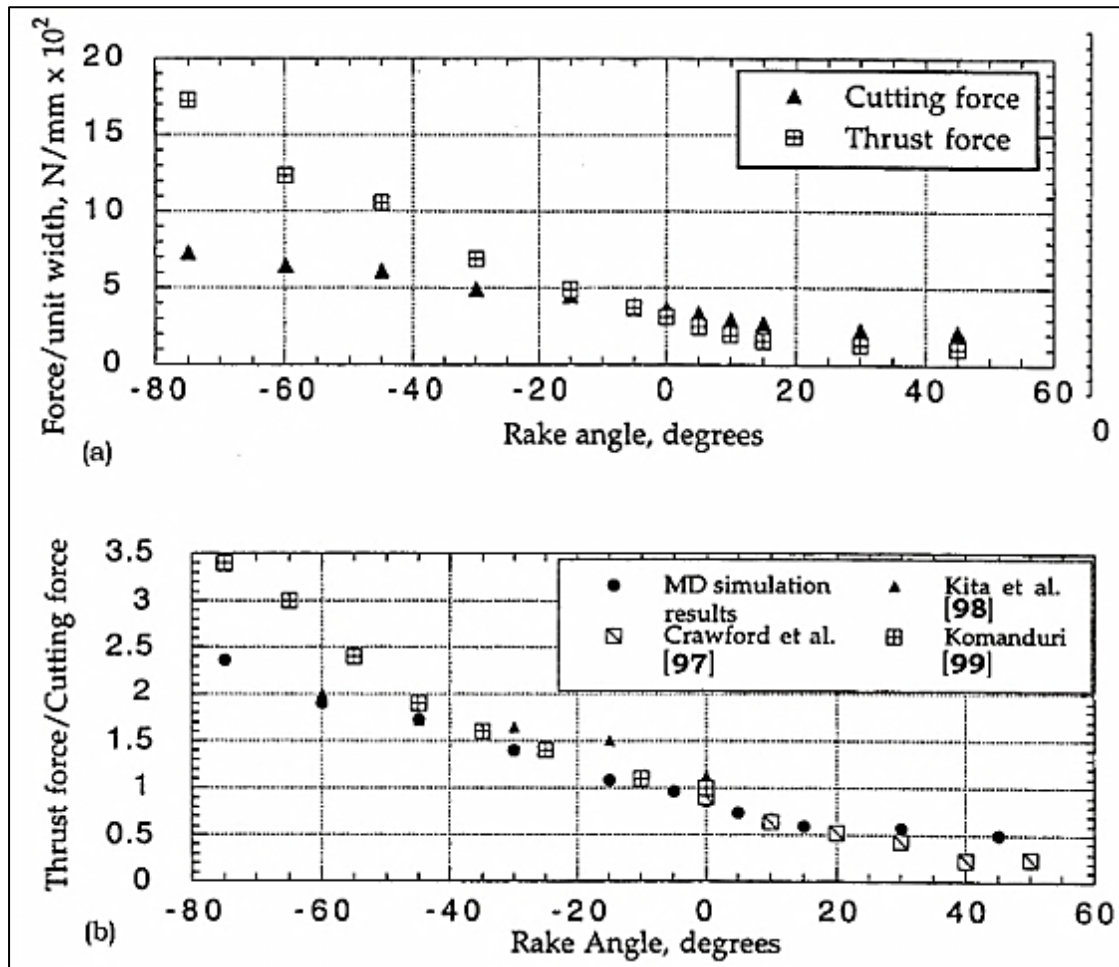
Ενώ οι πολύ αρνητικές γωνίες κοπής ($>-15^\circ$) χρησιμοποιούνται σπάνια στις κατεργασίες, χρησιμοποιούνται κατά κανόνα στη λείανση. Ο Hahn εισήγαγε την υπόθεση του κόκκου στίλβωσης στη λείανση, σύμφωνα με την οποία κάποιοι κόκκοι εκτριβής μπορεί απλώς να τρίβουν την κατεργαζόμενη επιφάνεια, προκαλώντας 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 αποβλίττου. 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. Στην Εικόνα 3.6a-f παρουσιάζεται η νανοκοπή του χαλκού με χρήση εξαιρετικά κοφτερού εργαλείου, άπειρης σκληρότητας σε διαφορετικές αρνητικές γωνίες κοπής του εργαλείου (0 ως -75°) (Komanduri et al. 1999) . Απεικονίζεται ο εξοπλισμός του αρχικού εργαλείου και του υλικού κατεργασίας, καθώς και η κίνηση του εργαλείου σε δεδομένη απόσταση με διαφορετικές γωνίες κοπής του εργαλείου. Η πλαστική παραμόρφωση μπροστά από το κοπτικό άκρο και την κατεργασμένη επιφάνεια είναι εμφανής. Εμφανή είναι επίσης τα εξής: μείωση στο μήκος του αποβλίττου (ή αύξηση στο πάχος του αποβλίττου) αύξηση της άρωσης του εργαλείου στο κατεργαζόμενο υλικό και αύξηση του βαθμού παραμόρφωσης του υποστρώματος με αύξηση της αρνητικής γωνίας κοπής του εργαλείου. Επίσης, μπορούν να παρατηρηθούν η παραγωγή και η μετακίνηση των μετατοπίσεων μέσα στο υλικό κατεργασίας, καθώς και η ελαστική επαναφορά της κατεργασμένης επιφάνειας. Καθώς οι γωνίες κοπής γίνονται πιο αρνητικές, η ζώνη διάτμησης περιστρέφεται προς την κατεργασμένη επιφάνεια όπως υποδεικνύεται από τη μείωση της γωνίας διάτμησης, η οποία οφείλεται στην περιστροφή του προκύπτοντος διανύσματος δυνάμεων.



Εικόνα 3.6: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής χαλκού με χρήση εξαιρετικά αιχμηρού εργαλείου άπειρης σκληρότητας σε διαφορετικές αρνητικές γωνίες κοπής (0 ως 75°) (Komanduri et al. 1999)

Στην Εικόνα 3.7 παρουσιάζεται η μεταβολή των δυνάμεων κοπής και των δυνάμεων ώσης ανά μονάδα εύρους, καθώς και ο λόγος της δύναμης ώσης προς τη δύναμη κοπής, ως προς τη γωνία κοπής.



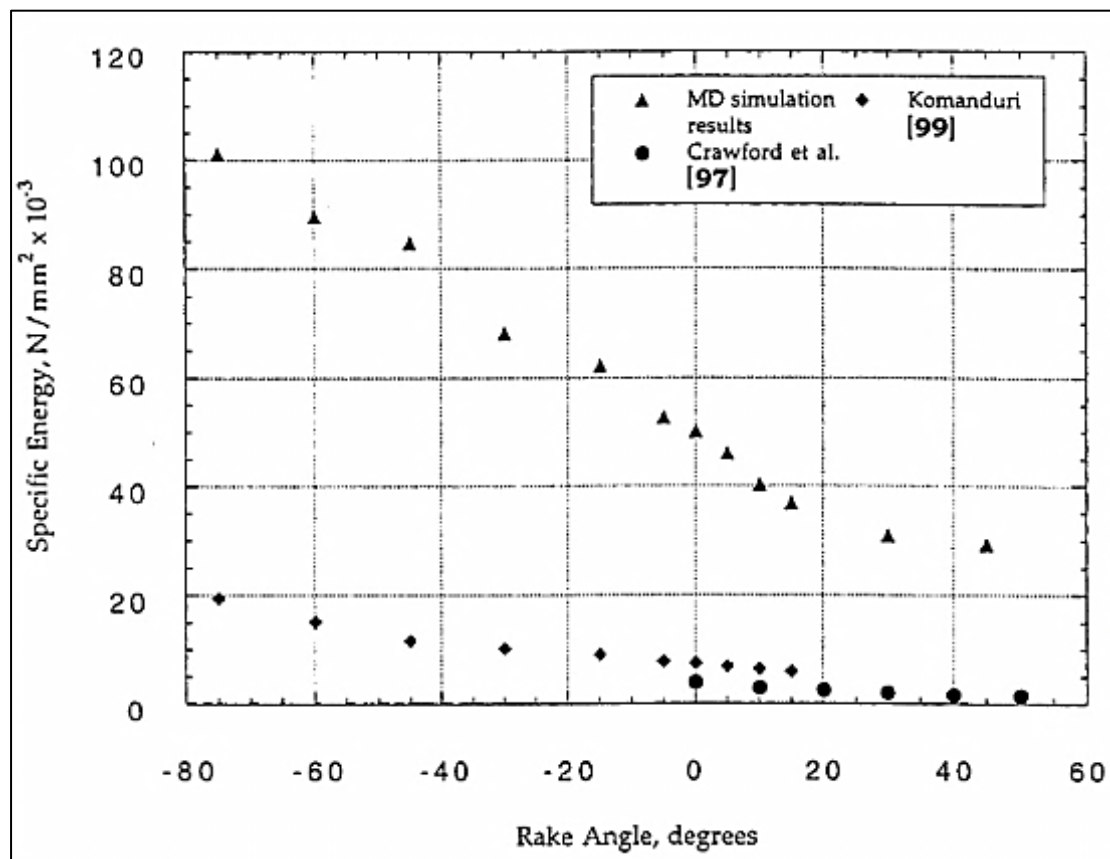
Εικόνα 3.7: Μεταβολή της δύναμης κοπής και της δύναμης πρόωσης ανά μονάδα εύρους του λόγου της δύναμης πρόωσης προς τη δύναμη κοπής με τη μεταβολή της γωνίας κοπής (Komanduri et al. 1999)

Στην Εικόνα 3.7b, παρουσιάζεται η υπέρθεση των αποτελεσμάτων διαφόρων ερευνητών σε διάφορες γωνίες κοπής. (Komanduri et al. 1999). Μπορεί να φανεί από την Εικόνα 3.6a ότι, καθώς η γωνία κοπής μειώνεται από τις +10° προς αρνητικές γωνίες κοπής, η δύναμη πρόωσης αυξάνεται γρήγορα μέχρι τις -75°. Η δύναμη κοπής παρουσιάζει επίσης αυξητική τάση, αλλά σε σημαντικά χαμηλότερο ρυθμό. Ο λόγος της δύναμης πρόωσης προς τη δύναμη κοπής αυξάνεται επίσης, καθώς η γωνία κοπής μεταβάλλεται σε πιο αρνητικές τιμές. Σε γωνία 10°, η δύναμη πρόωσης είναι 0.6 φορές η δύναμη κοπής. Ο λόγος αυξάνεται καθώς η γωνία κοπής μεταβάλλεται σε πιο αρνητικές τιμές, για παράδειγμα σε -75°.

Εκτός από πολύ αρνητικές γωνίες, όπου τα αποτελέσματα της προσομοίωσης είναι χαμηλότερα από τους συμβατικούς ελέγχους κατεργασίας, φαίνεται εν γένει ότι η συμφωνία μεταξύ των αποτελεσμάτων είναι λογική. Η ασυμφωνία για τις πολύ αρνητικές γωνίες μπορεί να αποδοθεί στη φθορά των εργαλείων κατά τους συμβατικούς ελέγχους με αρνητικές γωνίες κοπής, ενώ στις προσομοιώσεις ΜΔ δεν περιλαμβάνεται η φθορά του εργαλείου. Οι Marshall και Shaw βρήκαν το μέσο συντελεστή λείανσης ίσο με 0.47, ο οποίος είναι ο λόγος της δύναμης κοπής προς τη

δύναμη πρόωσης για τροχό καρβιδίου του πυριτίου. Συγκρίνοντας όλες αυτές τις τιμές, φαίνεται ότι υπάρχει ομοιότητα μεταξύ της λείανσης υπερακριβείας (UPG) και της νανοκοπής σε πολύ αρνητικές γωνίες, με τη μέση γωνία κοπής στη λείανση στην περιοχή των -60° .

Στην Εικόνα 3.8 παρουσιάζεται η μεταβολή της ειδικής ενέργειας (δηλ. της ενέργειας που απαιτείται για την αποβολή μιας μονάδας όγκου του υλικού κατεργασίας) με τη γωνία κοπής. Στο διάγραμμα απεικονίζονται επίσης τα πειραματικά δεδομένα του Komanduri για βάθος κοπής 10 μm και τα πειραματικά δεδομένα των Crawford και Merchant για βάθος κοπής 250 μm .



Εικόνα 3.8: Μεταβολή της ειδικής ενέργειας με μεταβολή της γωνίας κοπής (Komanduri et al. 1999)

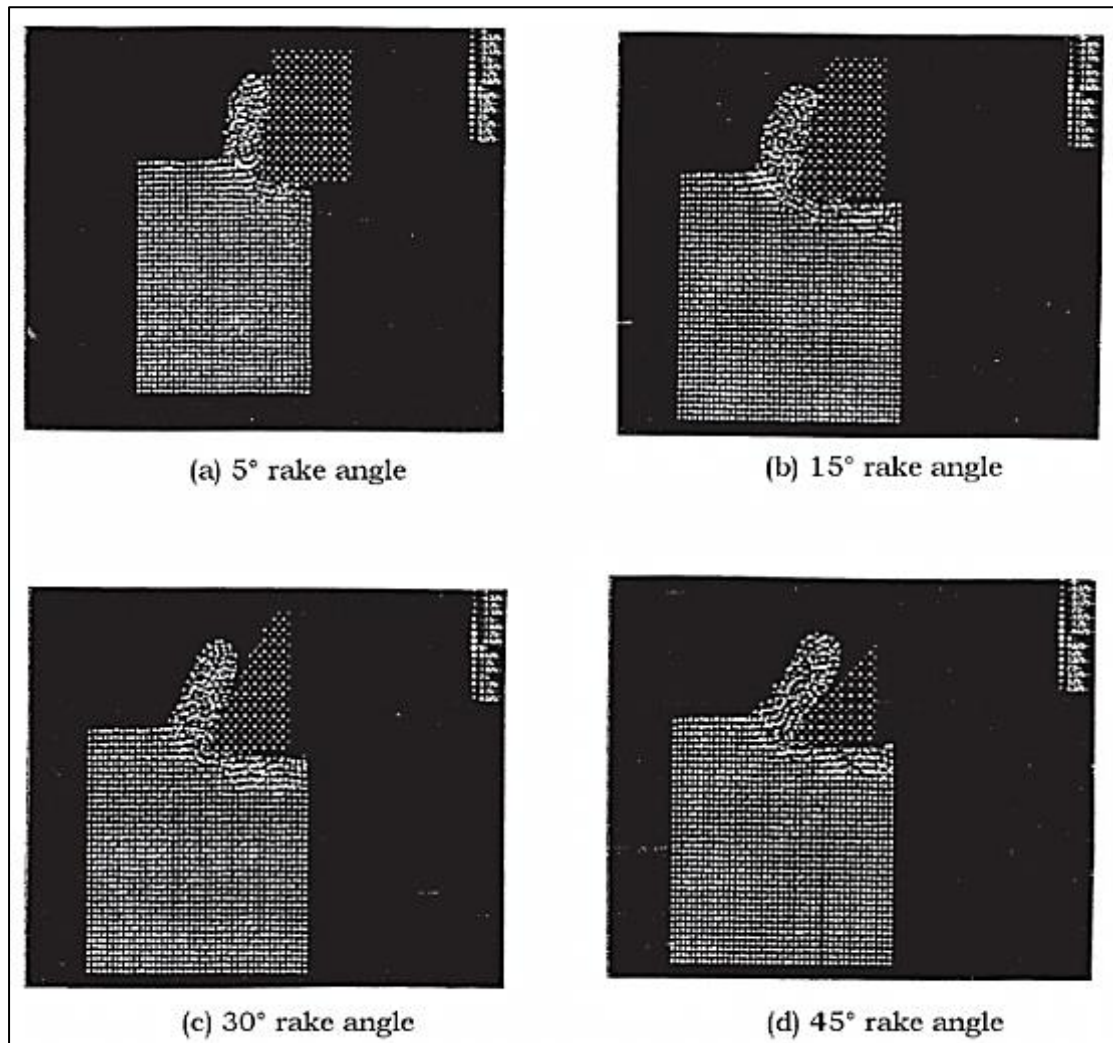
Το συγκεκριμένο διάγραμμα αφορά την ενέργεια που απαιτείται για την αποβολή μιας μονάδας όγκου του κατεργαζόμενου υλικού ως προς τη γωνία κοπής. Παρουσιάζονται επίσης τα πειραματικά δεδομένα του Komanduri για βάθος κοπής 10 μm και τα δεδομένα των Crawford και Merchant για βάθος κοπής 250 μm . (Komanduri et al. 2001)

Μπορεί να παρατηρηθεί αύξηση στην ειδική ενέργεια με μείωση της γωνίας κοπής, παρόμοια με αυτή που αναφέρεται από άλλους ερευνητές, αλλά με πολύ

μεγαλύτερο ρυθμό. Επίσης, είναι φανερό ότι υπάρχει καλή συμφωνία μεταξύ των πειραμάτων του Komanduri και των Crawford και Merchant σε ένα μεγάλο εύρος γωνιών. Όμως, η ειδική ενέργεια στη νανοκοπή, βρέθηκε να είναι σημαντικά υψηλότερη (περίπου μια τάξη μεγέθους μεγαλύτερη) σε σύγκριση με τη συμβατική κοπή. Η αύξηση της ειδικής ενέργειας αποδίδεται στην επίδραση κλίμακας, η οποία έχει αναφερθεί και από πολλούς άλλους ερευνητές στο παρελθόν. Καθώς το υλικό κατεργασίας στις προσομοιώσεις ΜΔ νανοκοπής είναι αρχικά χωρίς σημειακά, γραμμικά ή επιφανειακά ελαττώματα, και το μέγεθος του υπό εξέταση κατεργαζόμενου υλικού είναι μόνο μερικά νανόμετρα σε κάθε πλευρά του παραλληλεπίπεδου, ένα τέτοιο συμπέρασμα είναι εύλογο.

✓ **Θετικές γωνίες κοπής**

Καθώς δίνεται πλέον ιδιαίτερη έμφαση στις «ξηρές κατεργασίες» (κατεργασία χωρίς ή με ελάχιστη χρήση υγρού κοπής) ή στις «πράσινες κατεργασίες», μια σημαντική μείωση στην ενέργεια (πλαστική παραμόρφωση στην πρωτεύουσα ζώνη διάτμησης και τριβή στη διεπιφάνεια αποβλίττου-εργαλείου) μπορεί να μεταφραστεί απευθείας σε σημαντική μείωση της θερμοκρασίας του εργαλείου και κατά συνέπεια σε αύξηση της διάρκειας ζωής του εργαλείου. Παρόλο που τα πιο πυρίμαχα εργαλεία, όπως οι νανοεπενδύσεις πολλών στρωμάτων, ή τα προηγμένα κεραμικά μπορεί να επιτρέπουν την κατεργασία χωρίς τη χρήση υγρού κοπής, η γεωμετρία πολύ θετικών γωνιών μπορεί να επεκτείνει περαιτέρω τη διάρκεια ζωής του εργαλείου ή να βελτιώσει την παραγωγικότητα, αποβάλλοντας το υλικό σε υψηλότερες ταχύτητες και με μικρότερη κατανάλωση ενέργειας. Οι πολύ θετικές γωνίες κοπής (~45°) είναι ιδιαίτερα ελκυστικές για την κατεργασία μη- σιδηρούχων υλικών χαμηλής αντοχής, όπως το αλουμίνιο , όπου η φθορά του εργαλείου ή η δύναμη του εργαλείου δεν μας ενδιαφέρουν. Μια μελέτη προσομοίωσης ΜΔ διεξήχθη με θετικές γωνίες κοπής εργαλείου , ώστε να διερευνηθεί το εύρος της μείωσης στις δυνάμεις και η συνεπακόλουθη μείωση ενέργειας ως προς τη γωνία κοπής. Στην Εικόνα 3.9 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων ΜΔ σε διάφορες θετικές γωνίες κοπής (μέχρι 45°) (Komanduri et al. 1999).



Εικόνα 3.9: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής του χαλκού με χρήση εξαιρετικά αιχμηρού εργαλείου άπειρης σκληρότητας σε διάφορες θετικές γωνίες κοπής εργαλείου (μέχρι 45°) (Komanduri et al. 1999)

Παρουσιάζεται αύξηση στη γωνία διάτμησης, μείωση στο μήκος επαφής εργαλείου-αποβλίττου (μειωμένη τριβή) και καμπύλωση του αποβλίττου με αύξηση στη θετική γωνία κοπής. Στην Εικόνα 3.9α παρουσιάζεται μείωση σχεδόν 50% στη δύναμη κοπής και συνεπακόλουθη μείωση στην ενέργεια κοπής με χρήση θετικών γωνιών κοπής εργαλείου (~45°), σε σύγκριση με εργαλείο μηδενικής γωνίας κοπής.

3.3.2 Ακτίνα καμπυλότητας και βάθος κοπής

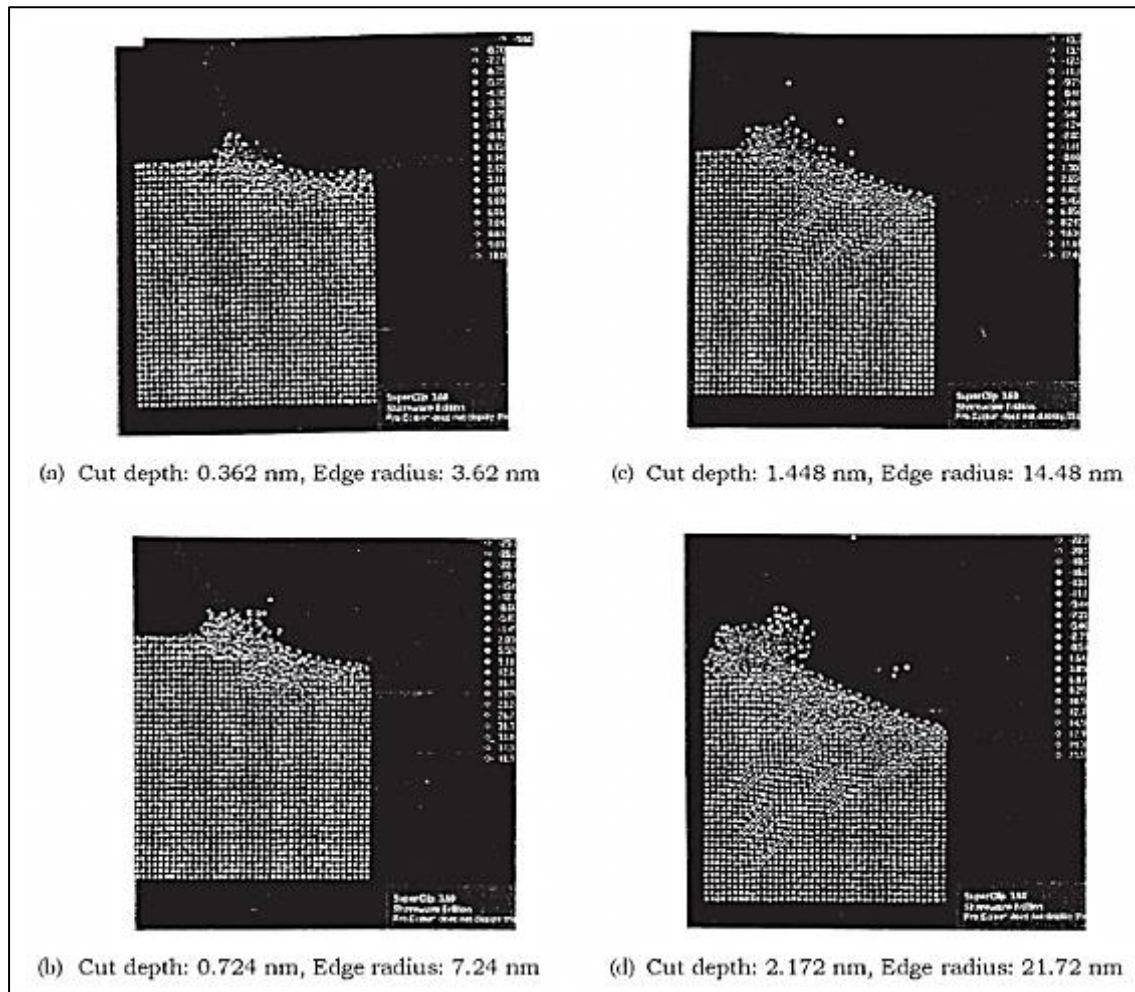
Προσομοιώσεις ΜΔ των νανοκοπών διεξήχθησαν με εργαλεία με διαφορετικές ακτίνες καμπυλότητας, r (1.207-21.72 nm), και βάθη κοπής, d (0.362-2.172 nm) διατηρώντας το λόγο d/r σταθερό (στα 0.1, 0.2 και 0.3). Έχουν ερευνηθεί διακυμάνσεις όσον αφορά τις δυνάμεις κοπής και ώθησης, το λόγο δυνάμεων, την ειδική ενέργεια και την υποστρωματική παραμόρφωση σε σχέση με τη γεωμετρία

του εργαλείου και τα βάθη κοπής. Με βάση αυτές τις μελέτες βρέθηκε ότι οι παράμετροι κοπής έχουν σημαντική επίδραση στις παραμέτρους εξόδου, όπως στις δυνάμεις, στο λόγο δυνάμεων και στην ειδική ενέργεια.

Η Εικόνα 3.10a-d δείχνουν τα αποτελέσματα προσομοίωσης ΜΔ για λόγο d/r της τάξεως 0.1 και για διαφορετικά βάθη κοπής (0.362-2.172 nm). Η Εικόνα 3.10 δείχνει αύξηση στην έκταση της πλαστικής παραμόρφωσης κατά μήκος της γραμμής του εργαλείου καθώς και ευρεία υποστρωματική παραμόρφωση με αύξηση στο βάθος κοπής για συγκεκριμένο λόγο d/r . Επίσης μπορούν να παρατηρηθούν μετατοπίσεις ειδικά σε μεγαλύτερα βάθη κοπής. Αυτό οφείλεται στη δημιουργία επιπρόσθετων μετατοπίσεων λόγω τη αλληλεπίδρασης με τις δημιουργηθείσες μετατοπίσεις. Χάρη στην απουσία εγγενών ατελειών στο υλικό κατεργασίας που χρησιμοποιήθηκαν κατά την μοντελοποίηση της προσομοίωσης ΜΔ, όπως ρωγμές, εγκλείσματα και όρια των κόκκων, τα μόνα εμπόδια στην κίνηση των μετατοπίσεων είναι η αλληλεπίδραση των μετατοπίσεων που οδηγούν στη δημιουργία επιπρόσθετων μετατοπίσεων.

Επίσης ο αριθμός των μετατοπίσεων αυξάνεται με την αύξηση του βάθους κοπής για συγκεκριμένο λόγο βάθους κοπής προς την ακτίνα καμπυλότητας του εργαλείου d/r , λόγω της αύξησης της δύναμης που δημιουργεί αυτές τις μετατοπίσεις. Τέλος, η έκταση της παραμόρφωσης του υποστρώματος φαίνεται να μειώνεται με μείωση του λόγου d/r , ενώ από την άλλη το παραχθέν απόβλιττο αυξάνεται ως επακόλουθο της αύξησης του λόγου d/r . Αυτό υποδεικνύει αύξηση της δυνατότητας κοπής και μείωση στην εκτριβή μεταξύ του εργαλείου κοπής και του υλικού κατεργασίας όσο αυξάνεται ο λόγος d/r . Επίσης, για δοθέν βάθος κοπής, αύξηση στην ακτίνα καμπυλότητας του εργαλείου (π.χ. μικρότεροι λόγοι d/r) μειώνει τη δημιουργία του αποβλίττου. Αυτό συμβαίνει γιατί για μεγαλύτερες τιμές ακτίνας καμπυλότητας, η γωνία κοπής του εργαλείου θα είναι πιο αρνητική και επακόλουθα δεν θα συμβάλλει σε μεγάλο βαθμό στη διαδικασία διαμόρφωσης του αποβλίττου. Επιπρόσθετα, για δοθέν λόγο d/r , η αύξηση στην ακτίνα καμπυλότητας αυξάνει την αρνητική γωνία κοπής με συνέπεια η ζώνη διάτμησης να περιστρέφεται προς την κατεύθυνση του υλικού κατεργασίας.

Η Εικόνα 3.11a-c δείχνει τη διακύμανση των δυνάμεων κοπής και πρόωσης, και το λόγο δύναμης πρόωσης προς κοπής σε σχέση με την ακτίνα καμπυλότητας του εργαλείου για διαφορετικά βάθη κοπής. Ενώ η δύναμη κοπής φαίνεται να μεταβάλλεται γραμμικά με το βάθος κοπής, η δύναμη πρόωσης φαίνεται να μεταβάλλεται με ταχύ ρυθμό αρχικά και στη συνέχεια κορεννύεται για μεγαλύτερα βάθη κοπής. Επίσης, ο λόγος δύναμης πρόωσης προς δύναμη κοπής είναι ίδιος όπως και στη λείανση ή στην κατεργασία με εργαλεία με μεγάλες αρνητικές γωνίες κοπής.

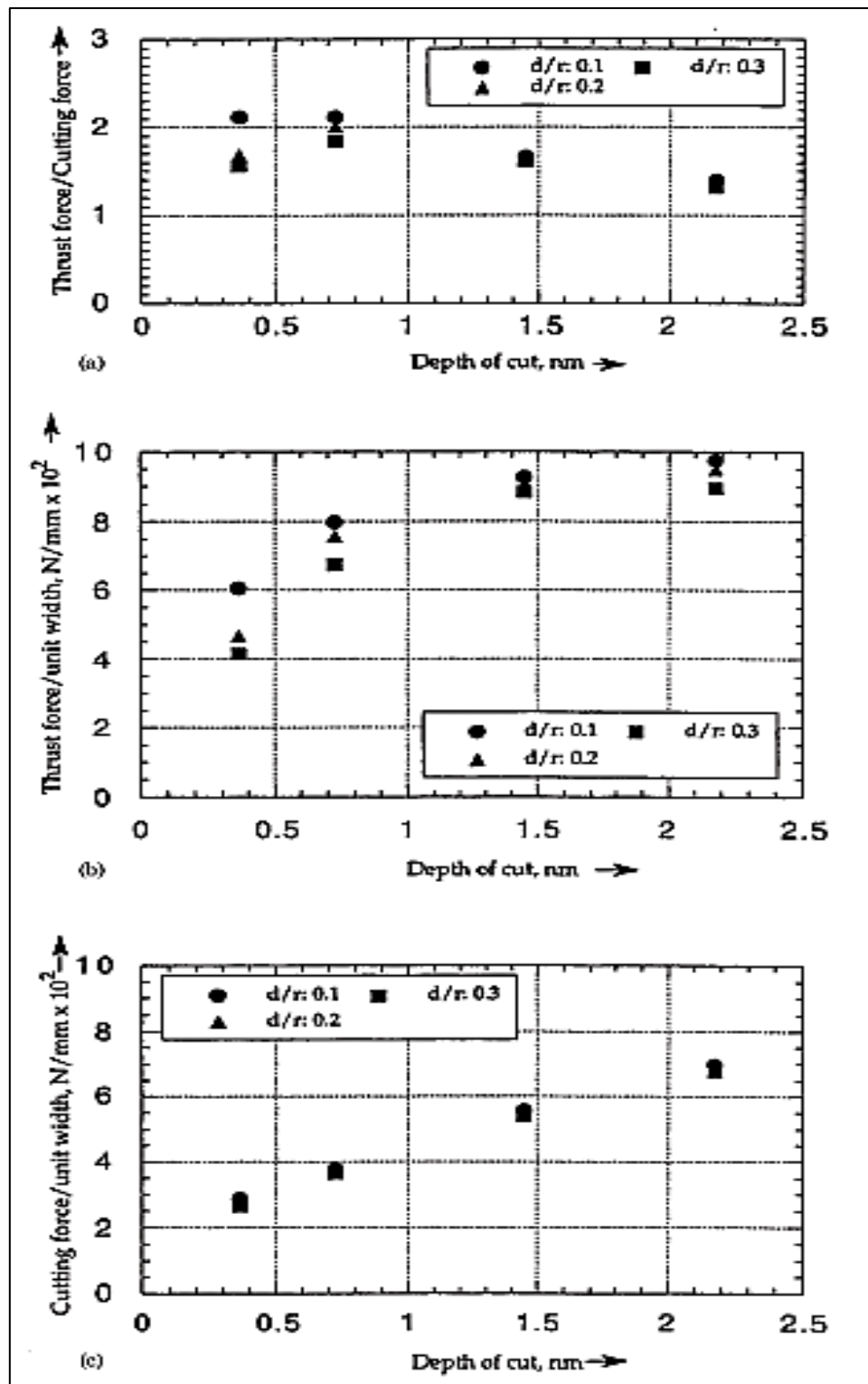


Εικόνα 3.10: Προσομοιώσεις ΜΑ ναυκοπήσης με εργαλείο στρογγυλού άκρου για λόγο d/r 0.1 και διάφορα βάθη κοπής (0.362-2.172 nm) (Komanduri et al. 2001)

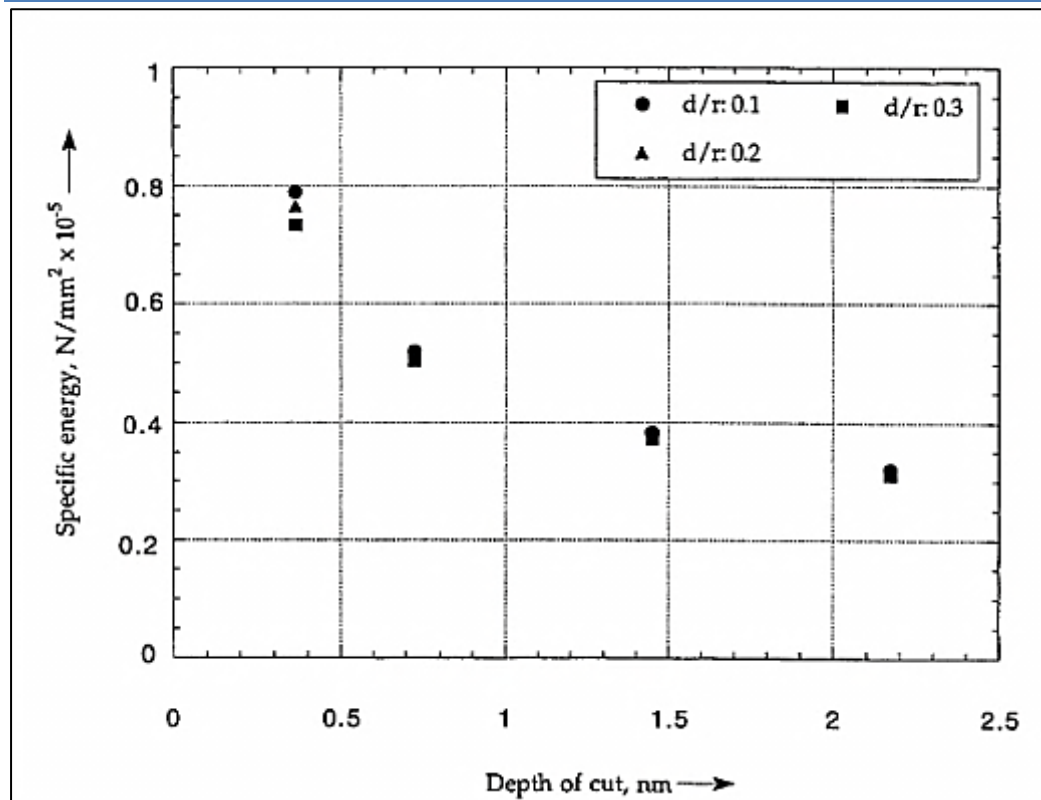
Παρατηρείται ότι ενώ οι δυνάμεις αυξάνονται με την ακτίνα καμπυλότητας εργαλείου ειδικά για μικρότερες ακτίνες καμπυλότητας (αυτό είναι πιο εμφανές στην περίπτωση της δύναμης πρόωσης σε σχέση με τη δύναμη κοπής), γίνονται πιο ανεξάρτητες για μεγαλύτερες ακτίνες καμπυλότητας του εργαλείου. Αυτό συμβαίνει γιατί για μεγάλες τιμές της ακτίνας καμπυλότητας του εργαλείου, η ισοδύναμη αρνητική γωνία κοπής είναι μεγάλη και μεταβάλλεται σε μικρό μόνο εύρος, ενώ σε χαμηλότερες τιμές η ακτίνα καμπυλότητας του εργαλείου μεταβάλλεται εντονότερα. Επίσης, για μεγαλύτερες ακτίνες καμπυλότητας, ο λόγος δύναμης πρόωσης προς κοπή παραμένει σταθερός, ενώ για μικρότερες ακτίνες καμπυλότητας του εργαλείου, ο λόγος αυξάνεται για μεγαλύτερες ακτίνες (Εικόνα 3.11c).

Ο λόγος μειώνεται με αύξηση του βάθους κοπής, το οποίο καταδεικνύει μεγαλύτερη κοπή και λιγότερη πλαστική παραμόρφωση του υποστρώματος του υλικού κατεργασίας. Η Εικόνα 3.12 δείχνει τη διακύμανση της ειδικής ενέργειας με το βάθος κοπής για διαφορετικούς λόγους d/r δείχνοντας αύξηση της ειδικής ενέργειας για μειούμενα βάθη κοπής (επίδραση κλίμακας). Πρέπει να επισημανθεί ότι για να μελετηθεί η επίδραση του βάθους κοπής για εργαλεία διαφόρων ακτινών

καμπυλότητας, είναι απαραίτητη η διατήρηση σταθερού λόγου d/r . Για παράδειγμα, η δύναμη κοπής φαίνεται να αυξάνεται με το βάθος κοπής ανεξάρτητα με το λόγο d/r .



