



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ

**ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ  
ΑΠΟΒΟΛΗΣ ΥΛΙΚΟΥ ΣΕ ΜΙΚΡΟ ΚΑΙ ΝΑΝΟΚΛΙΜΑΚΑ**

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΤΟΥ

**ΝΙΚΟΛΑΟΥ Ε. ΚΑΡΚΑΛΟΥ**

Διπλ. Μηχανολόγου Μηχανικού ΕΜΠ

**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ:**

Δρ. Α. Π. Μαρκόπουλος, Αναπλ. Καθ. ΕΜΠ

ΑΘΗΝΑ, ΙΑΝΟΥΑΡΙΟΣ 2022





ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ

## ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ ΑΠΟΒΟΛΗΣ ΥΛΙΚΟΥ ΣΕ ΜΙΚΡΟ ΚΑΙ ΝΑΝΟΚΛΙΜΑΚΑ

**ΝΙΚΟΛΑΟΣ Ε. ΚΑΡΚΑΛΟΣ**

Διπλ. Μηχανολόγος Μηχανικός ΕΜΠ

*Διδακτορική διατριβή που υποβλήθηκε στην Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών του Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου, για την απόκτηση Διδακτορικού Διπλώματος*

### **Μέλη της επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:**

1. Α.Π. Μαρκόπουλος, Αναπληρωτής Καθηγητής ΣΜΜ ΕΜΠ, μέλος της ΣΕ (επιβλέπων)
2. Δ. Μανωλάκος, Καθηγητής ΣΜΜ ΕΜΠ, μέλος της ΣΕ
3. Γ.Χ. Βοσνιάκος, Καθηγητής ΣΜΜ ΕΜΠ, μέλος της ΣΕ
4. Α. Αντωνιάδης, Καθηγητής ΣΜΠΔ Πολυτεχνείου Κρήτης
5. Χ. Προβατίδης, Καθηγητής ΣΜΜ ΕΜΠ
6. Σπ. Παπαευθυμίου, Αναπληρωτής Καθηγητής ΣΜΜΜ ΕΜΠ
7. Π. Μπενάρδος, Επίκουρος Καθηγητής ΣΜΜ ΕΜΠ



## Πρόλογος-Ευχαριστίες

Σε πολλές περιπτώσεις στη ζωή μας έρχεται η ώρα που φτάνουμε σε έναν τερματισμό, ένα τέλος μιας κατάστασης ή μιας εποχής. Έτσι και στην παρούσα περίπτωση, η ολοκλήρωση της παρούσας διατριβής σηματοδοτεί την ολοκλήρωση ενός πολυετούς κύκλου σπουδών και ερευνητικών δραστηριοτήτων. Με αυτή την αφορμή θα ήθελα να αφιερώσω μια σύντομη ενότητα στην αρχή της διατριβής μου για να αναφερθώ στην μέχρι τώρα πορεία μου στον ακαδημαϊκό τομέα και να ευχαριστήσω ορισμένους από τους ανθρώπους που με βοήθησαν σημαντικά αυτά τα χρόνια.

Η πορεία μου όλα αυτά τα χρόνια στο ΕΜΠ ως προπτυχιακός, μεταπτυχιακός και διδακτορικός φοιτητής αποτελεί αναμφίβολα ένα πολύ σημαντικό κομμάτι της μέχρι τώρα ζωής μου. Παρότι η ολοκλήρωση των προπτυχιακών σπουδών αποτελεί ένα μαραθώνιο παρακολούθησεων, μελέτης, εκπόνησης εργασιών και θεμάτων καθώς και τις προβλεπόμενες εξετάσεις, συνήθως στις σπουδές η πορεία είναι αυστηρά καθορισμένη. Αντίθετα, η διαδικασία εκπόνησης μιας διδακτορικής διατριβής, πέραν ορισμένων προβλεπόμενων κανονισμών, αποτελεί κυριολεκτικά ένα ταξίδι σε άγνωστα μέρη, στα οποία όσες ενδείξεις και προετοιμασία και να έχει κάνει ο ταξιδιώτης δεν εξασφαλίζεται ούτε η άνεση και η σιγουριά κατά το ταξίδι ώστε να έλθει η έγκαιρη και ανεμπόδιση άφιξη στον προορισμό, αλλά σε ορισμένες περιπτώσεις, ακόμα και η ύπαρξη του προορισμού δεν εξασφαλίζεται. Επομένως, ο ταξιδιώτης οφείλει να είναι διαρκώς έτοιμος για να αντιμετωπίσει τις προκλήσεις, διευρύνοντας τους ορίζοντές του και μαθαίνοντας από τα λάθη του και τις συμβουλές των σοφότερων, ώστε να μην αποκλίνει από τον προορισμό παραπάνω απ' ότι είναι αναγκαίο.

Με τον ίδιο τρόπο, η πορεία μου ως Υ/Δ περιλάμβανε αρκετούς σταθμούς, εκτός των δραστηριοτήτων που σχετίζονται με την εκπόνησή της. Μου δόθηκε η ευκαιρία να έρθω σε επαφή, έστω και σε αρχικά στάδια με την εκπαιδευτική διαδικασία, λαμβάνοντας μέρος στη διδασκαλία των εργαστηριακών ασκήσεων, όχι μόνο σε ένα αντικείμενο αλλά σε αρκετά αντικείμενα που σχετίζονται με τις κατεργασίες και τα υλικά, καθώς και στη διαδικασία αξιολόγησης των εργασιών εκατοντάδων προπτυχιακών φοιτητών, μελλοντικών συναδέλφων μου. Επίσης, μου δόθηκε η δυνατότητα να μάθω σε ένα επαρκές για τις δραστηριότητές μου επίπεδο, το χειρισμό διάφορων συναφών μηχανών και μετρητικών οργάνων, ώστε να μπορώ να συνεισφέρω πιο άμεσα τόσο στην εκπαιδευτική όσο και την ερευνητική δραστηριότητα του εργαστηρίου. Αν και αυτό δε μπορεί να εκτιμηθεί εύκολα από κάποιον εξωτερικό παρατηρητή, για έναν άνθρωπο που έχει ολοκληρώσει τις σπουδές του μηχανολόγου μηχανικού, η δυνατότητα εκμάθησης και χρήσης εργαστηριακού εξοπλισμού μπορεί να θεωρηθεί ανεκτίμητη. Επιπλέον, η δυνατότητα που μου έδωσαν οι καθηγητές του τομέα σχετικά με την συνεργασία με προπτυχιακούς φοιτητές κατά τη διάρκεια εκπόνησης των διπλωματικών εργασιών τους ήταν ιδιαίτερα χρήσιμη για εμένα, καθώς είχα τη δυνατότητα να αποκτήσω σημαντικές εμπειρίες, που ελπίζω να είναι χρήσιμες και να διευρυνθούν περαιτέρω και τα επόμενα χρόνια, και να έρθω σε επαφή με άτομα με τα οποία ακόμα και σήμερα συνεργάζομαι και τα θεωρώ, εκτός από συνεργάτες στον ακαδημαϊκό τομέα, και καλούς φίλους. Τέλος, όσον αφορά τις ακαδημαϊκές

δραστηριότητες, η συμμετοχή μου σε διάφορα διεθνή επιστημονικά συνέδρια, τόσο δια ζώσης όσο και απομακρυσμένα τα τελευταία χρόνια, λόγω της πανδημίας, αλλά και σε δράσεις ανταλλαγής φοιτητών, θεωρώ ότι με ωφέλησαν αρκετά και θα συνεχίσουν να με ωφελούν στο μέλλον.

Ολοκληρώνοντας το κομμάτι αυτής της ενότητας που αφορά την προσωπική μου πορεία θεωρώ ότι είναι επιβεβλημένο να αναφερθώ σύντομα σε ορισμένα άτομα με τα οποία ήμουν τον περισσότερο καιρό σε επαφή κατά τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας διατριβής. Εκ των προτέρων θα ήθελα να επισημάνω ότι η έκταση του κειμένου που αφιερώνω στον καθένα δεν είναι πάντα αναλογική με την εκτίμηση που τους δείχνω και την ευγνωμοσύνη μου προς αυτούς για τις επιστημονικές και κοινωνικές γνώσεις που μου μετέδωσαν και σε κάθε περίπτωση, πιστεύω ότι με τη στάση μου τους έχω ήδη αποδείξει την εκτίμησή μου, χωρίς να απαιτούν μακροσκελείς αναφορές σε αυτούς.

Αρχικά θα ήθελα να αναφερθώ στον επιβλέποντά μου, Αναπληρωτή Καθηγητή Άγγελο Μαρκόπουλο. Τον κ. Μαρκόπουλο τον γνώρισα ως προπτυχιακός φοιτητής στο τελευταίο έτος στο μάθημα των Μικρονανοκατεργασιών και μου έκανε ιδιαίτερη εντύπωση ο χαρακτήρας του και ο διαφορετικός τρόπος διδασκαλίας του σε σχέση με τους υπόλοιπους καθηγητές. Στα πλαίσια του μαθήματος αυτού είχα την πρώτη επαφή με τον τομέα των Μικροκατεργασιών, χωρίς βέβαια να μπορώ να γνωρίζω ότι θα αποτελέσει για μένα ένα αντικείμενο μακροχρόνιας μελέτης μετά από λίγα χρόνια. Ο κ. Μαρκόπουλος, εκτός από τις ακαδημαϊκές γνώσεις που μου μετέδωσε σε ένα ευρύτερο φάσμα επιστημών που σχετίζονται με τις κατεργασίες και το γεγονός ότι ήταν αυτός που με δίδαξε τον ακαδημαϊκό τρόπο γραφής, μου μετέδωσε ένα ανεκτίμητο θησαυρό γνώσεων για τη ζωή ενός ακαδημαϊκού πολίτη, τόσο ερευνητή όσο και διδάσκοντα, οι οποίες αποτέλεσαν και αποτελούν μια πυξίδα για την περιήγησή μου και όπως ελπίζω επιτυχή πορεία μου στο μέλλον στον ακαδημαϊκό αλλά και επαγγελματικό κόσμο. Θεωρώ ότι πέρα από τη στάση ζωής ενός ανθρώπου που μπορεί να αποτελεί πρότυπο για τους υπόλοιπους, το σημαντικότερο για έναν άνθρωπο είναι να διδάξει τους άλλους μέσα από την εμπειρία του, τις επιτυχίες και φιλόδοξες κινήσεις του, ώστε αυτοί να αποδειχθούν στο μέλλον σοφότεροι και να χαράξουν αυτόνομα τη δική τους πορεία με στιβαρότητα, και γνώσεις όχι μόνο ακαδημαϊκές, αλλά και κοινωνικές. Προς αυτό το σκοπό θεωρώ ότι συνέβαλλε σε μεγάλο βαθμό η παρακίνησή του προς εμένα να συμμετάσχω σε διάφορες δραστηριότητες όπως διεθνή επιστημονικά συνέδρια, δράσεις ανταλλαγής φοιτητών, αλλά και συνεργασίες με υψηλού κύρους ιδρύματα και επιστήμονες, τόσο στην Ελλάδα όσο και στην Ευρώπη. Επίσης, καθοριστικής σημασίας με πολλαπλά οφέλη ήταν η συμμετοχή μου μέχρι σήμερα στις δράσεις της επιστημονικής του ομάδας, στα μέλη της οποίας θα αναφερθώ ξεχωριστά στη συνέχεια. Τέλος, τον ευχαριστώ απεριόριστα για τη δυνατότητα που μου έδωσε να ασχοληθώ με ένα ιδιαίτερα ενδιαφέρον και σύγχρονο θέμα, το οποίο ήδη απασχολεί αλλά αναμένεται να απασχολήσει και σε πολύ μεγαλύτερο βαθμό τους επιστήμονες στον τομέα των κατεργασιών στο μέλλον.

Στη συνέχεια θα ήθελα να αναφερθώ στα άλλα δύο μέλη της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής μου, με πρώτο τον Καθηγητή Δημήτριο Μανωλάκο. Εκτός του ότι τον εκτιμώ βαθύτατα, τον ευχαριστώ και αυτόν όπως και όλα τα μέλη της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής μου για την δυνατότητα που μου έδωσαν να εκπονήσω τη διατριβή μου στο

εργαστήριο. Τον κ. Μανωλάκο τον γνωρίζω ως διδάσκοντα από το πρώτο κιάλας έτος της φοίτησής μου στο Πολυτεχνείο και είχα την τύχη να παρακολουθήσω τα περισσότερα μαθήματα που δίδασκε, ακολουθώντας την κατεύθυνση του κατασκευαστή Μηχανολόγου Μηχανικού. Παρότι εκείνη την εποχή δεν είχα αποφασίσει τον τομέα που θα ακολουθούσα στη συνέχεια και δεν γνώριζα ότι τελικά θα ασχοληθώ για αρκετά χρόνια με τον επιστημονικό τομέα των κατεργασιών, παρακολουθούσα πάντα τις διαλέξεις του με ευχαρίστηση, τόσο σε υποχρεωτικά όσο και σε κατ' επιλογή μαθήματα, όσο δύσκολο και αν ήταν το αντικείμενο λόγω του ιδιαίτερα δομημένου τρόπου που είχαν οι διαλέξεις και λόγω της μεταδοτικότητάς του. Κατά τη διάρκεια της πορείας μου στο εργαστήριο ως Υ/Δ είχα την ευκαιρία να τον γνωρίσω και από πιο κοντά, στην καθημερινότητα του εργαστηρίου αλλά και στις εξω-εργαστηριακές δραστηριότητες τις οποίες τα προηγούμενα χρόνια, πριν την εκδήλωση της πανδημίας, είχαμε τη δυνατότητα να συμμετάσχουμε και να τον εκτιμήσω ακόμα περισσότερο, όχι μόνο για τις επιστημονικές του γνώσεις που μας μετέδιδε όλα αυτά τα χρόνια αλλά και για τη στάση του ως εξέχοντος μέλους της ακαδημαϊκής κοινότητας και ως άνθρωπο.