Εικόνα 3.11: Διακύμανση της δύναμης κοπής και της δύναμης πρόωσης, και του λόγου πρόωσης προς κοπή, με την ακτίνα καμπυλότητας του εργαλείου για διαφορετικά βάθη κοπής (Komanduri et al. 2001)



Εικόνα 3.12: Διακύμανση της ειδικής ενέργειας με το βάθος κοπής για διαφορετικούς λόγους d/r , όπου φαίνεται αύξηση της ειδικής ενέργειας για μειούμενα βάθη κοπής (επίδραση κλίμακας) (Komanduri et al. 2001)

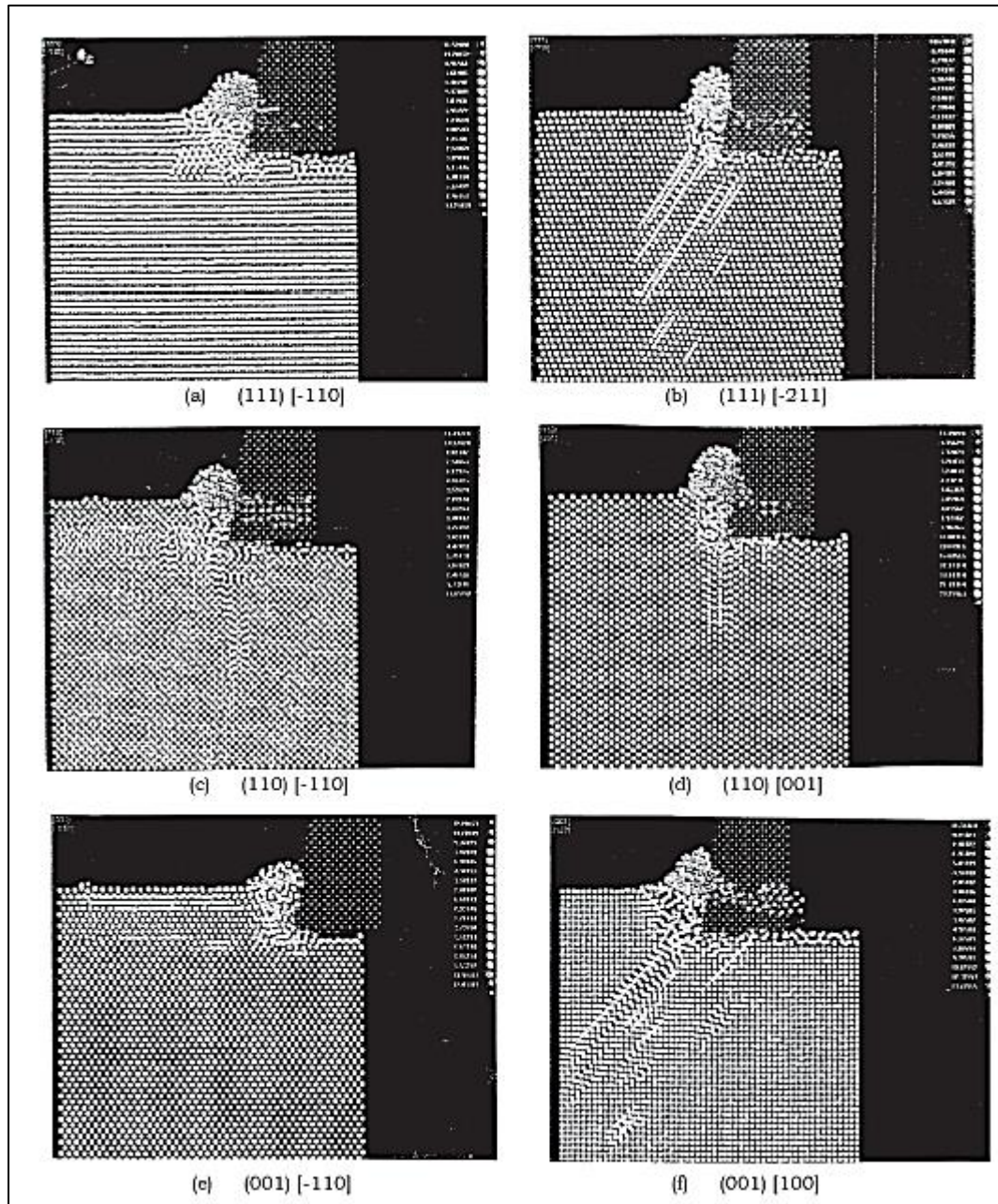
Ομοίως, η ειδική ενέργεια φαίνεται να αυξάνεται ραγδαία με μείωση του βάθους κοπής, ανεξάρτητα του λόγου d/r . Συνεπώς, η επίδραση του βάθους μπορεί να διαχωριστεί από την επίδραση της ακτίνας καμπυλότητας.

3.3.3 Κρυσταλλογραφικός προσανατολισμός

Το αλουμίνιο που χρησιμοποιείται σε μονάδες δίσκου, κατεργάζεται με πολύ υψηλή ακρίβεια, φινίρισμα και επιτεδότητα μέσω εργαλείων υπερυψηλής ακρίβειας προτού επιστρωθεί με νικέλιο. Το αλουμίνιο χρησιμοποιείται ευρέως σε καθρέπτες για laser, περιστρεφόμενους καθρέπτες σε μηχανήματα αντιγραφής κ.α. Συνεπώς η μελέτη νανοκοπής του αλουμινίου είναι χρήσιμη για τις βιομηχανίες υπολογιστών, laser και εκτύπωσης.

Η αφαίρεση υλικού σε μικρά βάθη κοπής περιλαμβάνει πλαστική παραμόρφωση μπροστά από το εργαλείο και ελαστική επαναφορά της φινιρισμένης επιφάνειας. Στις συμβατικές κοπές όπου το βάθος κοπής είναι σημαντικό, η ελαστική επίδραση μπορεί να παραλειφθεί. Οι διαφορές στο μέτρο ελαστικότητας με τον κρυσταλλογραφικό προσανατολισμό μπορούν να επηρεάσουν τη φύση της πλαστικής παραμόρφωσης μπροστά από το εργαλείο καθώς και το φινίρισμα και την ακρίβεια των κατεργασμένων τμημάτων.

Μιας και οι συνδεδεμένες δυνάμεις είναι επηρεάζονται από την απόσταση μεταξύ των ατόμων στον κρύσταλλο, οι σταθερές ελαστικότητας σε ένα μόνο κρύσταλλο μεταβάλλονται με την κατεύθυνση. Ο βαθμός ανισοτροπίας του αλουμινίου στην ελαστική περιοχή είναι ~ 1.219 . Επίσης αναμενόμενη θα είναι μια παρόμοια διακύμανση για την πλαστική περιοχή με διαφορετικούς όμως κρυσταλλογραφικούς προσανατολισμούς.



Εικόνα 3.13: Αποτελέσματα προσομοίωσης ΜΔ σε διάφορα στάδια νανοκοπής σε διαφορετικούς συνδυασμούς προσανατολισμών και κατευθύνσεις κοπής (Komanduri et al. 2001)

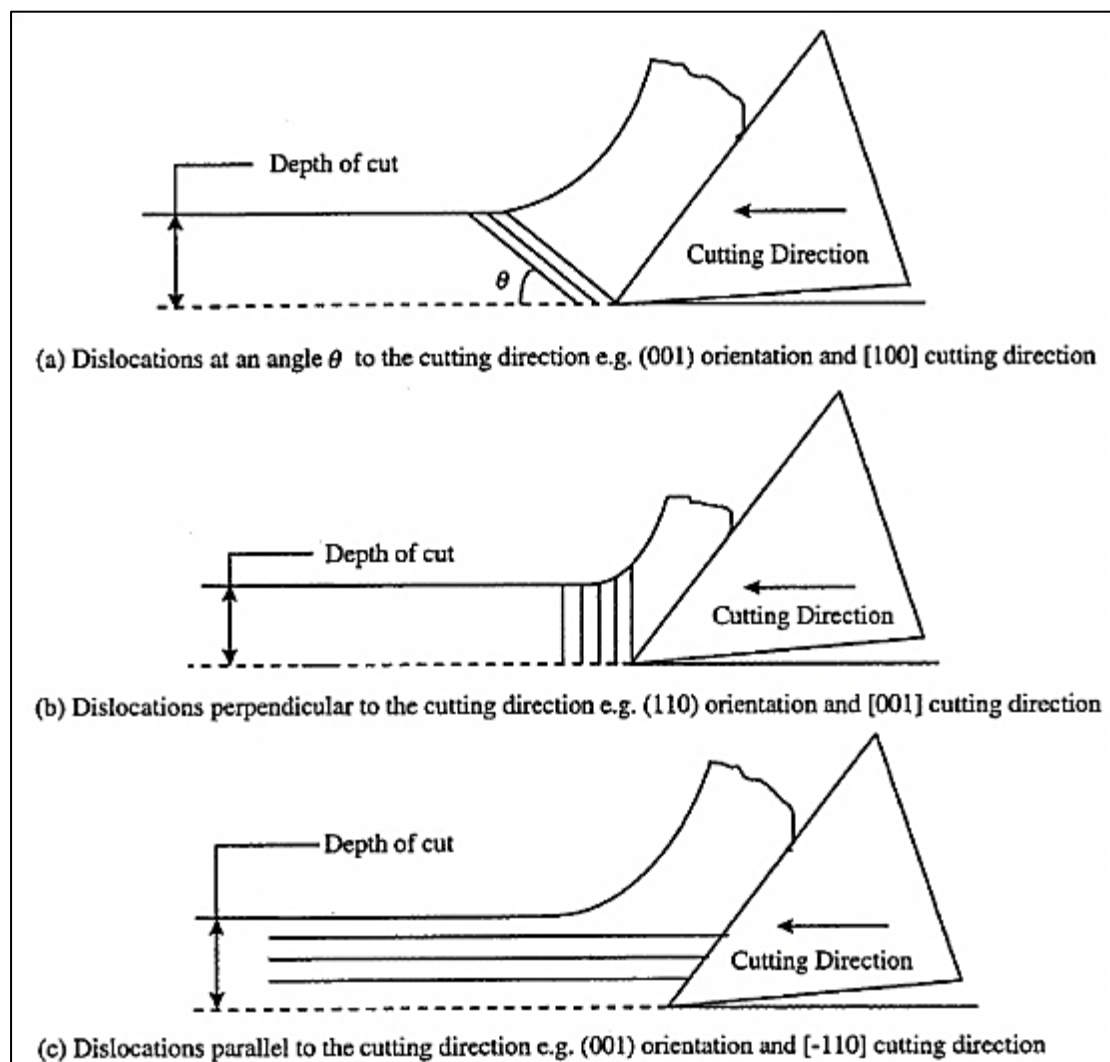
Για παράδειγμα, για τα μέταλλα δομής fcc, η ολίσθηση κυριαρχεί τόσο στα επίπεδα όσο και στις διάφορες κατευθύνσεις. Έτσι είναι αναμενόμενο να οδηγούμαστε σε μικρότερη δύναμη κοπής λόγω της συνεπαγόμενης εύκολης ολίσθησης.

Για να μελετηθεί η ανισοτροπική συμπεριφορά του μονοκρυσταλλικού αλουμινίου, διεξήχθησαν προσομοιώσεις MD για διαφορετικούς προσανατολισμούς και κατευθύνσεις κοπής. Οι Εικόνα 3.13a -f παρουσιάζουν τα αποτελέσματα MD σε διάφορα στάδια νανοκοπής για διαφορετικούς προσανατολισμούς και κατευθύνσεις κοπής (111, 110, 001, 110 211, 100). Για παράδειγμα για τον προσανατολισμό (111), οι κατευθύνσεις κοπής που χρησιμοποιήθηκαν είναι (110) και (211), για τον προσανατολισμό (110) είναι (110) και (011), και για τον προσανατολισμό (001) οι κατευθύνσεις είναι (110) και (100). Παρατηρείται ότι η φύση της παραμόρφωσης έμπροσθεν του εργαλείου, η κίνηση των μετατοπίσεων, η υποστρωματική παραμόρφωση και η πλευρική ροή του υλικού κατεργασίας εξαρτάται από τον προσανατολισμό και την κατεύθυνση της κοπής. Μπορεί να παρατηρηθεί η ελαστική επαναφορά κατά μήκος της κατεργασμένης επιφάνειας του υλικού κατεργασίας ποικίλλει για διαφορετικούς συνδυασμούς κρυσταλλογραφικού προσανατολισμού και κατευθύνσεων κοπής, επηρεάζοντας έτσι την ακεραιότητα της φινιρισμένης επιφάνειας. Για παράδειγμα, για κρυσταλλικό προσανατολισμό (110) και για κατεύθυνση κοπής (110), δημιουργούνται μετατοπίσεις κατά μήκος της κατεύθυνσης κοπής. Συνεπώς εμφανίζεται πολύ μικρή υποστρωματική παραμόρφωση. Εν αντιθέσει, για κρυσταλλικό προσανατολισμό (110) και κατεύθυνση κοπής (001), οι μετατοπίσεις δημιουργούνται κάθετα στην κατεύθυνση της κοπής. Η παραμόρφωση έμπροσθεν του εργαλείου οφείλεται περισσότερο σε συμπίεση παρά σε διάτμηση. Επίσης ενυπάρχει και σημαντική ποσότητα πλευρικής ροής λόγω της επίδρασης αυτής της συμπίεσης. Στην περίπτωση του προσανατολισμού (001) και των κατευθύνσεων (100), μπορούν να παρατηρηθούν εκτεταμένες μετατοπίσεις που κινούνται σε γωνία 45° σε σχέση με την κατεύθυνση κοπής, όπου εμφανίζεται τεράστια πλευρική ροή σε κάθε πλευρά του εργαλείου. Στην περίπτωση προσανατολισμού (111) και κατεύθυνσης (211), οι μετατοπίσεις πάλι κινούνται υπό γωνία 45° σε σχέση με την κατεύθυνση κοπής. Οι διαφορές στην κίνηση των μετατοπίσεων οδηγούν σε διακυμάνσεις στη φύση της πλαστικής παραμόρφωσης και επακόλουθα στις δυνάμεις, στην ειδική ενέργεια, στο λόγο δυνάμεων και στην υποστρωματική παραμόρφωση.

Όταν ένας κρύσταλλος αλουμινίου προσανατολίζεται στο επίπεδο (111), και κόβεται κατά την κατεύθυνση (110), οι μετατοπίσεις βρέθηκε ότι δημιουργούνται κατά μήκος της κατεύθυνσης κοπής. Συνεπώς, η επακόλουθη υποστρωματική παραμόρφωση καθώς ο κρύσταλλοι αναδιοργανώνονται χάρη στην ελαστική επαναφορά τους. Εν αντιθέσει, όταν ο κρύσταλλος προσανατολίστηκε στο επίπεδο (110) αλλά κόπηκε προς την κατεύθυνση (001), οι μετατοπίσεις δημιουργήθηκαν κανονικά προς την κατεύθυνση κοπής, ενώ η παραμόρφωση έμπροσθεν του εργαλείου βρέθηκε να περιλαμβάνει περισσότερο συμπίεση παρά διάτμηση. Στην

περίπτωση του επιπέδου (110) και κατεύθυνσης κοπής (110), οι μετατοπίσεις βρέθηκαν ότι είναι παράλληλες ή κάθετες στην κατεύθυνση κοπής. Εν αντιθέσει, για την περίπτωση προσανατολισμού (001) και κατεύθυνσης (100), βρέθηκαν εκτεταμένες μετατοπίσεις σε $\sim 45^\circ$ προς την κατεύθυνση κοπής. Παρόμοια, για περίπτωση προσανατολισμού (111) και κατεύθυνσης κοπής (211), παρατηρήθηκαν κινήσεις μετατοπίσεων σε $\sim 60^\circ$ προς την κατεύθυνση κοπής.

Η Εικόνα 3.14a-c δείχνει σχηματικά τρεις τρόπους πλαστικής παραμόρφωσης στη ζώνη διάτμησης της νανοκοπής.



Εικόνα 3.14: Σχηματική απεικόνιση τριών τρόπων πλαστικής παραμόρφωσης στη ζώνη διάτμησης της νανοκοπής ενός μονοκρυστάλλου σε διαφορετικούς κρυσταλλικούς προσανατολισμούς και κατευθύνσεις κοπής (Komanduri et al. 2001)

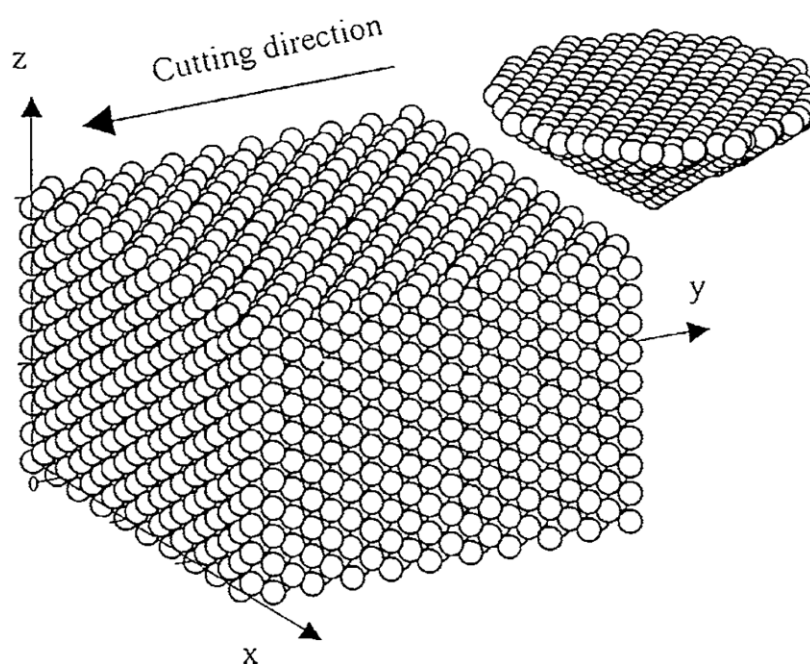
Στην Εικόνα 3.14a παρουσιάζεται η περίπτωση της διαδικασίας σχηματισμού αποβλίττου, στην οποία ο προσανατολισμός του επιπέδου διάτμησης είναι παρόμοιος με αυτόν που χρησιμοποιείται συνήθως στη συμβατική κατεργασία

πολυκρυσταλλικών υλικών και συμβατικά βάθη κοπής. Στην περίπτωση προσανατολισμού (001) και κατεύθυνσης κοπής (100), η διαδικασία σχηματισμού του αποβλίττου και ο προσανατολισμός της γωνίας διάτμησης βρέθηκαν παρόμοια με τη συμβατική διάτμηση μπροστά από το υλικό του εργαλείου όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.14a. Ως εκ τούτου, συνίσταται να χρησιμοποιείται ο συνδυασμός αυτός για την προσομοίωση της κατεργασίας, εάν πρέπει να επιλεγεί μόνο ένας προσανατολισμός. Όμως, σε ορισμένους άλλους προσανατολισμούς κρυσταλλικού προσανατολισμού και κατεύθυνσης κοπής, οι γωνίες διάτμησης βρέθηκαν πολύ μεγαλύτερες από 45° . Για παράδειγμα, στην περίπτωση του προσανατολισμού (110) και της κατεύθυνσης (001), βρέθηκε ότι παράγονται μετατοπίσεις σε θετικές γωνίες ως προς την κατεύθυνση της κοπής, δηλ. το υλικό παραμορφώνεται περιφερειακά της κατεύθυνσης κοπής. Κατά συνέπεια, η γωνία διάτμησης είναι μεγαλύτερη από 60° . Αυτός ο τρόπος παραγωγής μετατοπίσεων και πλαστικής παραμόρφωσης της ζώνης διάτμησης φαίνεται σχηματικά στην Εικόνα 3.14b. Αντιθέτως, όταν η κατεργασία λαμβάνει χώρα κατά τον προσανατολισμό (001) και την κατεύθυνση (100), βρέθηκε ότι οι μετατοπίσεις παράγονται παράλληλα προς την κατεύθυνση της κοπής. Κατά συνέπεια, το υλικό παραμορφώνεται παράλληλα προς την κατεύθυνση κοπής και η γωνία διάτμησης είναι πολύ μικρότερη από τις 45° . Αυτός ο τρόπος παραγωγής μετατοπίσεων και πλαστικής παραμόρφωσης της ζώνης διάτμησης φαίνεται σχηματικά στην Εικόνα 3.14c. Αυτές οι παραλλαγές στον τρόπο παραμόρφωσης της ζώνης διάτμησης δεν ήταν ανιχνεύσιμες παλαιότερα, καθώς οι περισσότερες δοκιμές πραγματοποιούνταν σε πολυκρυσταλλικό αλουμίνιο. Παρόλο που ορισμένοι ερευνητές ανέφεραν γωνίες διάτμησης $>45^\circ$, δεν μπορούσε να δοθεί καμία εξήγηση για τη συμπεριφορά μονοκρυσταλλικών υλικών. Αυτό οφείλεται στη δυσκολία της επί τόπου παρατήρησης της κοπής με άλλες πειραματικές τεχνικές, ενώ η προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής επιτρέπει την επί τόπου παρατήρηση.

Όταν ένας κρύσταλλος αλουμινίου προσανατολιζόταν στο επίπεδο (111) και η κοπή ήταν στην κατεύθυνση (110), βρέθηκε ότι οι μετατοπίσεις παράγονται κατά μήκος της κατεύθυνσης κοπής. Κατά συνέπεια, υπήρχε ελάχιστη παραμόρφωση υποστρώματος καθώς οι κρύσταλλοι αναδιοργανώνονται λόγω της ελαστικής επαναφοράς. Αντιθέτως, όταν ο κρύσταλλος προσανατολίζεται στο επίπεδο (110) αλλά η κοπή στην κατεύθυνση (001), οι μετατοπίσεις παράγονται κάθετα στην κατεύθυνση κοπής. Άρα, η παραμόρφωση μπροστά από το εργαλείο βρέθηκε αρκετά ασυνήθιστη, καθώς περιλάμβανε περισσότερο συμπίεση παρά διάτμηση. Υπήρχε επίσης σημαντική πλευρική ροή, λόγω αυτού του φαινομένου συμπίεσης. Στην περίπτωση του επιπέδου (110) και της κατεύθυνσης κοπής (110), οι μετατοπίσεις ήταν παράλληλες καθώς και περιφερειακές της κατεύθυνσης κοπής. Αντίθετα, για την περίπτωση του προσανατολισμού (001) και της κατεύθυνσης κοπής (100), παρουσιάστηκε εκτεταμένη μετατόπιση στις 45° ως προς την κατεύθυνση κοπής. Παρόμοια, στην περίπτωση προσανατολισμού (111) και κατεύθυνσης κοπής (211), η κίνηση των μετατοπίσεων παρατηρήθηκε στις 60° ως προς την κατεύθυνση κοπής.

3.4 Μελέτη των Fang et al. (2000) σε 3D μοντέλο νανοκοπής

Οι Fang et al. (2000) θεώρησαν ένα υλικό κατεργασίας από μονοκρυσταλλικό χαλκό και εργαλείο άκαμπτου διαμαντιού, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.15. Οι περιοδικές οριακές συνθήκες εφαρμόζονται κατά τον εγκάρσιο άξονα (x) και τα τρία στρώματα ατόμων είναι σταθερά στο χώρο στην αριστερή και στην κάτω πλευρά. Επίσης η δύναμη που ασκείται σε ένα ανεξάρτητο άτομο βρίσκεται θεωρώντας τις δυνάμεις που ασκούνται από τα παρακείμενα άτομα.

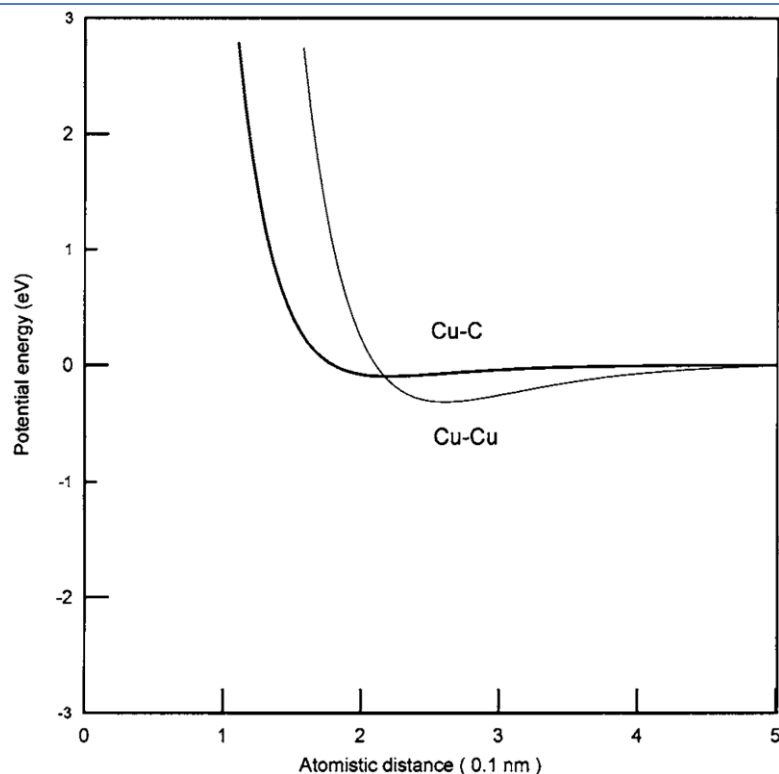


Εικόνα 3.15: Μοντέλο προσομοίωσης ΜΔ (Fang et al. 2000)

Το σχήμα των συναρτήσεων δυναμικού και των σχετικών παραμέτρων της φαίνονται στην Εικόνα 3.16.

Πίνακας 3.1: Παράμετροι δυναμικών Morse (Fang et al. 2000)

Παράμετρος	Cu-Cu	Cu-C
D(eV)	0.3429	0.100
A(10^{10} m^{-1})	1.3588	1.700
$r_0(10^{-10} \text{ m})$	2.6260	0.220



Εικόνα 3.16: Σχήμα διαφόρων τύπων δυναμικού Morse (Maekawa et al. 1995)

Το δυναμικό Morse επιλέχθηκε στην παρούσα μελέτη των Fang et al. (2000) γιατί είναι αρκετά απλό, είναι εύχρηστο σε υπολογιστικές εφαρμογές και είχε χρησιμοποιηθεί επιτυχώς και άλλες παρόμοιες έρευνες.

Οι είσοδοι του προγράμματος προσομοίωσης είναι η ταχύτητα κοπής και ο χρόνος ολοκλήρωσης, ενώ η αρχική μετατόπιση των ατόμων του υλικού κατεργασίας δημιουργείται από το κρυσταλλικό πλέγμα του χαλκού διάταξης FCC. Οι αρχικές ταχύτητες ακολουθούν κατανομή Maxwell. Οι υπολογισμοί των δυνάμεων μεταξύ των ατόμων λαμβάνει υπόψη και τις δυνάμεις που ασκούνται από τα παρακείμενα άτομα σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης. Ύστερα από 10 με 20 υπολογισμούς, η θέση του ατόμου i έχει μεταβληθεί σημαντικά.

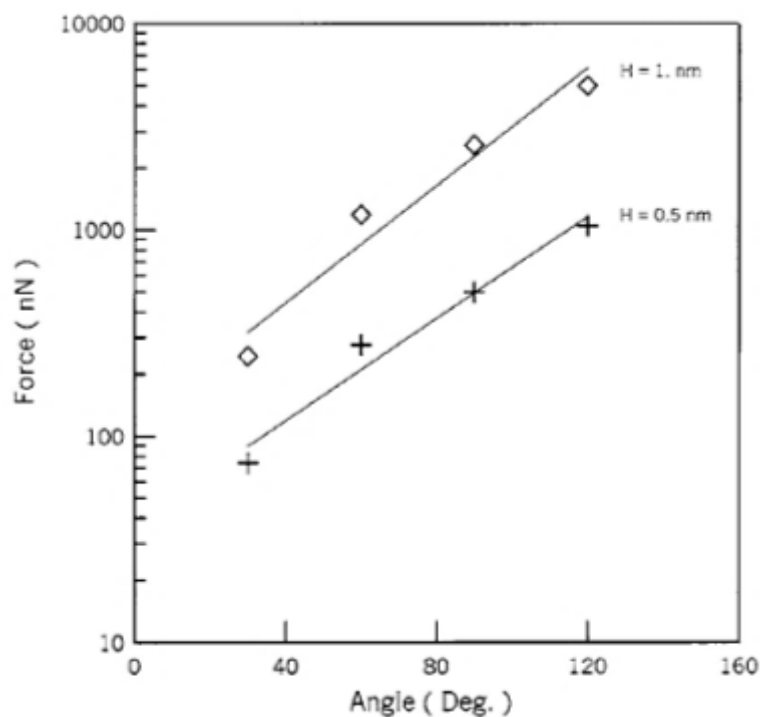
3.4.1 Αποτελέσματα προσομοίωσης ΜΔ

Η κατεύθυνση κοπής είναι παράλληλη με την επιφάνεια του υλικού κατεργασίας κατά τον άξονα y και οι συντεταγμένες επελέγησαν για δεξιόστροφο σύστημα συντεταγμένων. Τα άτομα στο επίπεδο $-xz$ αντιστοιχούν στο κρυσταλλικό επίπεδο (111) του χαλκού. Οι προσομοιώσεις χρησιμοποίησαν βάθη ατόμων 20, 40 και 60 στρωμάτων ατόμων. Από τις προσομοιώσεις φάνηκε ότι το φαινόμενο κλίμακας είναι αποδεκτό για 20 στρώματα ατόμων. Συνολικά θεωρήθηκαν 4000 άτομα με 200 άτομα ανά στρώμα, και 20 άτομα βάθος για μείωση του απαιτούμενου υπολογιστικού χρόνου. Το χρονικό βήμα ορίστηκε 0,5 fs. Επίσης η αρχική

Θερμοκρασία του τεμαχίου θεωρούνται οι 300K. Η μέση απόσταση μεταξύ δυο γειτονικών ατόμων μετρήθηκε στα 0,261 nm, που είναι κοντά στη θεωρητική τιμή για την απόσταση των ατόμων χαλκού (0,2556 nm).

3.4.2 Επίδραση του βάθους κοπής και της γωνίας κοπής του εργαλείου

Προσομοιώσεις ΜΔ διεξήχθησαν για γωνίες κοπής 30°, 60°, 90° και 120° και για βάθη κοπής 0,5 και 1 nm, όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.17.



Εικόνα 3.17: Συσχέτιση μεταξύ της γωνίας κοπής του εργαλείου και της δύναμης για διαφορετικά βάθη κοπής (Fang et al. 2000)

Η γεωμετρία του εργαλείου κοπής έχει απλοποιηθεί σε έναν αιχμηρό κώνο, ενώ αμελείται η επίδραση της κυκλικότητας της άκρης. Σε λογαριθμική κλίμακα, παρατηρείται η γραμμική σχέση μεταξύ της δύναμης και της γωνίας κοπής του εργαλείου. Η δύναμη μειώνεται για μικρότερες γωνίες κοπής του εργαλείου. Επίσης για το ίδιο βάθος κοπής, μια μικρή γωνία κοπής εργαλείου απαιτεί μικρότερη δύναμη για να υπερνικήσει τις διατομικές δυνάμεις μεταξύ του υλικού κατεργασίας και του εργαλείου. Επιπροσθέτως, η δύναμη κοπής αυξάνεται με αύξηση του βάθους κοπής.

3.5 Ελάχιστο πάχος αποβλίττου

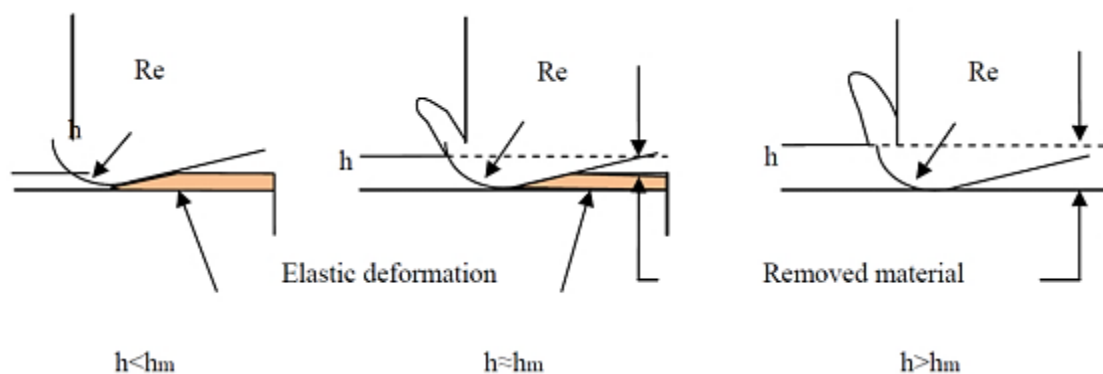
Σύμφωνα με το νόμο του Moore, προβλέπεται ότι το πλήθος των τρανζίστορ που ενσωματώνονται σε ένα ολοκληρωμένο κύκλωμα υπολογιστή διπλασιάζεται κάθε 24 μήνες. Η αρχή αυτή αποτελούσε οδηγό για την εξέλιξη του χώρου των υπολογιστών, αλλά σταδιακά φτάνει στο όριό της. Αυτό οφείλεται σε περιορισμούς που τίθενται από τους νόμους της φυσικής. Παρομοίως, στον τομέα των κατεργασιών, ο Taniguchi προέβλεψε μια αυξανόμενη εφικτή ακρίβεια κατεργασίας ως συνάρτηση του χρόνου. Το ερώτημα τίθεται στο αν υπάρχει ένα όριο στην ακρίβεια των κατεργασιών αποβολής υλικού.

Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής έχουν χρησιμοποιηθεί για τη διερεύνηση των ορίων της νανοκατεργασίας ενός τεμαχίου χαλκού με εργαλείο διαμαντιού. Από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων παρατηρήθηκε ότι για κάθε προσομοίωση, καθώς το βάθος κοπής μειώνεται, εμφανίζεται μια τιμή του βάθους κοπής, στην οποία σταματά να δημιουργείται απόβλιττο. Με τον τρόπο αυτό εμφανίζεται το ελάχιστο πάχος αποβλίττου (Ε.Π.Α.) (Μαρκόπουλος 2004)

- Ορισμός Ε.Π.Α: το ελάχιστο πάχος αποβλίττου που μπορεί να απομακρυνθεί σταθερά από την κατεργασμένη επιφάνεια, για δεδομένη ακτίνα καμπυλότητας

Αποτελεί το ελάχιστο εφικτό όριο κάτω από το οποίο δε μπορεί να σχηματιστεί απόβλιττο. Πρέπει να είναι γνωστό για την κατεργασία με συγκεκριμένο συνδυασμό τεμαχίου-εργαλείου, ενώ αποτελεί μέτρο της ακρίβειας της κατεργασίας που μπορεί να επιτευχθεί για δεδομένες παραμέτρους. (Μαρκόπουλος 2004)

Κατά τη διαδικασία της κοπής οι περιπτώσεις που μπορούν να εμφανιστούν ανάλογα με το βάθος κοπής είναι οι ακόλουθες:



Εικόνα 3.18: Περιπτώσεις κοπής που εμφανίζεται απόβλιττο αναλόγως τας βάθος κοπής (Oluwajobi και Chen 2011)

- $h < h_m \rightarrow$ μόνο ελαστική επαναφορά χωρίς αφαίρεση υλικού
Το υλικό ωθείται και παραμορφώνεται, αντί να υφίσταται διάτμηση.
- $h = h_m \rightarrow$ δημιουργία αποβλίττου λόγω διάτμησης και με μικρή ελαστική επαναφορά
Το πραγματικό βάθος κοπής είναι μικρότερο του επιθυμητού.
- $h > h_m \rightarrow$ ελάχιστη ελαστική επαναφορά
Όλο το βάθος κοπής απομακρύνεται ως απόβλιττο.

3.5.1 Παράγοντες που επηρεάζουν το ΕΠΑ

1. ακτίνα καμπυλότητας της κοπτικής ακμής
 2. αναλογία μεταξύ πάχους αποβλίττου και ακτίνας κοπτικής ακμής
 3. ιδιότητες του υλικού κατεργασίας
 4. τριβή μεταξύ εργαλείου και υλικού κατεργασίας
 5. ταχύτητα κοπής
- Πειραματικός προσδιορισμός ή μέσω αριθμητικής προσομοίωσης
 - Δεν έχει συγκεκριμένη τιμή, αλλά εύρος (5%-40% της ακτίνας καμπυλότητας ανάλογα με το υλικό) (Μαρκόπουλος 2004)

3.6 Μελέτη προσομοίωσης ΜΔ των Oluwajobi και Chen (2011) για το όριο του ΕΠΑ

Στην προσομοίωση ΜΔ που πραγματοποίησαν οι Oluwajobi και Chen (2011) χρησιμοποιήθηκε τεμάχιο από χαλκό το οποίο υφίσταται κατεργασία με εργαλείο διαμαντιού. Θεωρήθηκε ότι υπάρχει αλληλεπίδραση στη διεπιφάνεια μεταξύ εργαλείου-τεμαχίου, η οποία επηρεάζει ορισμένα στρώματα ατόμων. Η διεπιφάνεια στο επίπεδο αυτό θεωρείται ως αλληλεπιδράσεις διακριτών ατόμων, οι οποίες διέπονται από συγκεκριμένες συναρτήσεις διατομικών δυναμικών.

Το τεμάχιο αποτελείται από 43240 άτομα σε FCC διάταξη πλέγματος χαλκού και έχει διαστάσεις $8,6 \times 8,2 \times 7,1$ nm, στις x, y, z κατευθύνσεις, αντίστοιχα. Περιλαμβάνει τρία είδη ατόμων, δηλ: οριακά άτομα, νευτώνια άτομα και θερμοστατικά άτομα. Η μεταβολή του βάθους κοπής ήταν μεταξύ 0,01 nm και 0,5 nm. Για την περιγραφή της αλληλεπίδρασης των ατόμων Cu-Cu του τεμαχίου, χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό EAM, οι αλληλεπιδράσεις Cu-C (τεμαχίου-επιφάνειας εργαλείου)

χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Lennard-Jones ενώ το εργαλείο προσομοιώθηκε ως μη άκαμπτο και οι αλληλεπιδράσεις των ατόμων του (C-C) προσομοιώθηκαν μέσω του δυναμικού Tersoff.

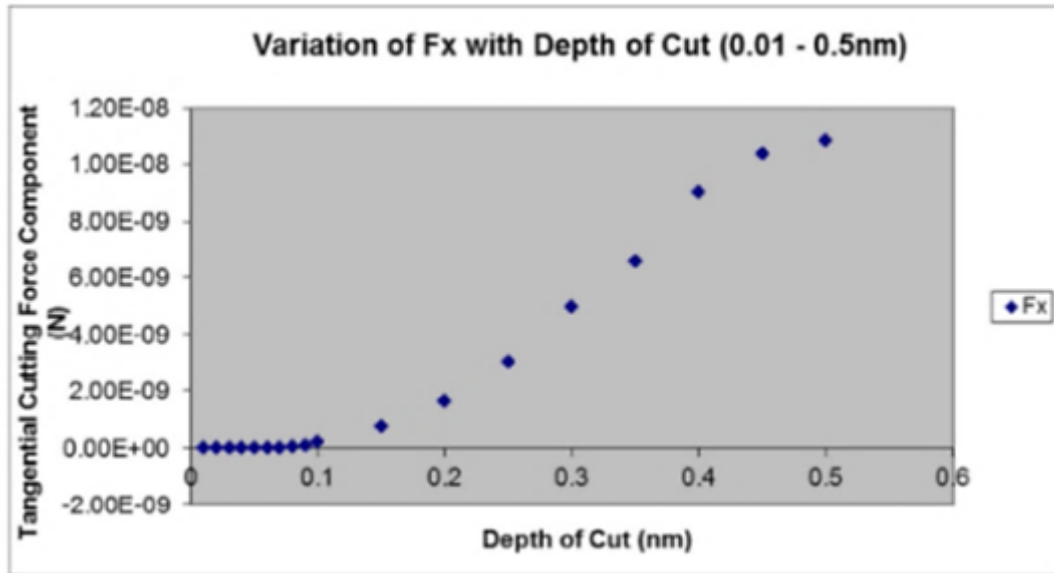
Οι υπόλοιπες παράμετροι της προσομοίωσης είναι οι ακόλουθες: Θερμοκρασία όγκου υλικού 293 K, κατεύθυνση κοπής [100] (δηλ. x κατεύθυνση), ταχύτητα κοπής 150 m/s, γωνία κοπής 0° γωνία ελευθερίας μικρότερη από 3° , χρονικό βήμα προσομοίωσης 0,3 fs. Το εργαλείο θεωρείται αιχμηρό με ακτίνα καμπυλότητας ορισμένων ατόμων (6 angstroms).