Τέλος, θα ήθελα επίσης να αναφερθώ και στον Καθηγητή Γεώργιο-Χριστόφορο Βοσνιάκο που αποτελεί επίσης μέλος της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής μου. Τον κ. Βοσνιάκο είχα επίσης την ευκαιρία να τον γνωρίσω, όπως και τα άλλα δύο μέλη της επιτροπής μου, ως διδάσκοντα κατά τη διάρκεια των προπτυχιακών σπουδών μου και να τον εκτιμήσω για τον τρόπο διδασκαλίας του και τα ενδιαφέροντα αντικείμενα των μαθημάτων που δίδασκε. Κατά τη διάρκεια της πορείας μου στο εργαστήριο είχα την ευκαιρία να τον γνωρίσω από κοντά και να τον εκτιμήσω, πέραν του ακαδημαϊκού ρόλου του και ως ένα σοβαρό και μεθοδικό άνθρωπο.

Στη συνέχεια θα ήθελα να ευχαριστήσω τα υπόλοιπα μέλη της επταμελούς συμβουλευτικής επιτροπής, ορισμένα από τα οποία γνωρίζω, αλλά και όσα δεν είχα ακόμα την τύχη να γνωρίσω από κοντά. Επομένως, αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Επίκουρο Καθηγητή Πανώριο Μπενάρδο, μέλος του εργαστηρίου Τεχνολογίας των Κατεργασιών, τον οποίο δεν είχα την ευκαιρία να τον γνωρίσω ως διδάσκοντα, αλλά ως μέλος ΔΕΠ του εργαστηρίου μας τα τελευταία χρόνια. Στη συνέχεια, θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Καθηγητή Χριστόφορο Προβατίδη τον οποίο γνωρίζω ως διδάσκοντα σε αρκετά προπτυχιακά μαθήματα, κυρίως αυτά που σχετίζονται με τη μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων. Τέλος, θα ήθελα επίσης να ευχαριστήσω τα υπόλοιπα δύο μέλη της επταμελούς συμβουλευτικής επιτροπής, δηλαδή τον Καθηγητή Αριστομένη Αντωνιάδη και τον Αναπληρωτή Καθηγητή Σπυρίδωνα Παπαευθυμίου, τους οποίους δεν είχα μέχρι στιγμής την τύχη να τους γνωρίσω από κοντά, αλλά παρόλα αυτά τους γνωρίζω ως ένα βαθμό λόγω των στενών σχέσεων και της συνεργασίας που έχουν με το εργαστήριό μας.

Εκτός όμως από τα μέλη της επταμελούς συμβουλευτικής επιτροπής, θα ήθελα να αναφερθώ σύντομα και στα υπόλοιπα μέλη του εργαστηρίου, παλιά και καινούρια με τα οποία ήρθα σε επαφή ή και συνεργάστηκα μαζί τους σε διάφορα επίπεδα. Όπως έχω προαναφέρει, η εκτίμησή μου προς όλους δεν μπορεί να εκφραστεί με λόγια, επομένως, σε καμία περίπτωση ο σεβασμός και η εκτίμησή μου σε άτομα που θα αναφερθούν στη συνέχεια δεν συσχετίζεται με την έκταση που τους αφιερώνω σε αυτό το κείμενο και είμαι σίγουρος ότι το γνωρίζουν καλά και οι ίδιοι. Αρχικά θα ήθελα να ευχαριστήσω το μέλος του

Εργαστηριακού και Διδακτικού Προσωπικού του εργαστηρίου μας, Δρ. Πρωτεσίλαο Κωστάζο, τον συνεργάτη του εργαστηρίου μας Δρ. Νικόλαο Γαλάνη, τον επί πολλά χρόνια "συγκάτοικό" μου στο γραφείο, Δρ. Ιωάννη Παπαντωνίου και το Δρ. Γεώργιο Παπαζήτη για την πολυετή επαφή μας στο εργαστήριο, τη συνεργασία μας τόσο σε θέματα που αφορούν το εργαστήριο και την έρευνα, όσο και σε άλλες δραστηριότητες, οι οποίες όμως είναι εξίσου ή και περισσότερο απαραίτητες για την διατήρηση ενός ευχάριστου κλίματος. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τα μέλη του εργαστηρίου κα. Μαριάννα Βασιλείου, κ. Νικόλαο Μελισσά και κ. Κωνσταντίνο Κερασιώτη για τη βοήθεια που μου παρείχαν όλα αυτά τα χρόνια τόσο κατά τη διδασκαλία των εργαστηριακών ασκήσεων και τη διεξαγωγή διαφόρων πειραμάτων και μετρήσεων, αλλά και για την καθημερινή μου επαφή μαζί τους και τις ανεκτίμητες εμπειρίες που είχα την ευκαιρία να βιώσω στο εργαστήριο.

Στη συνέχεια θα ήθελα να ευχαριστήσω ορισμένα άτομα με τα οποία είχα την ευκαιρία να γνωρίσω και να συνεργαστώ μαζί τους στο εργαστήριο μέχρι και σήμερα και άλλα τα οποία γνώρισα πρόσφατα και ελπίζω να έχω την ευκαιρία να συνεργαστώ μαζί τους στο μέλλον. Τον Υ/Δ Εμμανουήλ-Λάζαρο Παπάζογλου, όπως και τον Υ/Δ Δημήτριο Σκόνδρα-Γιούσιο είχα την τύχη να τους γνωρίσω από την εποχή που εκπόνησαν τις προπτυχιακές διπλωματικές τους εργασίες στο εργαστήριό μας υπό την επίβλεψη του κ. Μαρκόπουλου και εκτιμώ εκτός από τις επιστημονικές τους γνώσεις και την εργατικότητά τους και την ακεραιότητα του χαρακτήρα τους και τους ευχαριστώ επίσης για τη δημιουργία ενός ευνοϊκού και εποικοδομητικού κλίματος στο εργαστήριο που είναι απαραίτητο για την ομαλή διεξαγωγή των δραστηριοτήτων μας. Με το Μάνο έχω συνεργαστεί για περισσότερα χρόνια και θεωρώ ότι με την προθυμία του και καθοριστική συμβολή του στις ερευνητικές δραστηριότητες έχει ωφελήσει σε μεγάλο βαθμό την ερευνητική ομάδα στην οποία ήμουν μέλος όλα αυτά τα χρόνια. Επίσης, θα ήθελα να αναφερθώ στον Υ/Δ του Πανεπιστημίου Επιστημών και Τεχνολογίας της Κρακοβίας (AGH) Παναγιώτη Καρμίρη-Obrotanski, στενό συνεργάτη της επιστημονικής ομάδας μας, τον οποίο γνώρισα από την εποχή που συμμετείχε σε πρόγραμμα ανταλλαγής φοιτητών ως προπτυχιακός φοιτητής και εκτίμησα από την πρώτη στιγμή την ευγένεια και το ήθος του καθώς την αστείρευτη διάθεσή του για συμμετοχή σε ερευνητικές δραστηριότητες. Έως σήμερα που βρίσκεται στη θέση του Υ/Δ, λόγω της ενασχόλησής του σε ένα ευρύ φάσμα του επιστημονικού πεδίου των κατεργασιών, έχουμε συνεργαστεί αρκετές φορές και ελπίζω να συνεχίσουμε στο μέλλον την εποικοδομητική συνεργασία μας.

Τέλος, θα ήθελα να αναφερθώ και σε νεότερα μέλη του εργαστηρίου μας που είτε εκπονούν τη διδακτορική τους διατριβή στον τομέα είτε συνεργάζονται μαζί μας σε ερευνητικά προγράμματα, αλλά έχουν ήδη υπάρξει μέλη του εργαστηρίου κατά τη διάρκεια της εκπόνησης προπτυχιακών ή μεταπτυχιακών διπλωματικών εργασιών, την Χρυσή Γιακουμίδα, τον Οδυσσέα-Βασίλειο Βενετσάνο, την Μαρία Μπαλάνου, την Βασιλική Αλεξοπούλου και τον Ιωάννη Χριστοδούλου, τους οποίους εκτιμώ και θα ήθελα όπως και στους υπόλοιπους Υ/Δ και μέλη του εργαστηρίου, να ευχηθώ επιτυχή ολοκλήρωση της έρευνάς τους σχετικά με τη διδακτορική διατριβή τους, επιτυχή ενασχόληση με τα ερευνητικά προγράμματα και καλή σταδιοδρομία.

Εκτός από τους καθηγητές και συναδέλφους μου, θα ήθελα να εκφράσω την αμέριστη ευγνωμοσύνη μου προς το ΕΜΠ για την υποτροφία που έλαβα κατά το χρόνο



πραγματοποίησης της διατριβής μου από τον Ειδικό Λογαριασμό Κονδυλίων Έρευνας του ΕΜΠ, η οποία συνέβαλε σε μεγάλο βαθμό στην κάλυψη των εξόδων μου για την πραγματοποίηση έρευνας σχετικής με τη διδακτορική μου διατριβή.

Κλείνοντας, θα ήθελα να ευχαριστήσω ιδιαίτερα την οικογένεια και τους φίλους μου για την στήριξή τους όλα αυτά τα χρόνια, για την υπομονή τους και την εμπιστοσύνη τους σε εμένα, καθώς χωρίς αυτούς θα ήταν αδύνατη η υπερνίκηση όλων των εμποδίων στην πορεία μου προς την ολοκλήρωση της διατριβής μου.

## Περίληψη

Οι συνεχείς εξελίξεις σε βιομηχανίες αιχμής όπως η αυτοκινητοβιομηχανία, η αεροδιαστημική βιομηχανία και η βιομηχανία ηλεκτρονικών υπαγορεύουν μεταξύ άλλων την ανάγκη για συνεχή ανάπτυξη και εξέλιξη του πεδίου των Μικροκατεργασιών ώστε να παράγεται ένα μεγάλο πλήθος απαραίτητων μικροεξαρτημάτων με υψηλή ποιότητα και διαστατική ακρίβεια και να εξασφαλίζεται η υψηλή αποτελεσματικότητα της παραγωγής. Για το σκοπό αυτό, πρέπει να διεξάγονται εμπειριστατωμένες θεωρητικές μελέτες βασισμένες σε πειραματικά στοιχεία, ώστε να κατανοηθούν σε μεγάλο βαθμό τα ιδιαίτερα φαινόμενα που προκύπτουν στη μικροκλίμακα και να σχεδιαστούν κατάλληλα οι στρατηγικές κατεργασίας προκειμένου να επιτευχθούν οι προαναφερθέντες στόχοι. Ειδικότερα για τις μικροκατεργασίες αποβολής υλικού, τα φαινόμενα κλίμακας που προκύπτουν όταν οι διαστάσεις των μικροαντικειμένων ή των κοπτικών εργαλείων είναι συγκρίσιμες με το μέγεθος των κόκκων αλλά και όταν οι τιμές των παραγόντων της κατεργασίας που επιλέγονται είναι κατώτερες ορισμένων οριακών τιμών, επηρεάζουν δυσμενώς τις σχετικές απαιτήσεις ισχύος των εργαλειομηχανών, τη φθορά των κοπτικών εργαλείων, την ποιότητα επιφανείας και την εντατική κατάσταση των παραγόμενων αντικειμένων. Επιπλέον καθώς τα κυριότερα υλικά που χρησιμοποιούνται για την κατασκευή μικροηλεκτρονικών κυκλωμάτων είναι ψαθυρά, η ανάγκη για πραγματοποίηση της κατεργασίας τους υπό συνθήκες «όλκιμης» κοπής οδηγεί στην ανάγκη διερεύνησης των κατάλληλων συνθηκών που εξασφαλίζουν αυτή την ευνοϊκή κατάσταση, διατηρώντας παράλληλα όσο το δυνατόν μεγαλύτερη παραγωγικότητα.

Τις τελευταίες δεκαετίες διάφοροι ερευνητές ανέπτυξαν μοντέλα προσομοίωσης για τις κατεργασίες σε επίπεδο μικροκλίμακας και νανοκλίμακας προκειμένου να κατανοήσουν και να εξηγήσουν ικανοποιητικά τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα κατά τις κατεργασίες αυτές, κάτι που είναι είτε πρακτικά αδύνατο είτε αναποτελεσματικό να πραγματοποιηθεί αποκλειστικά μέσω πειραματικών διερευνήσεων. Ειδικότερα για την περίπτωση των κατεργασιών της νανοκλίμακας, λόγω της εξάρτησης πολλών φαινομένων από την κρυσταλλική δομή των υλικών και την αμεσότερη δυνατότητα μελέτης των θεμελιωδών μηχανισμών αποβολής υλικού μέσω προσομοιώσεων που λαμβάνουν υπόψη την ύλη σε ατομικό επίπεδο, η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής έχει τον σημαντικότερο ρόλο αναφορικά με τις προσομοιώσεις των νανοκατεργασιών. Μέσω αυτής της μεθόδου το μοντέλο προσομοίωσης δημιουργείται με βάση την κρυσταλλική του δομή, η θερμομηχανική και τριβολογική συμπεριφορά των υλικών μοντελοποιείται με βάση κατάλληλη συνάρτηση δυναμικής ενέργειας και το αποτέλεσμα της κατεργασίας μετά την επιβολή αρχικών και οριακών συνθηκών προκύπτει μέσω της επίλυσης του δεύτερου νόμου του Νεύτωνα για κάθε άτομο του συστήματος που επιτρέπεται να κινηθεί ελεύθερα. Η μετεπεξεργασία των αποτελεσμάτων οδηγεί στον προσδιορισμό των δυνάμεων της κατεργασίας, της θερμοκρασίας του τεμαχίου, της εντατικής κατάστασης, του συντελεστή τριβής αλλά και των μεταβολών στη μορφή του αποβλίττου και του γρεζιού που σχηματίζεται και της μεταβολής της δομής του υλικού του τεμαχίου προκειμένου μετά από ανάλυση να εντοπιστούν και να εξηγηθούν τα φαινόμενα που εμφανίζονται κατά τις νανοκατεργασίες και να προσδιοριστούν οι καταλληλότερες συνθήκες κατεργασίας.