Από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης προέκυψε ότι για βάθος κοπής μεταξύ 0,01 nm και 0,25 nm, παρατηρούνται φαινόμενα τριβής. Τα άτομα υφίστανται ελαστική παραμόρφωση και επιστρέφουν στις αρχικές τους θέσεις μετά το πέρασμα του εργαλείου. Καθώς το βάθος κοπής υπερβαίνει τα 0,25 nm, εμφανίζεται η άρωση, όπου τα άτομα του τεμαχίου μετατοπίζονται μόνιμα από τις θέσεις τους κατά τη διάρκεια του περάσματος του εργαλείου. Το φαινόμενο της άρωσης παρατηρείται με τον ίδιο τρόπο, καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται βαθμιαία ως τα 0,5 nm, αλλά ο όγκος και τα στρώματα των ατόμων που μετατοπίζεται αυξάνεται αντίστοιχα. (Πίνακας 3.2) Ο λόγος των δυνάμεων F_x/F_z για το αντίστοιχο βάθος κοπής αυξάνεται καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται.

Πίνακας 3.2: Επισκόπηση της αποβολής υλικού με μεταβολή του βάθους κοπής Oluwajobi και Chen (2011)

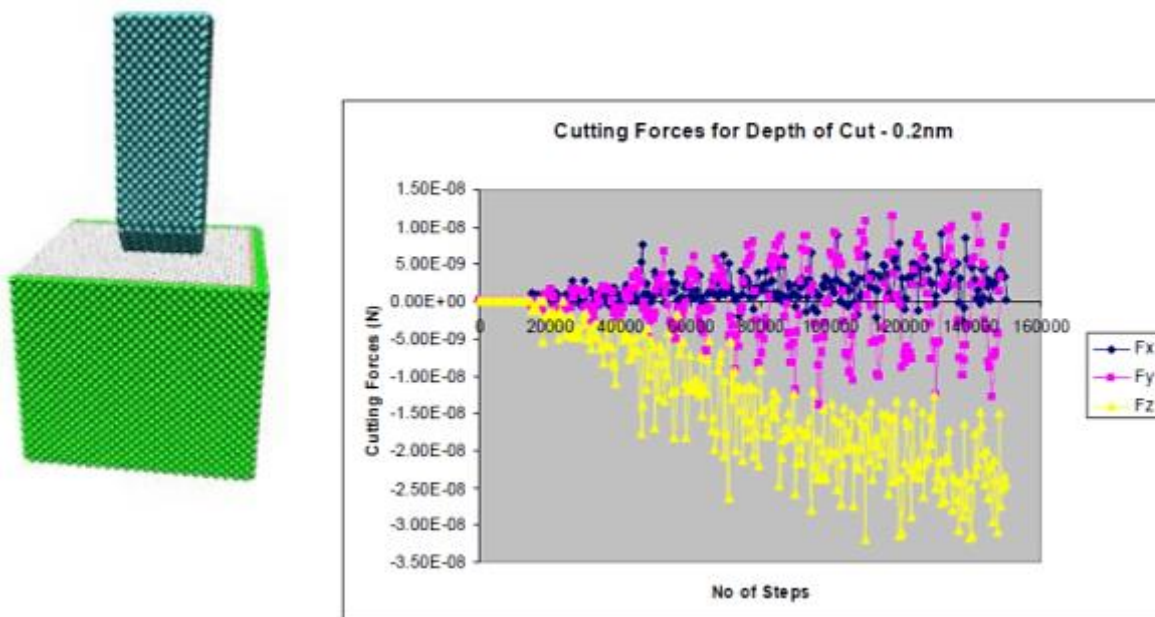
Βάθος κοπής [nm]	Φαινόμενα σώρευσης	Φαινόμενο αποβολής υλικού
0,01-0,09	Κανένα	Τριβή/Ελαστική παραμόρφωση
0,10	Κανένα	Τριβή/Ελαστική παραμόρφωση
0,15	Κανένα	Τριβή/Ελαστική παραμόρφωση
0,20	Κανένα	Τριβή/Ελαστική παραμόρφωση
0,25	Κανένα	Τριβή/Ελαστική παραμόρφωση
0,30	1 στρώμα ατόμων	Έναρξη άρωσης
0,35	1 στρώμα ατόμων	Άρωση
0,40	2 στρώματα ατόμων	Άρωση
0,45	2 στρώματα ατόμων	Άρωση
0,50	2 στρώματα ατόμων	Άρωση

Η μεταβολή της εφαπτομενικής συνιστώσας της δύναμης κοπής F_x με το βάθος κοπής παρουσιάζεται στην Εικόνα 3.19. Η δύναμη F_x για βάθος κοπής μεταξύ 0,01 nm ως 0,1 nm είναι ασήμαντη, καθώς το εργαλείο οριακά έρχεται σε επαφή με το τεμάχιο και ακόμη και τότε ωθεί τα άτομα κάθετα κατά την κατεύθυνση z.

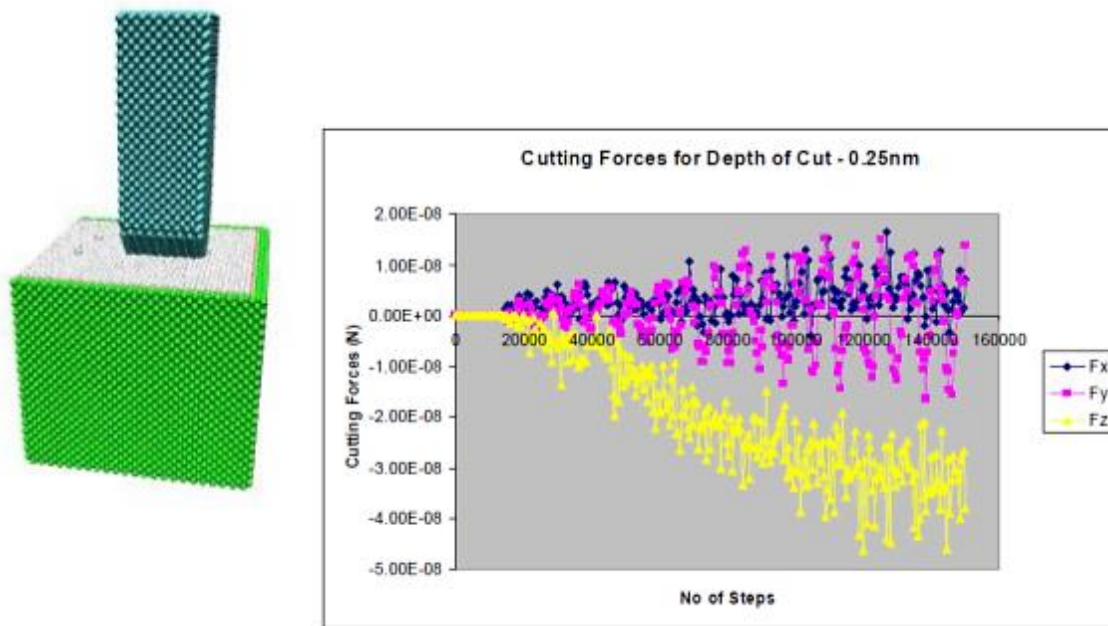


Εικόνα 3.19: Μεταβολή τα εφαπτομενικής δύναμης κοπής με το βάθος κοπής (0.01 nm- 0.5 nm) (Oluwajobi και Chen 2011)

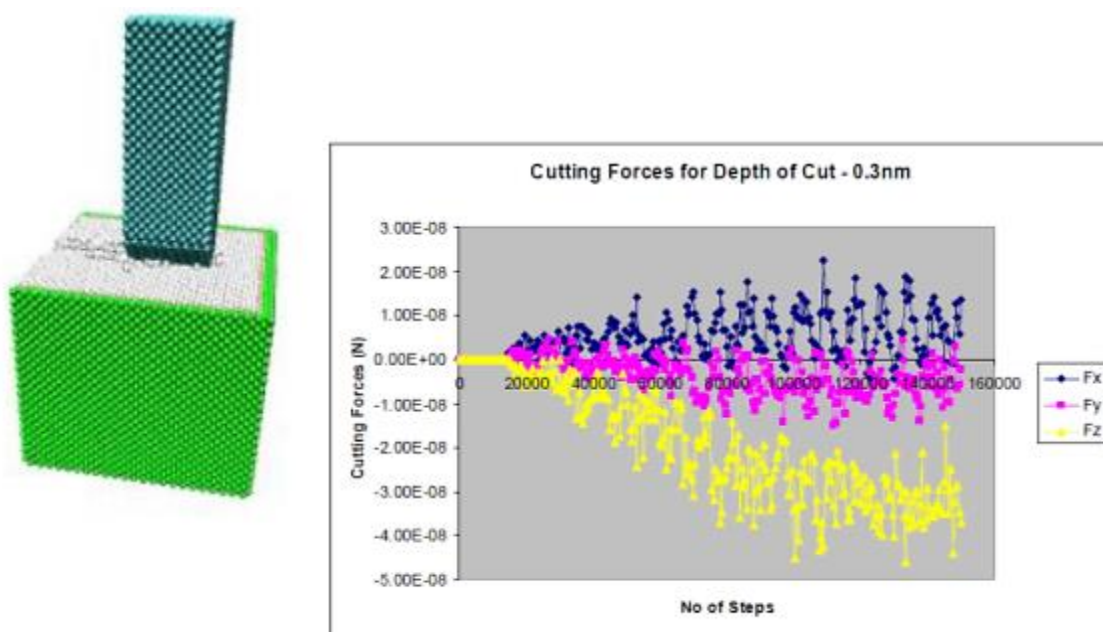
Καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται και το εργαλείο εισέρχεται περισσότερο στο τεμάχιο επηρεάζοντας περισσότερα άτομα, η δύναμη F_x αυξάνεται. Η εφαπτομενική, περιφερειακή και η κάθετη συνιστώσα της δύναμης κοπής και αντίστοιχες προσομοιώσεις για βάθη κοπής 0,2 nm, 0,25 nm και 0,3 nm παρουσιάζονται ακολούθως (Εικόνα 3.20,Εικόνα 3.21,Εικόνα 3.22).



Εικόνα 3.20: Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για βάθος κοπής 0,2 nm (Oluwajobi και Chen 2011)



Εικόνα 3.21: Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για βάθος κοπής 0,25 nm (Oluwajobi και Chen 2011)



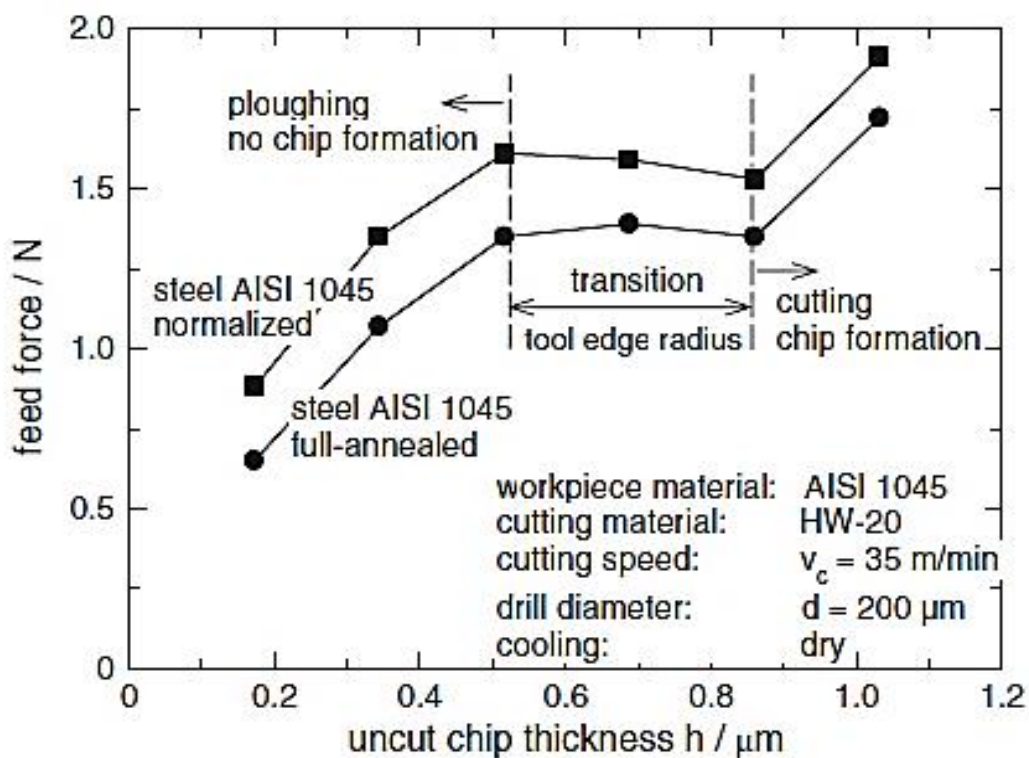
Εικόνα 3.22: Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για βάθος κοπής 0,3 nm (Oluwajobi και Chen 2011)

Από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης ΜΔ δεν παρατηρήθηκε αποβολή υλικού για βάθη κοπής μεταξύ 0,01 nm -0,25 nm. Για βάθος κοπής 0,3 nm, ένα στρώμα ατόμων υφίσταται άρωση με το πέρασμα του εργαλείου. Για βάθος κοπής μικρότερο του 0.3 nm, το μόνο φαινόμενο που παρατηρήθηκε ήταν η πίεση των

ατόμων από το εργαλείο. Το βάθος κοπής 0.3 μm είναι περίπου ίσο με τη διάμετρο των ατόμων του τεμαχίου (άτομα χαλκού). Συνεπώς, από τη συγκεκριμένη προσομοίωση των Oluwajobi και Chen, μπορεί να εξαχθεί το συμπέρασμα ότι το όριο της κατεργασίας μπορεί να είναι η αποβολή του ατόμου του τεμαχίου. Αυτό είναι λογικό, διότι ενστικτωδώς αντιλαμβάνεται κανείς ότι το θεωρητικό όριο ακρίβειας της κατεργασίας θα έπρεπε να είναι το μέγεθος του ατόμου. Επίσης, οι σχετικές εκτιμήσεις των δυνάμεων κοπής του εργαλείου είναι χρήσιμες για ως αναφορά για το σχεδιασμό μηχανών νανοκοπής (Oluwajobi και Chen 2011).

Βιβλιογραφικές μελέτες σε σχέση με το ΕΠΑ

3.7 Συσχέτιση δύναμης πρόωσης με το ελάχιστο πάχος αποβλίττου



Εικόνα 3.23: Συσχέτιση της δύναμης πρόωσης με το ελάχιστο πάχος απαραμόρφωτου αποβλίττου h (μm)

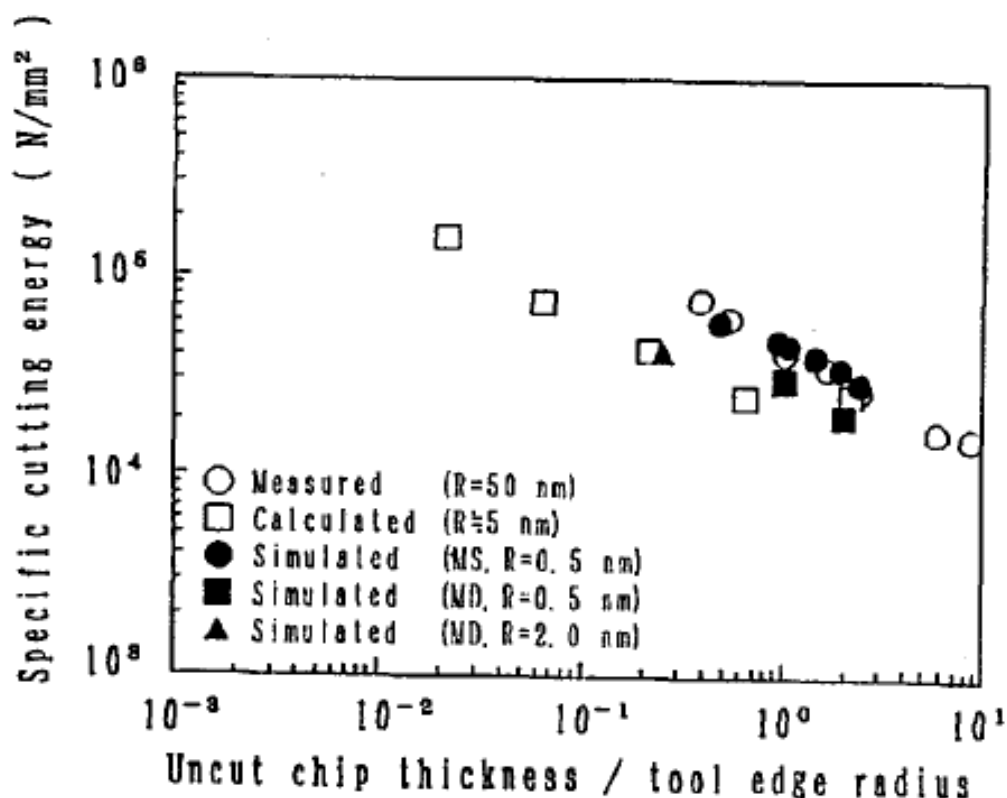
Στην Εικόνα 3.23 παρουσιάζεται η εξάρτηση της δύναμης πρόωσης με το πάχος του απαραμόρφωτου αποβλίττου για δράπανο διαμέτρου $d=200 \mu\text{m}$ υπό σταθερή ταχύτητα κοπής $V_c = 35 \text{ m/min}$. Οι μετρούμενες μέσες τιμές της δύναμης πρόωσης είναι υψηλότερες κατά τη μικροδιάτρηση κανονικοποιημένου χάλυβα, σε σχέση με τον πλήρως ανοπτημένο, λόγω της διαφοράς στην αντοχή τους, όπως φάνηκε και

στην Εικόνα 3.23. Όμοια με τη συμβατική κατεργασία, η δύναμη πρόωσης στη μικροδιάτρηση μειώνεται με μείωση του πάχους απαραμόρφωτου αποβλίττου. Παρόλα αυτά, όταν το πάχος είναι ίδιας τάξεως με την ακτίνας καμπυλότητας του εργαλείου, η δύναμη που προκαλείται λόγω της άρωσης ελέγχει τη διαδικασία της κοπής.

- Όσο μεγαλύτερη είναι η ακτίνα καμπυλότητας, τόσο μεγαλύτερη είναι η δύναμη κοπής, λόγω εμφάνισης άρωσης (Shimada et al. 1992)
- Η σχέση της δύναμης κοπής ως προς το ελάχιστο πάχος αποβλίττου είναι γραμμική

3.7.1 Συσχέτιση του φαινομένου κλίμακας με το ελάχιστο πάχος αποβλίττου

Η μικροκοπή χαρακτηρίζεται από πολύ μικρές ποσότητες υλικού που αφαιρούνται από την επιφάνεια, όπου το πάχος του αποβλίττου κυμαίνεται από μερικά μικρόμετρα μέχρι μερικές εκατοντάδες μικρόμετρα. Σε αυτά τα μεγέθη αφαίρεσης υλικού, αναμένεται να κάνει την εμφάνισή του το φαινόμενο κλίμακας, γνωστό στη βιβλιογραφία και ως “size effect”. Στις κατεργασίες, το φαινόμενο κλίμακας τυπικά χαρακτηρίζεται από μια μη γραμμική αύξηση της ειδικής ενέργειας ή ειδικής δύναμης όσο το ελάχιστο πάχος αποβλίττου μειώνεται.



Εικόνα 3.24: Συσχέτιση της ειδικής δύναμης κοπής ως προς το λόγο του πάχους αποβλίττου προς την ακτίνα καμπυλότητας του εργαλείου (Shimada S. et al.1992)

Στην Εικόνα 3.24 παρατηρούμε ότι για μικρότερο πάχος αποβλίττου αναμένεται να δαπανηθεί σημαντική ενέργεια για την παραμόρφωση γύρω από την ακτίνα καμπυλότητας στο υλικό κατεργασίας (Shimada et al.1992).

3.7.2 Συσχέτιση του ΕΠΑ με το φαινόμενο κλίμακας

Οι προσπάθειες που έχουν γίνει για να εξηγήσουν και να προβλέψουν το φαινόμενο κλίμακας είναι αρκετές.

Οι Larsen-Basse και Oxley (1984) απέδωσαν το φαινόμενο κλίμακας στην ευαισθησία του ρυθμού παραμόρφωσης του κατεργαζόμενου υλικού. Η επιχειρηματολογία τους βασίζεται σε εμπειρικά δεδομένα από πειράματα σε απλό ανθρακούχο χάλυβα, τα οποία δείχνουν ότι ο μέγιστος ρυθμός παραμόρφωσης στην κύρια ζώνη διάτμησης είναι αντιστρόφως ανάλογος με το πάχος απαραμόρφωτου αποβλίττου. Ως εκ τούτου, με αύξηση του ελάχιστου πάχους απαραμόρφωτου αποβλίττου, η παραμόρφωση στη ζώνη διάτμησης θα παραμένει αμετάβλητη, αλλά ο ρυθμός παραμόρφωσης θα αυξηθεί αντιστρόφως ανάλογα σε σχέση με το ελάχιστο πάχος απαραμόρφωτου αποβλίττου. Για τα περισσότερα μέταλλα, αύξηση στο ρυθμό παραμόρφωσης προκαλεί αύξηση της τάσης με την ευαισθησία του ρυθμού παραμόρφωσης της τάσης να αυξάνεται με ταχείς ρυθμούς

στην περιοχή όπου εκτελείται η κατεργασία. Κατά συνέπεια, αυτό θα μπορούσε να εξηγήσει την αύξηση της ειδικής ενέργειας/δύναμης κοπής με τη μείωση του ελάχιστου πάχους απαραμόρφωτου αποβλίττου.

Οι Nakayama και Tamura (1968) ανέλυσαν το φαινόμενο κλίμακας μέσω πειραμάτων μικροκοπής που εκτελέστηκαν σε πολύ χαμηλή ταχύτητα κοπής (0,1 m/min) ώστε να ελαχιστοποιηθεί η θερμοκρασία και οι επιδράσεις του ρυθμού παραμόρφωσης. Παρατήρησαν λοιπόν πλαστική διαρροή στο στρώμα κάτω από την επιφάνεια του τεμαχίου και ανέφεραν ότι η συμβολή του φαινομένου κλίμακας γίνεται σημαντική με μείωση του ελάχιστου πάχους κοπής. Η κύρια αιτία αυτής της πλαστικής διαρροής θεωρείται ότι είναι η επέκταση της ζώνης διάτμησης κάτω από την κατεργαζόμενη επιφάνεια. Ως εκ τούτου, απέδωσαν το φαινόμενο κλίμακας στο γεγονός ότι η ενέργεια που καταναλώνεται στην πλαστική διαρροή στο στρώμα κάτω από την επιφάνεια δεν είναι ανάλογη με το ελάχιστο πάχος αποβλίττου και στη μείωση της γωνίας διάτμησης με τη μείωση του πάχους του ελάχιστου πάχους κοπής.

Ο Lucca μελέτησε το ρόλο της πραγματικής αρνητικής γωνίας αποβλίττου που προκαλείται από την ακτίνα καμπυλότητας, όταν η τελευταία γίνεται συγκρίσιμη με το ελάχιστο πάχος αποβλίττου. Όσο το ελάχιστο πάχος αποβλίττου μειώνεται, παρατηρείται περιστροφή του διανύσματος της συνολικής δύναμης κάτω από το τεμάχιο. Η δύναμη άπωσης γίνεται η κύρια συνιστώσα κάτω από ένα ορισμένο ελάχιστο πάχος αποβλίττου. Ανέφερε ότι η διαδικασία μπορεί να θεωρηθεί ως μετάβαση από κύρια διαδικασία κοπής σε άρωση-ολίσθηση, όταν το ελάχιστο πάχος αποβλίττου μειώνεται.

Παρομοίως, οι Armarego και Brown (1962) ανέφεραν ότι η αύξηση της ειδικής δύναμης κοπής με μείωση του ελάχιστου πάχους αποβλίττου ήταν λόγω της μεγαλύτερης σχετικής συμβολής της δύναμης άρωσης που προκύπτει από την τριβή και την άρωση, που συνδέονται με την αφαίρεση υλικού από ένα αμβλύ εργαλείο.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: Περιγραφή του κώδικα προσομοιώσεων νανοκοπής

4.1 Εισαγωγή

Στο παρόν κεφάλαιο θα αναλυθεί ο βασικός κώδικας πάνω στον οποίο έγιναν οι προσθήκες για τη μεταβολή της γωνίας κοπής, του βάθους κοπής, αλλά και την ακτίνα καμπυλότητας του κοπτικού εργαλείου. Στα πλαίσια του τροποποιημένου κώδικα, θα πραγματοποιηθούν προσομοιώσεις της νανοκοπής με τη μεταβολή συγκεκριμένων παραμέτρων και εξαγωγή των επιθυμητών χαρακτηριστικών της κοπής σε κάθε περίπτωση. Εξάλλου στόχος της παρούσας διπλωματικής είναι η μελέτη της επίδρασης των εν λόγω παραμέτρων στο σχηματισμό αποβλίττου και γενικότερα στο τελικό αποτέλεσμα της νανοκοπής. Επίσης τα αποτελέσματα που προκύπτουν από κάθε προσομοίωση θα αξιολογηθούν και θα μελετηθεί η επίδρασή των διαφόρων παραμέτρων στην εξέλιξη της κοπής. Οι προσομοιώσεις έγιναν με το υπολογιστικό πακέτο Matlab R2011b.

4.2 Ο αλγόριθμος και τα κύρια μέρη του

Ο κώδικας έχει δομηθεί με βάση τη φιλοσοφία της Μοριακής Δυναμικής, η οποία στηρίζεται στην επαναληπτική ολοκλήρωση των εξισώσεων κίνησης του Newton. Τα άτομα στα οποία αναφέρονται οι εξισώσεις αυτές ονομάζονται νευτώνια άτομα. Η αριθμητική ολοκλήρωση των εξισώσεων αυτών θα γίνει με τη μέθοδο των βατραχοδιασκελισμών .

Αρχικά γίνεται ο πρώτος ορισμός των χαρακτηριστικών του συστήματος (στάδιο αρχικοποίησης). Στη συγκεκριμένη περίπτωση τα χαρακτηριστικά που μας ενδιαφέρουν είναι το πλήθος των ατόμων που απαρτίζουν το προς κατεργασία τεμάχιο, η διάταξή τους και οι αρχικές θέσεις που έχουν κατά την έναρξη της προσομοίωσης. Το πλήθος των ατόμων που απαρτίζουν το τεμάχιο επιλέγεται ίσο με 800, καθώς η τιμή αυτή θεωρείται αποδεκτή και ικανοποιητική για παρόμοιες προσομοιώσεις. Η διάταξη επιλέγεται βάσει του υλικού, το οποίο είναι ο χαλκός με δομή fcc. Πέρα από τη θέση, μας ενδιαφέρουν και οι αρχικές ταχύτητες των ατόμων του τεμαχίου κατά την έναρξη της προσομοίωσης.

Τα ίδια στοιχεία μας ενδιαφέρουν και για το εργαλείο, και ορίζονται πάλι βάσει του υλικού. Το υλικό του εργαλείου είναι το μονοκρυσταλλικό διαμάντι. Λόγω της συγκεκριμένης επιλογής υλικού, το εργαλείο θεωρείται άκαμπτο κατά τη διάρκεια της κοπής. Το πλήθος των ατόμων του εργαλείου επιλέγεται ίσο με 100, ώστε να είναι σε πραγματική αναλογία με τα άτομα του τεμαχίου. Όσον αφορά στην

ταχύτητα του εργαλείου, θεωρούμε ότι όλο το υλικό του εργαλείου έχει μια συγκεκριμένη τιμή ταχύτητας με κατεύθυνση τέτοια, ώστε το εργαλείο να προσεγγίσει το τεμάχιο. Στο εργαλείο δε μας ενδιαφέρουν οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων του, λόγω του ότι θεωρείται άκαμπτο. Οι αρχικές επιταχύνσεις των ατόμων εργαλείου και τεμαχίου θεωρούνται μηδενικές.

Η επίλυση των εξισώσεων κίνησης είναι επαναληπτική. Σε κάθε επανάληψη υπολογίζεται η δύναμη αλληλεπίδρασης του κάθε ατόμου με τα γειτονικά του άτομα, τα οποία βρίσκονται εντός μιας συγκεκριμένης απόστασης, η οποία ονομάζεται ακτίνα αποκοπής r_c . Αφού βρεθεί η συνισταμένη δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο κάθε χρονική στιγμή, στη συνέχεια μέσω της εξίσωσης κίνησης, υπολογίζεται η στιγμιαία επιτάχυνση.

Στη συνέχεια, μέσω της μεθόδου αριθμητικής ολοκλήρωσης των βατραχοδιασκελισμών, υπολογίζεται η μεταβολή της ταχύτητας, αφού η επιτάχυνση είναι η πρώτη παράγωγος της ταχύτητας, και τελικά η μεταβολή της θέσης κάθε ατόμου στο διάστημα ολοκλήρωσης, αφού η ταχύτητα είναι η πρώτη παράγωγος της θέσης. Σε κάθε βήμα επανάληψης, η προσομοίωση της κοπής εξελίσσεται και το κοπτικό εργαλείο αφαιρεί σταδιακά υλικό από το τεμάχιο. Η διαδικασία αυτή εξελίσσεται, έως ότου έχει αφαιρεθεί ο επιθυμητός όγκος υλικού. Σε κάθε επανάληψη, ευρίσκονται και αποθηκεύονται οι τιμές όλων των μεγεθών που μας ενδιαφέρουν.

Η ρύθμιση της θερμοκρασίας στην επιθυμητή τιμή, γίνεται με την διαδικασία της θερμοστάτησης. 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.

Η συνθήκη που καθορίζει τον επαναπροσδιορισμό των ταχυτήτων είναι η ακόλουθη:

$$\text{Temperature.val} > (T+3) \mid (\text{Temperature.val} < (T-3)) \quad (2.1)$$

Όταν η θερμοκρασία των θερμοστατικών ατόμων, κατά την προσομοίωση της νανοκοπής, ξεπερνά την καθορισμένη θερμοκρασία για το υλικό κατά 3 βαθμούς, οι ταχύτητες ανακατατάσσονται βάσει της εξίσωσης

$$v_{i,new} = v_i \sqrt{\frac{T_{desired}}{T_{current}}} \quad (2.2)$$

όπου T_{current} είναι η θερμοκρασία που υπολογίζεται από την κινητική ενέργεια και T_{desired} είναι η επιθυμητή θερμοκρασία.

Εκτός από τα νευτώνια και τα θερμοστατικά άτομα, υπάρχουν και τα οριακά άτομα, τα οποία παραμένουν ακίνητα κατά τη διάρκεια της κατεργασίας.

Η μοντελοποίηση γίνεται σε δύο διαστάσεις, για να μειωθεί η υπολογιστική πολυπλοκότητα και ο χρόνος της προσομοίωσης. Το δυναμικό ενέργειας που επιλέγεται να χρησιμοποιηθεί είναι το δυναμικό Morse, το οποίο είναι αρκετά εύχρηστο και περιγράφει ικανοποιητικά τα μεταλλικά υλικά., ενώ η αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων του χαλκού και του διαμαντιού θα υπολογιστεί επίσης από το δυναμικό Morse.

Χρησιμοποιούμενες μονάδες

Λόγω του ότι η κοπή 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.

Μονάδα μήκους:

$$[L] = 1 \times 10^{-1} \text{ nm} = 1 \times 10^{-10} \text{ m} = 1 \text{ \AA} \quad (2.3)$$

Μονάδα ενέργειας:

$$[E] = 1 \text{ eV} = 1.602176 \times 10^{-19} \text{ J} \quad (2.4)$$

Μονάδα δύναμης:

$$[F] = [a][D] = \frac{[E]}{[L]} = \frac{eV}{\text{\AA}} = \frac{1.602176 \times 10^{-19} \text{ J}}{10^{-10} \text{ m}} = 1.602176 \times 10^{-9} \text{ N} \quad (2.5)$$

Μονάδα μάζας:

$$[m] = \frac{[M]}{[M_r]} = \frac{62.93 \times 10^{-26}}{6.022} \text{ kg} = 1.045 \times 10^{-25} \text{ kg} \quad (2.6)$$

Μονάδα χρόνου:

$$[\ddot{r}] = \frac{[F]}{[m]} = \frac{[L]}{[t]^2} \Rightarrow [t] = \sqrt{\frac{[L][m]}{[F]}} = 80.76 \times 10^{-15} s = 80.76 fs \quad (2.7)$$

Μονάδα θερμοκρασίας:

$$[T] = \frac{[L]^2[m]}{[t]^2[k_B]} = \frac{[L]^2[m]}{[L][m][F]^{-1}[k_B]} = 11604.505 K \quad (2.8)$$

Το χρονικό βήμα ολοκλήρωσης επιλέγεται ίσο με:

$$dt = 10 fs = 0.123 t_{unit,MD} \quad (2.9)$$

και η θερμοκρασία προσομοίωσης είναι:

$$T = 293 K = \frac{293}{11604.505} 11604.505 K = 0.0252 T_{unit,MD} \quad (2.10)$$

Με τη βοήθεια της συνάρτησης *SetupJob* γίνεται ο ορισμός των ατόμων, που αντιστοιχούν στο τεμάχιο και στο εργαλείο, ενώ με τη συνάρτηση *moltype* καθορίζεται το είδος των ατόμων του τεμαχίου, καθώς και το πλήθος τους. 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 διαμαντιού στην περίπτωσή μας, δίνουμε:

$$moltype(1, tool) = 1 \quad (2.11)$$

Για τα νευτώνια άτομα του τεμαχίου ορίζουμε:

$$moltype(1, partNewton) = 2 \quad (2.12)$$

Για τα θερμοστατικά άτομα του τεμαχίου ορίζουμε:

$$moltype(1, partThermo) = 3 \quad (2.13)$$

Για τα συνοριακά άτομα του τεμαχίου:

$$moltype(1, partBoundary) = 4 \quad (2.14)$$

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

$$Temperature.val = 11604.505 * (nmol / 800) * (2 * Mcu * kinEnergy.val) / (3 * Kb) \quad (2.15)$$

Παρατηρούμε ότι η μεταβλητή της θερμοκρασίας κοπής 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 κοπής.

4.3 Ορισμός διαφορετικής γωνίας κοπής

Η γωνία περιστροφής του κοπτικού εργαλείου (γωνία κοπής) ορίζεται με τη μεταβλητή **rot_angle**. Η γωνία αυτή μπορεί να έχει θετικές ή αρνητικές τιμές. Στην περίπτωση αρνητικών τιμών η περιστροφή του κοπτικού γίνεται δεξιόστροφα, στην περίπτωση θετικών τιμών η περιστροφή γίνεται αριστερόστροφα.

Η αρχικοποίηση της θέσης του κοπτικού εργαλείου πραγματοποιείται στην υπορουτίνα: **InitCoordsTool**.

Η αρχική κατακόρυφη θέση των σωματιδίων που απαρτίζουν το κοπτικό δίνεται από τον πίνακα **r**.

Έστω ότι οι συντεταγμένες του κάθε σωματιδίου του κοπτικού εργαλείου είναι οι (x,y). Αν η περιστροφή του κοπτικού γίνει κατά γωνία rot_angle, οι νέες συντεταγμένες των σημείων θα είναι:

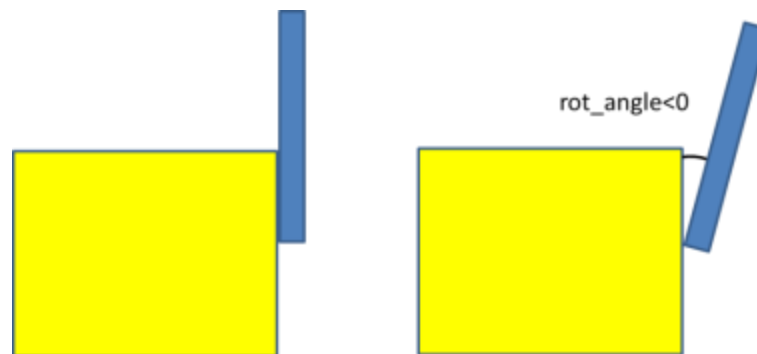
$$X = x * \cos(rot_angle) - y * \sin(rot_angle) \quad (2.16)$$

$$Y = y * \cos(rot_angle) + x * \sin(rot_angle) \quad (2.17)$$

Οι σχέσεις αυτές προκύπτουν από το λεγόμενο Πίνακα Περιστροφής (Rotation Matrix) και ουσιαστικά είναι ένας τελεστής $R(rot_angle)$ ο οποίος εφαρμόζεται πάνω στις αρχικές συντεταγμένες (x,y) για προκύψουν οι καινούριες (X,Y):

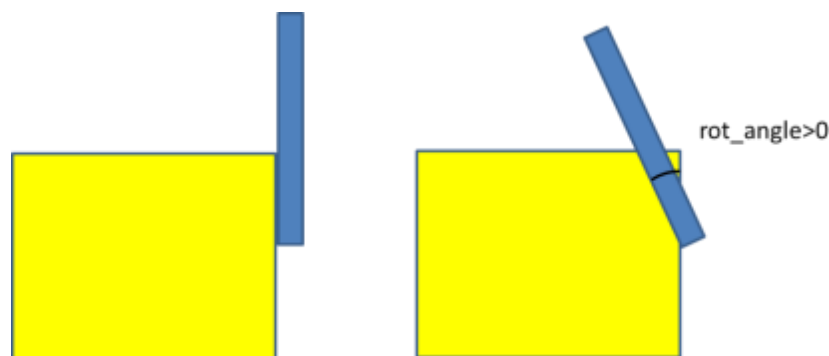
$$\begin{bmatrix} X \\ Y \end{bmatrix} = R(rot_angle) \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(rot_angle) & -\sin(rot_angle) \\ \sin(rot_angle) & \cos(rot_angle) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \quad (2.18)$$

Στην περίπτωση που η γωνία είναι αρνητική, η περιστροφή γίνεται δεξιόστροφα όπως φαίνεται στο ακόλουθο σχήμα:



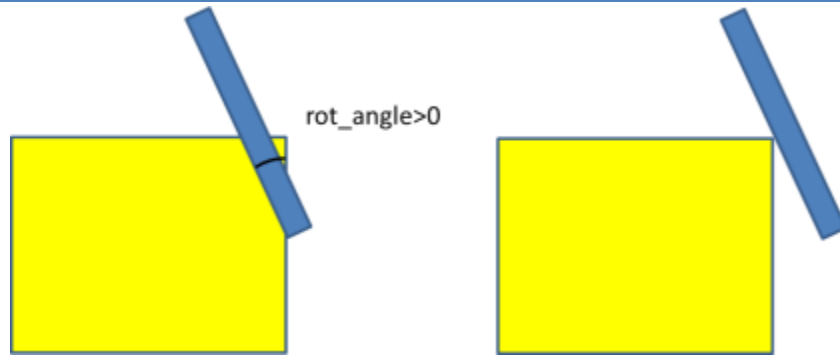
Εικόνα 4.1: Περιστροφή του κοπτικού εργαλείου για το σχηματισμό θετικής γωνίας κοπής

Στην περίπτωση που η γωνία είναι θετική τότε προκύπτει το ακόλουθο σχήμα:



Εικόνα 4.2: Περιστροφή του κοπτικού εργαλείου για το σχηματισμό αρνητικής γωνίας κοπής

Όπως φαίνεται στην Εικόνα 4.2 υπάρχει μια αλληλεπικάλυψη ατόμων του κοπτικού εργαλείου με άτομα του υλικού κατεργασίας. Έτσι για να αποφευχθεί το πρόβλημα της αλληλεπικάλυψης του κοπτικού με το υπόστρωμα, όταν ορίζουμε θετικές γωνίες (αρνητικές γωνίες κοπής) στον κώδικα, πρέπει να μετακινήσουμε το κοπτικό εργαλείο προς τα δεξιά, έτσι ώστε το κοπτικό να ακουμπάει στην πάνω δεξιά γωνία του υποστρώματος, δηλαδή όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα στην Εικόνα 4.3.