Κατά τις τρεις προηγούμενες δεκαετίες πραγματοποιήθηκαν αρκετές μελέτες για διάφορες νανοκατεργασίες με χρήση της Μοριακής Δυναμικής, τόσο για μεταλλικά όσο και για κεραμικά υλικά ή κράματα. Παρότι έχουν μελετηθεί αρκετά είδη νανοκατεργασιών και έχουν αναδειχθεί διάφορα σημαντικά θέματα, όπως η επίδραση των παραγόντων της κατεργασίας, των χαρακτηριστικών των κοπτικών εργαλείων και της μικροδομής του τεμαχίου στο αποτέλεσμα της κατεργασίας, οι συνθήκες μετάβασης από ψαθυρή σε όλκιμη κοπή, η καταλληλότητα της χρήσης υβριδικών τεχνικών κατεργασίας και η φθορά των κοπτικών εργαλείων, μεταξύ άλλων, είναι αναγκαίο να βελτιωθεί το επίπεδο κατανόησης των νανοκατεργασιών με χρήση πιο ρεαλιστικών μοντέλων ή με την μελέτη άλλων ειδών κατεργασιών.

Γι' αυτό το σκοπό, στην παρούσα διατριβή μελετήθηκαν κυρίως η νανο-λείανση και το νανο-φρεζάρισμα με χρήση μοντέλων προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής. Αρχικά, διερευνήθηκε η επίδραση ορισμένων θεμελιωδών παραμέτρων των κατεργασιών, όπως η ταχύτητα κοπής και η γωνία αποβλίττου μέσω ενός γενικού μοντέλου νανοκοπής προκειμένου να εξαχθούν απαραίτητα συμπεράσματα που θα διευκολύνουν την ανάλυση των δύο βασικών κατηγοριών προσομοιώσεων που προαναφέρθηκαν. Στη συνέχεια μελετήθηκε διεξοδικά η κατεργασία της περιφερικής νανο-λείανσης, με μοντέλο πολλαπλών κόκκων οι οποίοι ακολουθούν ρεαλιστική τροχιά λόγω τόσο της μεταφορικής όσο και περιστροφικής ταχύτητας σε αντίθεση με τα υπάρχοντα μοντέλα που απλοποιούν την τροχιά σε ευθύγραμμη, αγνοώντας ότι στην πράξη κατά τη λείανση το πάχος απαραμόρφωτου αποβλίττου είναι μεταβλητό. Επομένως, με χρήση αυτού του υπολογιστικού μοντέλου μελετήθηκαν διάφοροι παράμετροι όπως το βάθος κοπής, το μέγεθος του λειαντικού κόκκου, η επίδραση περισσότερων σειρών λειαντικών κόκκων και της απόστασής τους, το σχήμα και η γωνία αποβλίττου του λειαντικού κόκκου, η θερμοκρασία προθέρμανσης του τεμαχίου αλλά και η καταλληλότητα των οριακών συνθηκών που επιβάλλονται στο μοντέλο.

Στη συνέχεια, μελετήθηκε η κατεργασία του νανο-φρεζαρίσματος με δύο διαφορετικά είδη κοπτικών εργαλείων, δηλαδή ένα εργαλείο που προσομοιάζει το κονδύλι και ένα εργαλείο που προσομοιάζει τη φρεζοκεφαλή με ένθετους κοπτήρες. Καθώς το νανο-φρεζάρισμα με κονδύλι έχει μελετηθεί ελάχιστα στη βιβλιογραφία, έγινε μια προσπάθεια συστηματικής διερεύνησης της επίδρασης σημαντικών παραμέτρων στην κατεργασία αυτή για μεγάλο εύρος τιμών. Έτσι, διερευνήθηκε η επίδραση της ταχύτητας περιστροφής του κοπτικού εργαλείου, η οποία είναι ιδιαίτερα σημαντική στο νανοφρεζάρισμα που αποτελεί μια κατεργασία διακοπτόμενης κοπής, του αριθμού των κοπτικών ακμών και του βάθους κοπής και αναλύθηκαν τα αποτελέσματα τόσο αναφορικά με τις δυνάμεις κατεργασίας όσο και με τη μορφολογία του αποβλίττου και τις μεταβολές της δομής του τεμαχίου. Όσον αφορά το νανο-φρεζάρισμα με φρεζοκεφαλή, το οποίο δεν είχε μελετηθεί προηγουμένως στη βιβλιογραφία, διερευνήθηκε η επίδραση της ταχύτητας περιστροφής του κοπτικού εργαλείου, του αριθμού των κοπτήρων, του βάθους κοπής και της ταχύτητας πρόωσης προκειμένου να προσδιοριστεί το εύρος των κατάλληλων συνθηκών ώστε να εξασφαλίζεται η αποδοτικότερη κατεργασία με τη μικρότερη επιβάρυνση στο τεμάχιο.

# Abstract

The continuous advancements in various high end industries, such as the automotive, aerospace and electronics industries lead to the necessity of continuous development and improvement in the field of Micromachining with a view to produce a large variety of essential microparts with high quality and dimensional accuracy while at the same time ensuring the high productivity level as well. For that reason, it is required that thorough theoretical studies are carried out based on experimental findings, in order to increase the level of understanding regarding various phenomena occurring in the microscale, so as to adopt suitable machining strategies and achieve the aforementioned goals. More specifically, regarding the micromachining processes, the size effects occurring when the size of produced microparts or cutting tools are comparable to the grain size, as well as when the selected process parameters values are lower than specific threshold values affect the machine tool power consumption, cutting tool wear, surface quality and stress condition of the produced parts negatively. Furthermore, as the materials used usually for in microelectronics applications are brittle, the necessity of machining them in ductile mode leads to the need for determining the most appropriate process conditions, in order to ensure this favorable condition and at the same time maintain high levels of productivity.

During the last decades, various researchers developed simulation models for microscale and nanoscale machining processes in order to understand and sufficiently explain the phenomena occurring during these processes, something that is almost impossible or ineffective to be performed exclusively by experimental investigations. More specifically, regarding nanoscale machining processes, due to many phenomena being dependent on the crystal structure of materials and the possibility of directly studying the fundamental material removal mechanisms via atomic scale simulations, Molecular Dynamics method plays a considerable role in the field of nanomachining simulations. In Molecular Dynamics simulations, the computational model can be developed based on its crystal structure, the thermo-mechanical and tribological behavior of materials is modeled using a potential energy function and after imposing initial and boundary conditions, the process outcome is determined by solving the Newton' second law of motion for every unconstrained atom in the system. Postprocessing of the results leads to the determination of process forces, workpiece temperature, chip and burr morphology as well as workpiece structure alterations, in order to detect and explain the occurring phenomena during nanomachining and determine optimum process conditions.

During the last three decades, several studies regarding various nanomachining processes were conducted by Molecular Dynamics simulation models, both for monocrystalline and polycrystalline materials, as well as alloys. Although various models for nanomachining processes are already developed and several important subjects, such as the effect of process parameters, cutting tool characteristics, and workpiece microstructure on the process outcome, the brittle to ductile cutting mode transition, the suitability of using hybrid machining techniques and cutting tool wear were studied using these models, it is necessary that the studies are also directed towards other nanomachining processes or that more realistic models are developed.

For that reason, in the present thesis, the nano-grinding and nano-milling processes were mainly studied by using Molecular Dynamics simulation models. At first, the effect of various fundamental process parameters, such as cutting speed and rake angle was investigated by developing a general nanocutting model in order to draw necessary conclusions for facilitating the analysis of the two different nanomachining processes studied in this thesis. Afterwards, peripheral nano-grinding process was thoroughly investigated by a model including multiple grains and realistic trajectory of the abrasive grains, due to both translational and rotational speed, in contrast to the models used in the relevant literature, which include a simplified linear grain trajectory, neglecting the fact that the undeformed chip thickness during nano-grinding is variable. Thus, this computational model was employed to study the effect of various process parameters, such as depth of cut, the size of the abrasive grain, the effect of using multiple rows of grains and their distance, the preheating temperature of the workpiece and the appropriateness of using different types of boundary conditions in the model.

Finally, the nano-milling process was also studied by the use of two different models, with a cutting tool resembling an end mill and a cutting tool resembling a milling head cutter. As nano-milling is not adequately investigated in the relevant literature, a systematic work of investigating the effect of various parameters on the outcome this process was carried out for a wide range of parameters values. Thus, the effect of an important parameter for an intermittent cutting processes such as nano-milling, namely the rotational speed of the cutting tool was studied, as well as the number of cutting edges and the depth of cut and afterwards, simulation results, such as the cutting forces, chip morphology and workpiece structure alterations were analyzed. Regarding simulations of nano-milling with a milling head cutter, a category of simulations not yet examined in the relevant literature, the effect of milling head rotational speed, the number of cutting inserts, the depth of cut and feed speed were also studied, in order to determine the appropriate range of process parameters which can be used for ensuring increased productivity levels during nano-milling while maintaining workpiece integrity.

# Περιεχόμενα διδακτορικής διατριβής

Πρόλογος-Ευχαριστίες .....	i
Περίληψη.....	vi
Abstract .....	viii
Περιεχόμενα διδακτορικής διατριβής .....	x
Εισαγωγή .....	xiv
<b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΒΑΣΙΚΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΑΠΟ ΤΗΝ ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ .....</b>	<b>1</b>
1.1 Η κρυσταλλική δομή των υλικών .....	1
1.2 Ατέλειες κρυσταλλικού πλέγματος .....	5
1.2.1 Εισαγωγή .....	5
1.2.2 Σημειακές ατέλειες.....	5
1.2.3 Γραμμικές ατέλειες.....	7
1.2.4 Επιφανειακές ατέλειες .....	7
1.2.5 Χωρικές ατέλειες .....	8
1.3 Πλαστικότητα και διαταραχές.....	8
1.3.1 Εισαγωγή .....	8
1.3.2 Είδη διαταραχών και κίνηση διαταραχών .....	9
1.3.3 Πεδία παραμόρφωσης .....	12
1.3.4 Συστήματα ολίσθησης.....	12
1.3.5 Διδυμία.....	15
1.3.6 Εργοσκλήρυνση και διαταραχές .....	16
<b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΜΙΚΡΟΚΑΤΕΡΓΑΣΙΕΣ .....</b>	<b>20</b>
2.1 Γενικά στοιχεία για τις μικροκατεργασίες .....	20
2.1.1 Εισαγωγή .....	20
2.1.2 Κατηγοριοποίηση μικροκατεργασιών.....	20
2.1.3 Μικροκατεργασίες αποβολής υλικού .....	21
2.1.4 Μικροκατεργασίες διαμόρφωσης .....	22
2.1.4.1 Μικρο-σφυρηλάτηση .....	22
2.1.4.2 Μικρο-διέλαση .....	23
2.1.4.3 Μικρο-βαθεία κοίλανση.....	23
2.1.4.4 Μικρο-τύπωση .....	23
2.1.4.5 Μη συμβατικές κατεργασίες διαμόρφωσης.....	24

2.1.5 Μικρο-συγκολλήσεις.....	24
2.1.6 Μικρο-χύτευση.....	25
2.1.7 Μικροκατεργασίες προσθήκης υλικού .....	25
2.2 Μικροκατεργασίες αποβολής υλικού .....	28
2.2.1 Εισαγωγή .....	28
2.2.2 Συμβατικές μικροκατεργασίες αποβολής υλικού .....	31
2.2.3 Χαρακτηριστικά φαινόμενα που συμβαίνουν κατά τις μικροκοπές .....	32
2.2.4 Μικροτόρνευση.....	43
2.2.5 Μικρο-διάτρηση .....	44
2.2.6 Μικρο-φρεζάρισμα.....	46
2.2.7 Τόρνευση με διαμάντι μίας κοπτικής ακμής .....	49
2.2.8 Μη-συμβατικές μικροκατεργασίες αποβολής υλικού .....	50
2.2.8.1 Μικρο-ηλεκτροδιάβρωση (micro-EDM).....	50
2.2.8.2 Μικροκατεργασία με χρήση laser .....	51
2.2.8.3 Μικρο-ηλεκτροχημική κοπή.....	51
2.2.8.4 Μικροκοπή με εστιασμένη δέσμη ιόντων .....	51
2.3 Μικρολείανση .....	52
2.3.1 Εισαγωγή .....	52
2.3.2 Βασικά χαρακτηριστικά μικρο-λείανσης.....	53
2.3.3 Λειαντικοί τροχοί για μικρο-λείανση .....	57
2.3.4 Κατεργασία mill-grinding .....	61
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΝΑΝΟΚΑΤΕΡΓΑΣΙΕΣ: ΠΕΙΡΑΜΑΤΑ, ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ .....	63
3.1 Νανοκατεργασίες .....	63
3.1.1 Εισαγωγή .....	63
3.1.2 Γενική περιγραφή των νανοκατεργασιών.....	65
3.1.3 Θεωρητική μελέτη νανοκατεργασιών.....	67
3.1.4 Χρήση μικροσκοπίων ακίδας και άλλων διατάξεων για νανοκατεργασίες .....	69
3.1.5 Μελέτες νανοκατεργασιών με χρήση μικροσκοπίων ακίδας .....	74
3.1.5.1 Νανοκατεργασίες σε AFM.....	74
3.1.5.2 Νανοκατεργασίες σε AFM με υποβοήθηση.....	76
3.1.5.3 Νανοκατεργασίες σε άλλα μικροσκόπια και διατάξεις .....	77
3.1.6 Εφαρμογές νανοκατεργασιών .....	78
3.2 Θεωρία της μεθόδου Μοριακής Δυναμικής και βήματα μοντελοποίησης κατεργασιών αποβολής υλικού στη νανοκλίμακα.....	79

3.2.1 Εισαγωγή .....	79
3.2.2 Περιγραφή των σταδίων της προσομοίωσης κατεργασιών αποβολής υλικού μέσω ΜΔ .....	80
3.2.2.1 Κατασκευή της γεωμετρίας του υπολογιστικού μοντέλου.....	81
3.2.2.2 Συνάρτηση Δυναμικού .....	84
3.2.2.3 Μέθοδοι υπολογισμού δυνάμεων.....	89
3.2.2.4 Αριθμητική ολοκλήρωση της εξίσωσης κίνησης.....	90
3.2.2.5 Οριακές συνθήκες .....	91
3.2.2.6 Αρχικές συνθήκες .....	93
3.2.3 Μετεπεξεργασία αποτελεσμάτων ΜΔ.....	94
3.2.4 Σύνοψη χαρακτηριστικών και δυνατοτήτων της μεθόδου ΜΔ .....	98
3.2.4.1 Χαρακτηριστικά και δυνατότητες της ΜΔ.....	98
3.2.4.2 Σύντομη περιγραφή βημάτων προσομοίωσης ΜΔ.....	101
3.3 Εφαρμογές της μεθόδου ΜΔ σε προσομοιώσεις νανοκατεργασιών .....	102
3.3.1 Εισαγωγή .....	102
3.3.2 Προσομοιώσεις με γενικό μοντέλο νανοκοπής .....	103
3.3.3 Προσομοίωση κατεργασιών σε AFM/νανο-εγχάραξης .....	106
3.3.4 Προσομοιώσεις νανο-φρεζαρίσματος .....	106
3.3.5 Προσομοιώσεις νανο-λείανσης.....	107
3.3.6 Προσομοίωση νανοκατεργασιών με χρήση laser .....	110
3.3.7 Προσομοίωση νανοκατεργασιών με σωματίδια .....	111
3.3.8 Προσομοίωση νανοκατεργασιών διαμόρφωσης.....	111
3.3.9 Προσομοίωση νανοστίλβωσης .....	112
3.3.10 Προσομοίωση νανοκατεργασιών μηχανοχημικής στίλβωσης .....	113
3.3.11 Προσομοίωση νανο-ηλεκτροδιαμόρφωσης .....	114
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ ΜΕ ΓΕΝΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ ΝΑΝΟΚΟΠΗΣ .....	115
4.1 Εισαγωγή .....	115
4.2 Διερεύνηση της επίδρασης του βάθους κοπής και του πλάτους του ΤΕ κατά τη νανοκοπή.....	115
4.3 Διερεύνηση της επίδρασης της ταχύτητας κοπής κατά τη νανοκοπή .....	119
4.4 Διερεύνηση της επίδρασης της γωνίας αποβλίττου στη νανοκοπή .....	123
4.5 Ανακεφαλαίωση 4ου κεφαλαίου .....	128
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ ΝΑΝΟ-ΛΕΙΑΝΣΗΣ .....	130
5.1 Εισαγωγή .....	130



5.2 Επίδραση βάθους κοπής και μεγέθους κόκκου .....	131
5.3 Επίδραση χρήσης περισσότερων λειαντικών κόκκων .....	138
5.4 Επίδραση των οριακών συνθηκών .....	140
5.4.1 Εισαγωγή .....	140
5.4.2. Πρώτη κατηγορία μοντέλων .....	141
5.4.3. Δεύτερη κατηγορία μοντέλων.....	143
5.4.4. Τρίτη κατηγορία μοντέλων.....	145
5.5 Επίδραση διαφορετικού σχήματος κόκκων .....	147
5.6 Επίδραση της απόστασης μεταξύ των σειρών των κόκκων.....	151
5.7 Επίδραση της γωνίας αποβλίπτου των λειαντικών κόκκων .....	155
5.8 Επίδραση της θερμοκρασίας προθέρμανσης του ΤΕ.....	159
5.9 Ανακεφαλαίωση 5ου κεφαλαίου .....	163
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΕΙΣ NANO-ΦΡΕΖΑΡΙΣΜΑΤΟΣ .....	166
6.1 Προσομοιώσεις μετωπικού νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι.....	166
6.1.1 Επίδραση της ταχύτητας περιστροφής .....	167
6.1.2 Επίδραση του αριθμού των κοπτικών ακμών.....	173
6.1.3 Επίδραση του βάθους κοπής .....	175
6.2 Προσομοιώσεις μετωπικού νανο-φρεζαρίσματος με φρεζοκεφαλή .....	178
6.2.1 Επίδραση της ταχύτητας κοπής .....	178
6.2.2 Επίδραση του βάθους και του αριθμού κοπτήρων .....	184
6.2.3 Επίδραση της ταχύτητας πρόωσης .....	188
6.3 Ανακεφαλαίωση 6ου κεφαλαίου .....	190
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	192
Μελλοντικές προεκτάσεις της διατριβής.....	196
Λίστα δημοσιεύσεων .....	197
Βιβλιογραφία .....	199
Παράρτημα.....	226

# Εισαγωγή

Οι ραγδαίες εξελίξεις σε αρκετούς σύγχρονους βιομηχανικούς τομείς όπως η ηλεκτρονική, η βιοϊατρική ή η αεροδιαστημική βιομηχανία οδηγούν αναπόφευκτα σε εξελίξεις σε αρκετούς συναφείς επιστημονικούς κλάδους. Επομένως, θα ήταν αδύνατο να μην προκύψουν εξελίξεις στον τομέα των Κατεργασιών, ο οποίος βρίσκεται στην «καρδιά» πάσης φύσεως κατασκευαστικής εργασίας διότι παρέχει τα απαραίτητα μέσα και τη μεθοδολογία προκειμένου να παραχθούν τα απαραίτητα εξαρτήματα και μηχανισμοί που συνθέτουν το μεγάλο πλήθος κατασκευών και μηχανημάτων που χρησιμοποιούνται στις προαναφερθείσες βιομηχανίες. Μία από τις σημαντικότερες τάσεις που επικρατούν τις τελευταίες δεκαετίες στον τομέα των Κατεργασιών είναι η τάση για παραγωγή ολοένα και μικρότερων λειτουργικών εξαρτημάτων με κατεργασίες που παρότι έχουν αρκετές ομοιότητες όσον αφορά την κινηματική τους σε σχέση με τις συνήθεις μακροσκοπικές κατεργασίες, παρουσιάζουν και σημαντικές ιδιαιτερότητες οι οποίες γίνονται ολοένα πιο σημαντικές όταν οι διαστάσεις των αντικειμένων που κατεργάζονται ή των δομών που δημιουργούνται προσεγγίζουν τη μικροκλίμακα ή και ακόμα περισσότερο, τη νανοκλίμακα.

Οι ιδιαίτερα αυστηρές προδιαγραφές που διέπουν τις κατεργασίες σε αυτές τις κλίμακες οδηγούν στην ανάγκη να μελετηθούν σε επιστημονικό επίπεδο τα φαινόμενα που εμφανίζονται, ώστε τελικά να επιτυγχάνεται τόσο η απαραίτητη διαστατική ακρίβεια και ποιότητα επιφανείας αλλά και η όσο το δυνατόν πιο αυξημένη παραγωγικότητα, ώστε να είναι από οικονομική άποψη εφικτές οι κατεργασίες αυτές σε βιομηχανικό επίπεδο. Όπως θα φανεί στα επόμενα κεφάλαια, εδώ και τουλάχιστον τέσσερις δεκαετίες, οι μικροκατεργασίες αποτελούν αντικείμενο μελέτης, τόσο θεωρητικής ή υπολογιστικής όσο και πειραματικής, με αποτέλεσμα να έχουν εντοπισθεί και εξηγηθεί σε έναν βαθμό τα λεγόμενα φαινόμενα κλίμακας που εμφανίζονται στη μικροκλίμακα. Καθώς όμως, η ανάγκη για ολοένα και μικρότερα αντικείμενα και δομές είναι διαρκής, είναι απαραίτητο να επεκταθούν οι μελέτες αυτές και σε χαμηλότερα επίπεδα, δηλαδή προς τη νανοκλίμακα όπου η διακριτή φύση της ύλης σε ατομικό επίπεδο αρχίζει να έχει αυξανόμενη επίδραση και οι παραδοχές και οι θεωρίες που έχουν εξηγήσει επαρκώς φαινόμενα που συμβαίνουν σε μεγαλύτερες κλίμακες να μην είναι αρκετά για τη μελέτη των κατεργασιών σε αυτή τη κλίμακα. Επομένως, τις τελευταίες δεκαετίες άρχισε να αυξάνονται σημαντικά οι προσπάθειες για τον εντοπισμό των κατάλληλων προϋποθέσεων ώστε να αναπτυχθούν διάφορα είδη κατεργασιών στη νανοκλίμακα που θα εξασφαλίζουν τόσο την υψηλή ποιότητα των παραγόμενων αντικειμένων, όσο και την αυξημένη παραγωγικότητα των κατεργασιών.

Ενώ μέχρι στιγμής υπάρχουν διάφορες μέθοδοι νανοκατεργασιών που χρησιμοποιούνται με επιτυχία ακόμα και σε βιομηχανικό επίπεδο, η ανάπτυξη των νανοκατεργασιών αποβολής υλικού με μηχανική επαφή, δηλαδή π.χ. αντίστοιχες της τόνρευσης ή του φρεζαρίσματος είναι αρκετά λιγότερο ανεπτυγμένες απ' ό,τι οι αντίστοιχες κατεργασίες στη μακροκλίμακα και τη μικροκλίμακα, ενώ οι περισσότερες πειραματικές προσπάθειες που έχουν πραγματοποιηθεί για τη μελέτη τους βασίζονται σχεδόν αποκλειστικά σε χρήση μικροσκοπίων με δυνατότητα απεικόνισης της νανοκλίμακας όπως το μικροσκόπιο ατομικής δύναμης (AFM) ή ηλεκτρονικά μικροσκόπια όπως το SEM. Λόγω της αδυναμίας

διενέργειας μεγάλου αριθμού πειραμάτων με χαμηλό κόστος σε αυτές τις διατάξεις και της αδυναμίας διεξαγωγής μετρήσεων για συγκεκριμένα μεγέθη στη νανοκλίμακα είναι απαραίτητο να διεξαχθούν παράλληλα προσομοιώσεις, ώστε να υποβοηθήσουν τις πειραματικές διερευνήσεις. Για διάφορους λόγους, η χρήση της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων για προσομοιώσεις σε αυτή την κλίμακα δεν ενδείκνυται, με αποτέλεσμα να χρησιμοποιούνται μέθοδοι που μπορούν να λάβουν υπόψη την ύλη σε επίπεδο ατόμων όπως η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής.

Η καταλληλότητα της μεθόδου αυτής για την περιγραφή και ακριβή προσομοίωση συστημάτων της νανοκλίμακας βασίζεται σε αρκετά από τα χαρακτηριστικά της. Καθώς η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής είναι ικανή να λάβει υπόψη τη διακριτή φύση της ύλης, μπορεί να περιγράψει άμεσα δομές της νανοκλίμακας και την ιδιαίτερη συμπεριφορά τους όπως τη φαινομενικά αυξημένη αντοχή των μονοκρυσταλλικών υλικών, την ανισοτροπία τους αλλά και τους θεμελιώδεις μηχανισμούς αφαίρεσης υλικού που επηρεάζουν τις κατεργασίες σε όλες τις κλίμακες. Για παράδειγμα, οι προσομοιώσεις με χρήση της Μοριακής Δυναμικής έχουν μεγάλη σημασία για την βιομηχανία ηλεκτρονικών και συγκεκριμένα την κατασκευή διαφόρων διατάξεων από ημιαγωγούς, διότι είναι δυνατόν μέσω τα των προσομοιώσεων να προσδιοριστούν οι καταλληλότερες πρακτικές για την κατεργασία τους, ώστε να αποφεύγονται οι αυξημένες παραμένουσες τάσεις και η δημιουργία ρωγμών μέσω της επίτευξης συνθηκών κοπής όπως αυτές των όγκιμων υλικών. Επίσης, αν και η πραγματοποίηση πειραμάτων στο επίπεδο της νανοκλίμακας είναι περιορισμένη, η ακρίβεια των αποτελεσμάτων εξασφαλίζεται μέσω της χρήσης κατάλληλων μοντέλων για την προσομοίωση της συμπεριφοράς των υλικών, που ονομάζονται συναρτήσεις δυναμικού. Οι συναρτήσεις δυναμικού, όπως θα φανεί στο κεφάλαιο 3, περιγράφουν όχι μόνο τη μηχανική συμπεριφορά του υλικού αλλά και τη θερμική και την τριβολογική υπό οποιεσδήποτε συνθήκες τόσο για μονοκρυσταλλικά όσο και για πολυκρυσταλλικά υλικά και βασίζονται σε πειραματικές μετρήσεις ή προσομοιώσεις κβαντικής μηχανικής.