Εικόνα 4.3: Αποφυγή αλληλεπικάλυψης των ατόμων του κοπτικού εργαλίου με το υλικό κατεργασίας για αρνητικές γωνίες κοπής

Στον κώδικα η μετατόπιση αυτή γίνεται με τον ακόλουθο αλγόριθμο:

```
if (rot_angle>0)
% Check for overlapping between the tool and Copper (this happens when
% rot_angle>0
% find maximum x-coordinate at height = lowerleft(2)
[i,j]=find(R(2,*)<=abs(lowerleft(2)));
k=max(R(1,j));
R(1,:)=R(1,:)+k-1;
end
```

Αφού γίνει η περιστροφή του κοπτικού, βρίσκουμε τα σωματίδια του κοπτικού τα οποία βρίσκονται καθ' ύψος κάτω από την επιφάνεια του υποστρώματος, δηλαδή βρίσκουμε ποια σωματίδια του κοπτικού έχουν Y συντεταγμένη η οποία είναι μικρότερη από το βάθος κοπής:

```
[i,j]=find(R(2,*)<=abs(lowerleft(2)));
```

Από αυτά τα σωματίδια βρίσκουμε εκείνο με τη μέγιστη X συντεταγμένη τιμή:

```
k=max(R(1,j));
```

Αφού βρούμε αυτή τη μέγιστη τιμή, τότε μετατοπίζουμε κατά k όλες τις X συντεταγμένες των σωματιδίων του κοπτικού:

```
R(1,:)=R(1,:)+k-1;
```

4.4 Διαφορετική ακτίνα καμπυλότητας του κοπτικού εργαλείου

Στην παρούσα ενότητα γίνεται παρουσίαση της προσθήκης της ακτίνας καμπυλότητας του κοπτικού εργαλείου και του ορισμού του βάθους κοπής.

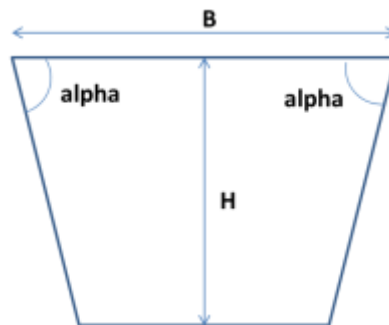
Βάθος κοπής = μεταβλητή Depth

Ακτίνα καμπυλότητας = μεταβλητή Rc

Υπορουτίνα σχεδιασμού σχήματος του εργαλείου κοπής

Η μεταβλητή που θα χρησιμοποιήσουμε αρχικά είναι η InitCoordsTool.

Έτσι αρχικά στον κώδικα υπολογίζονται οι συντεταγμένες των σωματιδίων του εργαλείου κοπής έτσι ώστε να προκύπτει ένα τραπέζιο μεγάλης βάσης, B και ύψους H. Το σχήμα παρακάτω στην Εικόνα 4.4 απεικονίζει τις μεταβλητές που χρησιμοποιούνται.



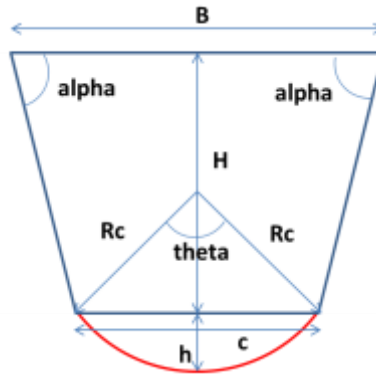
Εικόνα 4.4: Σχήμα του τραpezίου για την προσθήκη ακτίνας καμπυλότητας στο κοπτικό εργαλείο

Ξεκινώντας από τη βάση του τραpezίου (μήκους B) προσθέτουμε σωματιδία τα οποία ισαπέχουν κατά απόσταση dx. Στη συνέχεια υπολογίζονται οι x και y συντεταγμένες των σημείων του κοπτικού.

Ακολουθώντας τα σημεία του κοπτικού θα τοποθετηθούν σε οριζόντιες γραμμές οι οποίες ισαπέχουν μεταξύ τους κατά dh.

Σε κάθε γραμμή τοποθετείται ένας αριθμός σωματιδίων που ισαπέχουν μεταξύ τους κατά dx. Το μήκος κάθε οριζόντιας γραμμής ανάλογα με το ύψος που βρισκόμαστε μεταβάλλεται. Οι συντεταγμένες των σωματιδίων που βρίσκονται πάνω σε αυτή τη γραμμή υπολογίζονται ανάλογα στον κώδικα της νανοκοπής, όπου το y παραμένει σταθερό, ενώ το x μεταβάλλεται.

Στη συνέχεια του κώδικα προσθέτουμε ένα κυκλικό τομέα, ο οποίος αντιστοιχεί στην επιθυμητή καμπυλότητα R_c . Τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του κυκλικού τομέα δίνονται στο ακόλουθο σχήμα στην



Εικόνα 4.5: Τελικό σχήμα του κοπτικού εργαλείου στο οποίο έχει γίνει προσθήκη ακτίνας καμπυλότητας

Το μήκος της τελευταίας οριζόντιας γραμμής (που αντιστοιχεί στο ύψος H από τη βάση του τραπεζιού) έχει ήδη υπολογιστεί και είναι ίσο με c . Με βάση το c και δεδομένης της ακτίνας καμπυλότητας υπολογίζουμε τη γωνία του κυκλικού τομέα θ . (https://en.wikipedia.org/wiki/Circular_segment)

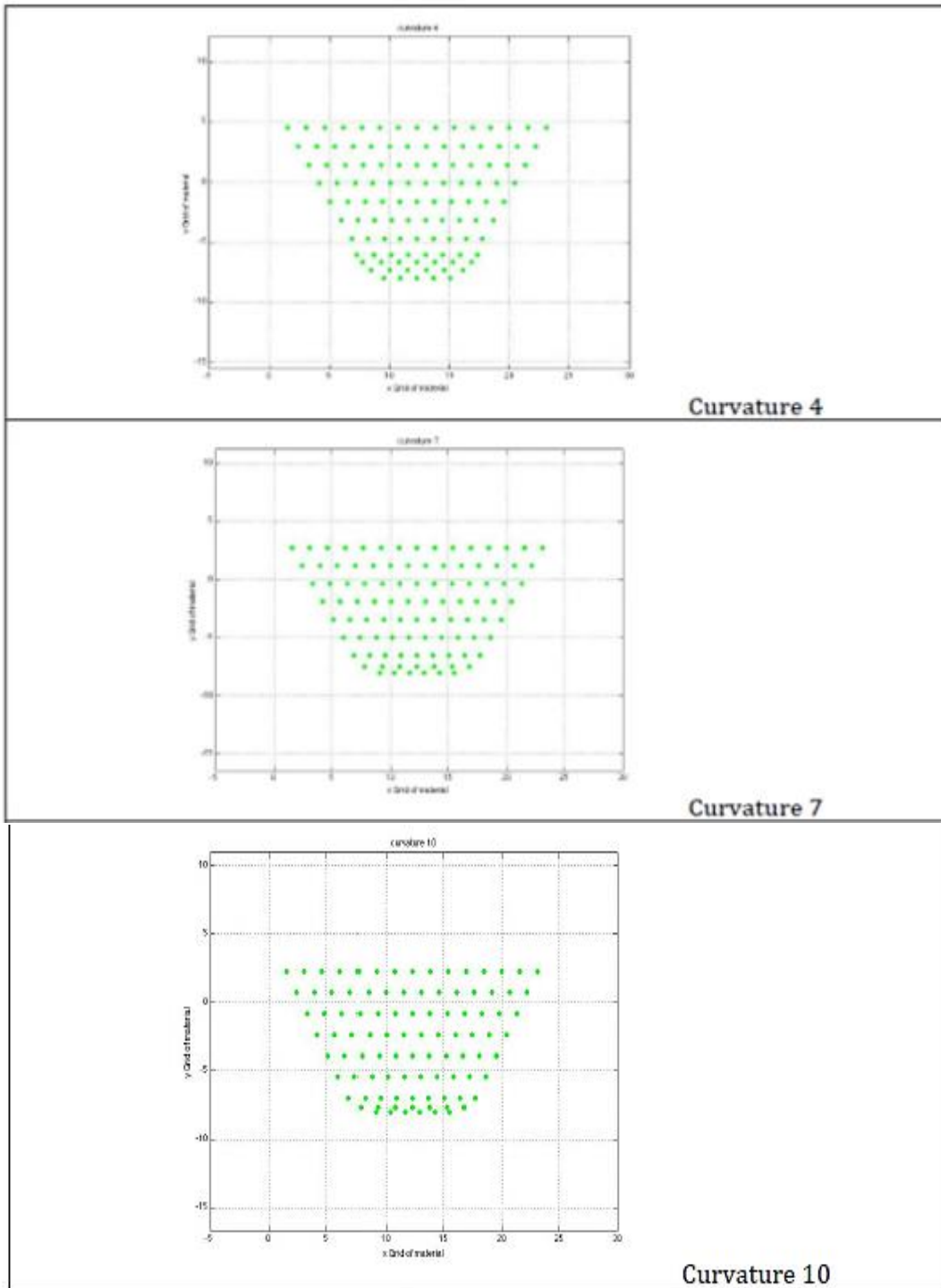
Στη συνέχεια υπολογίζουμε το ύψος h του κυκλικού τομέα. Μέσα στον κυκλικό τομέα θα σχεδιάσουμε ένα αριθμό από ισαπέχουσες καθ' ύψος οριζόντιες γραμμές.

Στη συνέχεια σε κάθε γραμμή πραγματοποιούμε μια σειρά υπολογισμών έτσι ώστε τα σωματίδια του κοπτικού να βρίσκονται εντός του κυκλικού τομέα.

- *Συγκεκριμένα:* υπολογίζουμε το καινούριο ύψος h_{new} του κυκλικού τομέα. Με βάση αυτό το ύψος (και δεδομένης της ακτίνας καμπυλότητας που παραμένει ίδια και είναι ίση με R_c) υπολογίζουμε τη γωνία του κυκλικού τομέα θ_{new} και το μήκος της οριζόντιας γραμμής (μήκος χορδής), c_{new} .

Έτσι προκύπτει ο αριθμός των σωματιδίων που θα τοποθετηθούν στη χορδή. Αυτό που πρέπει να υπολογίσουμε σε κάθε χορδή είναι η x – συντεταγμένη του πρώτου σωματιδίου (η οποία βρίσκεται πάνω στην κυκλική περιφέρεια που σχεδιάζεται παραπάνω με κόκκινο χρώμα). Η συντεταγμένη αυτή υπολογίζεται στη γραμμή 602. Η συντεταγμένη αυτή ουσιαστικά υπολογίζεται από την απόσταση από το κέντρο του κύκλου (που είναι στο $B/2$) και είναι ίση με:

$$R_c \cdot \sin(\theta_{new}/2) \quad (2.19)$$



Εικόνα 4.6: Παραδείγματα κοπτικών εργαλείων με διαφορετικές ακτίνες καμπυλότητας, 4, 7 και 10

4.5 Αρχικοποίηση κώδικα νανοκοπής

Στη συνέχεια μέσω της συνάρτησης *InitCoordsPart* ορίζονται οι αρχικές θέσεις του τεμαχίου , ενώ με τον ίδιο τρόπο με την συνάρτηση *InitCoordsTool*, ορίζονται οι αρχικές συντεταγμένες του εργαλείου.

Αφού οριστούν οι αρχικές συντεταγμένες των ατόμων του τεμαχίου και του εργαλείου, πρέπει μέσω της συνάρτησης *InitVelsPart* , να οριστούν οι ταχύτητες που έχουν τα άτομα του τεμαχίου. Η ανάθεση των αρχικών ταχυτήτων αφορά μόνο στα νευτώνια και στα θερμοστατικά άτομα, καθώς τα οριακά παραμένουν ακίνητα καθ' όλη τη διάρκεια της κοπής, και επομένως οι ταχύτητές τους είναι συνεχώς μηδενικές. Η κατεύθυνση της ταχύτητας των νευτώνιων και των θερμοστατικών ατόμων ορίζεται να έχει τυχαία κατεύθυνση.

Με τον ίδιο τρόπο ορίζεται και η ταχύτητα των ατόμων του εργαλείου, η οποία έχει συνιστώσα μόνο κατά την κατεύθυνση x και είναι κοινή για όλα τα άτομα του κοπτικού εργαλείου, και κατά συνέπεια ίση με την ταχύτητα κοπής. Η ταχύτητα κοπής της προσομοίωσης εισάγεται μέσω της συνάρτησης *InitVelsTool* και ορίζεται ως εξής:

$$V_t = 0.1 \frac{L_{unit,MD}}{t_{unit,MD}} = 0.1 \frac{10^{-10} m}{80.76 \times 10^{-15} s} = 123 \frac{m}{s} \quad (2.20)$$

Στο κώδικα παριστάνεται ως:

$$veltool = [-0.1, 0, 0]' \quad (2.21)$$

Οι αρχικές επιταχύνσεις των ατόμων ορίζονται καλώντας τη συνάρτηση *InitAccels* . Κατά την έναρξη της προσομοίωσης οι επιταχύνσεις όλων των ατόμων, τόσο του τεμαχίου όσο και του εργαλείου, θεωρούνται μηδενικές.

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

Η μεταβλητή ***kinEnergy*** αναφέρεται στην κινητική ενέργεια, και ορίζεται στον κώδικα ως:

$$\text{kin.Energy.val} = 0.5 * \text{vnSum} / \text{nmol} \quad (2.22)$$

και η μεταβλητή **totEnergy** αναφέρεται στη συνολική ενέργεια και ορίζεται ως:

$$\text{totEnergy.val} = \text{kinEnergy.val} + \text{uSum} / \text{nmol} \quad (2.23)$$

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.

➤ Αρχικοποίηση παραμέτρων νανοκοπής

Για την παρούσα διπλωματική εργασία, οι σημαντικότερες παράμετροι της διαδικασίας κοπής νανοκλίμακας που μπορεί να ορίζει ο χρήστης στον συγκεκριμένο κώδικα είναι η γωνία κοπής, το βάθος κοπής και η ακτίνα καμπυλότητας. Τα συγκεκριμένα μεγέθη επιλέχθηκαν μιας και σχετίζονται άμεσα και επηρεάζουν, σύμφωνα και με τη βιβλιογραφία, το σχηματισμό του αποβλίττου και πιο ειδικά το ελάχιστο πάχος αποβλίττου.

Για κάθε καμπυλότητα εργαλείου θα δοκιμάζεται και διαφορετικό βάθος κοπής, ή το αντίστροφο, από τα οποία θα βρίσκουμε κάθε φορά το ελάχιστο πάχος αποβλίττου, αλλά και διαπιστώνεται και το τελικό αποτέλεσμα της επιφάνειας του υλικού κατεργασίας. Επίσης με τη μεταβολή της ακτίνας καμπυλότητας r και του βάθους κοπής d , υπολογίζεται και ο λόγος του βάθους κοπής d προς την ακτίνα καμπυλότητας r (d/r), ώστε να διαπιστώνουμε πότε προκύπτει το ελάχιστο πάχος αποβλίττου. Μια επιπλέον μεταβλητή της διαδικασίας νανοκοπής είναι η γωνία κοπής, όπου θέλουμε να διαπιστωθεί

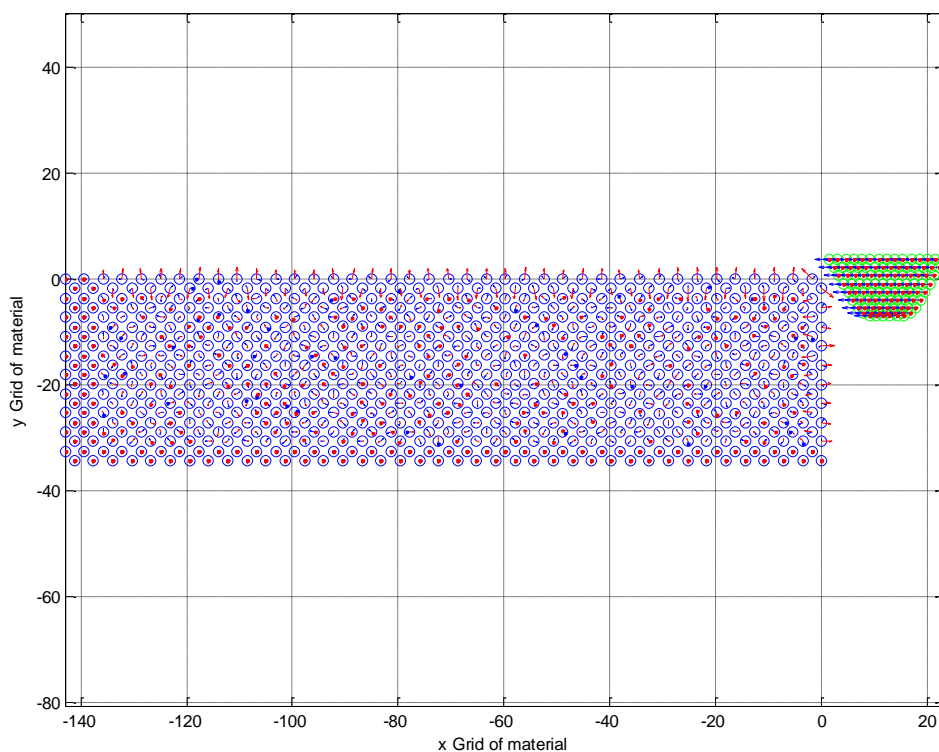
Έτσι έχουμε τις ακόλουθες παραμέτρους:

- ❖ Γωνία κοπής: **rot_angle** (rake angle), ο χρήστης με τη συγκεκριμένη μεταβλητή έχει τη δυνατότητα στην αρχικοποίηση του κώδικα να ορίζει την επιθυμητή γωνία κοπής του εργαλείου. Οι τιμές της συνήθως κυμαίνονται μεταξύ -30° με 30° , παρόλα αυτά ο χρήστης έχει τη δυνατότητα ελεύθερης επιλογής γωνίας κοπής, μιας και στη βιβλιογραφία έχουν αναφερθεί τιμές από -75° έως 60° .

- ❖ Βάθος κοπής: **Depth**, ο χρήστης με τη συγκεκριμένη μεταβλητή έχει τη δυνατότητα στην αρχικοποίηση του κώδικα να ορίζει το επιθυμητό βάθος κοπής.
- ❖ Ακτίνα καμπυλότητας: **Rc** (edge radius), ο χρήστης με τη συγκεκριμένη μεταβλητή έχει τη δυνατότητα στην αρχικοποίηση του κώδικα να ορίζει την ακτίνα καμπυλότητας του κοπτικού εργαλείου. Οι τιμές του που δέχεται ο κώδικας είναι ακέραιες και μεταξύ 4 και 20 Å.

4.5.1 Παράδειγμα προσομοίωσης

Στην Εικόνα 4.7 παρουσιάζεται η σχηματική απεικόνιση μιας προσομοίωσης με γωνία κοπής 0° , ακτίνα καμπυλότητας 7 και βάθος κοπής 7. Έτσι παρατηρούμε την αρχική τοποθέτηση του κοπτικού εργαλείου σε σχέση με το υλικό κατεργασίας, αλλά και τα αντίστοιχα άτομα που τα απαρτίζουν.



Εικόνα 4.7: Παράδειγμα αρχικού στιγμιότυπου προσομοίωσης νανοκοπής

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: Παρουσίαση προσομοιώσεων και αποτελεσμάτων

5.1 Εισαγωγή

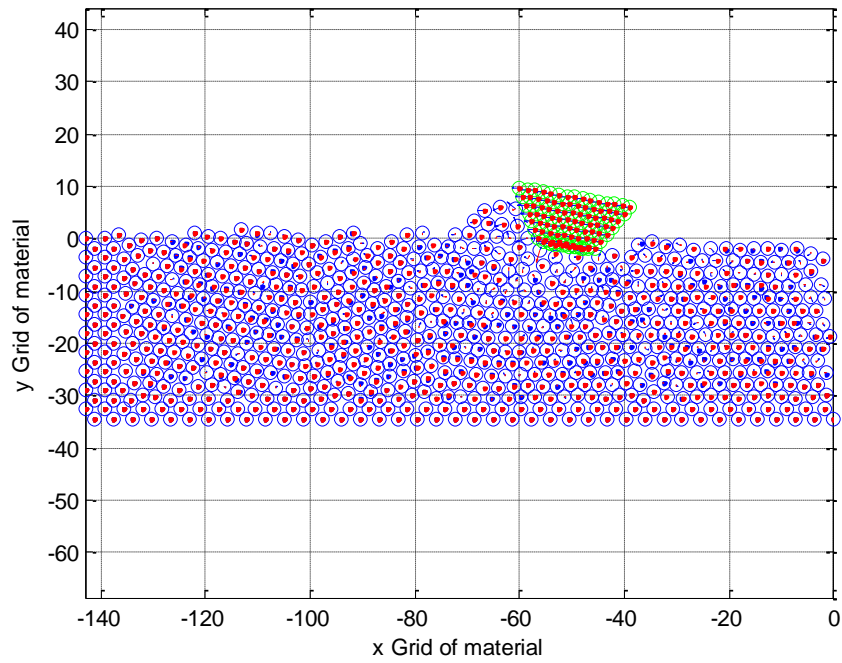
Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται μια διερεύνηση της νανοκοπής υλικού χαλκού με εργαλείο διαμαντιού μέσω του μοντέλου της Μοριακής Δυναμικής. Οι παράμετροι που μπορούν να μεταβληθούν και επιδρούν στο σχηματισμό του τελικού αποβλίττου είναι η γωνία κοπής, το βάθος κοπής και η ακτίνα καμπυλότητας του κοπτικού εργαλείου. Αρχικά εξετάζεται η δημιουργία του αποβλίττου ανάλογα με τη γωνία κοπής, επιλέγοντας μια θετική και μια αρνητική τιμή, διατηρώντας ίδιο το βάθος κοπής και την ακτίνα καμπυλότητας και στις δύο περιπτώσεις. Εξετάζεται η εμφάνιση του Ελάχιστου Πάχους Αποβλίττου για διάφορες περιπτώσεις κοπής. Συγκεκριμένα διατηρώντας σταθερή τη γωνία κοπής και την ακτίνα καμπυλότητας, μεταβάλλουμε το βάθος κοπής, έως ότου προκύψει το ΕΠΑ και γενικότερα μελετάται ο σχηματισμός του αποβλίττου. Στη συνέχεια διατηρώντας σταθερό το βάθος κοπής για το οποίο προέκυψε το ΕΠΑ μεταβάλλουμε την ακτίνα καμπυλότητας, και με βάση τις διάφορες τιμές d/r που προκύπτουν, προσδιορίζεται η μεταβολή του ΕΠΑ ως προς το λόγο d/r .

5.2 Γεωμετρία αποβλίττου ανάλογα με τη γωνία κοπής

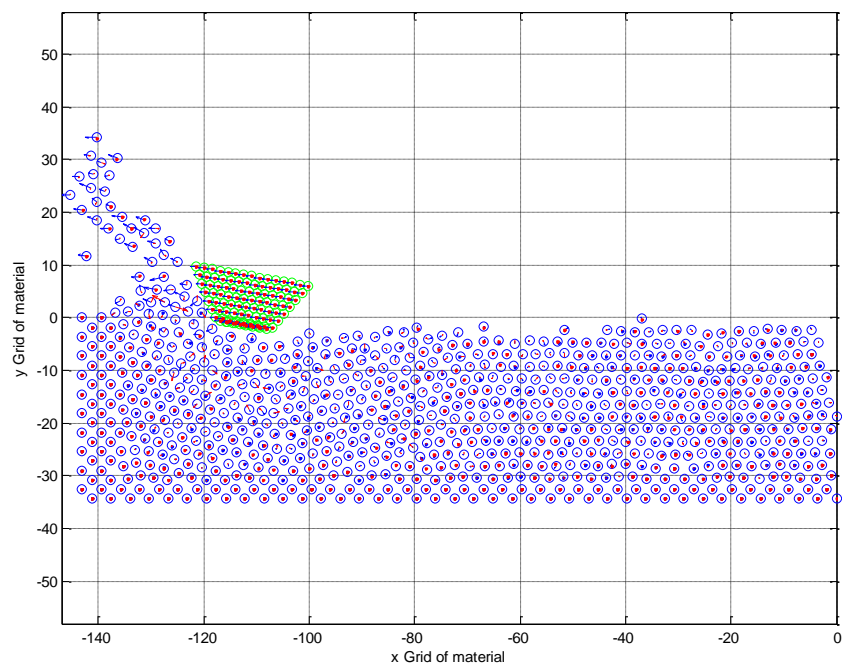
Στην ενότητα αυτή θα παρουσιαστεί η προσομοίωση της κοπής για δύο διαφορετικές περιπτώσεις γωνίας κοπής, μια θετική και μια αρνητική. Στις κοπές νανοκλίμακας προτιμώνται εν γένει οι θετικές γωνίες κοπής, διότι οδηγούν σε μικρότερη φθορά του κοπτικού εργαλείου και άρα σε μεγαλύτερη διάρκεια ζωής, Εναλλακτικά μια τέτοια γωνία κοπής μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε «ξηρή κατεργασία», δηλαδή χωρίς τη χρήση υγρού κοπής. Οι αρνητικές γωνίες κοπής προσομοιάζουν τη διαδικασία της λείανσης.

5.2.1 Θετική Γωνία κοπής

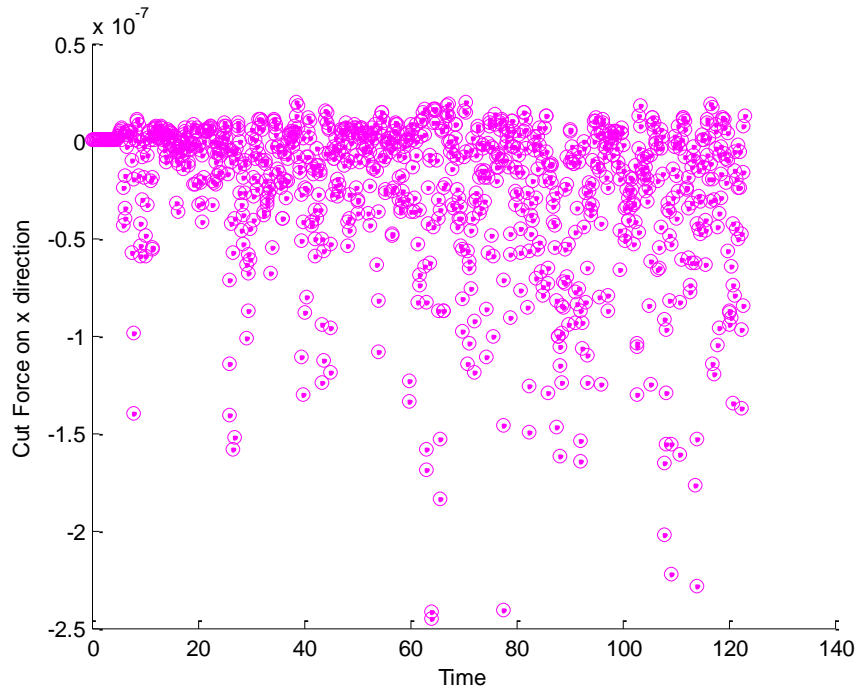
Στην περίπτωση αυτή παρουσιάζονται τα στιγμιότυπα της προσομοίωσης για γωνία κοπής 10° , ενώ το βάθος κοπής είναι ίσο με 2 \AA ενώ η ακτίνα καμπυλότητας ίση με 20 \AA . Ο λόγος d/r προφανώς ισούται με $0,1$.



Εικόνα 5.1: Στιγμιότυπο κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης



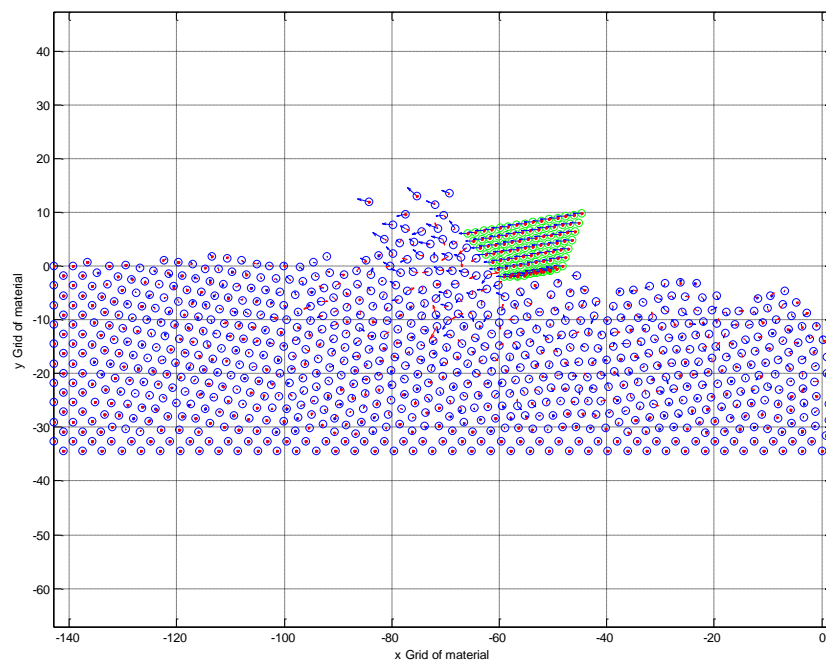
Εικόνα 5.2: Στιγμιότυπο κοπής στο τέλος της προσομοίωσης



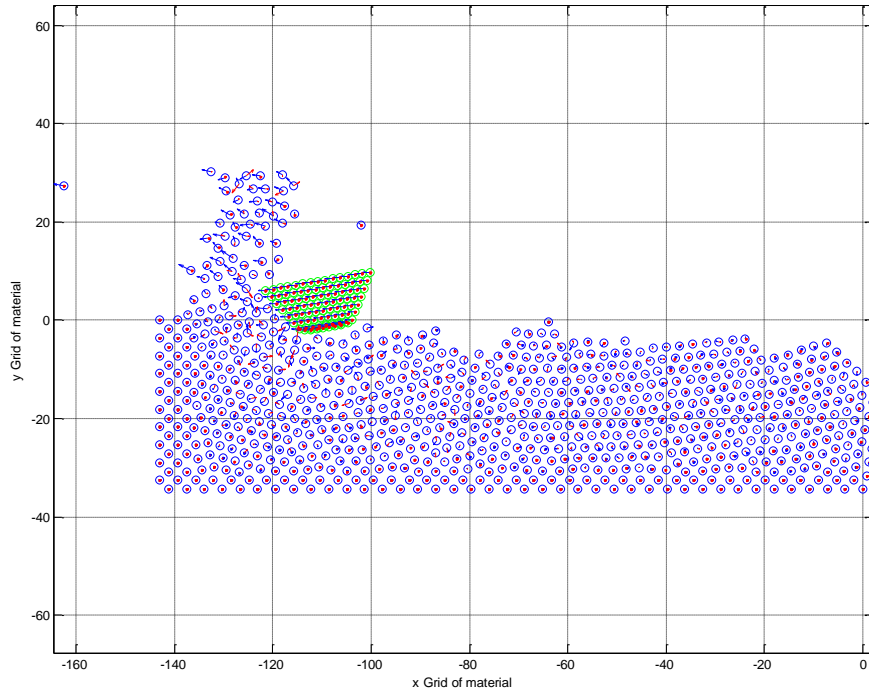
Εικόνα 5.3: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για γωνία κοπής 10°

5.2.2 Αρνητική γωνία κοπής

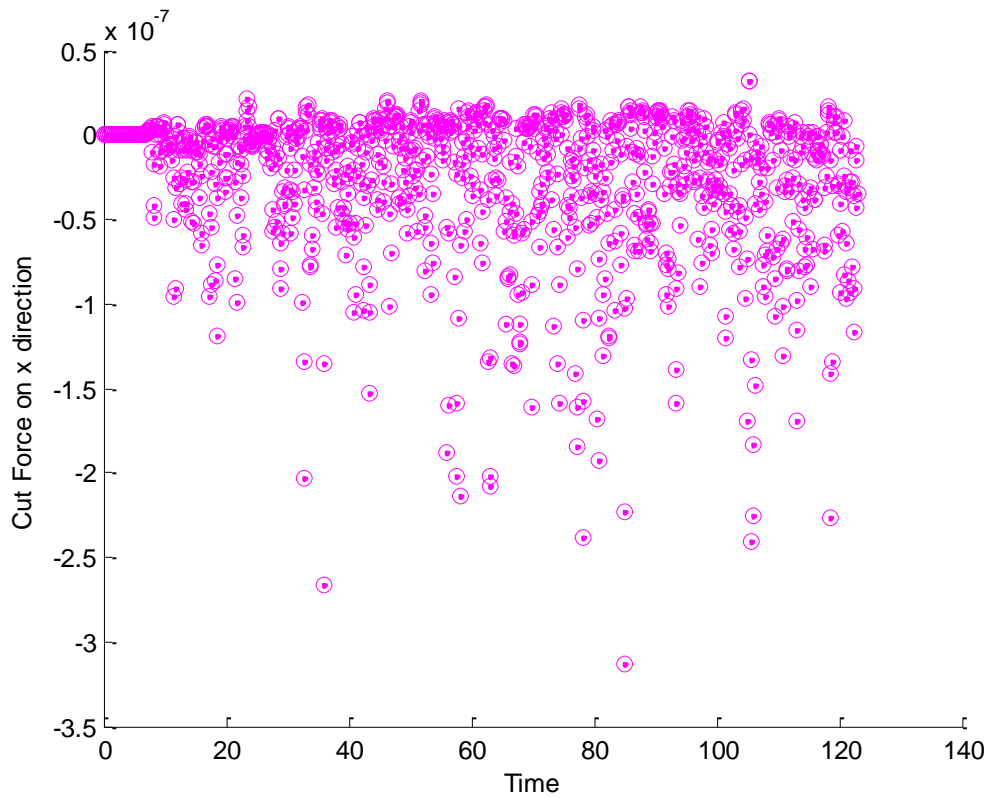
Στην περίπτωση αυτή η γωνία κοπής επιλέχθηκε ίση με -10° . Το βάθος κοπής ισούται με όπως και στην προηγούμενη περίπτωση με 2 \AA ενώ η ακτίνα καμπυλότητας ισούται με 20 \AA . Ο λόγος d/r προφανώς ισούται με 0,1.



Εικόνα 5.4: Στιγμιότυπο κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης



Εικόνα 5.5: Στιγμιότυπο κοπής στο τέλος της προσομοίωσης



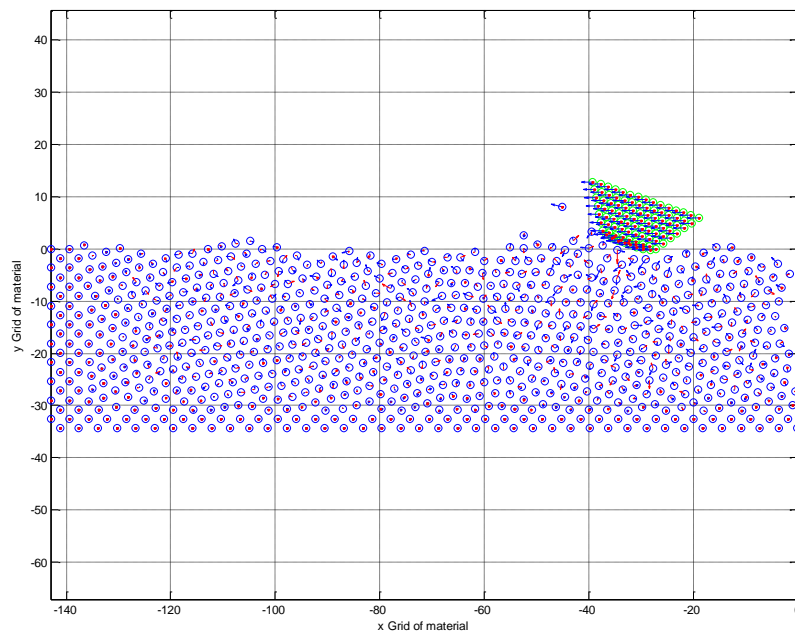
Εικόνα 5.6: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για γωνία κοπής -10°

Παρατηρούμε ότι όταν η γωνία κοπής είναι αρνητική, οι δυνάμεις που ασκούνται στο τεμάχιο είναι μεγαλύτερες, πράγμα το οποίο δικαιολογεί και το γεγονός ότι συνήθως αποφεύγονται, ώστε να μην προκαλείται έντονη φθορά στο εργαλείο.

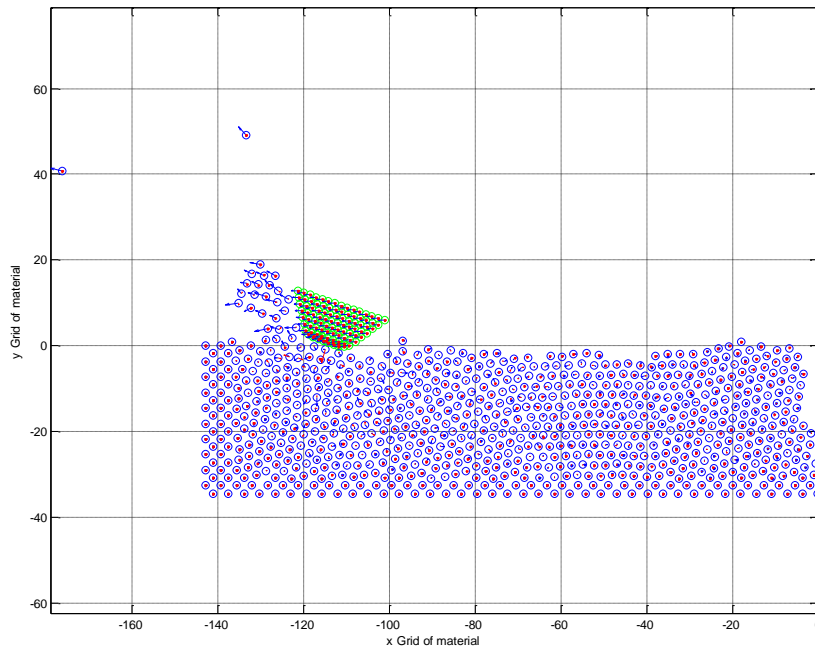
5.3 Διερεύνηση εμφάνισης ΕΠΑ

5.3.1 Βάθος κοπής 0,2 Å

Γωνία κοπής (α)	Βάθος κοπής (d)	Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
+20°	0,2 Å	10 Å	0,02



Εικόνα 5.7: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης



Εικόνα 5.8: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης

Λόγω του μικρού βάθους κοπής, παρατηρούμε ότι στα πρώτα βήματα της προσομοίωσης δε σχηματίζεται σχεδόν καθόλου απόβλιττο και το εργαλείο φαίνεται να πιέζει απλώς το τεμάχιο, χωρίς να αποκόπτεται υλικό. Το υλικό απλώς συμπιέζει τα άτομα πάνω από τα οποία διέρχεται, τα οποία μετά την απομάκρυνση του εργαλείου επιστρέφουν στις αρχικές τους θέσεις.