Στον τομέα των νανοκατεργασιών, η χρήση της μεθόδου ξεκίνησε πριν από περίπου 30 χρόνια, όμως άρχισε να αναπτύσσεται ραγδαία τις δύο τελευταίες δεκαετίες, όπως θα διαπιστωθεί στη συνέχεια στο κεφάλαιο 3. Γι' αυτό το σκοπό, το αντικείμενο της διατριβής επιλέχθηκε να αποτελούν οι αριθμητικές προσομοιώσεις με τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής, κυρίως για δύο είδη νανο-κατεργασιών που δεν έχουν μελετηθεί ακόμα επαρκώς, όπως τη νανο-λείανση και το νανο-φρεζάρισμα.

Στην συνέχεια της παρούσας ενότητας, θα πραγματοποιηθεί μια σύντομη περιγραφή του περιεχομένου κάθε κεφαλαίου ώστε να επισημανθούν τα βασικά στοιχεία που περιλαμβάνονται σε αυτά. Η παρούσα διατριβή περιλαμβάνει, όπως θα φανεί και στη συνέχεια τόσο θεωρητικά όσο και κεφάλαια αφιερωμένα στην παρουσίαση και ανάλυση των αποτελεσμάτων των μελετών που πραγματοποιήθηκαν στο πλαίσιο της.

Τα τρία πρώτα κεφάλαια είναι θεωρητικά και αποτελούν ουσιαστικά την εισαγωγή στο αντικείμενο της παρούσας διατριβής. Αρχικά, στο πρώτο κεφάλαιο παρατίθεται μια σύντομη εισαγωγή σε βασικές έννοιες που σχετίζονται με την επιστήμη των υλικών και είναι απαραίτητες για την ευκολότερη εξήγηση διάφορων φαινομένων που θα

παρουσιαστούν στα πλαίσια της παρούσας διατριβής. Αφού το αντικείμενο είναι σχετικό με τη νανοκλίμακα κρίθηκε απαραίτητο να παρουσιαστεί η κρυσταλλική δομή των υλικών, οι ατομικοί δεσμοί και τα κυριότερα είδη κυψελίδων, οι ατέλειες διαφόρων διαστάσεων και τέλος οι διαταραχές και η σημασία τους σχετικά με την πλαστική παραμόρφωση.

Στη συνέχεια γίνεται μια παρουσίαση των μικροκατεργασιών που αποτελούν τον ενδιάμεσο κρίκο μεταξύ των συνηθισμένων κατεργασιών της μακροκλίμακας και των νανοκατεργασιών οι οποίες μελετώνται στην παρούσα διατριβή. Επομένως, αφού γίνει αρχικά η παρουσίαση των κατηγοριών των μικροκατεργασιών, δίνεται ιδιαίτερη έμφαση στις κατεργασίες αποβολής υλικού όπως η μικρο-τόρνευση, το μικρο-φρεζάρισμα και η μικροδιάτρηση καθώς και οι κατεργασίες αποβολής υλικού με λειαντικά μέσα με έμφαση στη μικρο-λείανση. Στις αντίστοιχες υποενοότητες παρουσιάζονται τα βασικά χαρακτηριστικά κάθε κατεργασίας, τα κοπτικά εργαλεία που χρησιμοποιούνται και αναδεικνύονται οι σημαντικές διαφορές που παρουσιάζονται κατά τη διεξαγωγή τους με έμφαση στα διάφορα φαινόμενα κλίμακας που λαμβάνουν χώρα.

Στο τρίτο κεφάλαιο γίνεται η παρουσίαση των νανο-κατεργασιών σε πειραματικό επίπεδο, η αναλυτική παρουσίαση της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής καθώς και οι εφαρμογές της σε διάφορες νανο-κατεργασίες. Η παρουσίαση των νανο-κατεργασιών κρίνεται ιδιαίτερα απαραίτητη, αφενός για να αναδειχθεί η σχέση τους με τις μικρο-κατεργασίες και τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά και αφετέρου να αποδειχθεί η χρησιμότητα της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής και ο βαθμός ρεαλισμού που επιτυγχάνεται με τη χρήση της. Προς αυτό το σκοπό συμβάλλει και η συνοπτική αναφορά στις προσομοιώσεις διαφόρων νανοκατεργασιών, με περιγραφή των χαρακτηριστικών των μοντέλων που χρησιμοποιούνται στη σχετική βιβλιογραφία ώστε να αναδειχθεί η καταλληλότητα της μεθόδου και να παρουσιαστεί η τρέχουσα στάθμη γνώσης στον τομέα αυτό.

Το υπόλοιπα τρία κεφάλαια αφορούν τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που πραγματοποιήθηκαν στο πλαίσιο της παρούσας διατριβής. Αρχικά, στο τέταρτο κεφάλαιο γίνονται ορισμένες σειρές βασικών προσομοιώσεων με χρήση ενός γενικού μοντέλου νανοκοπής προκειμένου να γίνουν οι απαραίτητες παρατηρήσεις σχετικά με φαινόμενα που παρατηρούνται κατά τις νανοκοπές, χωρίς να υπάρχει η επίδραση ιδιαίτερων χαρακτηριστικών κάποιας πιο σύνθετης νανοκατεργασίας. Επομένως, μελετώνται θέματα όπως η επίδραση του πλάτους και του βάθους κοπής και γίνονται αναλυτικές διερευνήσεις σχετικά με την επίδραση της ταχύτητας κοπής και της γωνίας αποβλίπτου στις νανοκατεργασίες για ένα σημαντικό εύρος τιμών αυτών των παραμέτρων.

Στο πέμπτο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι προσομοιώσεις σχετικά με τη νανο-λείανση. Το είδος νανο-λείανσης που προσομοιώνεται είναι η περιφερική νανο-λείανση, η οποία δεν έχει προσομοιωθεί ακόμα στη σχετική βιβλιογραφία με ρεαλιστική πορεία του λειαντικού κόκκου που περιλαμβάνει τόσο μεταφορική όσο και περιστροφική ταχύτητα όπως στην πράξη. Επίσης, τα μοντέλα περιλαμβάνουν πολλαπλούς λειαντικούς κόκκους και άνω της μίας σειρές κόκκων, ώστε να είναι ακόμα πιο ρεαλιστικές οι συνθήκες προσομοίωσης. Με αυτά τα μοντέλα αφού γίνουν οι απαραίτητες διερευνήσεις σχετικά με τον αριθμό και τα χαρακτηριστικά των κόκκων καθώς και τις κατάλληλες οριακές συνθήκες, μελετώνται ζητήματα που δεν έχουν διερευνηθεί σε βάθος ή καθόλου στη σχετική βιβλιογραφία όπως

η επίδραση της μορφής του λειαντικού κόκκου και η επίδραση της θερμοκρασίας προθέρμανσης. Σε κάθε υποενότητα όπως και στο προηγούμενο κεφάλαιο, αναλύεται η επίδραση των παραμέτρων σε μεγέθη όπως οι δυνάμεις, οι θερμοκρασίες και ο συντελεστής τριβής κατά τη νανο-λείανση ενώ πραγματοποιείται επίσης ανάλυση της δομής του τελικού ΤΕ, ώστε να διαπιστωθούν οι μεταβολές που προκλήθηκαν στη δομή λόγω της κατεργασίας.

Στο έκτο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι προσομοιώσεις σχετικά με το νανο-φρεζάρισμα. Πιο συγκεκριμένα, προσομοιώνεται το μετωπικό φρεζάρισμα τόσο με χρήση εργαλείου που προσομοιάζει σε κονδύλι όσο και με χρήση εργαλείου που προσομοιάζει σε φρεζοκεφαλή με ένθετους κοπτήρες. Στην περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος με εργαλείο που προσομοιάζει σε κονδύλι επιχειρείται η διεύρυνση της υπάρχουσας γνώσης σχετικά με την κατεργασία με τη διεξαγωγή προσομοιώσεων σχετικά με διάφορους παράγοντες που επηρεάζουν την κατεργασία και πραγματοποιείται η επακόλουθη ανάλυση των αποτελεσμάτων. Στην περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος με εργαλείο που προσομοιάζει το νανο-φρεζάρισμα με φρεζοκεφαλή, επιχειρείται για πρώτη φορά η μελέτη αυτής της κατεργασίας με σκοπό τη διερεύνηση των δυνατοτήτων που παρέχει και των κατάλληλων συνθηκών που πρέπει να επιλέγονται για να διεξάγεται με ομαλό τρόπο.

Στο τελευταίο κεφάλαιο της παρούσας διατριβής παρατίθενται τα σημαντικότερα συμπεράσματα που προέκυψαν από τις μελέτες που πραγματοποιήθηκαν.



# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

## Βασικά στοιχεία από την επιστήμη των υλικών

Στο παρόν κεφάλαιο θα παρουσιαστούν θεμελιώδεις έννοιες από την επιστήμη των Υλικών, οι οποίες έχουν άμεση σχέση με το αντικείμενο της παρούσας διατριβής και πιο συγκεκριμένα τις προσομοιώσεις νανοκατεργασιών. Καθώς σε αυτές τις κλίμακες οι κατεργασίες γίνονται πολύ κοντά στην κλίμακα των ατόμων, είναι προφανές ότι οι νανοκατεργασίες επηρεάζονται ιδιαίτερα από φαινόμενα που αφορούν τα άτομα και τις αλληλεπιδράσεις τους. Επομένως, προκειμένου να εξηγηθούν τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων ή να εντοπιστούν οι κατάλληλες συνθήκες κατεργασίας, πρέπει να λαμβάνονται υπόψη αρκετές από αυτές τις θεμελιώδεις έννοιες.

### 1.1 Η κρυσταλλική δομή των υλικών

Στα κρυσταλλικά υλικά, η κρυσταλλική δομή παίζει σημαντικό ρόλο στις ιδιότητές τους. Υπάρχει ένα μεγάλο πλήθος κρυσταλλικών δομών, αλλά στις πιο συνηθισμένες περιπτώσεις συναντώνται κυρίως ορισμένες χαρακτηριστικές κατηγορίες, οι οποίες θα παρουσιαστούν στη συνέχεια. Όταν γίνεται αναφορά στην κρυσταλλική δομή των υλικών, θα γίνει εστίαση στη θεμελιώδη επαναλαμβανόμενη δομική μονάδα, που ονομάζεται μοναδιαία κυψελίδα. Η πιθανή δομή της μοναδιαίας κυψελίδας των κρυσταλλικών υλικών εξαρτάται και από το είδος των δεσμών που αναπτύσσονται μεταξύ των ατόμων του υλικού [1,2]. Γι' αυτό το λόγο, θα γίνει μια σύντομη αναφορά στα είδη ατομικών δεσμών.

Όταν τα άτομα βρίσκονται σε κοντινή απόσταση μεταξύ τους, αναπτύσσονται δυνάμεις. Γενικά, δύο άτομα ασκούν ελκυστικές δυνάμεις μεταξύ τους, εκτός από την περίπτωση που βρίσκονται σε πολύ κοντινή απόσταση. Οι δυνάμεις αυτές εξισορροπούνται σε μια συγκεκριμένη απόσταση, που ονομάζεται σημείο ισορροπίας [2]. Η έννοια των διατομικών δυνάμεων σχετίζεται με την έννοια του ατομικού δεσμού. Πιο συγκεκριμένα, για τη δημιουργία του δεσμού μεταξύ ατόμων, κυρίαρχο ρόλο έχουν τα ηλεκτρόνια της εξωτερικής στιβάδας τους που αλληλεπιδρούν με τα θετικά ιόντα, καθώς ο τρόπος με τον οποίο αλληλεπιδρούν στα διάφορα είδη υλικών καθορίζει το είδος του δεσμού που τελικά δημιουργείται [3, 4]. Τα σημαντικότερα είδη δεσμών που υπάρχουν είναι ο ιοντικός δεσμός, ο ομοιοπολικός δεσμός, ο μεταλλικός δεσμός και δευτερεύοντες, ασθενέστεροι δεσμοί όπως οι van der Waals [2].

Ο *ιοντικός δεσμός* είναι ένα από τα απλούστερα είδη ατομικών δεσμών και συνήθως απαντάται σε ενώσεις που περιλαμβάνουν τόσο μεταλλικά όσο και μη μεταλλικά στοιχεία [1]. Οι ενώσεις αυτές ονομάζονται και ιοντικοί κρύσταλλοι [3]. Συνήθως τα άτομα που δημιουργούν αυτές τις ενώσεις έχουν πολύ μεγάλες διαφορές στην ηλεκτραρνητικότητά τους [3]. Τα άτομα του μεταλλικού στοιχείου δίνουν τα ηλεκτρόνια σθένους τους στα μη-μεταλλικά στοιχεία, ώστε να επιτευχθεί μια ευσταθής κλειστή ηλεκτρονιακή στιβάδα [1,2]. Ο κρύσταλλος συγκρατείται επαρκώς από τις δυνάμεις Coulomb μεταξύ των ατόμων [4]. Οι ιοντικοί δεσμοί είναι μη-κατευθυντικοί, δηλαδή η ισχύς του δεσμού είναι ίδια προς όλες τις

κατευθύνσεις γύρω από ένα ιόν και άρα για είναι ευσταθείς οι δομές των υλικών με ιοντικούς δεσμούς, πρέπει τα κατιόντα να έχουν ως πλησιέστερα άτομα ανιόντα και το αντίθετο. Τα υλικά αυτά είναι σκληρά και ψαθυρά και λόγω των ιδιαίτερα ισχυρών δεσμών, τα υλικά αυτά έχουν υψηλές θερμοκρασίες τήξης [4].

Στην περίπτωση ατόμων του ίδιου στοιχείου ή ατόμων διαφορετικών στοιχείων των οποίων η ηλεκτροαρνητικότητα δε διαφέρει σημαντικά, δεν είναι δυνατόν να σχηματιστεί ιοντικός δεσμός με τον τρόπο που περιγράφηκε προηγουμένως, διότι επικρατεί διαφορετική κατάσταση μεταξύ των ηλεκτρονίων των γειτονικών ατόμων [3]. Ο *ομοιοπολικός δεσμός* δημιουργείται μέσω κοινών ηλεκτρονίων που «μοιράζονται» τα γειτονικά άτομα [1,2]. Κάθε γειτονικό άτομο συνεισφέρει τουλάχιστον ένα ηλεκτρόνιο στο δεσμό. Ο δεσμός δημιουργείται όταν ηλεκτρόνια σθένους διαφορετικού spin μπορούν να δημιουργήσουν ζεύγος σε επικαλυπτόμενα τροχιακά, ώστε το κάθε άτομο να αποκτήσει σταθερή ηλεκτρονιακή δομή [2]. Ο ομοιοπολικός δεσμός είναι κατευθυντικός, σε αντίθεση με τα άλλα δύο βασικά είδη δεσμών, διότι υπάρχει μόνο μεταξύ συγκεκριμένων ατόμων τα οποία σχηματίζουν μεταξύ τους συγκεκριμένες γωνίες [1, 5]. Πολλά μη μεταλλικά στοιχεία έχουν ομοιοπολικούς δεσμούς, καθώς και χημικές ενώσεις τους, με πιο σημαντικά τα C, Si, Ge, GaAs και SiC. Οι ομοιοπολικοί δεσμοί μπορεί να είναι είτε πολύ ισχυροί όπως στο διαμάντι το οποίο εμφανίζει υψηλή σκληρότητα και έχει πολύ υψηλή θερμοκρασία τήξης ή να είναι πολύ ασθενείς σε άλλες περιπτώσεις. Τέλος, υπάρχει η περίπτωση να εμφανίζονται διατομικοί δεσμοί, που είναι μερικώς ιοντικοί και μερικώς ομοιοπολικοί [1, 6].

Ο *μεταλλικός δεσμός* είναι το κυρίαρχο είδος δεσμού στα μέταλλα και τα κράματά τους. Επειδή συνήθως τα μέταλλα έχουν ένα έως τρία ηλεκτρόνια σθένους, τα ηλεκτρόνια θεωρείται ότι δε σχετίζονται με συγκεκριμένα άτομα, αλλά δημιουργούν το λεγόμενο «ηλεκτρονιακό νέφος», καθώς είναι ελεύθερα να κινούνται σε όλη τη μάζα του υλικού. Παράλληλα, τα υπόλοιπα ηλεκτρόνια και οι πυρήνες των ατόμων θεωρούνται ως ακίνητα ιόντα. Ο μεταλλικός δεσμός δημιουργείται από την αλληλεπίδραση μεταξύ των κατιόντων και των ελεύθερων ηλεκτρονίων [2]. Τα ελεύθερα ηλεκτρόνια αποτρέπουν την άσκηση απωθητικών δυνάμεων μεταξύ των ιόντων, ενώ συμβάλλουν στην «συγκράτηση» των πυρήνων μεταξύ τους. Ο μεταλλικός δεσμός είναι μη-κατευθυντικός και η ενέργεια συνοχής μπορεί να λάβει ένα μεγάλο εύρος τιμών για τα διάφορα υλικά. Η ύπαρξη των μεταλλικών δεσμών, εκτός των άλλων επιδράσεων στις ιδιότητες των μετάλλων και των κραμάτων τους είναι η αιτία για την όλκιμη συμπεριφορά των μετάλλων, καθώς η θραύση επέρχεται μετά από σημαντική πλαστική παραμόρφωση, όπως θα παρουσιαστεί σε επόμενη υποενότητα, αλλά και για τη μικρότερη αντοχή τους σε σχέση με την ιδανική τιμή αντοχής, λόγω της ισχύος του δεσμού τους [1, 5]. Άλλα είδη δεσμών, όπως οι van der Waals δε σχετίζονται άμεσα με το αντικείμενο της διατριβής, επομένως δε θα σχολιαστούν.

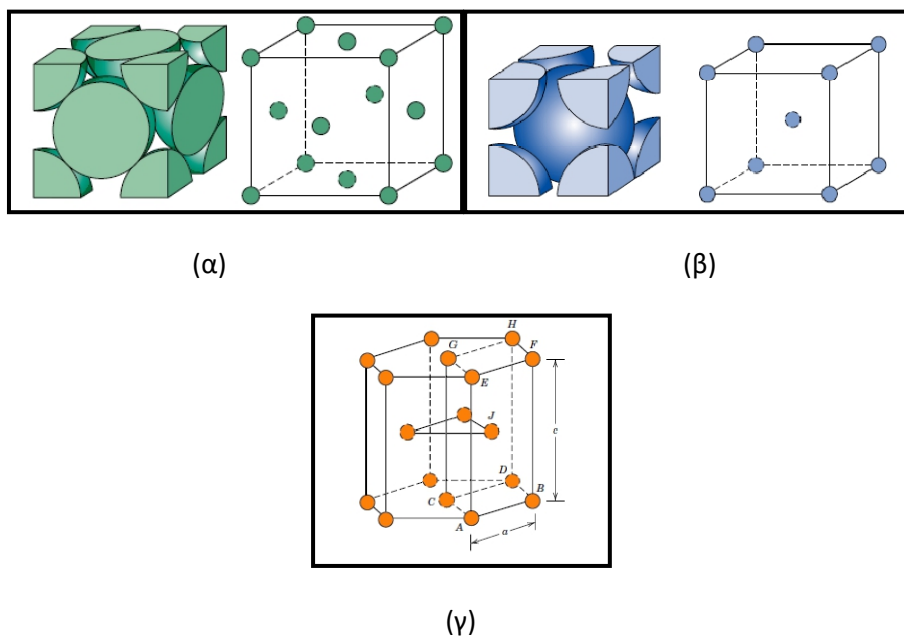
Ο μεταλλικός δεσμός είναι υπεύθυνος για την δομή των καθαρών μετάλλων, η οποία συνήθως ανήκει σε μια από τα ακόλουθα τρία είδη κρυσταλλικών δομών: κυβική εδροκεντρωμένη, κυβική χωροκεντρωμένη και εξαγωνική διάταξη πυκνής δομής (hexagonal close packed, hcp) [7-9]. Τα άτομα των υλικών τα οποία εμφανίζουν μη κατευθυντικούς δεσμούς όπως οι ιοντικοί, μεταλλικοί και van der Waals, τείνουν να διατάσσονται όσο πιο πυκνά μπορούν [3].



Η κυβική εδροκεντρωμένη δομή (FCC) περιλαμβάνει άτομα στα κέντρα όλων των εδρών της κυψελίδας καθώς και στις κορυφές της, όπως φαίνεται στο σχήμα 1.1. Συνήθη μέταλλα με κυβική εδροκεντρωμένη κρυσταλλική δομή είναι ο χαλκός, το αλουμίνιο, ο άργυρος και ο χρυσός. Το μήκος της ακμής της κυψελίδας που συμβολίζεται με  $a$  είναι ίσο με  $2R\sqrt{2}$  όπου  $R$  η ατομική ακτίνα. Αξίζει να σημειωθεί ότι για να προσδιοριστεί πλήρως η δομή ενός υλικού εκτός από το είδος της κρυσταλλικής δομής πρέπει να προσδιορίζονται και οι διαστάσεις της μοναδιαίας κυψελίδας [2]. Σε αυτή την κρυσταλλική δομή ο αριθμός συνδιάταξης (coordination number), που σχετίζεται με τον αριθμό των γειτονικών ατόμων κάθε ατόμου της κυψελίδας είναι 12, διότι κάθε άτομο της μπροστινής έδρας έχει τέσσερα γειτονικά άτομα στις γωνίες της έδρας, τέσσερα άτομα στο επίπεδο πίσω του και τέσσερα άτομα στη γειτονική κυψελίδα. Τέλος, για αυτή τη δομή, ο αριθμός ατομικής πλήρωσης (atom packing factor, APF), που υποδηλώνει το άθροισμα των όγκων όλων των ατόμων της κυψελίδας διαιρεμένο με τον όγκο της κυψελίδας είναι 0.74, δηλαδή το μεγαλύτερο πιθανό για άτομα του ίδιου στοιχείου [7].

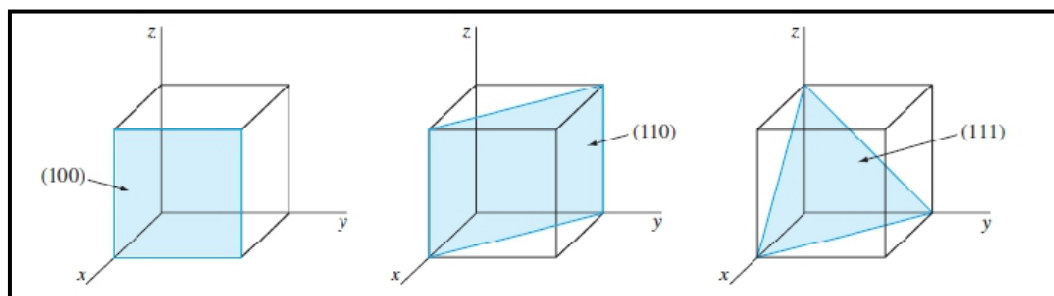
Στην περίπτωση της κυβικής χωροκεντρωμένης δομής (BCC), η μοναδιαία κυψελίδα περιλαμβάνει άτομα στις κορυφές του κύβου και ένα άτομο στο κέντρο του. Για αυτή την δομή, το μήκος της ακμής του κύβου δίνεται από τη σχέση  $a = 4R/\sqrt{3}$ , όπου με  $R$  συμβολίζεται η ατομική ακτίνα. Μερικά από τα γνωστότερα μέταλλα που έχουν κυβική χωροκεντρωμένη δομή είναι ο σίδηρος και το βολφράμιο. Ο αριθμός συνδιάταξης για αυτήν τη δομή είναι 8 και ο αριθμός ατομικής πλήρωσης είναι 0.68 [7].

Η εξαγωνική διάταξη πυκνής δομής (HCP) διαφέρει σημαντικά από τις δύο προαναφερθείσες δομές. Σε αυτή, η άνω και η κάτω έδρες της μοναδιαίας κυψελίδας έχουν έξι άτομα που σχηματίζουν κανονικά εξάγωνα με ένα επιπλέον άτομο στο κέντρο, ενώ στο μεσαίο επίπεδο υπάρχουν τρία επιπλέον άτομα. Υλικά με δομή HCP είναι το τιτάνιο, το μαγνήσιο και ο ψευδάργυρος. Ο αριθμός συνδιάταξης για τη δομή HCP είναι 12 και ο αριθμός ατομικής πλήρωσης 0.74, όπως και για τη δομή FCC [7].

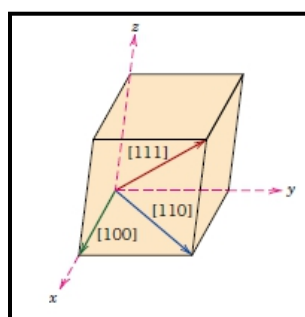


**Σχήμα 1.1.** Οι τρεις βασικότερες κρυσταλλικές δομές: (α) FCC, (β) BCC, (γ) HCP [1].

Γενικά, εκτός από τις τρεις βασικές κρυσταλλογραφικές δομές για τα μεταλλικά υλικά, υπάρχουν και ορισμένες άλλες δομές. Στη γενική περίπτωση, η μοναδιαία κυψελίδα χαρακτηρίζεται από τρία μήκη ( $a, b, c$ ) και τρεις γωνίες ( $\alpha, \beta, \gamma$ ) που ονομάζονται παράμετροι πλέγματος της κρυσταλλικής δομής [1,2]. Υπάρχουν επτά διαφορετικοί συνδυασμοί των παραμέτρων αυτών που αντιπροσωπεύουν κρυσταλλικά συστήματα, τα οποία αντιστοιχούν σε πρωτογενείς τύπους πλεγμάτων Bravais [1,3]. Επομένως, εκτός από το κυβικό και το εξαγωνικό σύστημα που προαναφέρθηκαν, υπάρχουν και το τετραγωνικό, το ορθορομβικό, το ρομβοεδρικό, το μονοκλινές και το τρικλινές [3, 4]. Μια άλλη σημαντική έννοια που είναι ιδιαίτερα χρήσιμη κατά τη μελέτη συστημάτων στη νανοκλίμακα είναι η έννοια της κρυσταλλογραφικής διεύθυνσης. Για την αναπαράσταση της κρυσταλλογραφικής διεύθυνσης, χρησιμοποιούνται οι λεγόμενοι δείκτες Miller ή Miller-Bravais, οι οποίοι είναι χαρακτηριστικοί ακέραιοι αριθμοί που αντιπροσωπεύουν, τόσο επιφάνειες με διαφορετικούς προσανατολισμούς, όσο και διευθύνσεις. Ορισμένα παραδείγματα επιφανειών με διαφορετικούς δείκτες Miller παρουσιάζονται στο σχήμα 1.2.



(α)



(β)

**Σχήμα 1.2** (α) Παραδείγματα επιπέδων με διαφορετικούς δείκτες Miller, (β) Παραδείγματα διευθύνσεων με διαφορετικούς δείκτες Miller [1, 10].