Βλέπουμε ότι στη συνέχεια της κοπής το υλικό (χαλκός) παραμορφώνεται μπροστά και πέριξ του κοπτικού εργαλείου, όπως συμβαίνει και στις συμβατικές κατεργασίες κοπής με μεγαλύτερα βάθη κοπής. Επιπλέον, μπορούμε να δούμε ότι το ακατέργαστο υλικό του τεμαχίου που βρίσκεται μακριά από το κοπτικό εργαλείο, δεν επηρεάζεται σχεδόν καθόλου από την κίνηση του εργαλείου. Ο σχηματισμός του αποβλίττου φαίνεται ότι προκύπτει από την πίεση του κοπτικού εργαλείου στο κατεργαζόμενο τεμάχιο και την επακόλουθη αποκοπή των ατόμων του τεμαχίου.

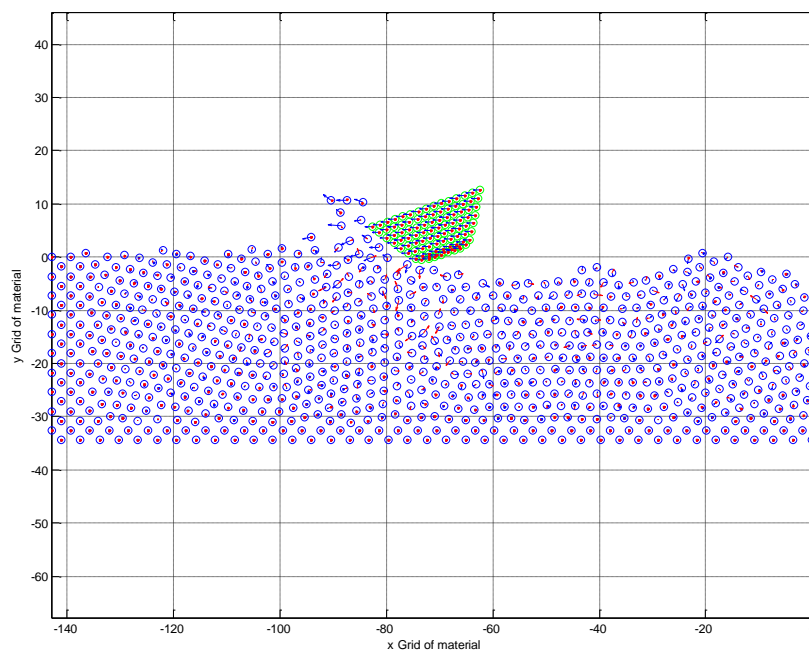
Καθώς προχωράει η διαδικασία της κοπής, το απόβλιττο φαίνεται να μετακινείται προς τα επάνω και σχεδόν κατά μήκος της επιφάνειας του εργαλείου, και σταδιακά διαμορφώνεται και η κατεργασμένη επιφάνεια. Επιπλέον, στην κατεργασμένη επιφάνεια του τεμαχίου είναι εμφανής η πλαστική παραμόρφωση και η ελαστική επαναφορά του υλικού. Διακρίνονται επίσης οι ταχύτητες (μπλε βέλη) και οι επιταχύνσεις (κόκκινα βέλη) των ατόμων. Φαίνεται ότι όσο το φαινόμενο εξελίσσεται, οι ταχύτητες και οι επιταχύνσεις των ατόμων στο χώρο γύρω από το σημείο κοπής μεγαλώνουν.

Βάσει της δομής του υλικού, κάθε στρώση αποτελείται από 40 άτομα χαλκού. Στην περίπτωση όπου το βάθος κοπής ισούται με $0,2 \text{ \AA}$, αφαιρούνται από το υλικό 29 άτομα. Άρα για το συγκεκριμένο βάθος κοπής, δεν αφαιρείται ολόκληρη στρώση του υλικού, συνεπώς θεωρείται ότι δε σχηματίζεται απόβλιττο και πρέπει να αυξηθεί το βάθος κοπής.

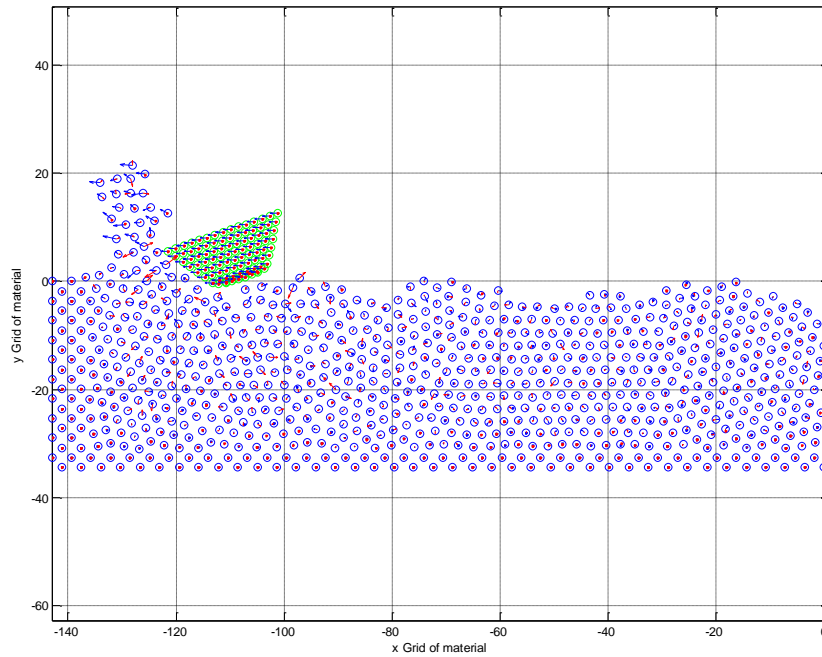
5.3.2 Βάθος κοπής 0,5 Å

Η ακόλουθη περίπτωση προσομοίωσης έγινε διατηρώντας σταθερή τη γωνία κοπής και την ακτίνα καμπυλότητας σε σχέση με την προηγούμενη περίπτωση, και αυξάνοντας το βάθος κοπής στα 0,5 Å. Στην περίπτωση αυτή ισχύει $d/r=0,05$.

Γωνία κοπής (α)	Βάθος κοπής (d)	Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
-20°	0,5 Å	10 Å	0,05



Εικόνα 5.9: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης



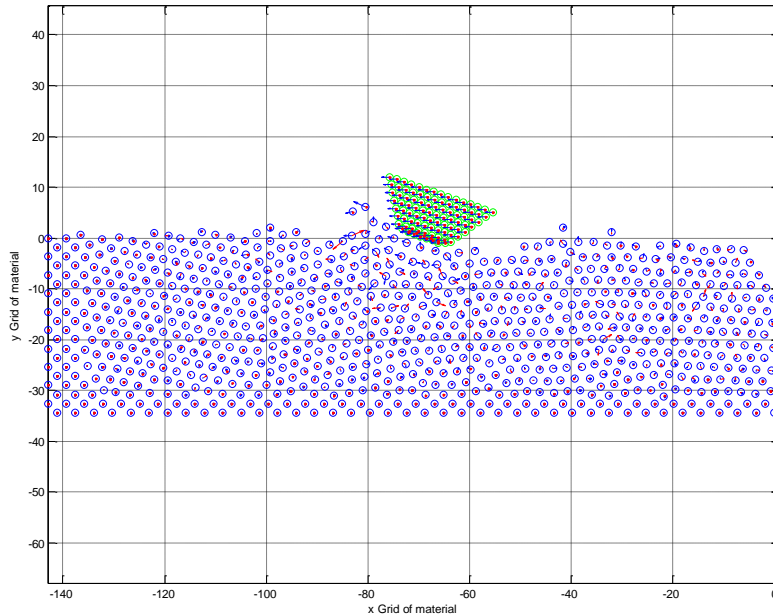
Εικόνα 5.10: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης

Στην περίπτωση αυτή όπου το βάθος κοπής αυξάνεται και φτάνει στα 0,5 Å, παρατηρούμε ότι μέχρι το εργαλείο να διανύσει τη μισή απόσταση του υλικού, είναι ελάχιστα τα μόρια του υλικού που έχουν αφαιρεθεί και δεν είναι καν εμφανής ο σχηματισμός του αποβλίττου. Στο τέλος της προσομοίωσης έχουν αφαιρεθεί από το υλικό 36 άτομα. Παρατηρούμε συνεπώς ότι το πλήθος των ατόμων που αφαιρούνται από το υλικό αυξάνεται καθώς αυξάνεται το βάθος κοπής, αλλά και πάλι στην περίπτωση αυτή τα άτομα που αφαιρούνται είναι λιγότερα από όσα απαρτίζουν μια στρώση υλικού, δηλαδή 40 άτομα. Άρα ούτε στην περίπτωση αυτή σχηματίζεται απόβλιττο και άρα το βάθος κοπής πρέπει να αυξηθεί περαιτέρω.

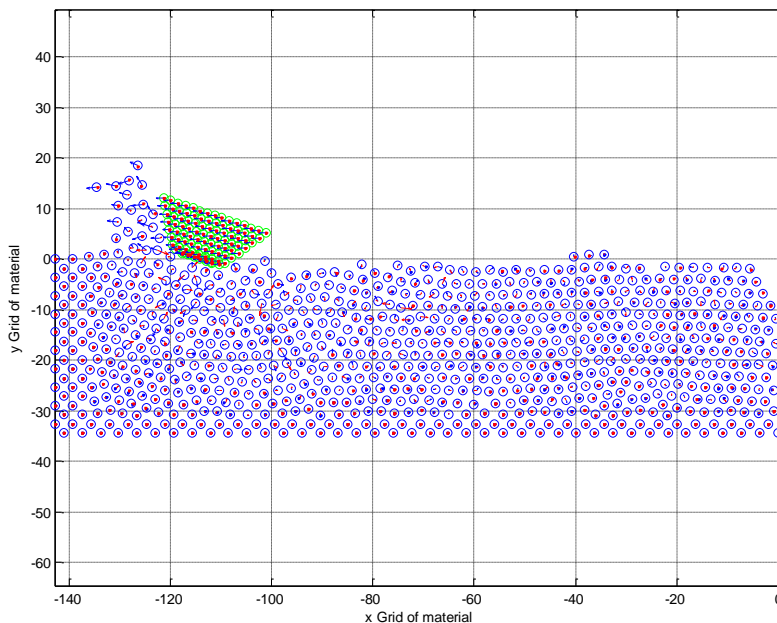
5.3.3 Βάθος κοπής 1 Å

Αυξάνουμε περισσότερο το βάθος κοπής, φτάνοντας στο 1 Å, ώστε να διερευνηθεί αν το βάθος αυτό είναι ικανό, για τις δεδομένες συνθήκες γωνίας κοπής και ακτίνας καμπυλότητας, να οδηγήσει σε σχηματισμό αποβλίττου.

Γωνία κοπής (α)	Βάθος κοπής (d)	Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
+20°	1 Å	10 Å	0,1



Εικόνα 5.11: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης



Εικόνα 5.12: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης

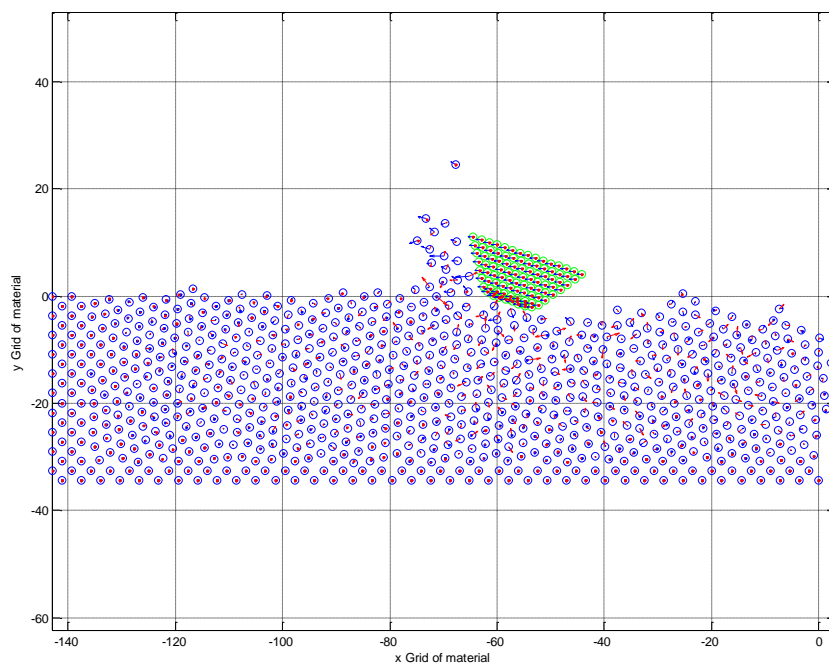
Παρατηρούμε ότι στην περίπτωση αυτή, παρόλο που το βάθος κοπής έχει αυξηθεί σε σχέση με τις προηγούμενες περιπτώσεις, δεν είναι πιο εμφανής ο σχηματισμός του αποβλίττου. Κατά τη διάρκεια της κοπής ελάχιστα άτομα έχουν αποκοπεί από την επιφάνεια του υλικού, ενώ συνολικά στο τέλος της προσομοίωσης 28 άτομα απαρτίζουν το τελικό απόβλιττο. Είναι αξιοσημείωτο ότι στην περίπτωση αυτή αφαιρούνται λιγότερα άτομα, παρόλο που έχει αυξηθεί το βάθος κοπής, πράγμα το οποίο πιθανώς να οφείλεται στο φαινόμενο κλίμακας που εμφανίζεται κατά τη νανοκοπή. Αυτό σημαίνει ότι το εργαλείο πρέπει να μεταδώσει μεγαλύτερη ενέργεια στα άτομα του υλικού όσο πλησιάζουμε προς το ελάχιστο πάχος

αποβλίττου. Επειδή το εργαλείο κινείται με την ίδια ταχύτητα και μεταφέρει την ίδια ενέργεια στο υλικό, τα άτομα που αφαιρέθηκαν είναι λιγότερα. Αυτό έρχεται σε συμφωνία με βιβλιογραφικές αναφορές συσχέτισης του μηχανισμού δημιουργίας αποβλίττου με το φαινόμενο κλίμακας.

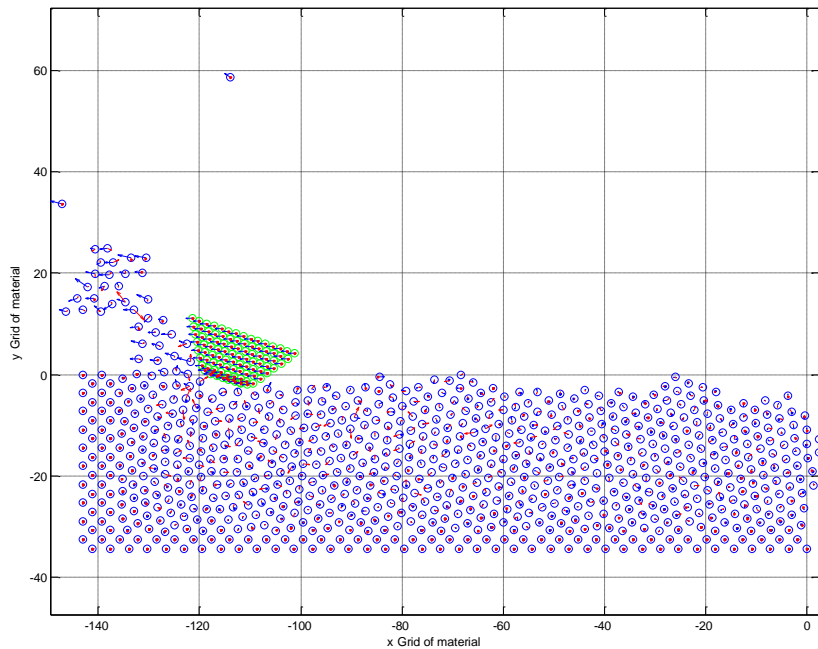
5.3.4 Βάθος κοπής 2 Å

Αυξάνουμε περαιτέρω το βάθος κοπής φτάνοντας στα 2Å, ώστε να μελετηθεί η διαδικασία σχηματισμού αποβλίττου.

Γωνία κοπής (α)	Βάθος κοπής (d)	Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
+20°	2 Å	10 Å	0,2



Εικόνα 5.13: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης



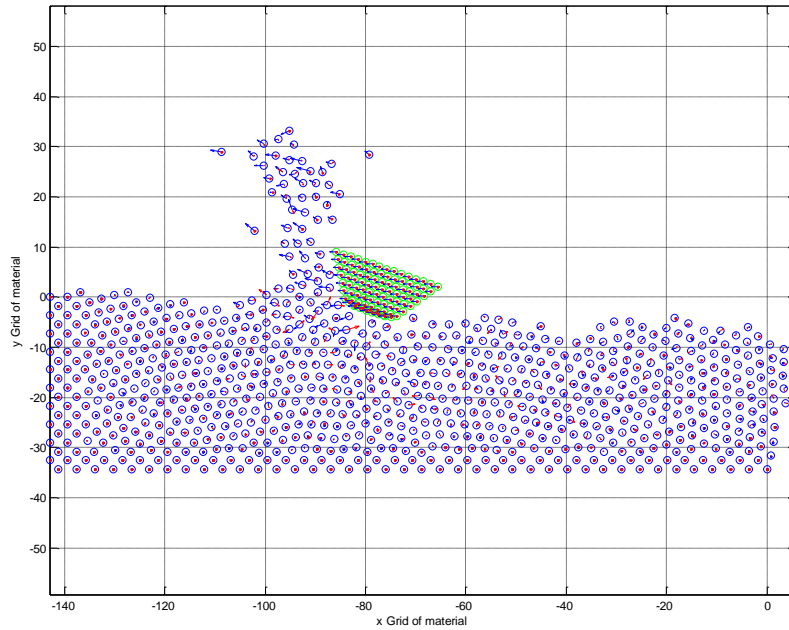
Εικόνα 5.14: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης

Στην περίπτωση όπου το βάθος κοπής αυξάνεται και φτάνει στα 2 Å, ο σχηματισμός του αποβλίττου έχει ξεκινήσει ήδη από τη στιγμή που το κοπτικό εργαλείο βρίσκεται στο μέσο του υλικού κατεργασίας. Συνολικά στο τέλος της προσομοίωσης νανοκοπής έχον αφαιρεθεί από το υλικό 40 άτομα, όσα δηλαδή απαρτίζουν μια στρώση υλικού. Προφανώς η περίπτωση όπου το βάθος κοπής επιλέγεται ίσο με 2 Å, οδηγεί στην εμφάνιση του Ελάχιστου Πάχους Αποβλίττου για δεδομένη γωνία κοπής και ακτίνα καμπυλότητας. Συνεπώς το ΕΠΑ αντιστοιχεί σε μία στρώση ατόμων του υλικού.

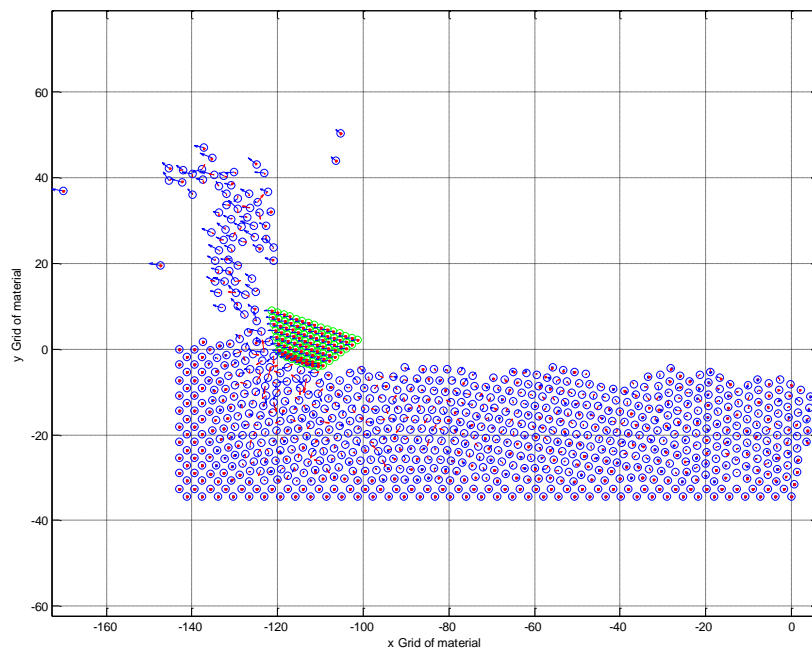
5.3.5 Βάθος κοπής 4 Å

Η περίπτωση αυτή αποτελεί την τελευταία προσομοίωση για βάθος κοπής μεγαλύτερο του βάθους κοπής που αντιστοιχεί στο ΕΠΑ, ώστε να διερευνηθεί ο σχηματισμός του αποβλίττου για τη συγκεκριμένη περίπτωση.

Γωνία κοπής (α)	Βάθος κοπής (d)	Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
+20°	4 Å	10 Å	0,4



Εικόνα 5.15: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης



Εικόνα 5.16: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης

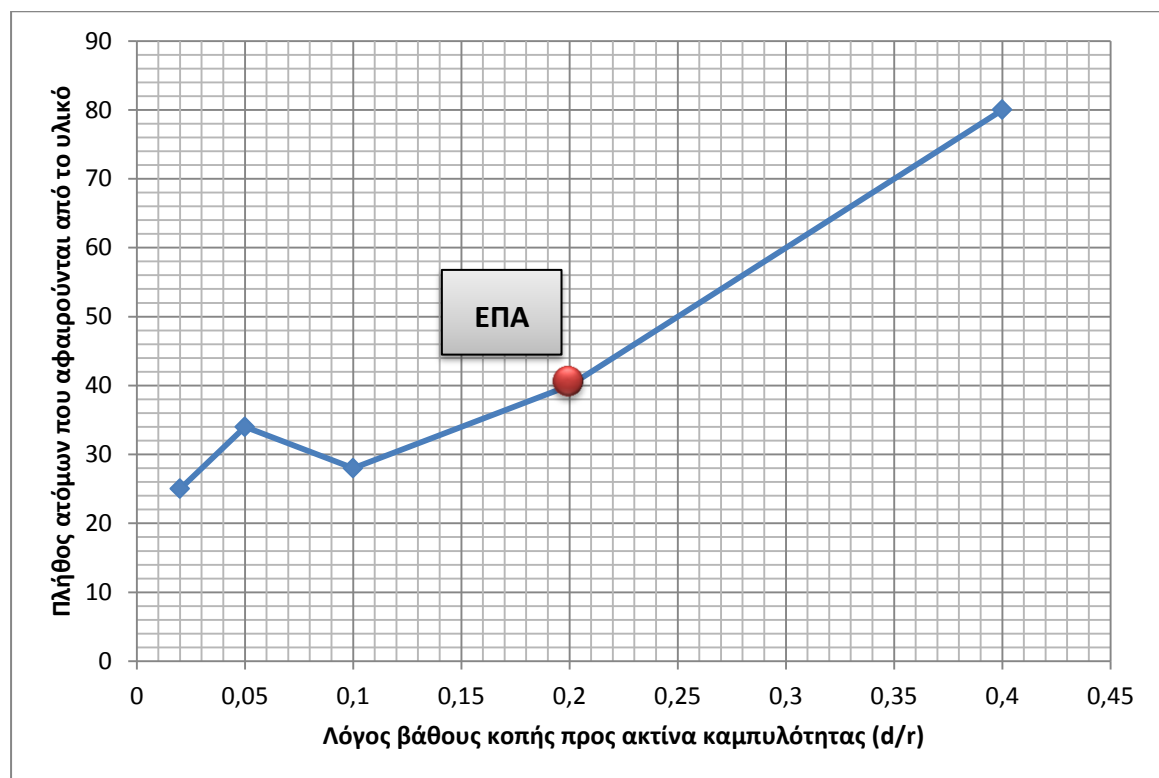
Από τα στιγμιότυπα της προσομοίωσης, παρατηρούμε ότι καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται, αυξάνεται και η έκταση της πλαστικής παραμόρφωσης μπροστά από το κοπτικό εργαλείο. Η ποιότητα της κατεργασμένης επιφάνειας μειώνεται και παρατηρούμε ότι δημιουργούνται κενά και εξαρθρώσεις ατόμων. Λόγω των δυσμορφιών που προκύπτουν, οι αλληλεπιδράσεις ανάμεσα στα άτομα γίνονται ακόμη πιο έντονες, με αποτέλεσμα κατά την εξέλιξη της κοπής, να είναι 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 κοπής, 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.

Στην περίπτωση όπου το βάθος κοπής διπλασιάζεται και γίνεται ίσο με 4 Å, το απόβλιττο που σχηματίζεται απαρτίζεται από 80 άτομα υλικού, πράγμα το οποίο σημαίνει ότι από το τεμάχιο έχουν αφαιρεθεί δύο στρώσεις υλικού.

Στο παρακάτω διάγραμμα (Εικόνα 5.17 παρατηρούμε τη συσχέτιση του σχηματισμού αποβλίττου ως προς το λόγο του βάθους κοπής προς την ακτίνα καμπυλότητας.



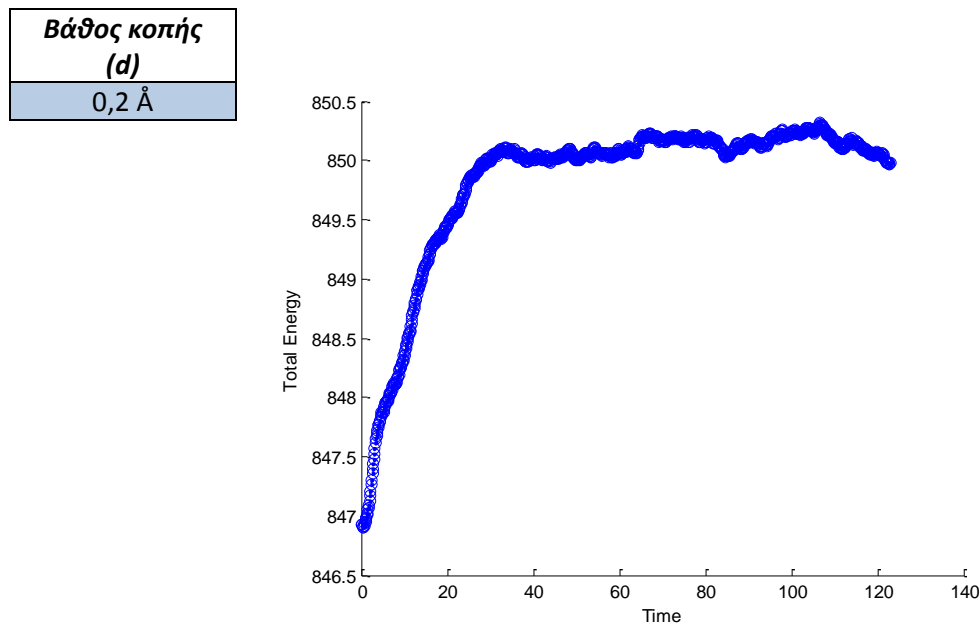
Εικόνα 5.17: Εξέλιξη του παραγόμενου αποβλίττου ως προς το λόγο του βάθους κοπής προς την ακτίνα καμπυλότητας

Παρατηρούμε ότι για λόγους d/r με μικρότερες τιμές από 0,2, τιμή που αντιστοιχεί στο ελάχιστο πάχος αποβλίττου είναι μικρότερη η αύξηση των ατόμων που αφαιρούνται από το απόβλιττο, ενώ όταν έχει υπερβληθεί το ΕΠΑ, η περαιτέρω

αύξηση του λόγου d/r οδηγεί σε σημαντική αύξηση των ατόμων που αφαιρούνται από το υλικό και απαρτίζουν το απόβλιττο. Το γεγονός αυτό, επιβεβαιώνει την εμφάνιση του φαινομένου κλίμακας, σύμφωνα με το οποίο για μικρά βάθη κοπής είναι δυσκολότερος ο σχηματισμός αποβλίττου, λόγω της μεγαλύτερης ενέργειας που πρέπει να απορροφήσει το υλικό για την απομάκρυνση των ατόμων. Αντίθετα, όταν το βάθος κοπής είναι μεγαλύτερο, η κινητική ενέργεια που αποκτούν τα άτομα του υλικού βοηθά στην αποκοπή τους από το τεμάχιο και άρα ο σχηματισμός του αποβλίττου είναι συνεχής και η αντίστοιχη ποσότητα αποβλίττου μεγαλύτερη.

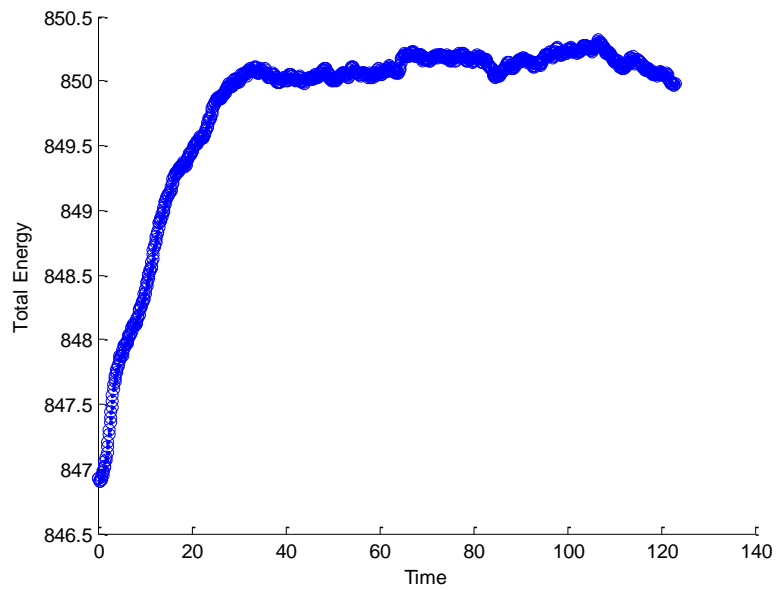
5.4 Μεταβολή της συνολικής ενέργειας με το βάθος κοπής

Στην ενότητα αυτή θα εξετάσουμε την επίδραση που έχει η μεταβολή του βάθους κοπής στη συνολική ενέργεια κοπής, για δεδομένη γωνία κοπής και ακτίνα καμπυλότητας. Συγκεκριμένα η γωνία κοπής διατηρείται ίση με -20° και η ακτίνα καμπυλότητας ίση με 10 \AA , ενώ το βάθος κοπής εξετάζεται για τις τιμές: $0,2 \text{ \AA}$, $0,5 \text{ \AA}$, 1 \AA , 2 \AA και 4 \AA .



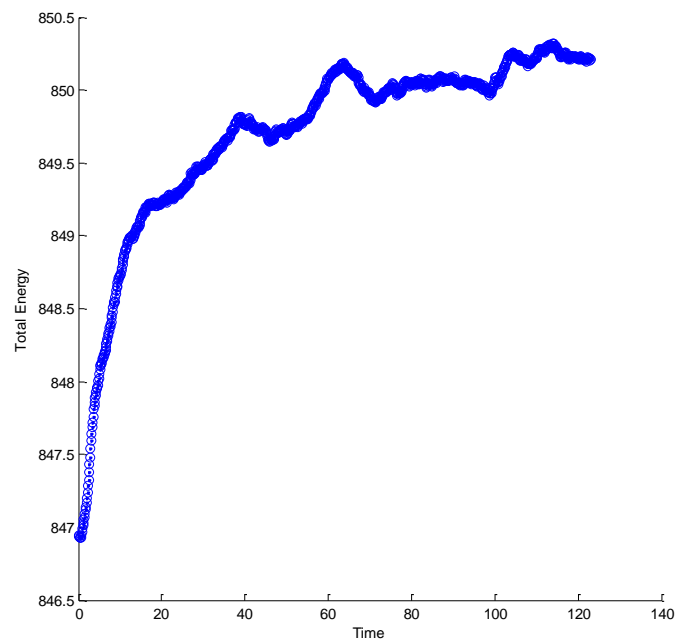
Εικόνα 5.18: Μεταβολή της συνολικής ενέργειας κοπής για $d/r=0,02$

**Βάθος κοπής
(d)**
0,5 Å



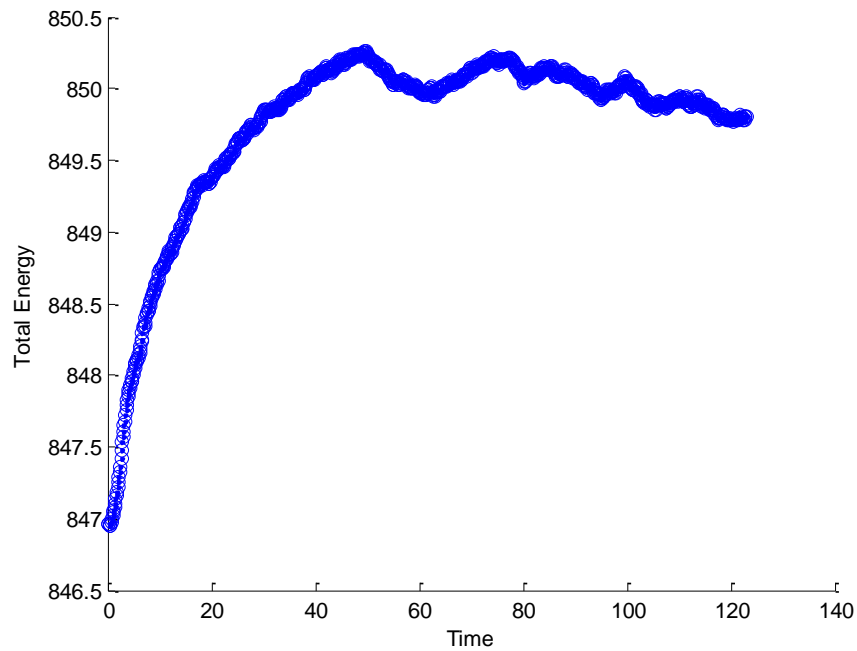
Εικόνα 5.19: Μεταβολή της συνολικής ενέργειας κοπής για $d/r=0,05$

**Βάθος κοπής
(d)**
1 Å



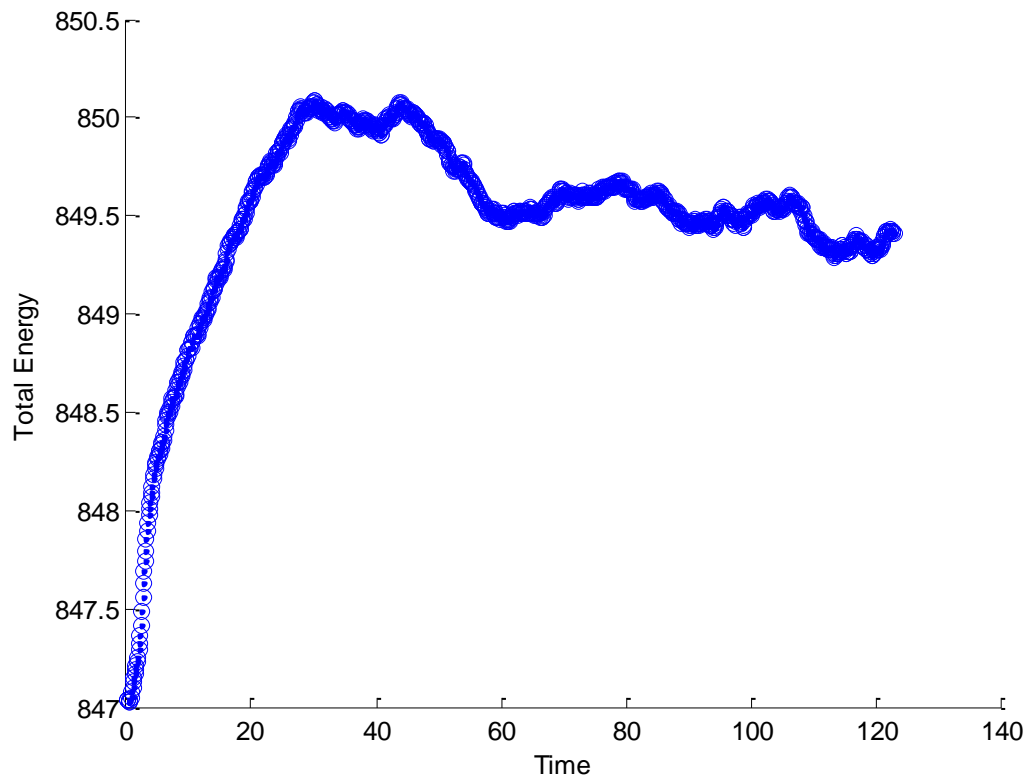
Εικόνα 5.20: Μεταβολή της συνολικής ενέργειας κοπής για $d/r=0,1$

Βάθος κοπής (d)
2 Å



Εικόνα 5.21: Μεταβολή της συνολικής ενέργειας κοπής για $d/r=0,2$

Βάθος κοπής (d)
4 Å



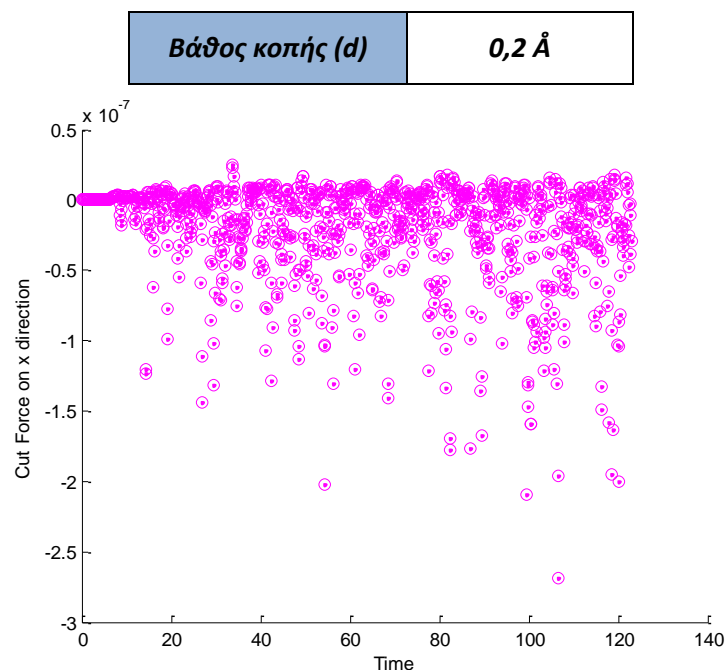
Εικόνα 5.22: Μεταβολή της συνολικής ενέργειας κοπής για $d/r=0,4$

Παρατηρούμε ότι σε όλες τις περιπτώσεις η συνολική ενέργεια παρουσιάζει μια απότομη αύξηση κατά τα πρώτα βήματα της προσομοίωσης και τη συνέχεια η καμπύλη τείνει να σταθεροποιηθεί. Παρατηρούμε ότι για βάθος κοπής 1 Å, η μορφή της καμπύλης συνεχίζει να είναι ανοδική πράγμα το οποίο αντιστοιχεί στην υψηλότερη ενέργεια που πρέπει να αποκτήσουν τα άτομα του υλικού για να αποκοπούν από το τεμάχιο καθώς πλησιάζουμε στο ΕΠΑ. Από την άλλη πλευρά για τιμές βάθους κοπής μεγαλύτερες του ΕΠΑ, ο μέσος όρος των τιμών τείνει να μειώνεται καθώς είναι ευκολότερη η αποκοπή των ατόμων του υλικού και ο σχηματισμός του αποβλίττου.