Ένα επίπεδο σε δομές που περιγράφονται από τρεις δείκτες Miller προσδιορίζεται ως  $(hkl)$ , όπου  $h, k, l$  οι δείκτες Miller, ενώ οι διευθύνσεις προσδιορίζονται ως  $[hkl]$ . Αξίζει να σημειωθεί ότι για ορισμένες κρυσταλλικές δομές, υπάρχουν διευθύνσεις με διαφορετικούς δείκτες Miller που είναι ισοδύναμες και χαρακτηρίζονται ως οικογένειες διευθύνσεων, οι οποίες γράφονται ως  $\langle hkl \rangle$  ενώ οι οικογένειες ισοδύναμων επιπέδων ως  $\{hkl\}$ . Στην περίπτωση των εξαγωνικών κρυσταλλικών δομών χρησιμοποιείται ένα παρόμοιο σύστημα με τέσσερις δείκτες Miller-Bravais [1,2,8].

Τα υλικά που ιδανικά εμφανίζουν την ίδια κρυσταλλική δομή σε όλη τη μάζα τους ονομάζονται μονοκρυσταλλοί. Σε όλο το υλικό, οι κυψελίδες έχουν τον ίδιο προσανατολισμό σε αντίθεση με τα πολυκρυσταλλικά υλικά, τα οποία αποτελούνται από ένα μεγάλο αριθμό μικρών ομάδων κυψελίδων με ίδιο προσανατολισμό που ονομάζονται κόκκοι. Στην περιοχή που συναντώνται γειτονικοί κόκκοι δεν ευθυγραμμίζονται τα ατομικά επίπεδα και αυτή η περιοχή ονομάζεται όριο κόκκων. Στη φύση είναι πολύ πιο πιθανό να απαντηθούν πολυκρυσταλλικά απ'ότι μονοκρυσταλλικά υλικά [1,2, 5].

Οι ιδιότητες των μονοκρυστάλλων εξαρτώνται από την κρυσταλλογραφική διεύθυνσή τους, κάτι που ονομάζεται ανισοτροπία [1]. Αυτό σημαίνει ότι ιδιότητες του υλικού όπως το μέτρο ελαστικότητας έχουν διαφορετικές τιμές στη διεύθυνση [100] και [111]. Η ανισοτροπία σχετίζεται με την διακύμανση των ατομικών διακένων σε κάθε κρυσταλλογραφική διεύθυνση. Πιο συγκεκριμένα, ο βαθμός της ανισοτροπίας αυξάνεται όσο μειώνεται η συμμετρία της κρυσταλλικής δομής, γι' αυτό και οι τρικλινείς δομές είναι συνήθως αρκετά ανισοτροπικές [1]. Στα πολυκρυσταλλικά υλικά οι προσανατολισμοί των κόκκων είναι τυχαίοι και γι' αυτό παρ' ότι ο κάθε κόκκος ξεχωριστά μπορεί να εμφανίζει ανισοτροπία, ολόκληρο το υλικό μπορεί να συμπεριφέρεται ιστροπικά [5].

## 1.2 Ατέλειες κρυσταλλικού πλέγματος

### 1.2.1 Εισαγωγή

Στην προηγούμενη υποενότητα περιγράφηκε η κρυσταλλική δομή των υλικών και έγινε η θεώρηση ότι τα υλικά αυτά αποτελούνται από τέλειους κρυστάλλους. Στην πράξη δεν υπάρχει κάποιο στερεό σώμα που να εμφανίζει τέτοια δομή, καθώς τα στερεά σώματα συνήθως εμπεριέχουν ένα σημαντικό αριθμό ατελειών [5]. Η ύπαρξη αυτών των ατελειών οδηγεί σε διαφοροποιήσεις των ιδιοτήτων των υλικών και είναι ιδιαίτερα σημαντική για διάφορα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα στη νανοκλίμακα [1].

Οι ατέλειες των κρυσταλλικών πλεγμάτων διακρίνονται συνήθως σε διάφορες κατηγορίες, ανάλογα με τη γεωμετρία και τη μορφή τους ως εξής [7]:

- Σημειακές ατέλειες ή ατέλειες μηδενικής διάστασης
- Γραμμικές ατέλειες ή διαταραχές ή ατέλειες μιας διάστασης
- Επίπεδες ατέλειες ή ατέλειες δύο διαστάσεων
- Χωρικές ατέλειες ή ατέλειες τριών διαστάσεων

### 1.2.2 Σημειακές ατέλειες

Στις *σημειακές ατέλειες* συγκαταλέγονται οι οπές (ή πλεγματικά κενά), τα άτομα παρεμβολής, αντικατάστασης και οι ατέλειες Frenkel και Schottky [1, 5, 6]. Η πρώτη κατηγορία σημειακών ατελειών σχετίζεται με πλεγματικές θέσεις στις οποίες απουσιάζουν τα άτομα που θα έπρεπε να βρίσκονται σε αυτή τη θέση, ενώ στη δεύτερη περίπτωση κάποια παραπλεγματική θέση έχει καταληφθεί από ένα άτομο, είτε του ίδιου υλικού είτε

ξένο άτομο. Επιπλέον, στην περίπτωση της αντικατάστασης, το ξένο άτομο έχει καταλάβει πλεγματική θέση [7].

Τα πλεγματικά κενά αποτελούν την απλούστερη σημειακή ατέλεια, η οποία δημιουργείται όταν μια πλεγματική θέση η οποία έπρεπε να καταλαμβάνεται από ένα άτομο είναι κενή [1]. Συνήθως όλα τα κρυσταλλικά στερεά περιέχουν σε ένα βαθμό κενά, τα οποία προκύπτουν στο κρυσταλλικό πλέγμα, είτε κατά τη στερεοποίηση είτε κατά τη διάχυση όταν το υλικό είναι σε στερεά κατάσταση, είτε εάν υπάρξει πρόσδοση μεγάλου ποσού ενέργειας στο υλικό, με αποτέλεσμα τα άτομα να ανακατανεμηθούν, λόγω της αυξημένης κινητικότητάς τους [1]. Έτσι, εάν υπάρχει επαρκές ποσό ενέργειας, είναι δυνατόν ένα άτομο να μετακινηθεί από την πλεγματική του θέση και να αποτεθεί σε μια γειτονική θέση. Αυτό συμβαίνει συνήθως όταν το υλικό δέχεται ένα μεγάλο ποσό ακτινοβολίας ή πλαστικής παραμόρφωσης ή λόγω υψηλής θερμοκρασίας [8]. Περιοχές δημιουργίας κενών θεωρούνται οι ελεύθερες επιφάνειες του κρυστάλλου, τα όρια των κόκκων ή το επιπλέον ημιεπίπεδο μιας διαταραχής ακμής [2]. Αξίζει να σημειωθεί η σημαντική συμβολή των πλεγματικών κενών στο φαινόμενο της διάχυσης και στην αναρρίχηση (climb) των διαταραχών [2].

Η παρεμβολή θεωρείται λιγότερο σημαντική ατέλεια από τα πλεγματικά κενά, καθώς η ενέργεια που απαιτείται για να επιτευχθεί είναι σχετικά μεγάλη. Στην περίπτωση που το άτομο παρεμβολής είναι από το ίδιο υλικό (αυτοπαρεμβολή), το κρυσταλλικό πλέγμα παραμορφώνεται σε μεγάλο βαθμό, καθώς καταλαμβάνει μια θέση που έπρεπε να είναι κενή υπό φυσιολογικές συνθήκες διότι είναι μικρότερη από τη διάσταση του ατόμου [1]. Η παρεμβολή από άτομα του ίδιου υλικού οφείλεται στις ίδιες αιτίες που αναφέρθηκαν και για τα πλεγματικά κενά [8]. Ανάλογα με το είδος της κρυσταλλικής δομής, υπάρχουν συγκεκριμένες θέσεις στις οποίες η δυναμική ενέργεια ελαχιστοποιείται, όπως η  $(1/2, 1/2, 1/2)$  και  $(1/4, 1/4, 1/4)$  στη δομή FCC, που έχουν έξι και τέσσερα γειτονικά άτομα αντίστοιχα και η  $(1/2, 0, 0)$  και  $(1/4, 1/2, 0)$  στη δομή BCC [3]. Αυτή η περίπτωση είναι σχετικά σπάνια, γιατί είναι πολύ μικρή η πιθανότητα να συμβεί. Καθώς συνήθως τα μέταλλα δεν είναι τελείως καθαρά, αλλά περιέχουν σε ένα ποσοστό άτομα άλλων στοιχείων είναι δυνατό να εμφανιστεί και ένα άλλο είδος παρεμβολής [1].

Στην περίπτωση της αντικατάστασης, ένα άτομο του υλικού αντικαθίσταται από ξένο άτομο σε πλεγματική θέση. Το ξένο άτομο μπορεί να εισαχθεί, είτε σε τυχαία θέση είτε να ακολουθήσει συγκεκριμένη διάταξη και να προκαλέσει παραμόρφωση στο πλέγμα. Αξίζει να αναφερθεί ότι τα ξένα άτομα, τόσο στην περίπτωση της παρεμβολής, όσο και της αντικατάστασης θεωρούνται ακαθαρσίες και το μέταλλο χαρακτηρίζεται ως στερεό διάλυμα [2, 8]. Η αντικατάσταση σχετίζεται με τη δημιουργία κραμάτων και για να πραγματοποιηθεί πρέπει να πληρούνται ορισμένες προϋποθέσεις. Πιο συγκεκριμένα, για να υπάρχει μεγάλη πιθανότητα να πραγματοποιηθεί αντικατάσταση, θα πρέπει να μην υπάρχει μεγάλη διαφορά μεταξύ των ατομικών ακτίνων των δύο υλικών, πρέπει η κρυσταλλική τους δομή να είναι ίδια και το ένα υλικό να έχει μεγαλύτερο σθένος από το άλλο για να είναι πιο ευνοϊκές οι συνθήκες να διαλυθεί σε αυτό [1]. Επιπλέον, όταν πρόκειται για δύο υλικά, που είναι το ένα αρκετά ηλεκτροθετικό και το άλλο αρκετά ηλεκτραρνητικό σε αυτή την περίπτωση το πιο πιθανό είναι να σχηματιστεί μια ενδομεταλλική ή μεσομεταλλική ένωση, παρά ένα στερεό διάλυμα αντικατάστασης, όπως

περιγράφηκε προηγουμένως [1]. Τόσο στην περίπτωση της παρεμβολής, όσο και στην περίπτωση της αντικατάστασης εισάγεται επιπλέον ενέργεια στο πλέγμα ανάλογα με το διαθέσιμο χώρο και το μέγεθος του ατόμου που εισάγεται στο πλέγμα. Τέλος, η ατέλεια Schottky σχετίζεται με την απουσία ενός θετικού (κατιονικό κενό) και ενός αρνητικού ιόντος (ανιονικό κενό) σε ένα ιοντικό στερεό. Η ατέλεια Frenkel σχετίζεται με την ύπαρξη ενός κατιονικού κενού και παραπλεγματικού κατιόντος [7].

### **1.2.3 Γραμμικές ατέλειες**

Οι γραμμικές ατέλειες σχετίζονται με τις λεγόμενες διαταραχές, οι οποίες συνδέονται άμεσα με την πλαστική παραμόρφωση των μετάλλων. Γι' αυτό το λόγο θα παρουσιαστούν εκτενέστερα σε επόμενη υποενότητα.

### **1.2.4 Επιφανειακές ατέλειες**

Οι επιφανειακές ατέλειες σχετίζονται με διεπιφάνειες και συνήθως αποτελούν επιφάνειες που διαχωρίζουν περιοχές με διαφορετικές κρυσταλλικές δομές ή κρυσταλλογραφικούς προσανατολισμούς. Σε αυτή την κατηγορία συμπεριλαμβάνονται τα όρια κόκκων, οι εξωτερικές επιφάνειες, οι διδυμίες (twinning), τα όρια μεταξύ διαφορετικών φάσεων και τα σφάλματα επιστοίβασης (stacking faults) [6, 7].

Όσον αφορά τα όρια κόκκων, έχει προαναφερθεί ότι τα πολυκρυσταλλικά υλικά αποτελούνται από ένα μεγάλο αριθμό κόκκων, που απαρτίζονται ο καθένας από έναν αριθμό μοναδιαίων κυψελίδων με συγκεκριμένο προσανατολισμό. Κάθε κόκκος έχει διαφορετικό προσανατολισμό από τους άλλους και πιθανότατα διαφορετικό μέγεθος [5]. Έτσι, τα όρια των κόκκων είναι η περιοχή, στην οποία διαχωρίζονται οι γειτονικοί κόκκοι και έχουν πλάτος αρκετές ατομικές αποστάσεις [1]. Στην περιοχή που ενώνονται οι γειτονικοί κόκκοι υπάρχει μια ασυμβατότητα, η οποία χαρακτηρίζεται μέσω της διαφοράς του προσανατολισμού των κόκκων [1, 6]. Τα όρια κόκκων χαρακτηρίζονται ως ατέλεια, διότι τα άτομα στην περιοχή των ορίων των κόκκων καταλαμβάνουν θέσεις μεταξύ των κόμβων των γειτονικών πλεγμάτων, διατηρώντας τους ατομικούς τους δεσμούς και παράλληλα έχουν υψηλότερη ενέργεια από τα γειτονικά τους άτομα, επειδή κατά τη συνένωση δύο κόκκων αναπτύσσονται στα όριά τους τάσεις που απαιτούν την δέσμευση μιας διεπιφανειακής ενέργειας. Η ενέργεια αυτή είναι συνάρτηση της διαφοράς του προσανατολισμού των γειτονικών κόκκων και είναι υψηλότερη σε χονδρόκοκκα, απ'ότι στα λεπτόκοκκα υλικά, καθώς η συνολική επιφάνεια είναι μικρότερη στα χονδρόκοκκα υλικά [1]. Παρ'ότι στα όρια των κόκκων διαταράσσεται η κανονικότητα της κρυσταλλικής δομής, τα πολυκρυσταλλικά υλικά έχουν ικανοποιητική αντοχή λόγω δυνάμεων συνοχής.