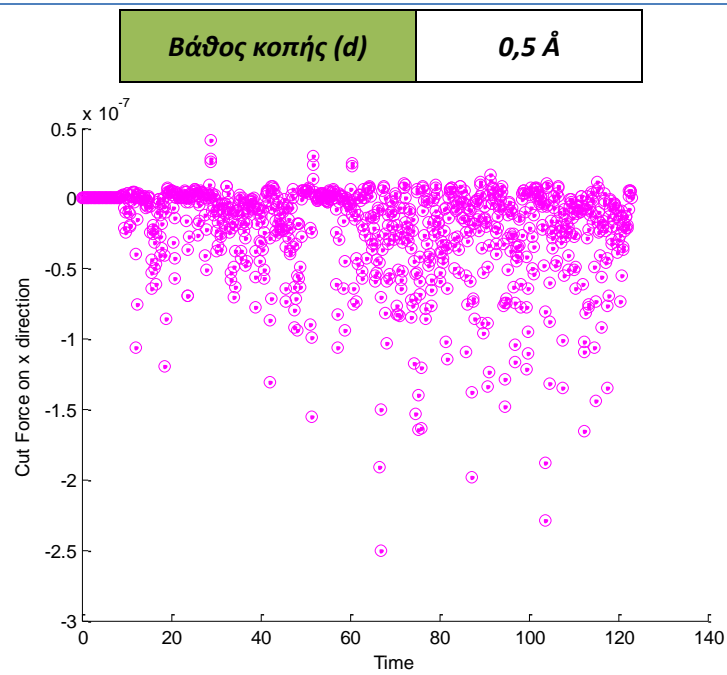
5.5 Μεταβολή της δύναμης κοπής στην κατεύθυνση x με το βάθος κοπής

Στην ενότητα αυτή θα εξετάσουμε την επίδραση που έχει η μεταβολή του βάθους κοπής στη δύναμη κοπής κατά την κατεύθυνση x, για δεδομένη γωνία κοπής και ακτίνα καμπυλότητας. Συγκεκριμένα η γωνία κοπής διατηρείται ίση με -20° και η ακτίνα καμπυλότητας ίση με 10 Å, ενώ το βάθος κοπής εξετάζεται για τις τιμές: 0,2 Å, 0,5 Å, 1 Å, 2 Å και 4 Å.

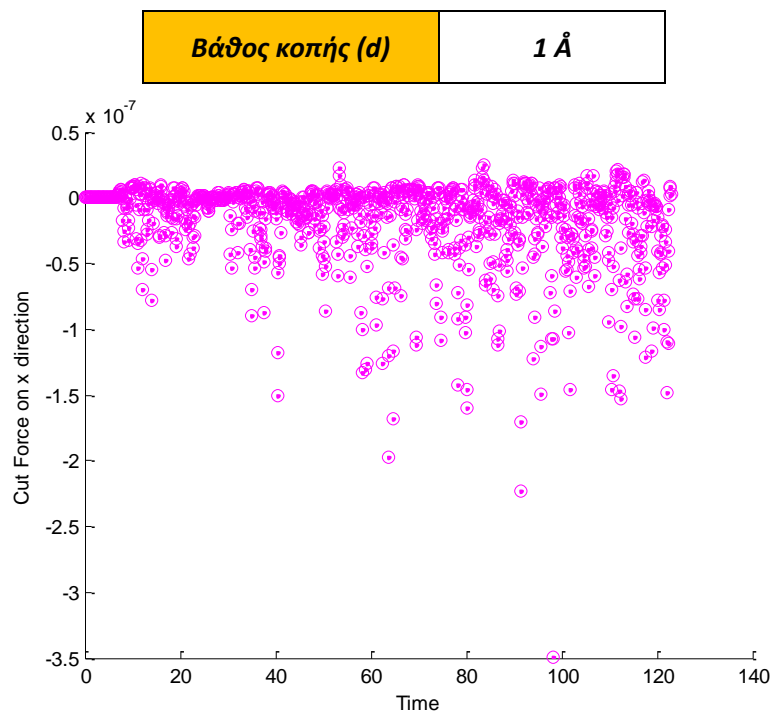
Αντίστοιχα διαγράμματα που αφορούν τη συνολική δύναμη κατά την κατεύθυνση x για τα ίδια βάθη κοπής παρουσιάζονται στο Παράρτημα.



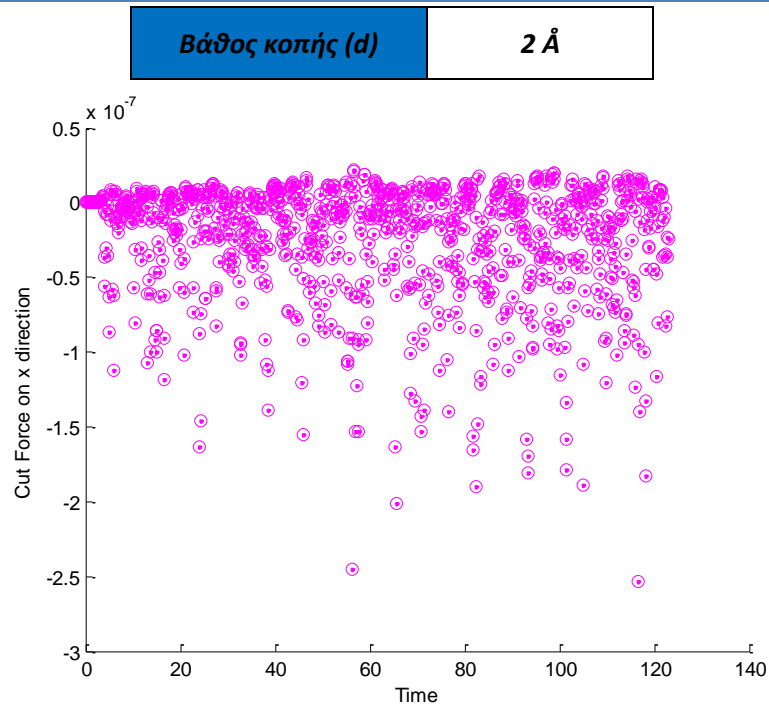
Εικόνα 5.23: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για βάθος κοπής 0,2 Å



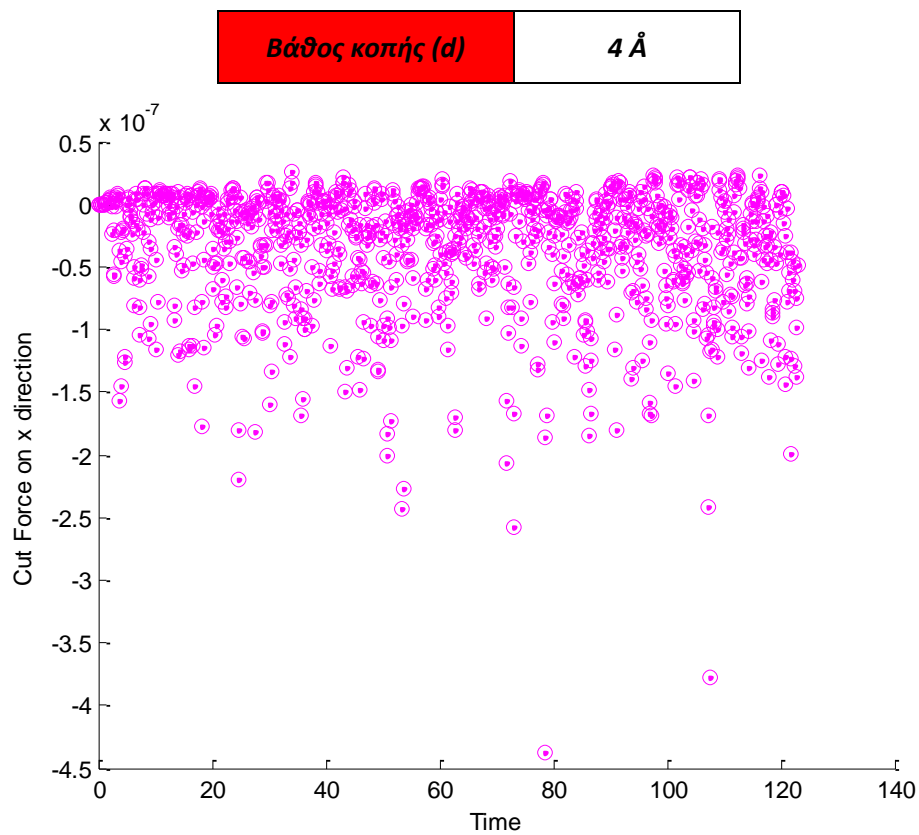
Εικόνα 5.24: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για βάθος κοπής 0,5 Å



Εικόνα 5.25: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για βάθος κοπής 1 Å



Εικόνα 5.26: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για βάθος κοπής 2 Å

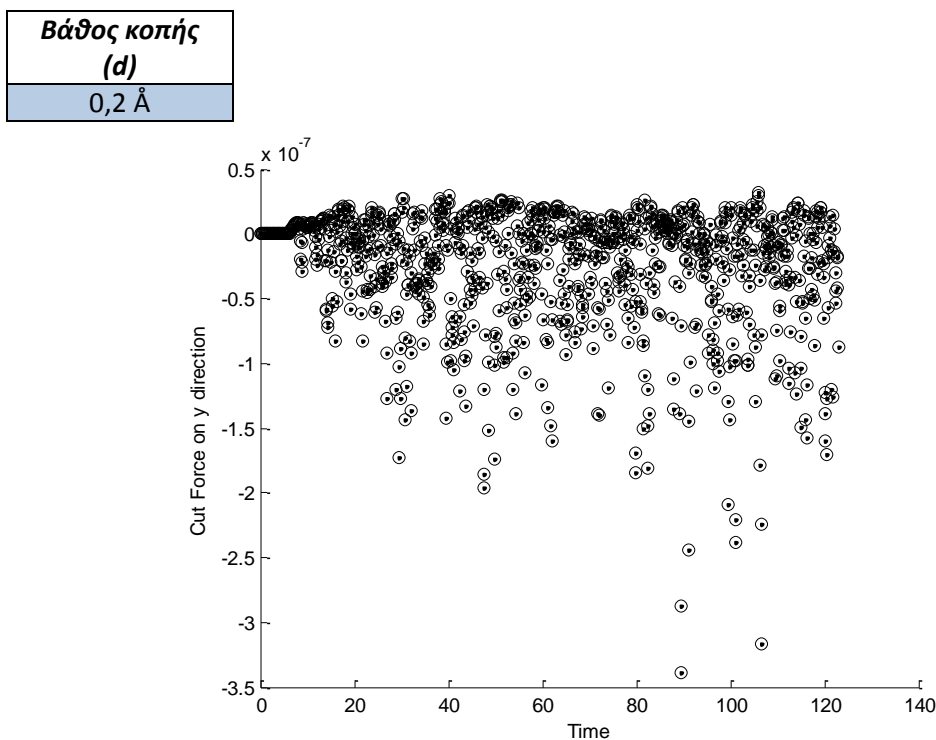


Εικόνα 5.27: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για βάθος κοπής 4 Å

Όσον αφορά τις δυνάμεις κατά την κατεύθυνση x παρατηρούμε ότι κατά την έναρξη της προσομοίωσης οι δυνάμεις συσσωρεύονται γύρω από την τιμή μηδέν ενώ όσο προχωρά η προσομοίωση εμφανίζονται ορισμένες αρνητικές τιμές οι οποίες φτάνουν ως το $-2 \cdot 10^{-8}$ N. Καθώς αυξάνεται το βάθος κοπής παρατηρούνται ορισμένα σημεία με πιο αρνητικές τιμές, ενώ τα σημεία δεν είναι τόσο συγκεντρωμένα γύρω από το μηδέν, παρουσιάζουν δηλαδή μεγαλύτερη διασπορά προς τις αρνητικές τιμές. Αυτό είναι λογικό διότι όσο αυξάνεται το βάθος κοπής επηρεάζονται περισσότερα άτομα από το κοπτικό εργαλείο, τα οποία με τη σειρά τους επηρεάζουν τα γειτονικά τους άτομα, ασκώντας τους δυνάμεις κατά την κατεύθυνση της κίνησης.

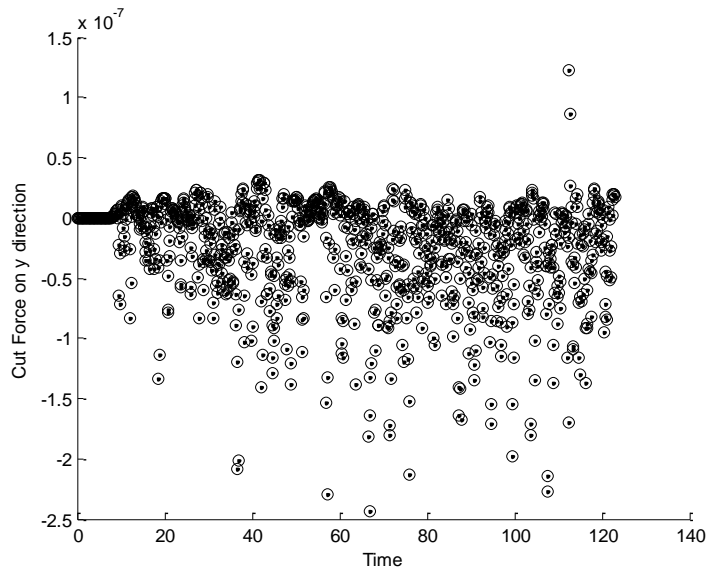
5.6 Μεταβολή της δύναμης κοπής στην κατεύθυνση y με το βάθος κοπής

Στην ενότητα αυτή θα εξετάσουμε την επίδραση που έχει η μεταβολή του βάθους κοπής στη δύναμη κοπής κατά την κατεύθυνση y , για δεδομένη γωνία κοπής και ακτίνα καμπυλότητας. Συγκεκριμένα η γωνία κοπής διατηρείται ίση με -20° και η ακτίνα καμπυλότητας ίση με 10 \AA , ενώ το βάθος κοπής εξετάζεται για τις τιμές: $0,2 \text{ \AA}$, $0,5 \text{ \AA}$, 1 \AA , 2 \AA και 4 \AA . Αντίστοιχα διαγράμματα που αφορούν τη συνολική δύναμη κατά την κατεύθυνση y για τα αντίστοιχα βάθη κοπής παρουσιάζονται στο Παράρτημα.



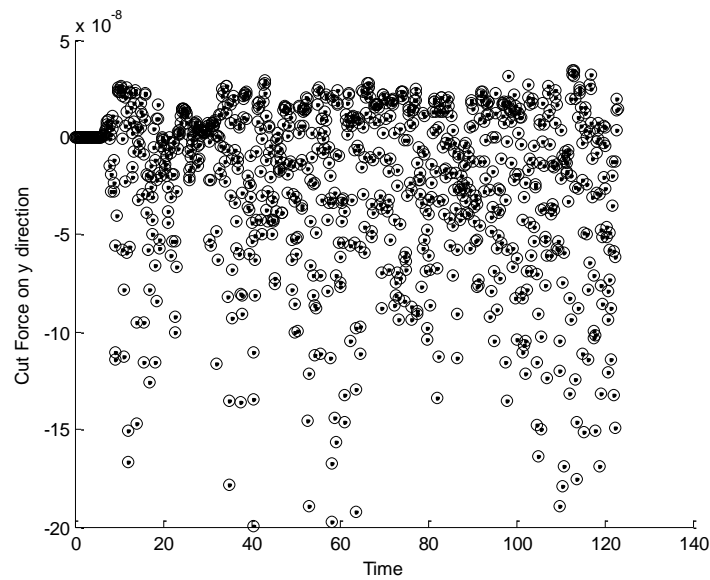
Εικόνα 5.28: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για βάθος κοπής $0,2 \text{ \AA}$

**Βάθος κοπής
(d)**
0,5 Å



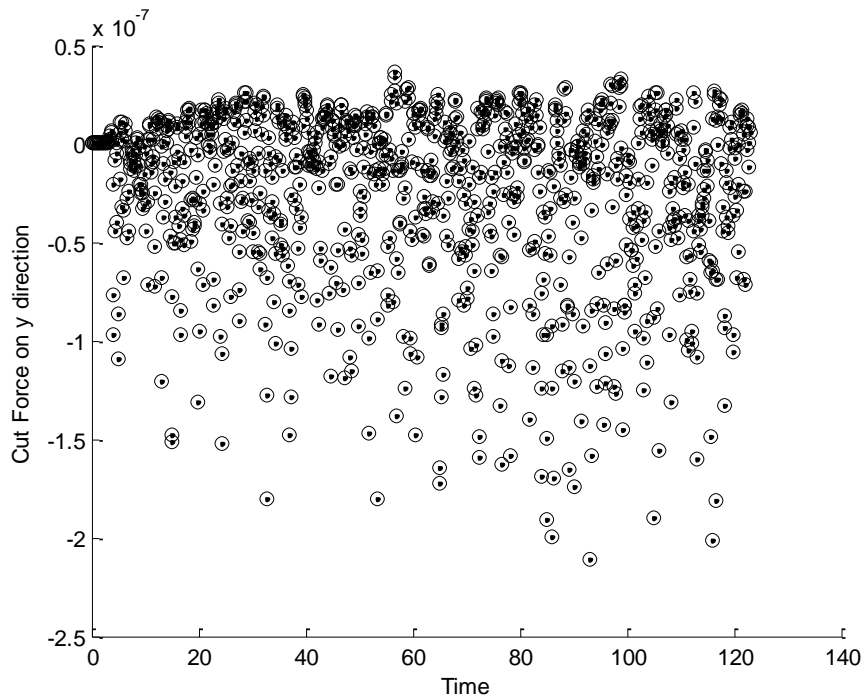
Εικόνα 5.29: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για βάθος κοπής 0,5 Å

**Βάθος κοπής
(d)**
1 Å



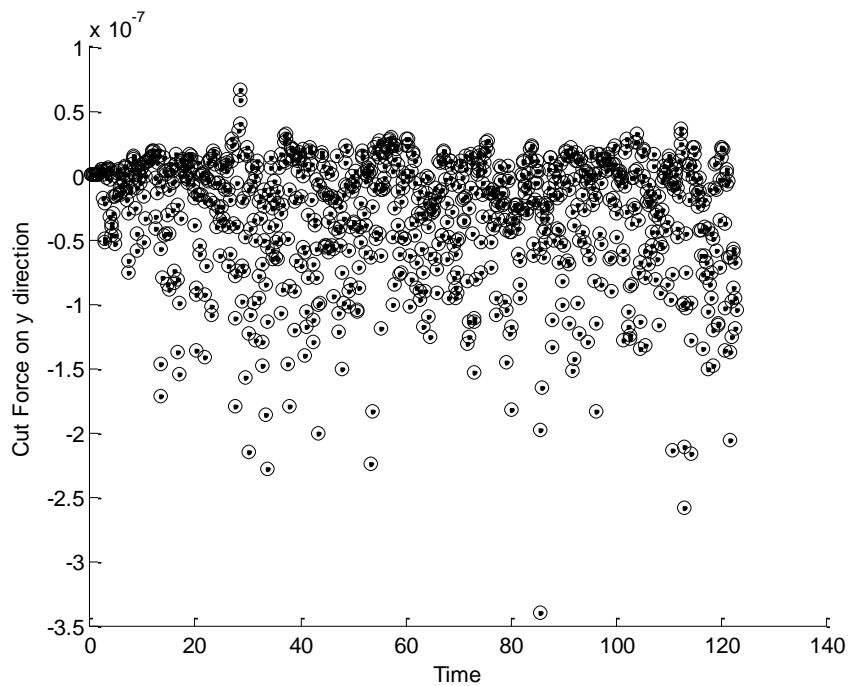
Εικόνα 5.30: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για βάθος κοπής 1 Å

**Βάθος κοπής
(d)**
2 Å



Εικόνα 5.31: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για βάθος κοπής 2 Å

**Βάθος κοπής
(d)**
4 Å



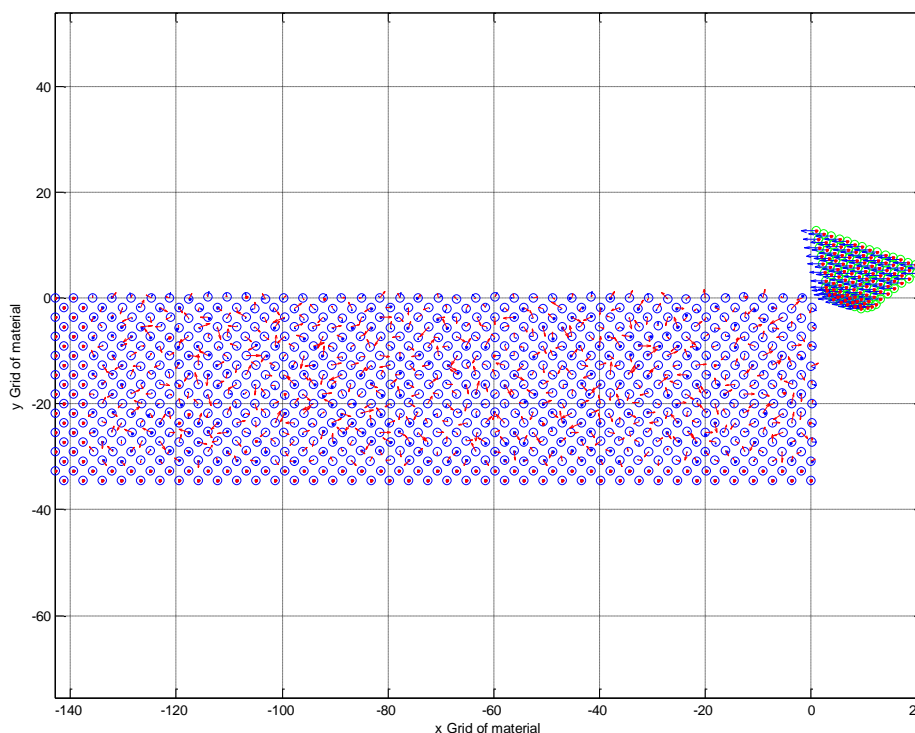
Εικόνα 5.32: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για βάθος κοπής 4 Å

Ομοίως η δύναμη κατά την κατεύθυνση y έχει τιμές που συσσωρεύονται γύρω από το μηδέν κατά την έναρξη της προσομοίωσης και παρουσιάζουν μεγαλύτερη διασπορά όσο η προσομοίωση εξελίσσεται. Όπως και στην περίπτωση της δύναμης κατά την κατεύθυνση x , όσο αυξάνεται το βάθος κοπής, τόσο αυξάνεται και η διασπορά των τιμών γύρω από τη μηδενική τιμή, λόγω του μεγαλύτερου πλήθους ατόμων που επηρεάζονται από την κοπή, δεχόμενα δυνάμεις από τα γειτονικά τους άτομα.

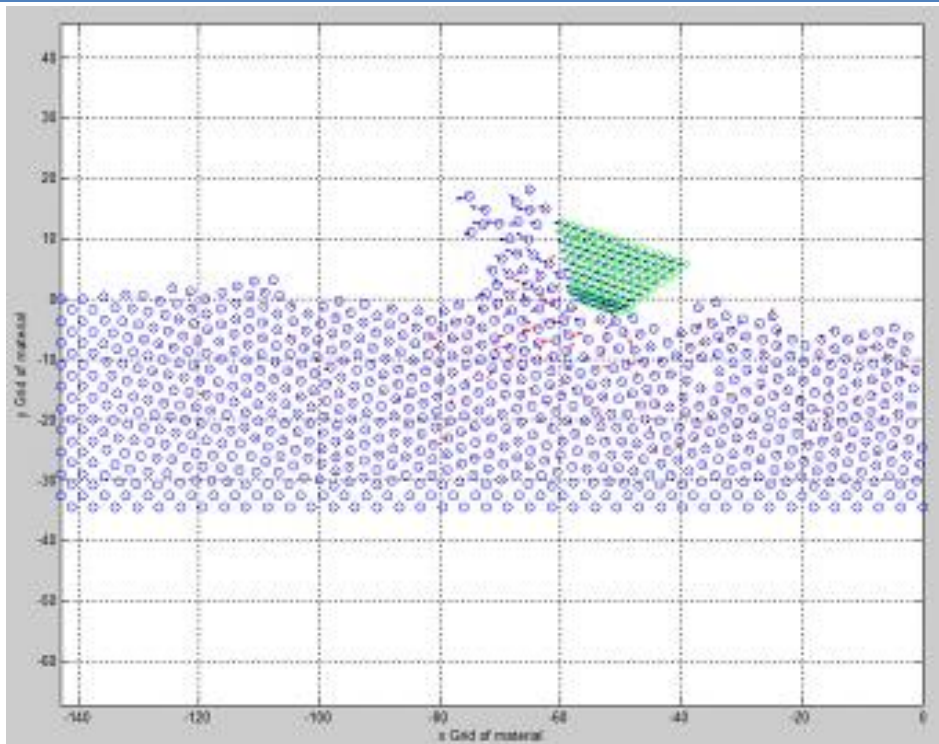
5.7 Αποτελέσματα προσομοιώσεων για διαφορετική ακτίνα καμπυλότητας r

Στην ενότητα αυτή θα εξεταστεί η επίδραση της μεταβολής της ακτίνας καμπυλότητας στο σχηματισμό του αποβλίττου. Συγκεκριμένα διατηρούμε τη γωνία κοπής ίση με 20° και το βάθος κοπής ίσο με 2 \AA για το οποίο προέκυψε στην προηγούμενη ενότητα το ελάχιστο πάχος αποβλίττου και μεταβάλλουμε την ακτίνα καμπυλότητας από 4 ως 20 \AA .

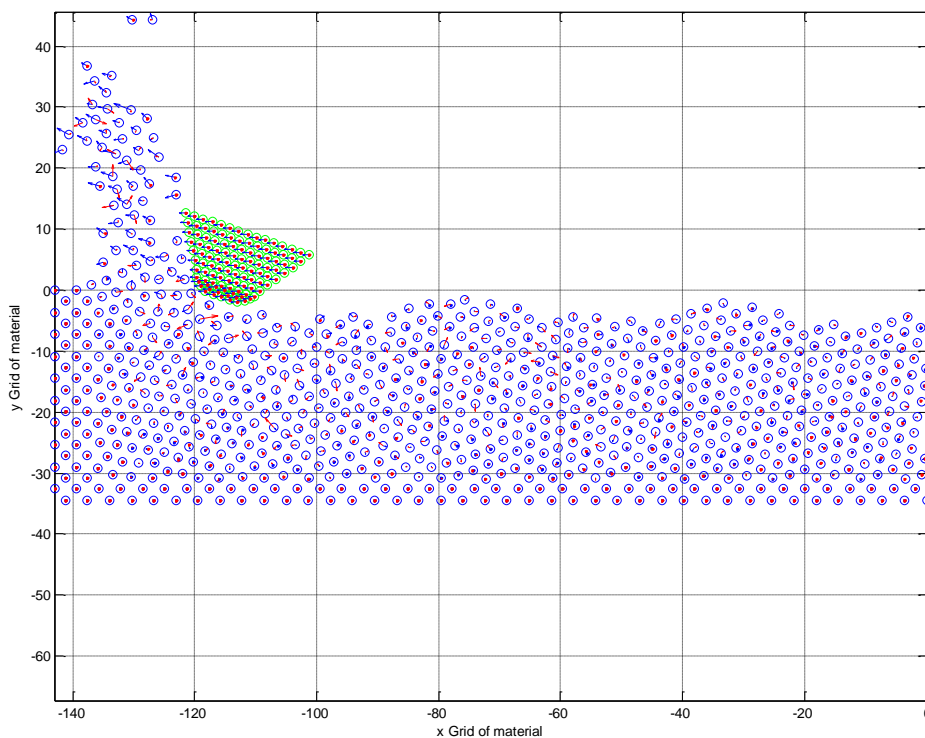
Γωνία κοπής (α)	Βάθος κοπής (d)	Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
$+20^\circ$	2 \AA	4 \AA	0,5



Εικόνα 5.33: Στιγμιότυπο της κοπής κατά την έναρξη της προσομοίωσης



Εικόνα 5.34: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης

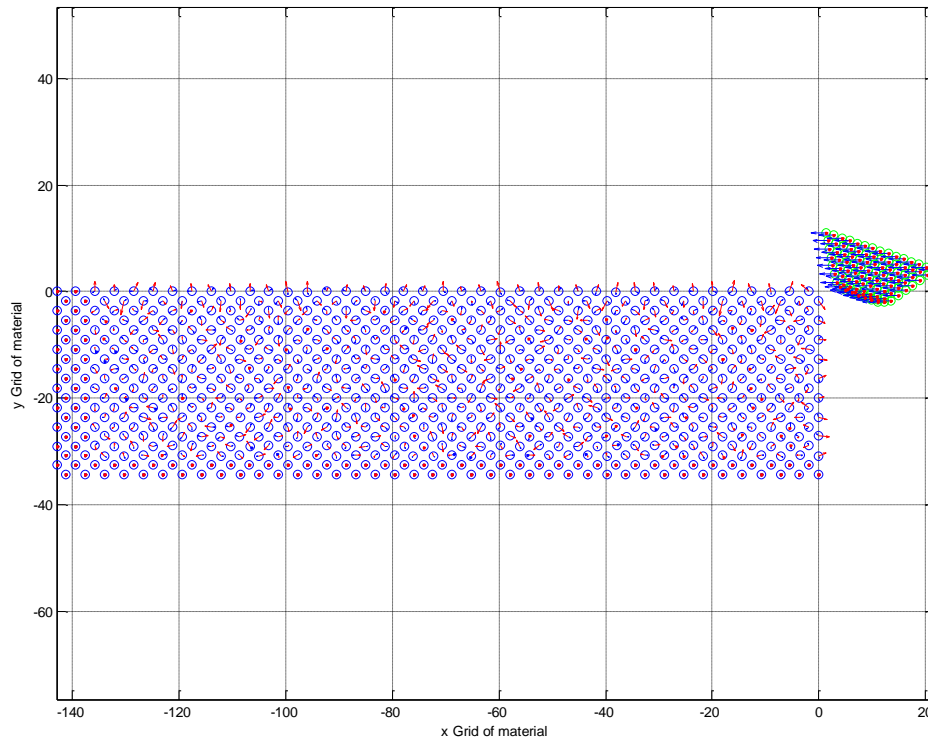


Εικόνα 5.35: Στιγμιότυπο της κοπή στο τέλος της προσομοίωσης

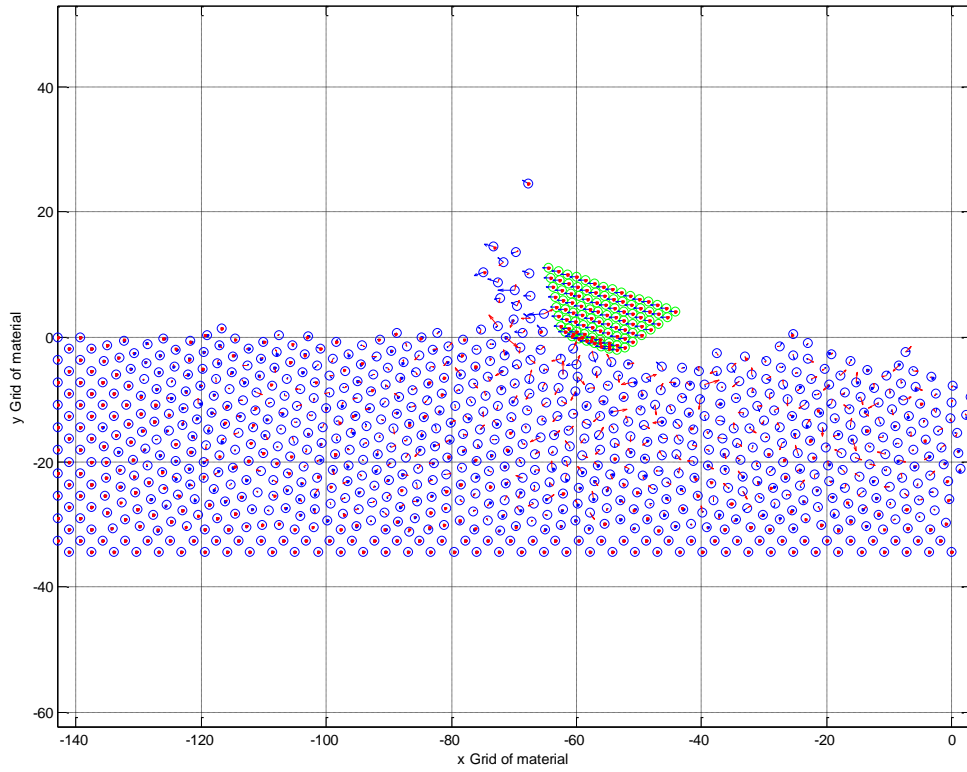
Για τις συγκεκριμένες συνθήκες κοπής, όπου ισχύει $d/r= 0,5$, αφαιρούνται από το τεμάχιο 65 άτομα. Παρατηρούμε δηλαδή ότι στην περίπτωση αυτή που η ακτίνα καμπυλότητας έχει μειωθεί, για το ίδιο βάθος κοπής, αφαιρούνται πολύ

περισσότερα άτομα από το υλικό. Αυτό δικαιολογείται διότι όσο πιο αιχμηρό είναι το κοπτικό εργαλείο, τόσο πιο εύκολα αποκόπτονται τα άτομα από το κυρίως σώμα του υλικού.

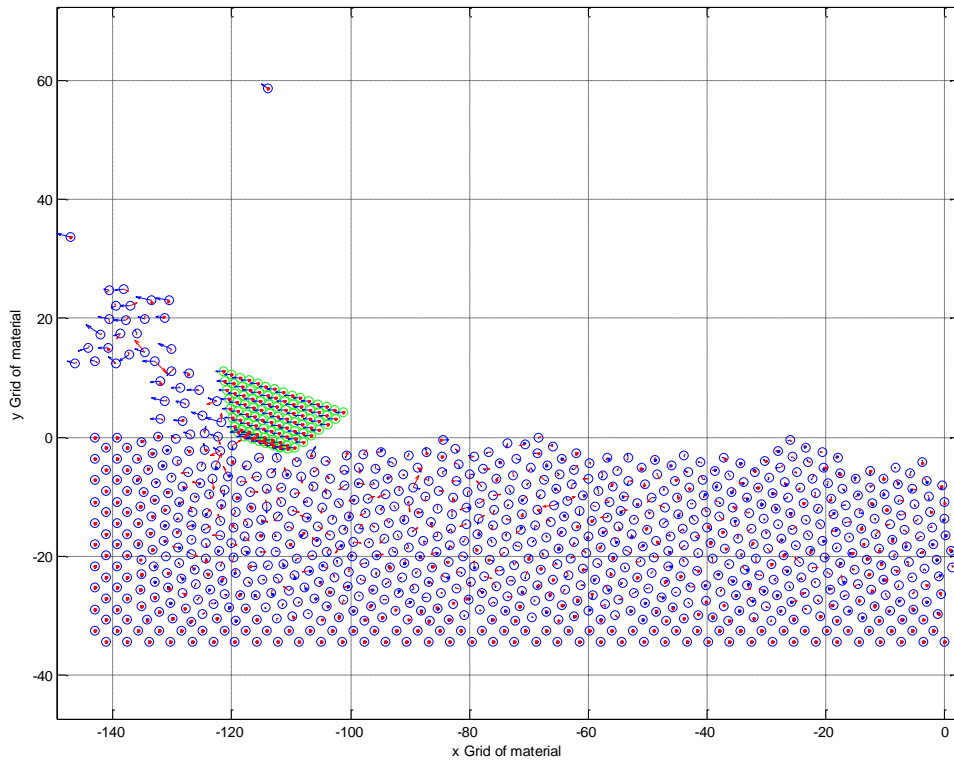
Γωνία κοπής (α)	Βάθος κοπής (d)	Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
+20°	2 Å	10 Å	0,2



Εικόνα 5.36: Στιγμιότυπο της κοπής κατά την έναρξη της προσομοίωσης



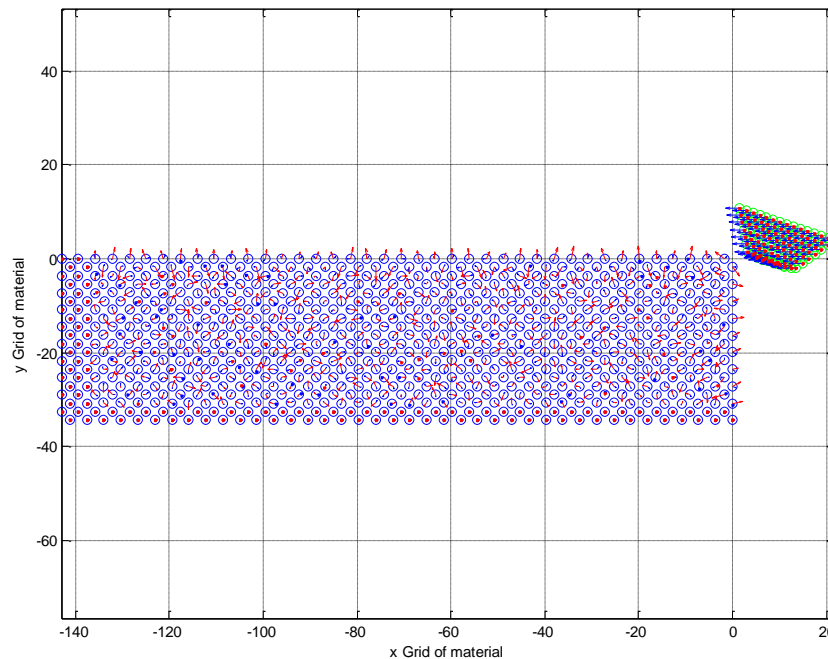
Εικόνα 5.37: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης



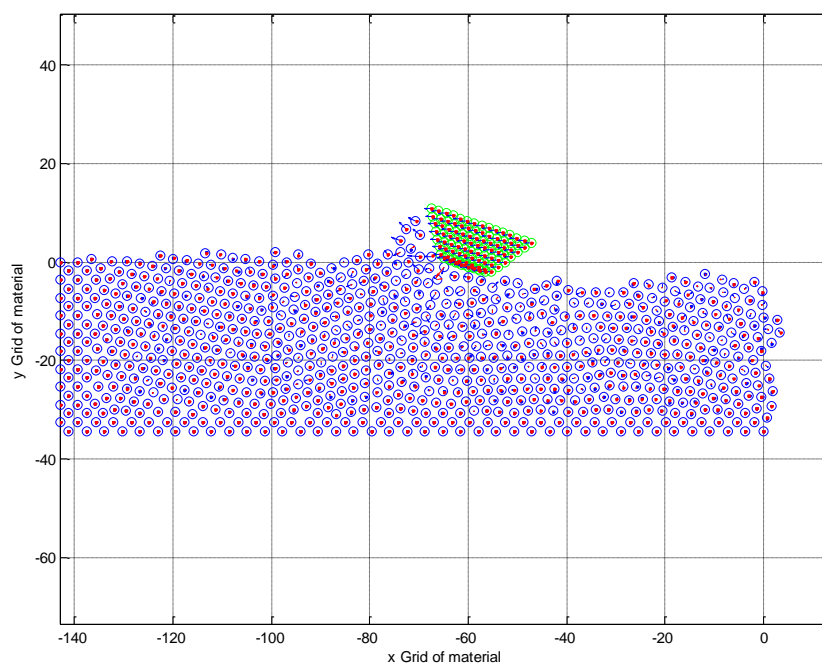
Εικόνα 5.38: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης

Για τις συγκεκριμένες συνθήκες κοπής, όπου ισχύει $d/r= 0,2$, αφαιρούνται από το τεμάχιο 49 άτομα. Όπως ήταν αναμενόμενο, η αύξηση της ακτίνας καμπυλότητας οδήγησε στην απομάκρυνση λιγότερων ατόμων από το σώμα του υλικού. Όσο αυξάνεται η ακτίνα καμπυλότητας, το εργαλείο κυρίως «πιέζει» τα άτομα πάνω από τα οποία περνά, έχοντας με αυτό τον τρόπο τη δυνατότητα να αποκόψει λιγότερα άτομα.

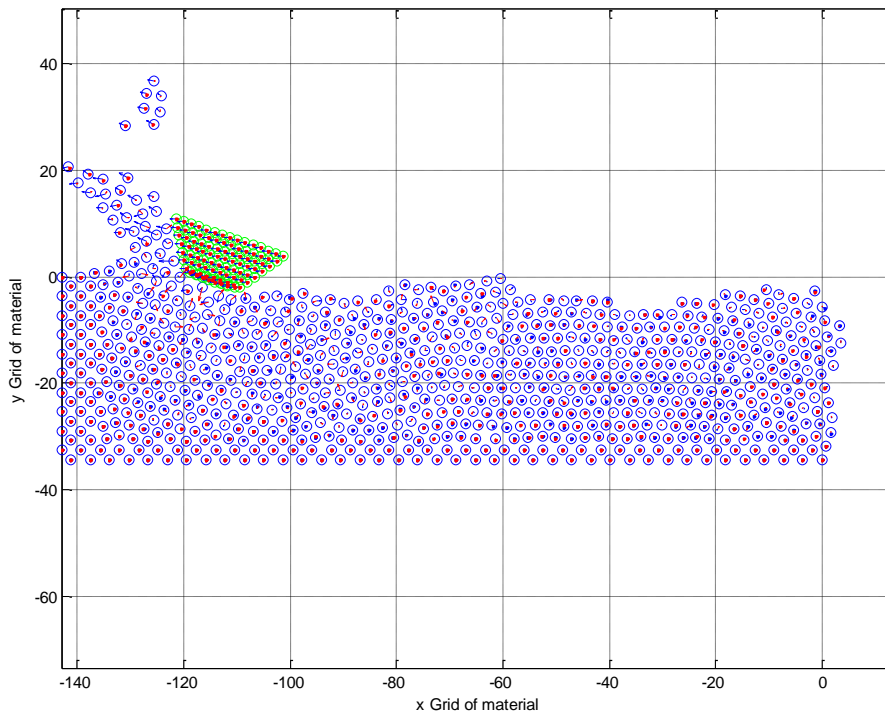
Γωνία κοπής (α)	Βάθος κοπής (d)	Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
+20°	2 Å	15 Å	0,13



Εικόνα 5.39: Στιγμιότυπο της κοπής κατά της έναρξη της προσομοίωσης



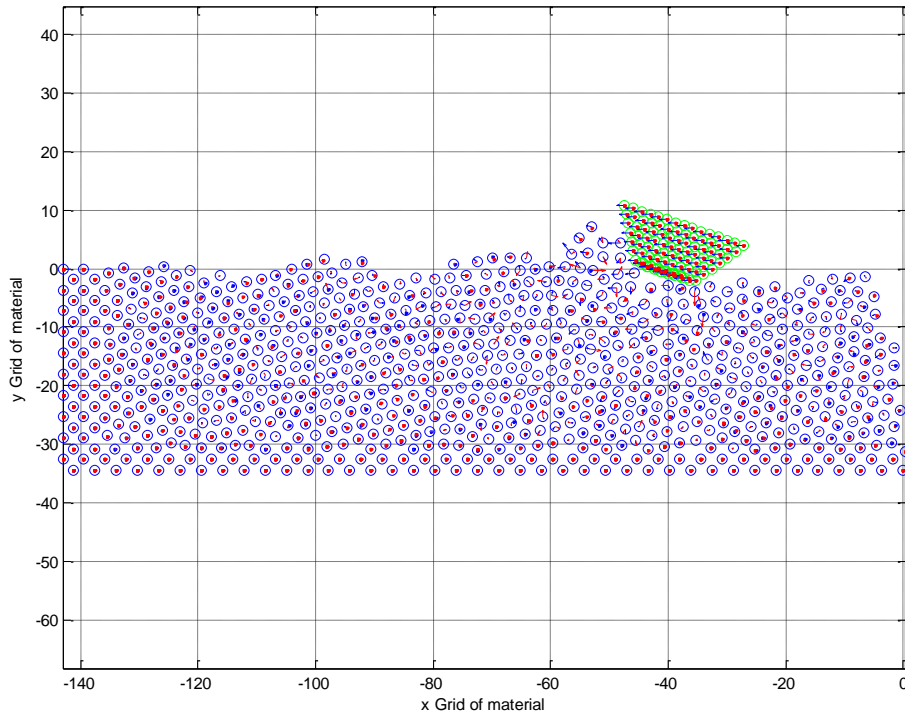
Εικόνα 5.40: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης



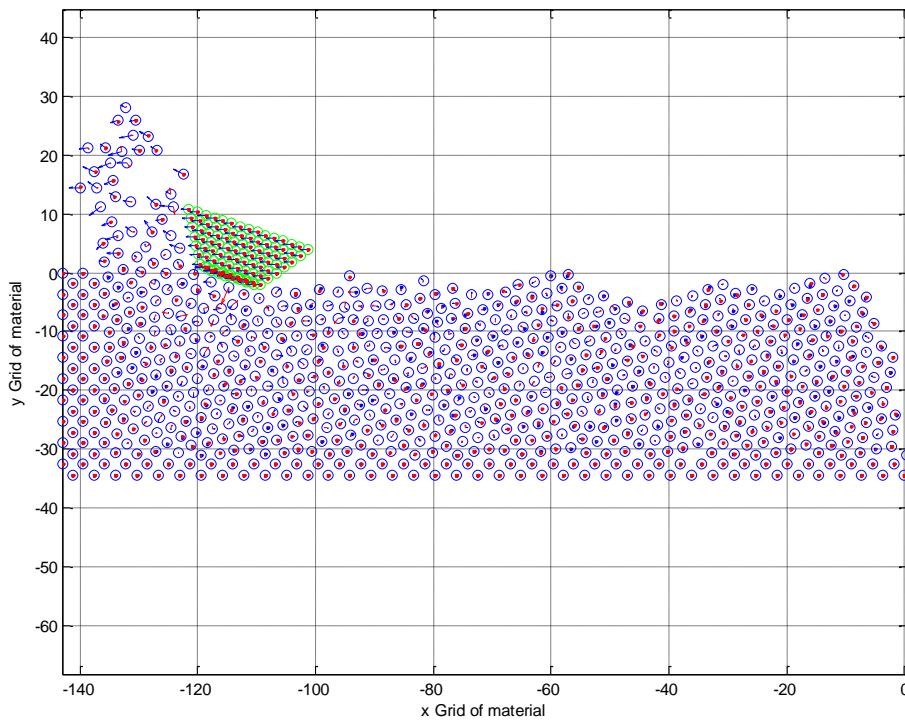
Εικόνα 5.41: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης

Για τις συγκεκριμένες συνθήκες κοπής, όπου ισχύει $d/r= 0,13$, αφαιρούνται από το τεμάχιο 45 άτομα. Όπως και στην προηγούμενη περίπτωση, η αύξηση της ακτίνας καμπυλότητας οδήγησε στην αποκοπή λιγότερων ατόμων από το υλικό, η οποία αναφέρθηκε και πριν, οφείλεται στο ότι το εργαλείο περισσότερο συμπιέζει παρά αποκόπτει τα άτομα από το κυρίως σώμα του υλικού.

Γωνία κοπής (α)	Βάθος κοπής (d)	Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
+20°	2 Å	20 Å	0,1



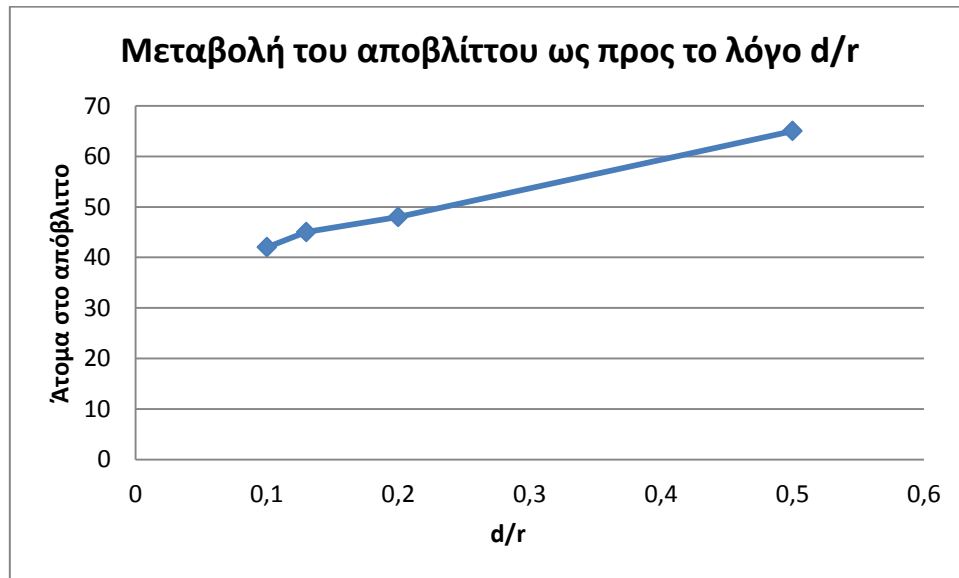
Εικόνα 5.42: Στιγμιότυπο της κοπής κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης



Εικόνα 5.43: Στιγμιότυπο της κοπής στο τέλος της προσομοίωσης

Για τις συγκεκριμένες συνθήκες κοπής, όπου ισχύει $d/r= 0,1$, αφαιρούνται από το τεμάχιο 42 άτομα., λιγότερα από όλες τις περιπτώσεις που μελετήθηκαν καθώς η περίπτωση αυτή αντιστοιχεί στη μεγαλύτερη ακτίνα καμπυλότητας.

Στο διάγραμμα που ακολουθεί παρουσιάζεται η μεταβολή του αποβλίττου ως προς το λόγο του βάθους κοπής προς την ακτίνα καμπυλότητας, μεταβάλλοντας την ακτίνα καμπυλότητας για δεδομένο βάθος κοπής.

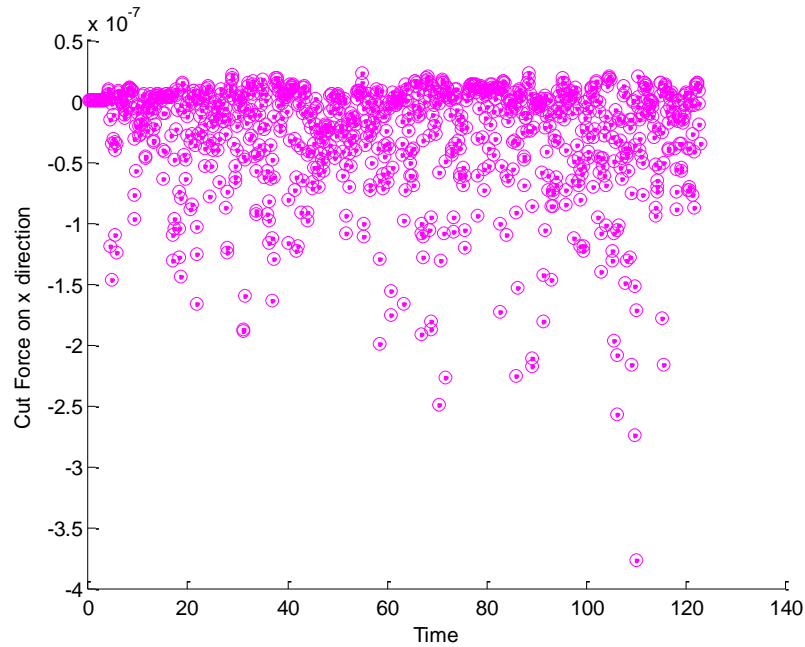


Εικόνα 5.44: Μεταβολή του αποβλίττου ως προς το λόγο d/r

Παρατηρούμε ότι η μεταβολή του αποβλίττου είναι γραμμική ως προς το λόγο d/r , για δεδομένο βάθος κοπής, δηλαδή όσο αυξάνεται η γωνία καμπυλότητας μειώνεται το πλήθος των ατόμων που αφαιρούνται από το υλικό μέσω της κοπής. Αυτό όπως αναφέρθηκε προκύπτει λόγω της συμπίεσης που προκαλείται στο υλικό από το κοπτικό εργαλείο. Για να μειωθεί η άρωση που προκαλείται στο υλικό και να αποκοπούν περισσότερα άτομα πρέπει να αυξηθεί το βάθος κοπής.

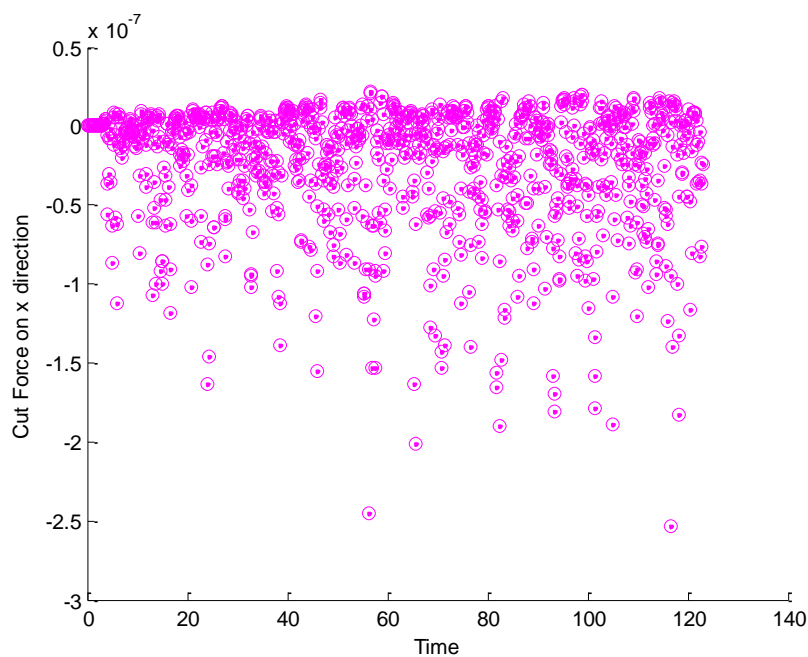
5.8 Μεταβολή της δύναμης κοπής στην κατεύθυνση x με την ακτίνα καμπυλότητας

Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
2Å	0,5



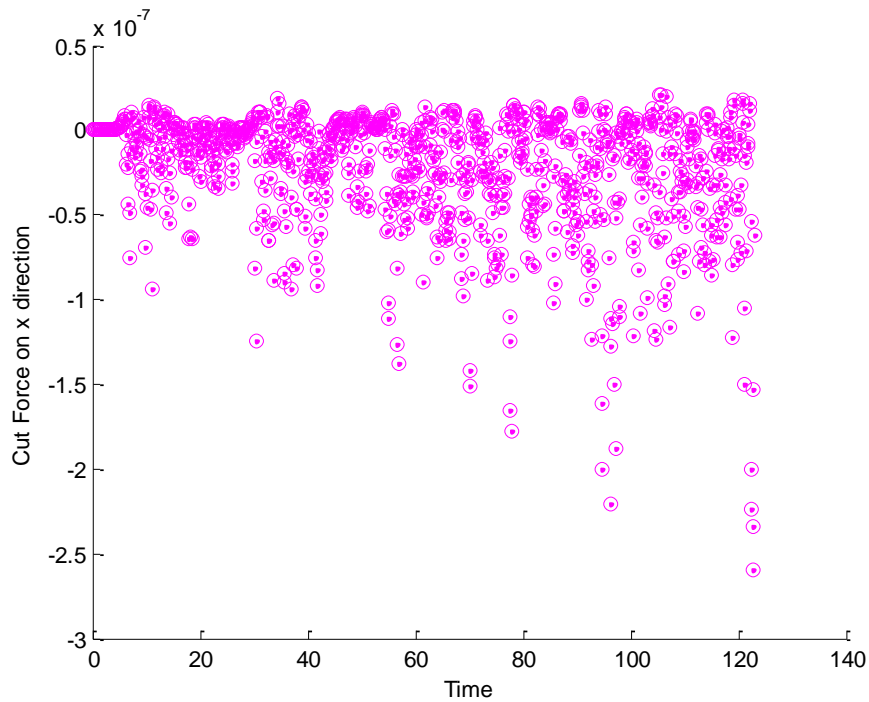
Εικόνα 5.45: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για $d/r=0,5$

Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
10Å	0,2



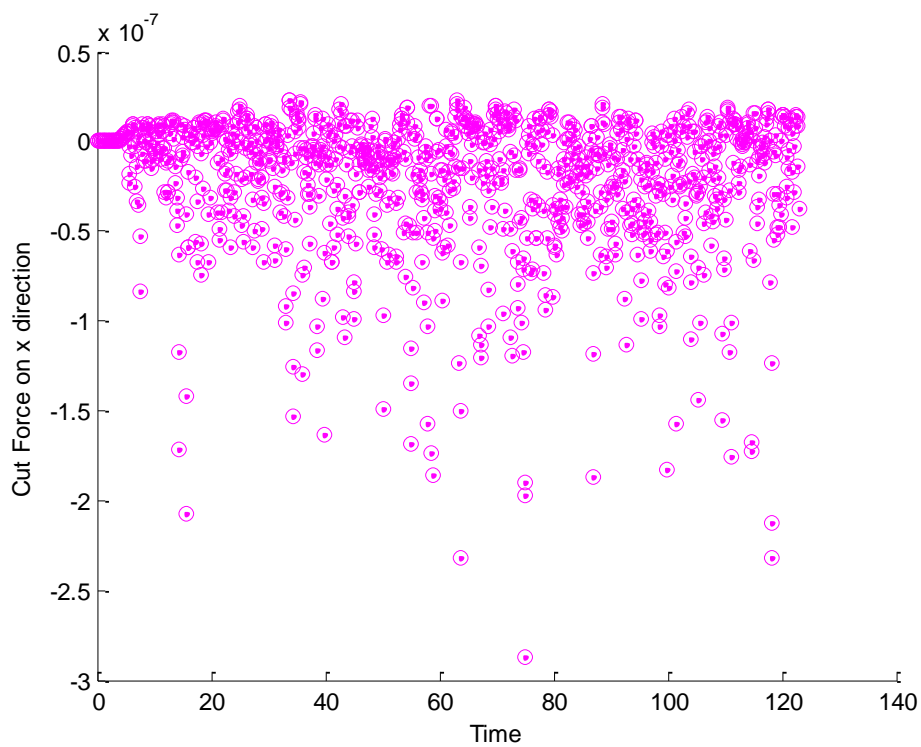
Εικόνα 5.46: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για $d/r=0,2$

Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
15Å	0,13



Εικόνα 5.47: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για $d/r=0,13$

Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
20Å	0,1

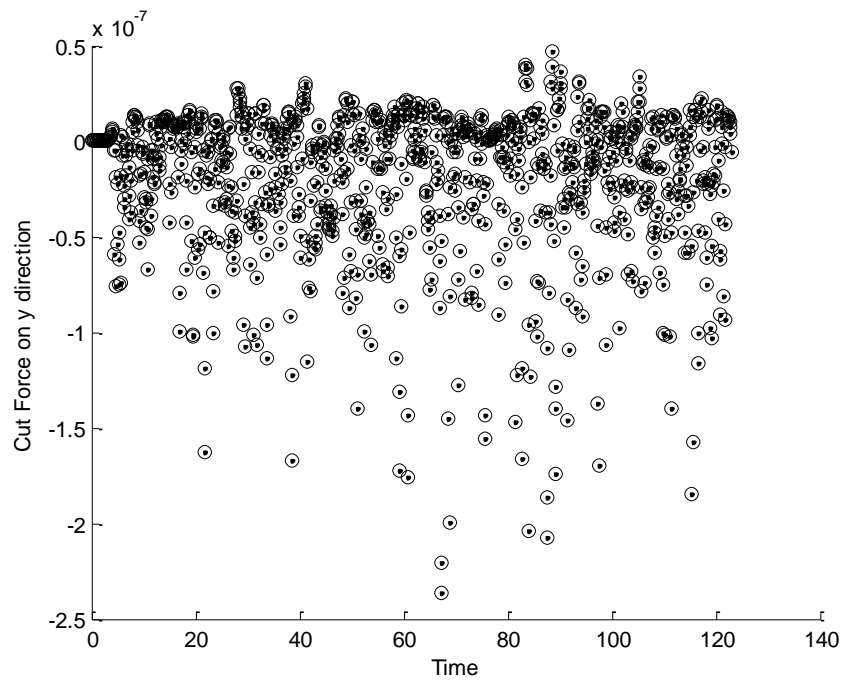


Εικόνα 5.48: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση x για $d/r=0,1$

Παρατηρούμε ότι οι δυνάμεις κοπής κατά τον άξονα x είναι μεγαλύτερες για τη μικρότερη ακτίνα καμπυλότητας. Αυτό δικαιολογείται διότι όσο μικρότερη είναι η ακτίνα καμπυλότητας, δηλαδή όσο αιχμηρό είναι το κοπτικό εργαλείο, τόσο περισσότερο μπορεί να μετακινήσει τα άτομα του υλικού και να τα αποκόψει από το τεμάχιο, ενώ όταν η ακτίνα καμπυλότητας αυξάνεται το κοπτικό εργαλείο δεν έχει τη δυνατότητα να αποκόψει τα άτομα του υλικού παρά μόνο να τα μετακινήσει ελαφρώς και στη συνέχεια να επιστρέψουν στις αρχικές θέσεις τους.

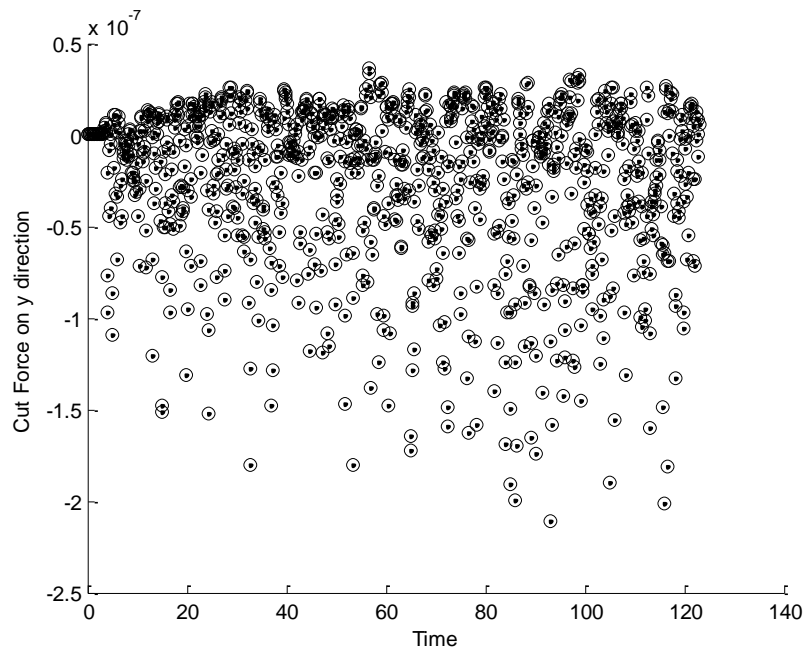
5.9 Μεταβολή της δύναμης κοπής στην κατεύθυνση y με την ακτίνα καμπυλότητας

Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
4Å	0,5



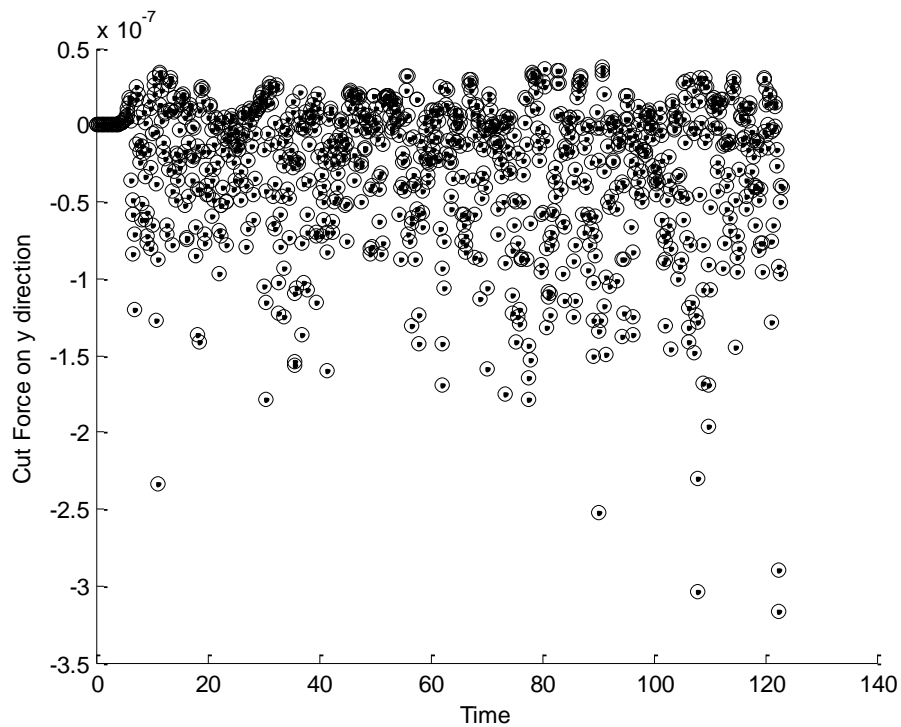
Εικόνα 5.49: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για d/r=0,5

Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
10Å	0,2



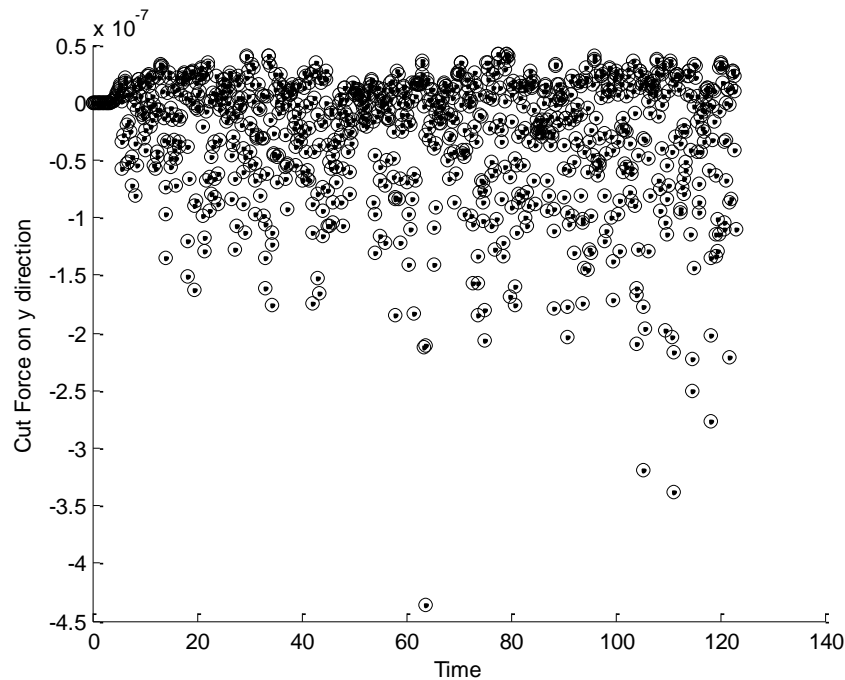
Εικόνα 5.50: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για $d/r=0,2$

Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
15Å	0,13



Εικόνα 5.51: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για $d/r=0,13$

Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
20Å	0,1



Εικόνα 5.52: Μεταβολή της δύναμης κοπής κατά την κατεύθυνση y για $d/r=0,1$

Όσον αφορά τη δύναμη κοπής κατά την κατεύθυνση y , παρατηρούμε ότι όσο αυξάνεται η ακτίνα καμπυλότητας εμφανίζονται πιο αρνητικές δυνάμεις κατά τον κάθετο άξονα. Όσο αυξάνεται η ακτίνα καμπυλότητας δυσχεραίνεται η αποκοπή των ατόμων του υλικού από το τεμάχιο και το υλικό συμπιέζεται προς τα κάτω, λόγω άρρωσης. Για το λόγο αυτό είναι και λιγότερα τα άτομα που αφαιρούνται από το υλικό όσο αυξάνεται η ακτίνα καμπυλότητας για δεδομένο βάθος κοπής.

Συμπεράσματα

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής για τη μελέτη της κοπής χαλκού από εργαλείο διαμαντιού σε επίπεδο νανοκλίμακας. Η Μοριακή Δυναμική αποτελεί μια από τις καταλληλότερες μεθόδους για τη μελέτη τέτοιων φαινομένων, αφού το “πλέγμα” που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση του τεμαχίου κατεργασίας και του κοπτικού εργαλείου είναι αντίστοιχα το πλέγμα της δομής του κάθε υλικού.

Μελετήθηκε η επίδραση διαφόρων παραμέτρων στην κοπή και στο σχηματισμό αποβλίττου, όπως η μεταβολή της γωνίας κοπής, η μεταβολή του βάθους κοπής και της ακτίνας καμπυλότητας. Όπως προέκυψε από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, όταν επιλέγεται αρνητική γωνία κοπής στο κοπτικό εργαλείο, οι δυνάμεις κοπής που ασκούνται στο σύνολο τεμαχίου-εργαλείου είναι μεγαλύτερες από την περίπτωση κατά την οποία επιλέγεται θετική γωνία κοπής στο εργαλείο. Το αποτέλεσμα αυτό συμφωνεί με τις βιβλιογραφικές αναφορές, οι οποίες αναφέρουν ότι οι αρνητικές γωνίες κοπής πρέπει να αποφεύγονται διότι οδηγούν σε μεγαλύτερη φθορά του κοπτικού εργαλείου.

Στη συνέχεια εξετάστηκε η μεταβολή του βάθους κοπής στην εμφάνιση του ελάχιστου πάχους αποβλίττου. Συγκεκριμένα το βάθος κοπής μεταβλήθηκε από 0,2 Å ως 4 Å και εξετάστηκε το πλήθος των ατόμων που αφαιρούνται σε κάθε περίπτωση για το σχηματισμό του αποβλίττου. Για γωνία κοπής 20° και ακτίνα καμπυλότητας 10 Å, το Ελάχιστο Πάχος Κοπής προέκυψε για βάθος κοπής 2 Å και ήταν ίσο με μια στρώση ατόμων του υλικού. Μελετήθηκαν επίσης οι δυνάμεις της κοπής κατά τις κατευθύνσεις x και y και προέκυψε ότι όσο αυξάνεται το βάθος κοπής αυξάνονται οι τιμές της δύναμης, καθώς επηρεάζονται περισσότερα άτομα από την κοπή, τα οποία με τη σειρά τους ασκούν δυνάμεις στα γειτονικά τους άτομα. Όσον αφορά την ενέργεια της κοπής, παρατηρήθηκε αυξητική τάση όταν το βάθος κοπής βρισκόταν κοντά σε εκείνο που αντιστοιχεί στο ΕΠΑ ενώ με περαιτέρω αύξηση του βάθους κοπής παρατηρείται μείωση της συνολικής ενέργειας τεμαχίου-εργαλείου. Το γεγονός αυτό μπορεί να αποδοθεί στο φαινόμενο κλίμακας που παρουσιάζεται κατά τη νανοκοπή και κατ’ ουσίαν δείχνει ότι σε μικρά βάθη κοπής είναι απαιτείται περισσότερη ενέργεια ανά μονάδα όγκου υλικού για την αποκοπή των ατόμων από το σώμα του υλικού.

Τέλος εξετάστηκε η επίδραση της μεταβολής της ακτίνας καμπυλότητας για δεδομένη γωνία κοπής και βάθος κοπής. Προέκυψε ότι όσο αυξάνεται η ακτίνα καμπυλότητας τόσο δυσκολότερος είναι ο σχηματισμός αποβλίττου, διότι το εργαλείο περισσότερο συμπιέζει τα άτομα του υλικού παρά τα αποκόπτει προς σχηματισμό του αποβλίττου. Οι δυνάμεις κατά την κατεύθυνση x είναι μεγαλύτερες για μικρή ακτίνα καμπυλότητας γιατί το αιχμηρότερο εργαλείο έχει τη δυνατότητα να μετακινήσει και να αποκόψει τα άτομα του υλικού, ενώ με το εργαλείο μεγαλύτερης καμπυλότητας τα άτομα μετακινούνται και στη συνέχεια επανέρχονται

στις αρχικές τους θέσεις. Όσον αφορά τις δυνάμεις κατά την κατεύθυνση y παρατηρούμε ότι οι όσο αυξάνεται η ακτίνα καμπυλότητας, τόσο αυξάνονται οι δυνάμεις κατά τον άξονα αυτό, διότι το εργαλείο συμπιέζει τα άτομα προς την κατακόρυφη κατεύθυνση αντί να τα αποκόπτει.

5.10 Μελλοντικές προοπτικές

Η μελλοντική έρευνα στο τομέα των νανοκοπών θα μπορούσε να συνεχιστεί με τη μετάβαση στις τρεις διαστάσεις και την εφαρμογή περιοδικών συνοριακών συνθηκών στη z διάσταση. Επιπλέον, όπως προέκυψε από την βιβλιογραφική μας ανασκόπηση, 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 στο νανόκοσμο. Στην περίπτωση μας η μελέτη έγινε σε τεμάχιο ατόμων χαλκού. Σημαντική προσθήκη θα ήταν επίσης η εισαγωγή δομών που θα προσομοιάζουν διάφορα ελαττώματα των υλικών, όπως π.χ. κενά. Με τον τρόπο αυτό η προσομοίωση αποκτά πιο ρεαλιστική διάσταση, αφού στην πραγματικότητα κανένα υλικό δεν έχει τέλεια δομή.

Όσον αφορά στο υπολογιστικό τμήμα, θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί η μέθοδος του καταλόγου γειτονικών ατόμων για την εύρεση των αλληλεπιδράσεων, αντί για τη μέθοδο όλων των ζευγών που χρησιμοποιήθηκε, η οποία πιθανώς να οδηγήσει σε μείωση του υπολογιστικού φόρτου και του απαιτούμενου χρόνου υπολογισμού.

Πρέπει ακόμη να σημειωθεί ότι, όσον αφορά την ταχύτητα κοπής 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 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 κοπής πιο κοντά στις πραγματικές (1-5 m/s), πράγμα που θα βοηθήσει να εξαιρεθούν 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. 1 m/s, ένας οκταπύρηνος επεξεργαστής χρειάζεται μια εβδομάδα προσομοίωσης. (Romero 2013)

Βιβλιογραφία

A.G. Atkins, "Modeling metal cutting using modern ductile fracture mechanics: quantitative explanations for some longstanding problems", *Int. J. of Mech. Sci.*, 45, pp. 373-396, 2003.

A.O. Oluwajobi and X. Chen, "Is There a Limit to Nanoscale Mechanical Machining?", Department of Mechanical Engineering, Obafemi Awolowo University, Nigeria, Advanced Manufacturing Technology Research Laboratory, General Engineering Research Institute, Liverpool John Moores University, UK, 2011.

B. Lin, S. Y. Yu, S. X. Wang. "An experimental study on molecular dynamics simulation in nanometer grinding", *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 138, no. 1{3, pp. 484-488, 2003.

D. C. Rapaport, "The Art of Molecular Dynamics Simulation", 2nd edition, Cambridge University Press, 2004.

D. Frenkel, B. Smit, "Understanding Molecular Simulations: From Algorithms to Applications", Academic Press, New York, 1996.

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.

D. N. Theodorou, "Applied Molecular Theory for Engineers", National Technical University Athens, Greece, 2004.

D. A. Lucca, Y.W.Seo, "Effect of Tool Edge Geometry on Energy Dissipation in Ultraprecision Machining", *CIRP Annals*, 42/1:83-88, 1993

E. Brinksmeier, J. C. Aurich, E. Govekar, C. Heinzl, H. W. Hofmeister, F. Klocke, J. Peters, R. Rentsch, D. J. Stephenson, E. Uhlmann, K. Weinert, M. Wittmann, "Advances in modeling and simulation of grinding processes", *Annals of the CIRP*, vol. 55, no. 2, pp. 667-696, 2006.

E. M. Kopalinsky and P.L.B. Oxley, "Size effects in metal removal processes", *Institute of Physics Conference Series*, n70, pp. 389-396, 1984.

E. J. A. Armarego and R. H. Brown, "On the size effect in metal cutting", *International Journal of Production Research.*, 1, n3, pp. 75-99, 1962.

H. Tsuzuki, P.S. Branicio and J.P. Rino, "Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood", *Comput. Phys. Commun.*, 177: p. 518-523, 2007.

J. Belak and I. F.Stowers, "A molecular dynamics model of the orthogonal cutting process". In *Proceedings of the ASPE Annual Conference*, Rochester, p. 76,1990.

- J. Belak, "Nanotribology: modeling atoms when surfaces collide. Energy and Technology Review", Lawrence Livermore National Laboratories (LLNL), pp. 13-24, 1994.
- J. Belak, D. B. Boercker and I. F. Stowers, "Simulation of nanometer-scale deformation of metallic and ceramic surfaces". MRS Bull., 21(2), p. 55-60, May 1993.
- Jing Shi, Yachao Wang and Xiaoping Yang, "Nano-scale machining of polycrystalline coppers - effects of grain size and machining parameters", Nanoscale Research Letters, 8:500, 2013.
- K. Maekawa and A. Itoh, "Friction and tool wear in nano-scale machining—a molecular dynamics approach", Wear 188 115, 1995.
- K. Nakayama, K. Tamura, "Size Effect in Metal- Cutting Force", Journal of Engineering for Industry- Transactions of the ASME, 90/1:119-126, 1968.
- K. Ueda and K. Iwata, "Chip formation mechanism in single crystal cutting of brass", Ann. CIRP, 29(1), 41, 1980.
- K.W. Kim, W.Y. Lee and H.C. Sin, "A finite element analysis of machining with the tool edge considered", J. of Mat. Proc. Tech., 86, pp. 45-55, 1999.
- M. Kotelyanskii, D. N. Theodorou, "Simulation Methods of Polymers", Marcel Dekker Inc., New York, 2004.
- M. P. Allen, D. J. Tildesley and J. R. Banavar, "Computer Simulation of Liquids. Physics Today", 42(3):105, 1989.
- M. P. Allen, D. J. Tildesley, "Computer Simulations of Liquids", Oxford University press, Oxford, 1987.
- N. Ikawa, S. Shimada and H. Tanaka, "Minimum thickness of cut in micromachining, Nanotechnology", vol.3, p.6–9, 1992.
- P.A. Romero, G. Ancaix, A. Molinari, J. Molinari, "Insights into the thermo-mechanics of orthogonal nanometric machining", Computational Materials Science 72, p. 116–126, 2013.
- Piljek Petar, Zdenka Keran, and Milijenko Math, "Micromachinig – Review of Literature from 1980 to 2010", Interdisciplinary Description of Complex Systems 12(1), p. 1-27, 2014.
- Q. X. Pei, C. Lu, F. Z. Fang, H. Wu. "Nanometric cutting of copper: A molecular dynamics study", Computational Materials Science, vol. 37, no. 4, pp. 434-441, 2006.
- R. Komanduri and L. M. Raff, "A review on the molecular dynamics simulation of machining at the atomic scale", Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture, School of Mechanical and Aerospace Engineering, Oklahoma State University, USA, 2001.

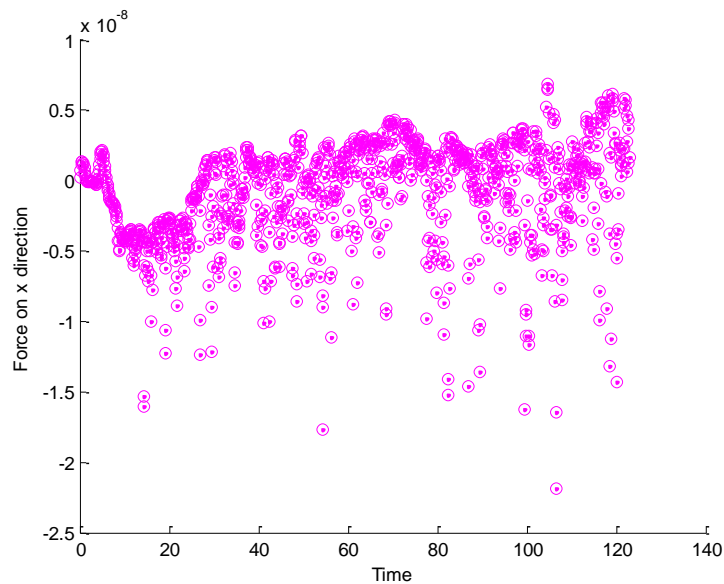
- R. Komanduri, N. Chandrasekaran and L. M. Raff, "MD simulation of nanometric cutting of single crystal aluminum: effect of crystal orientation and direction of cutting", *Wear*, 242, p. 60-88, 2000.
- R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L. M. Raf, "Some aspects of machining with negative-rake tools simulating grinding: A molecular dynamics simulation approach", *Philosophical Magazine Part B*, vol. 79, no. 7, pp. 955-968, 1999.
- R. Rentsch, I. Inasaki. "Molecular dynamics simulation for abrasive processes", *Annals of the CIRP*, vol. 43, no. 1, pp. 327-330, 1994.
- Rapeepan Promyoo, Dr. Hazim El-Mounayri, "Molecular Dynamics Simulation of Nanometric Machining Under Realistic Cutting Conditions Using LAMMPS", Department of Mechanical Engineering Purdue School of Engineering and Technology, IUPUI February 18th, 2008.
- S. Hoppe, "Experimental and numerical analysis of chip formation in metal cutting. Dissertation", RWTH, Aachen, 2004.
- S. Shimada, N. Ikawa, H. Tanaka and J. Uchikoshi, "Structure of micromachined surface simulated by molecular dynamics analysis", *Ann. CIRP*, 43(1), 51-54, 1994.
- S. Shimada, N. Ikawa, H. Tanaka, G. Ohmori, J. Uchikoshi, and H. Yoshinaga, "Feasibility study on ultimate accuracy in microcutting Using Molecular Dynamics Simulation", *CIRP Annals - Manufacturing Technology*, 42 (1), p. 91-94, 1993.
- T. Fang and C-I.Weng, "Three-dimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale Nanotechnology", vol. 11, 148-53, 2000.
- T. Inamura, H. Suzuki and N. Takezawa, "Cutting experiments in a computer using atomic models of a copper crystal and a diamond tool", *Int. J. Jap. Soc. Precision Engng*, 25(4), 259-266, 1991.
- T. Inamura, N. Takezawa and N. Taniguchi, "Atomic- scale cutting in a computer using crystal models of copper and diamond", *Ann. CIRP*, 41(1), 121-124, 1992.
- T. Moriwaki, "A study of orthogonal micro machining of single crystal copper", *Trans. N. Am. Manufacturing Res. Conf. (NAMRC)*, vol. 19, p.177-182, 1991.
- V.K. Jain, A. Sidpara, M.R. Sankar and M. Das, "Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers", Part C Journal of Mech. Eng. Sciences, 2011.
- A. Μαρκόπουλος, Σημειώσεις μαθήματος "Μικρο-Νανοκατεργασίες", εκδόσεις ΕΜΠ, Αθήνα, 2004.
- Η. Ηλιόπουλος, "Εισαγωγή στη Μοριακή Προσομοίωση", Μοριακή Αναγνώριση, ΓΠΑ 2001.
- Π. 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, Πάτρα 2007.

Παράρτημα

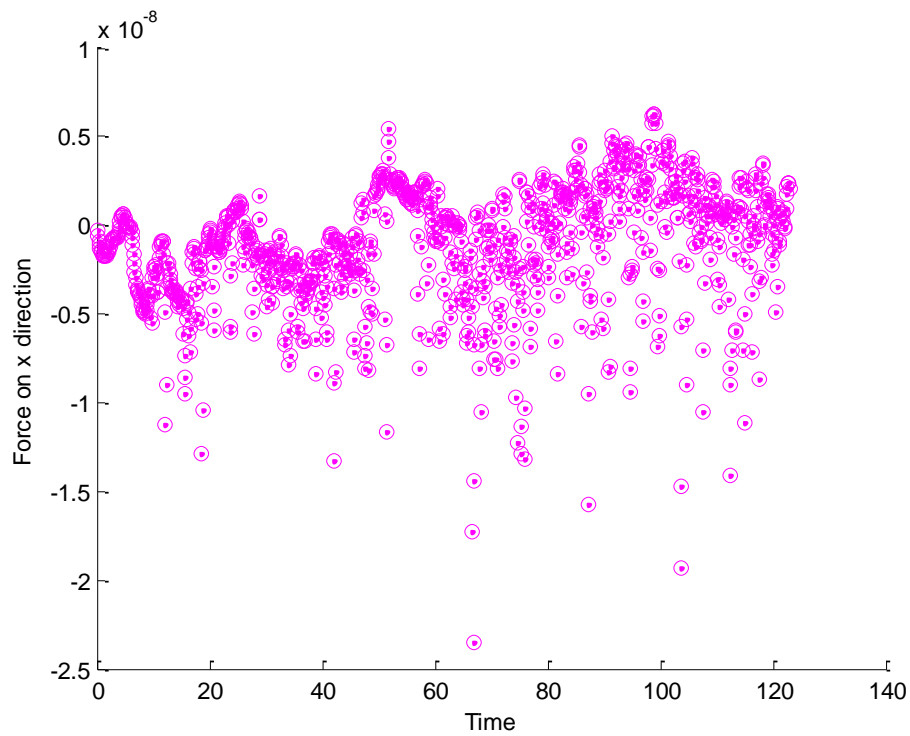
Μεταβολή της δύναμης στην κατεύθυνση x με το βάθος κοπής

Στην ενότητα αυτή θα εξετάσουμε την επίδραση που έχει η μεταβολή του βάθους κοπής στη συνολική δύναμη κατά την κατεύθυνση x για δεδομένη γωνία κοπής και ακτίνα καμπυλότητας. Συγκεκριμένα η γωνία κοπής διατηρείται ίση με -20° και η ακτίνα καμπυλότητας ίση με 10 \AA , ενώ το βάθος κοπής εξετάζεται για τις τιμές: $0,2 \text{ \AA}$, $0,5 \text{ \AA}$, 1 \AA , 2 \AA και 4 \AA .

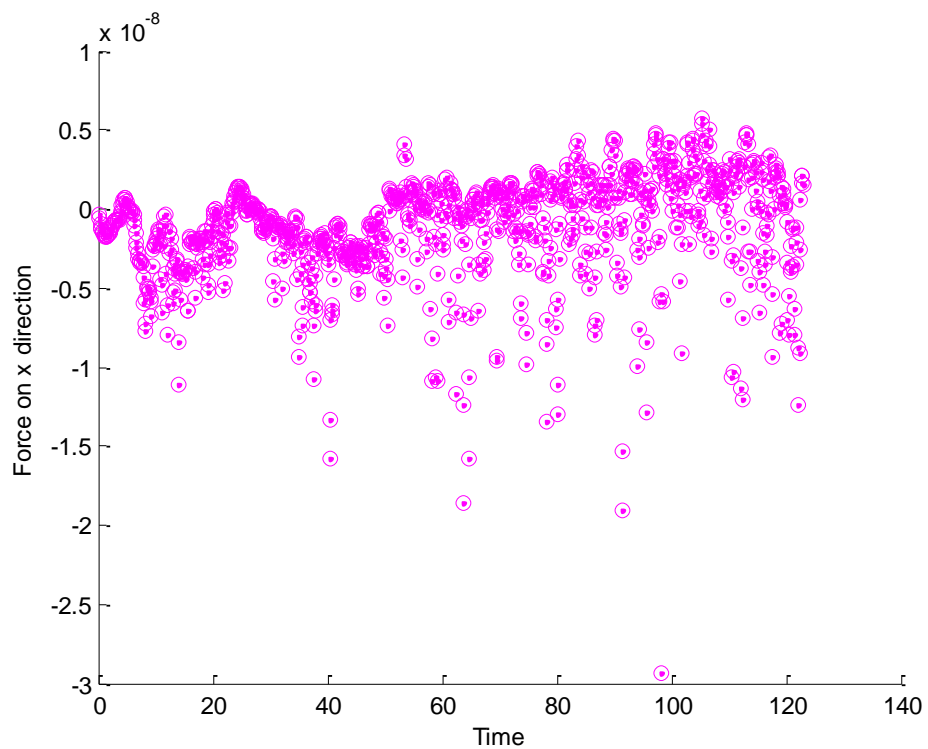
Βάθος κοπής (d)
0,2 \AA



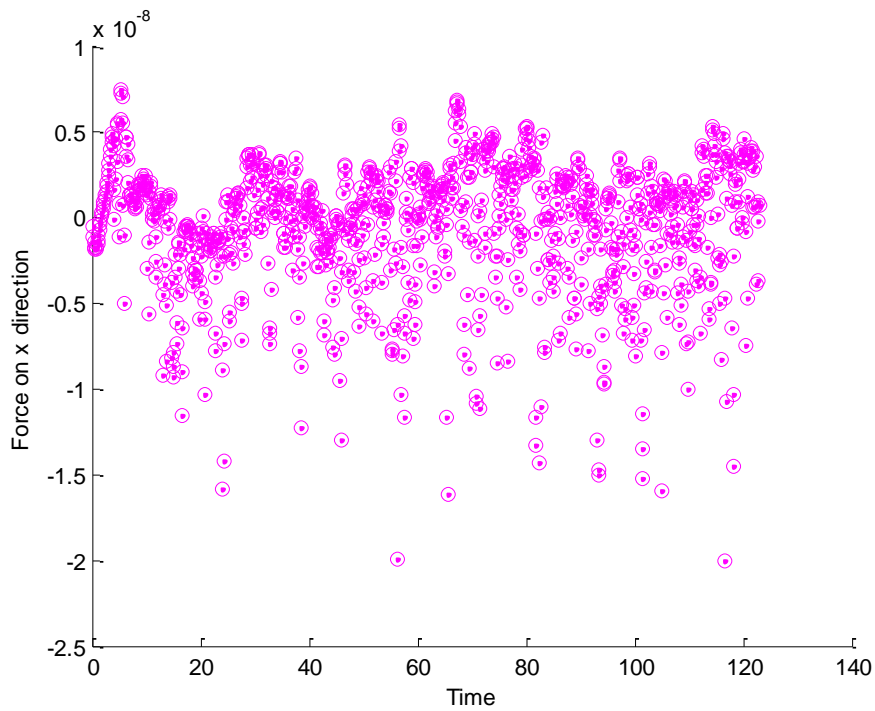
**Βάθος κοπής
(d)**
0,5 Å



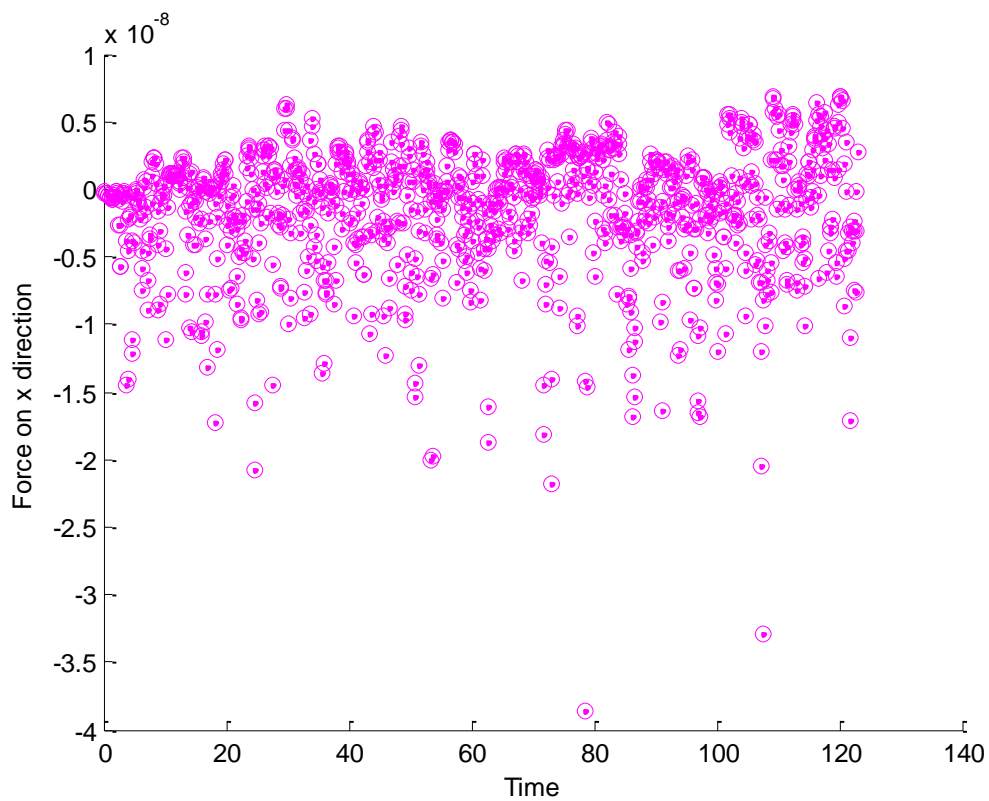
**Βάθος κοπής
(d)**
1 Å



**Βάθος κοπής
(d)**
2 Å



**Βάθος κοπής
(d)**
4 Å

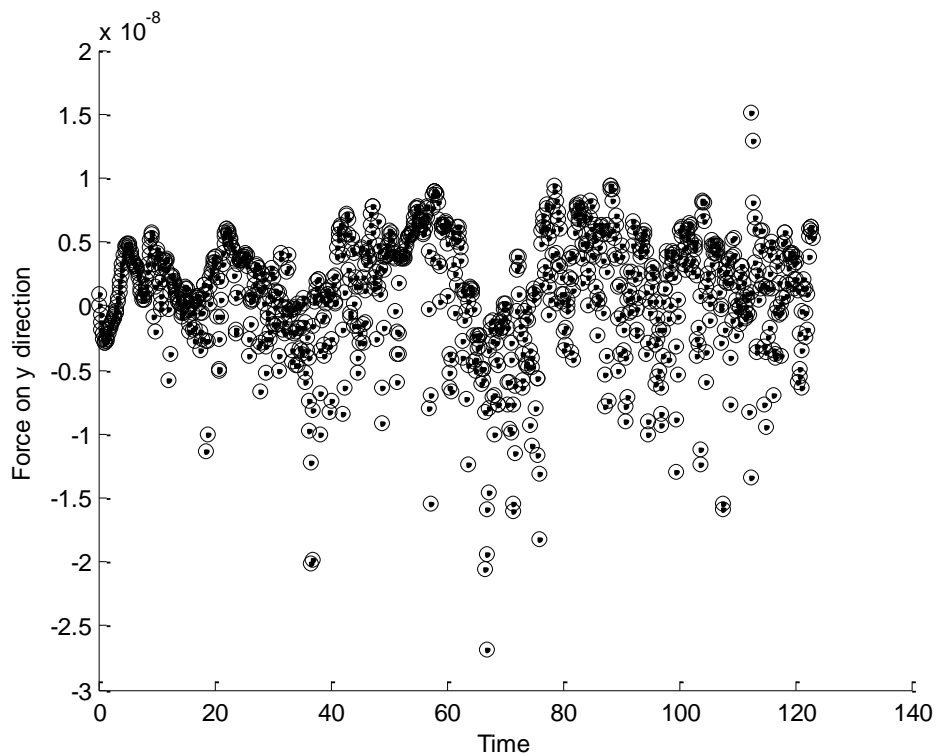


Μεταβολή της δύναμης στην κατεύθυνση y με το βάθος κοπής

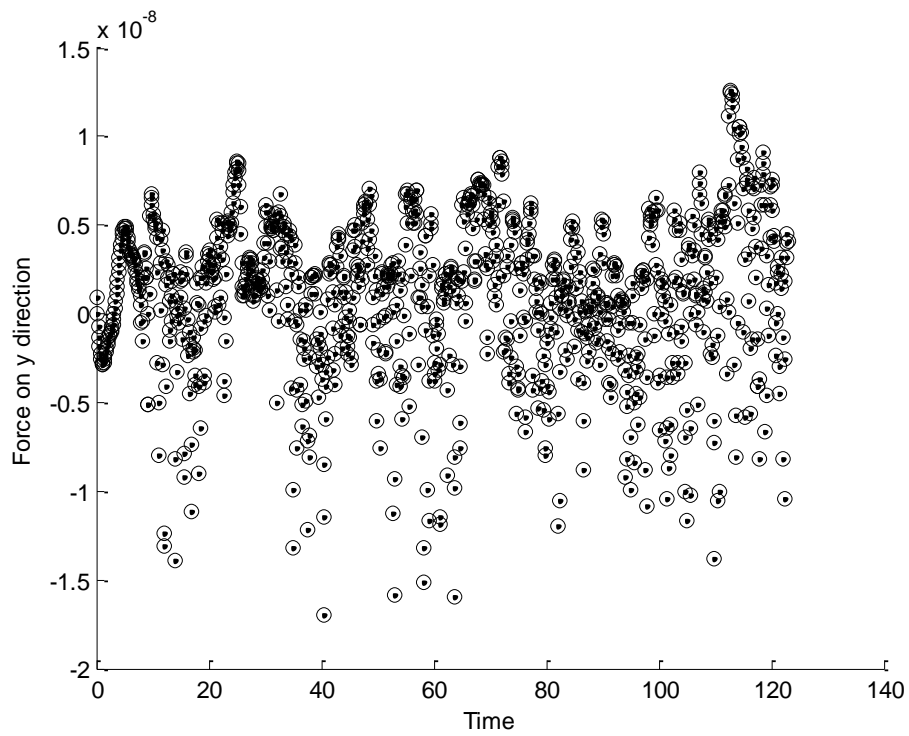
Στην ενότητα αυτή θα εξετάσουμε την επίδραση που έχει η μεταβολή του βάθους κοπής στη δύναμη κατά την κατεύθυνση y για δεδομένη γωνία κοπής και ακτίνα καμπυλότητας. Συγκεκριμένα η γωνία κοπής διατηρείται ίση με -20° και η ακτίνα καμπυλότητας ίση με 10 \AA , ενώ το βάθος κοπής εξετάζεται για τις τιμές: $0,2 \text{ \AA}$, $0,5 \text{ \AA}$, 1 \AA , 2 \AA και 4 \AA .

	Γωνία κοπής (α)	Ακτίνα καμπυλότητας (r)
Δύναμη στην κατεύθυνση y	-20°	10 \AA

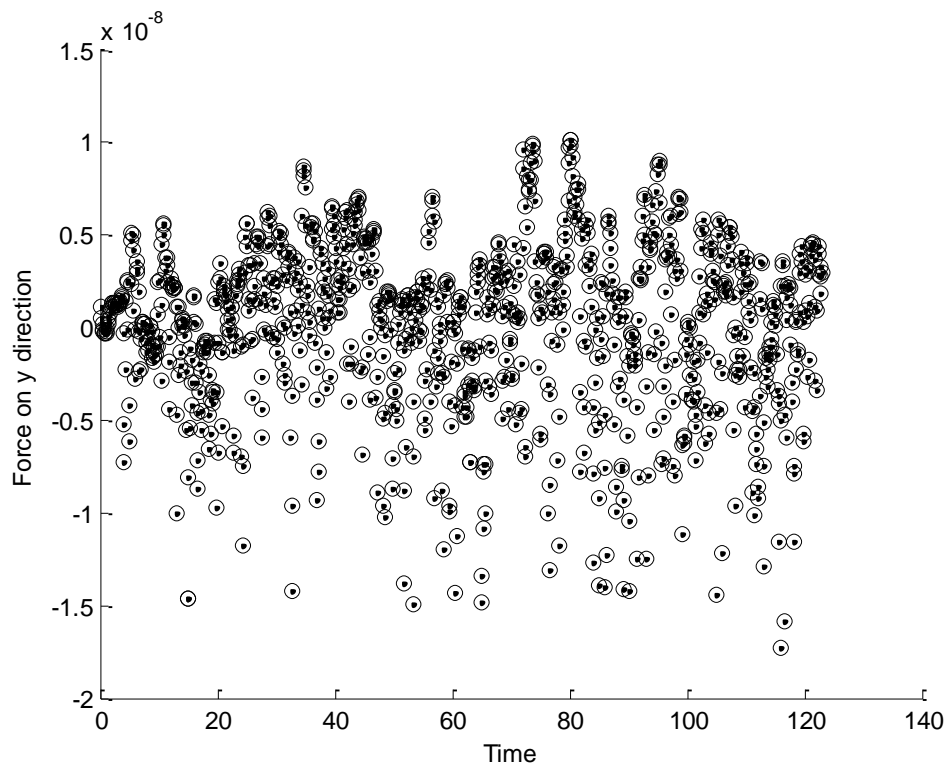
Βάθος κοπής (d)
0,5 \AA



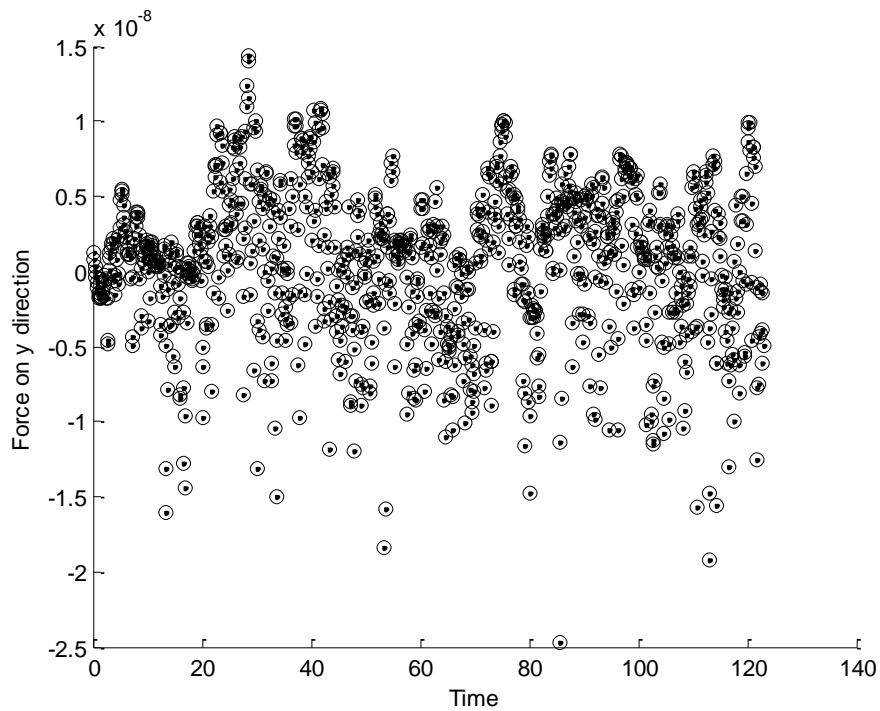
**Βάθος κοπής
(d)**
1 Å



**Βάθος κοπής
(d)**
2 Å

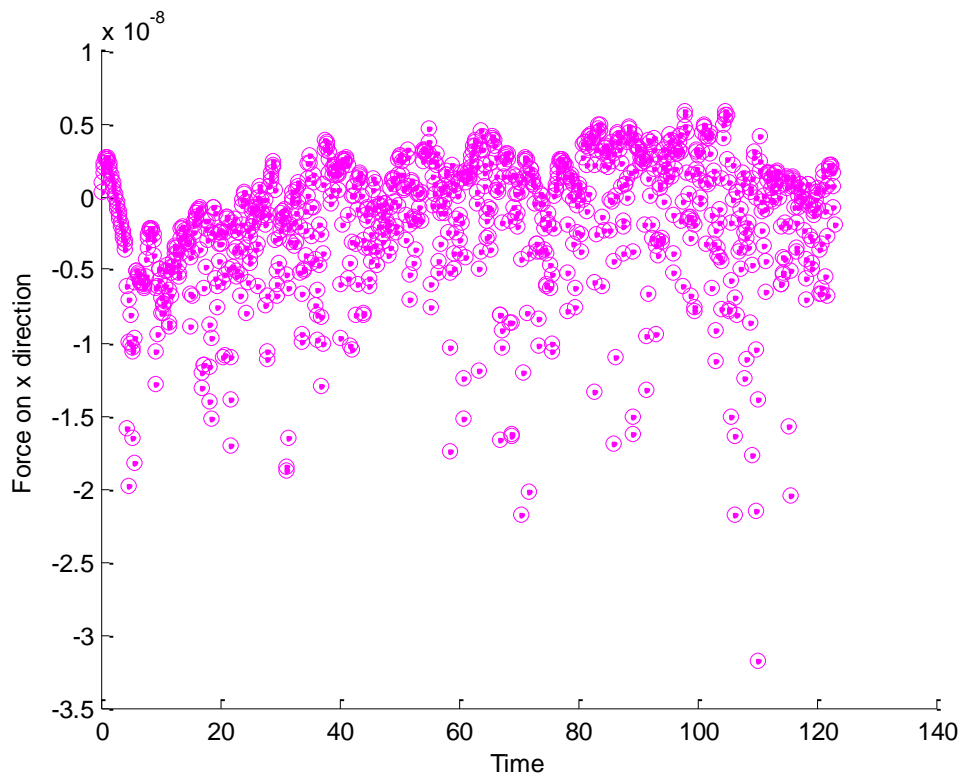


Βάθος κοπής (d)
4 Å

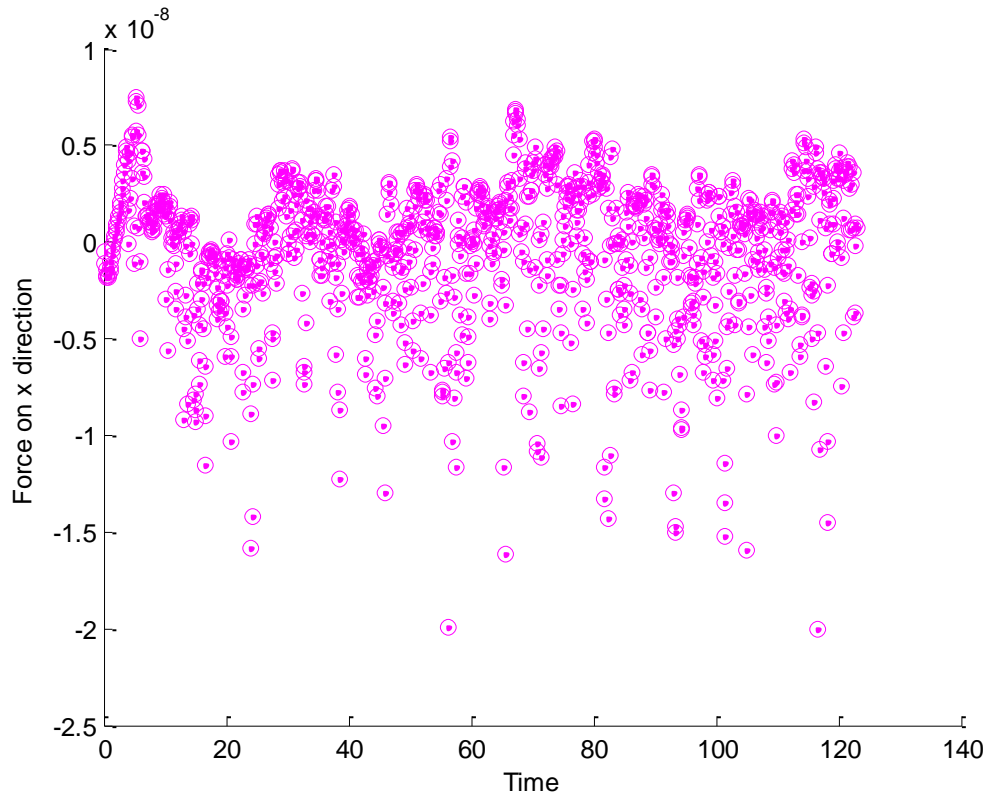


Μεταβολή της δύναμης στην κατεύθυνση x με την ακτίνα καμπυλότητας

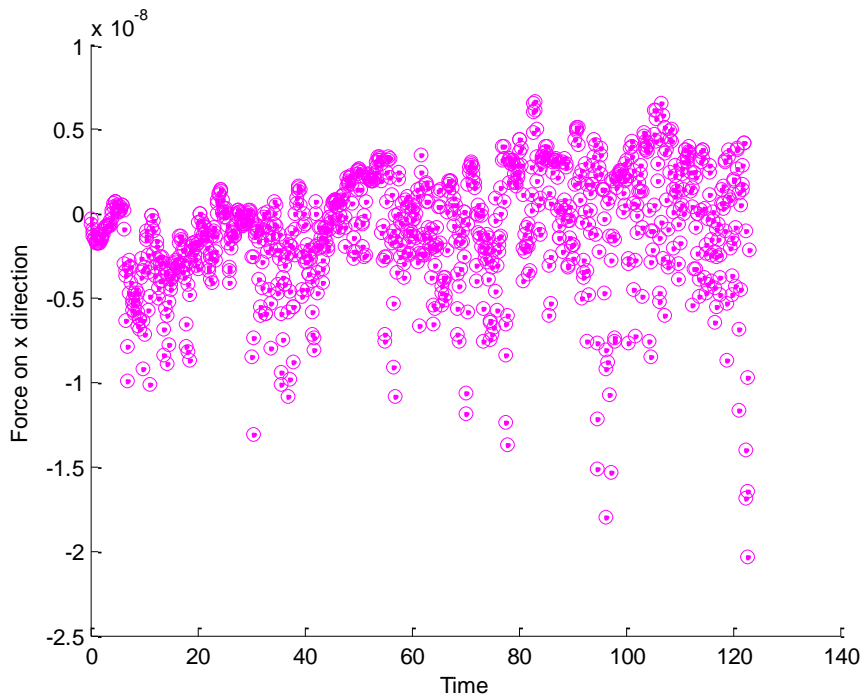
Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
2 Å	0,5



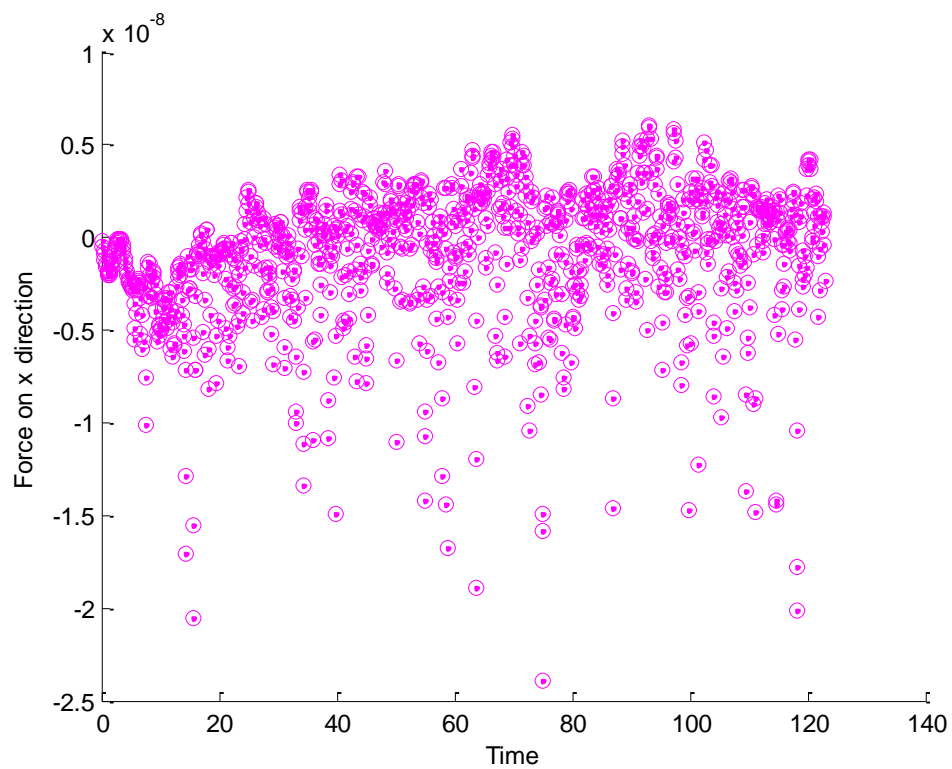
Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
10Å	0,2



Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
15Å	0,13

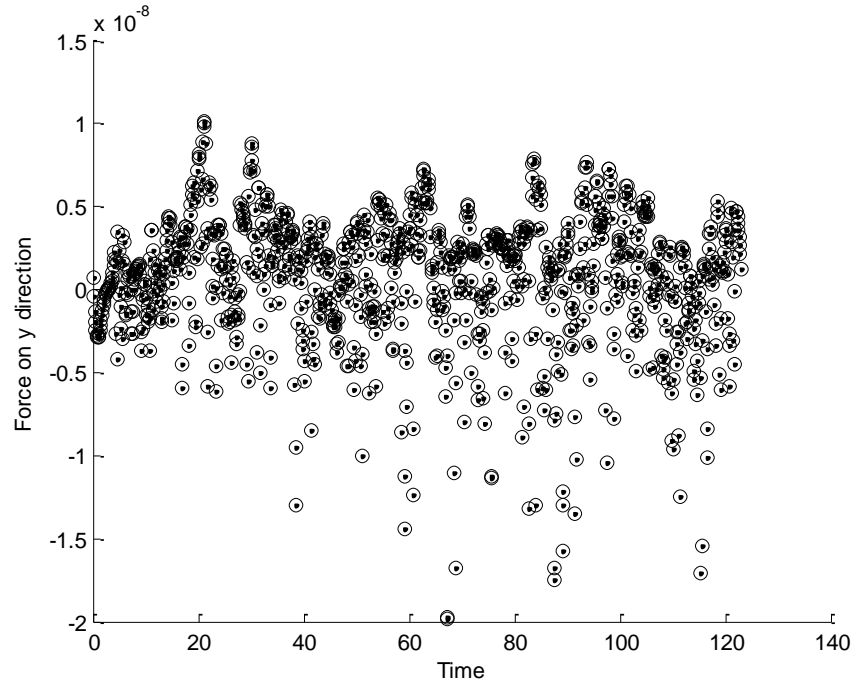


Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
20Å	0,1

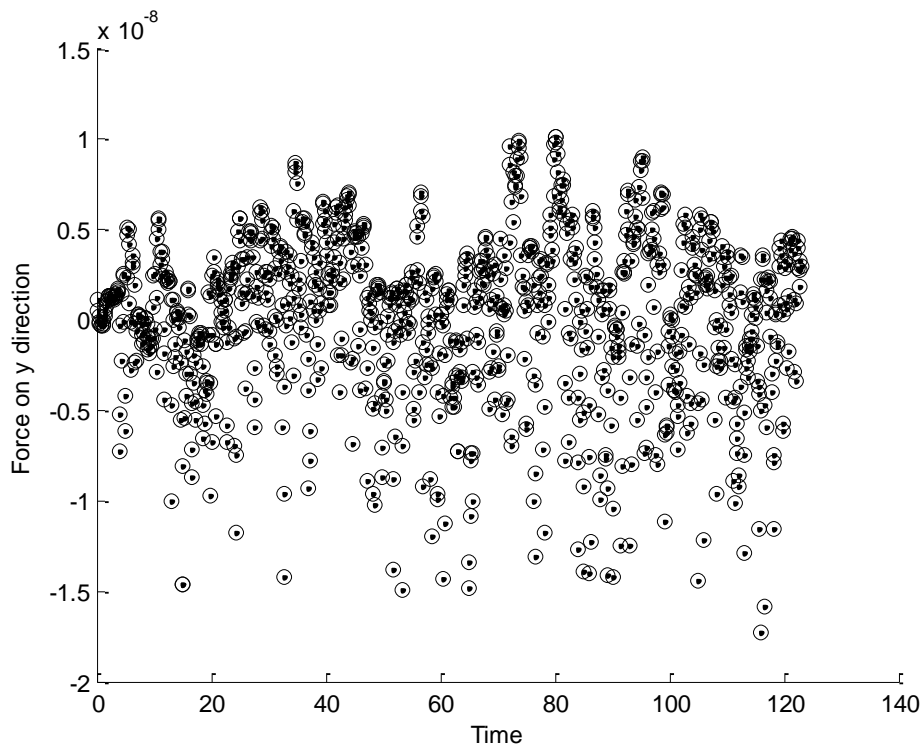


Μεταβολή της δύναμης κοπής στην κατεύθυνση y με την ακτίνα καμπυλότητας

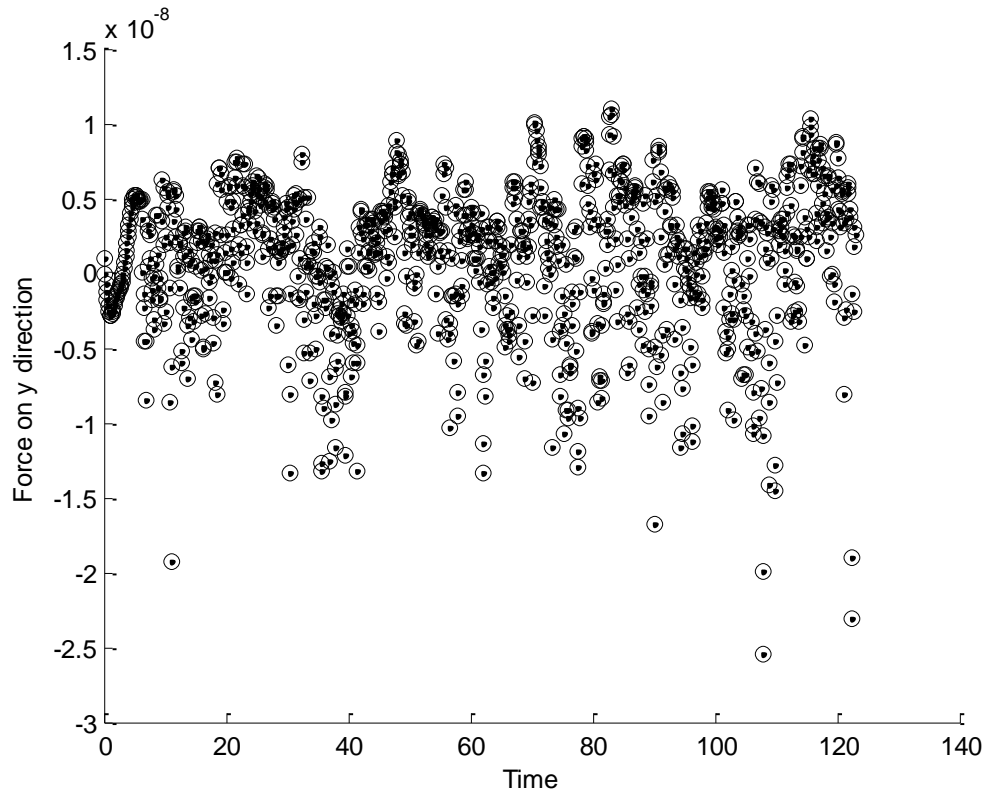
Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
4Å	0,5



Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
10Å	0,2



Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
15Å	0,13



Ακτίνα καμπυλότητας (r)	Λόγος d/r
20Å	0,1