Εκτός από τα όρια των κόκκων, η εξωτερική επιφάνεια αποτελεί επίσης ένα σύνορο για το υλικό, καθώς ουσιαστικά στην εξωτερική επιφάνεια ολοκληρώνεται η κρυσταλλική του δομή. Τα άτομα της επιφάνειας δεν εμφανίζουν τον ίδιο αριθμό δεσμών με τα εσωτερικά άτομα και επομένως, βρίσκονται σε ανώτερη ενεργειακή κατάσταση από αυτά. Στην περίπτωση των υγρών προκειμένου να ελαχιστοποιηθεί η ενέργεια της επιφάνειας γίνεται αλλαγή του σχήματος του υλικού, κάτι που είναι αδύνατο στα στερεά [1].

Η διδυμία δημιουργείται σε έναν κρύσταλλο, όταν ένα τμήμα του είναι κατά τέτοιον τρόπο μετατοπισμένο ως προς το υπόλοιπο, ώστε να μοιάζει σαν είδωλο του άλλου ως προς ένα κρυσταλλικό επίπεδο που ονομάζεται επίπεδο διδυμίας. Η μετατόπιση αυτή οφείλεται σε ομοιογενή διάτμηση του αρχικού πλέγματος [8]. Οι διδυμίες προέρχονται λόγω αλλαγής φάσης, ανακρυστάλλωσης, σχηματίζονται κατά την ανόπτηση ή λόγω πλαστικής παραμόρφωσης του υλικού, λόγω διατμητικών τάσεων. Στα μέταλλα FCC εμφανίζεται κυρίως διδυμία μετά από ανόπτηση, ενώ στα BCC και HCP κυρίως λόγω μηχανικών τάσεων [2]. Για τη διδυμία και το ρόλο της κατά την πλαστική παραμόρφωση των υλικών, θα γίνει αναφορά στην επόμενη υποενότητα.

Τα σφάλματα επιστοιβάσης είναι ατέλειες που παρεμβάλλονται στην κανονική διαδοχή των κρυσταλλικών επιπέδων κατά μήκος μιας κρυσταλλογραφικής διεύθυνσης και διακρίνονται περαιτέρω σε ενδογενή και εξωγενή [2, 5, 7]. Τα σφάλματα επιστοιβάσης θεωρούνται ως μια ομαδοποίηση ατελειών μικρότερης τάξης και έχουν τετραεδρική μορφή [2]. Γενικά, τα σφάλματα επιστοιβάσης απαντώνται συνήθως σε δομές FCC και η διαταραχή της ακολουθίας οδηγεί σε εμφάνιση κυψελίδων με δομή HCP στο υλικό [5]. Στην περίπτωση των ενδογενών σφαλμάτων επιστοιβάσης στα προηγούμενα και επόμενα επίπεδα από το επίπεδο στο οποίο εμφανίζεται το σφάλμα, η επιστοιβάση γίνεται κανονικά ενώ στην περίπτωση των εξωγενών σφαλμάτων επιστοιβάσης εμφανίζεται διπλή ατέλεια στην διαδοχή των επιπέδων [2]. Τέλος, είναι δυνατόν να προκύψει σφάλμα επιστοιβάσης λόγω ολίσθησης ενός τμήματος του κρυστάλλου, μεταξύ δύο στρώσεων συμπαγούς συσσωμάτωσης. Σε αυτά τα σφάλματα επιστοιβάσης θα γίνει αναφορά και σε επόμενη υποενότητα.

### **1.2.5 Χωρικές ατέλειες**

Τέλος, οι *χωρικές ατέλειες* της κρυσταλλικής δομής αφορούν περιπτώσεις στις οποίες ένα μέρος του όγκου του αρχικού κρυστάλλου αντικαθίσταται από όγκο διαφορετικής ένωσης. Δύο βασικά είδη χωρικών ατελειών είναι τα κατακρημνίσματα και τα εγκλείσματα. Τα κατακρημνίσματα είναι μικρού μεγέθους ενώσεις που σχηματίζονται από το αρχικό υλικό και ένα κραματικό στοιχείο, ενώ τα εγκλείσματα είναι ακαθαρσίες που δημιουργούνται κατά τη στερεοποίηση του μετάλλου από την υγρή φάση. Επιπλέον, πόροι και ρωγμές που μπορεί να σχηματιστούν στο υλικό, θεωρούνται επίσης ως χωρικές ατέλειες [1, 7].

## **1.3 Πλαστικότητα και διαταραχές**

### **1.3.1 Εισαγωγή**

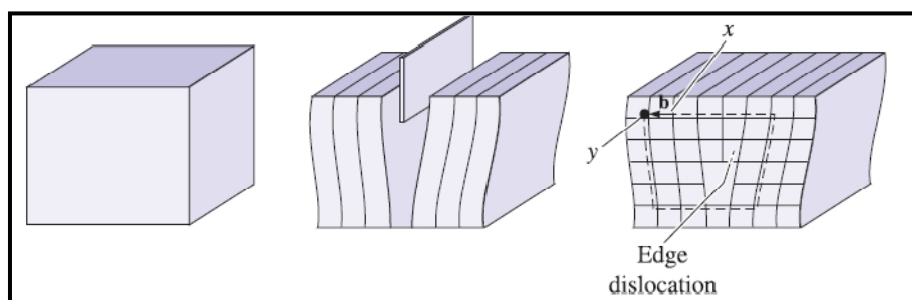
Στα μέσα του προηγούμενου αιώνα, επιβεβαιώθηκε με παρατηρήσεις σε ηλεκτρονικό μικροσκόπιο η ύπαρξη των γραμμικών ατελειών που ονομάζονται διαταραχές και σχετίζονται άμεσα με τη μηχανική συμπεριφορά των μετάλλων [1, 8]. Ο εντοπισμός των διαταραχών είναι δυνατό να πραγματοποιηθεί και με διάφορες άλλες τεχνικές, όπως με επιφανειακές μεθόδους για τον εντοπισμό του σημείου εμφάνισης μιας διαταραχής στην επιφάνεια ενός κρυστάλλου, μέσω ειδικού φωτισμού για την περίπτωση υλικών διαπερατών στο ορατό φάσμα του φωτός, μέσω περίθλασης ακτίνων χ και μικροσκοπίας πεδίου ιόντων ή τομογραφίας ανιχνευτή ατόμων [8, 11]. Όλα τα κρυσταλλικά υλικά

συνήθως περιέχουν διαταραχές, οι οποίες επιτρέπουν τα υλικά αυτά να οδηγηθούν σε μόνιμη παραμόρφωση, σε τάσεις μικρότερες από τις οποίες το υλικό θα οδηγούνταν σε θραύση [1, 2]. Η θεωρητική αντοχή σε διάτμηση είχε υπολογιστεί από τον Frenkel στην περίπτωση μονοκρυστάλλων με απλή ορθογωνική κρυσταλλική δομή [2, 11].

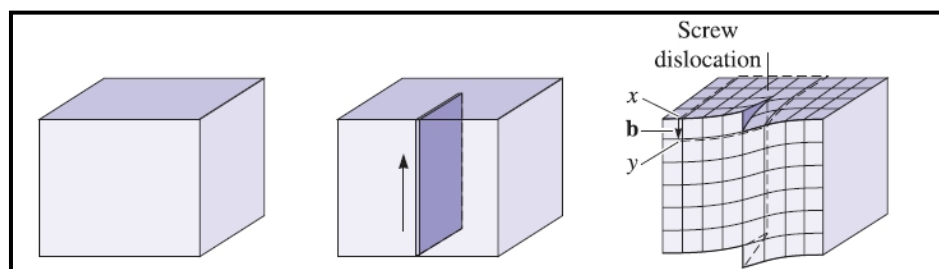
Με αυτό τον τρόπο, η αντοχή του μονοκρυστάλλου σε διάτμηση προκύπτει περίπου ως  $\mu/6$  ή  $\mu/10$ , όπου  $\mu$  το μέτρο διάτμησης [2, 11]. Ωστόσο στην πράξη, η τιμή της κρίσιμης διατμητικής τάσης για να ξεκινήσει η ολίσθηση είναι αρκετά χαμηλότερη, έως και  $10^{-5}$   $\mu$ , με βάση πειραματικές μετρήσεις [2, 11]. Η αιτιολόγηση αυτής της σημαντικής απόκλισης μεταξύ θεωρητικών και πειραματικών τιμών επιτεύχθηκε όταν λήφθηκε υπόψη η επίδραση των διαταραχών στην πλαστική παραμόρφωση [11].

### 1.3.2 Είδη διαταραχών και κίνηση διαταραχών

Η πλαστική παραμόρφωση σχετίζεται με την κίνηση μεγάλων αριθμών διαταραχών, γι' αυτό και αξίζει να μελετηθούν σε ξεχωριστή υποενότητα. Οι διαταραχές εμφανίζονται σε δύο κυρίως είδη, τις διαταραχές ακμής και κοχλία, όπως φαίνεται στο σχήμα 1.3. Οι διαταραχές χαρακτηρίζονται από δύο στοιχεία, τη διεύθυνσή τους και το διάνυσμα Burgers τους [11]. Οι διαταραχές ακμής εμφανίζουν παραμόρφωση του πλέγματος κοντά στη μία άκρη ενός επιπέδου ατομικού ημιεπιπέδου, που ορίζει τη γραμμή διαταραχής. Από την άλλη, η διαταραχή κοχλία προκύπτει μέσω διατμητικής παραμόρφωσης του πλέγματος και σε αυτή την περίπτωση μοιάζει το κρυσταλλικό πλέγμα να έχει υποστεί στροφή γύρω από τη γραμμή διαταραχής, λαμβάνοντας τη μορφή μιας σπείρας. Το τρίτο είδος διαταραχών είναι οι μικτές διαταραχές που έχουν συνιστώσες τόσο διαταραχών ακμής όσο και κοχλία [1, 7].



(α)



(β)

**Σχήμα 1.3.** Είδη διαταραχών και επίπεδα ολίσθησης (α) διαταραχή τύπου ακμής, (β) διαταραχή τύπου κοχλία [5].

Η πλαστική παραμόρφωση όπως έχει προαναφερθεί, βασίζεται στην κίνηση των διαταραχών, η οποία προκύπτει όταν η απαραίτητη δύναμη ασκηθεί στην κρυσταλλική δομή. Καθώς δημιουργείται και μια δύναμη που αντιτίθεται στην κίνηση της διαταραχής, η συνολική δύναμη είναι σχεδόν μηδενική και η τάση που ασκείται ονομάζεται τάση Peierls-Nabarro [5] και δίνεται από την παρακάτω σχέση:

$$\tau = c \exp\left(-\frac{kd}{b}\right) \quad (1.1)$$

όπου με  $\tau$  συμβολίζεται η διατμητική τάση που απαιτείται για την μετακίνηση της διαταραχής, με  $b$  συμβολίζεται το μέτρο του διανύσματος Burgers, με  $d$  συμβολίζεται η απόσταση μεταξύ κοντινών επιπέδων ολίσθησης και τα  $c$  και  $k$  είναι σταθερές του υλικού [5]. Η τάση Peierls-Nabarro επομένως εξαρτάται από το πλάτος της διαταραχής που υποδηλώνει ουσιαστικά την απόσταση των ατόμων από τις θέσεις που θα είχαν σε έναν τέλειο κρύσταλλο. Η διαταραχή θεωρείται «πλατιά» όταν το πλάτος είναι πάνω από 2 ατομικές αποστάσεις. Στην περίπτωση αυτή, οι διαταραχές ολισθαίνουν (glide) χωρίς δυσχέρειες και τα υλικά που εμφανίζουν τέτοιες διαταραχές είναι ιδιαίτερα όλκιμα. Αξίζει εδώ να διευκρινιστεί ότι η κίνηση των διαταραχών εάν γίνεται στο επίπεδο ολίσθησης όπως είναι φυσικό όταν το υλικό παραμορφώνεται πλαστικά, μπορεί να χαρακτηριστεί ως ολίσθηση (glide) ενώ εάν γίνεται κάθετα στο επίπεδο ολίσθησης χαρακτηρίζεται ως αναρρίχηση (climb). Αντίθετα, τα κεραμικά υλικά εάν εμφανίσουν διαταραχές, αυτές είναι πολύ μικρού πλάτους και έτσι τα υλικά αυτά είναι σκληρά και ψαθυρά. Η τάση Peierls-Nabarro μειώνεται όσο μεγαλώνει η απόσταση μεταξύ των ατομικών επιπέδων, όπως στα επίπεδα πυκνής διάταξης, γι' αυτό σε αυτά τα επίπεδα ευνοείται η ολίσθηση και επιτυγχάνεται σε μικρότερες τάσεις από τη θεωρητική [5].

Όσον αφορά τις διαταραχές ακμής, κινούνται ως αποτέλεσμα της δράσης διατμητικών τάσεων σε μια κατεύθυνση κάθετη προς την γραμμή διαταραχής [1]. Εάν η ασκούμενη τάση είναι επαρκώς μεγάλη, τότε μπορούν να υποστούν θραύση οι δεσμοί ορισμένων ατόμων κατά μήκος του επιπέδου διάτμησης, μια διαδικασία που καθώς επαναλαμβάνεται μέσα στο υλικό δίνει την αίσθηση της κίνησης. Πριν και μετά το πέρασμα μιας διαταραχής από μια συγκεκριμένη περιοχή, η διάταξη των ατόμων του υλικού είναι τέλεια και μόνο κατά τη διάρκεια της κίνησης διαταράσσεται η κανονικότητα της κρυσταλλικής δομής [1].

Η διαδικασία της ανάπτυξης της πλαστικής παραμόρφωσης μέσω κίνησης διαταραχών ονομάζεται ολίσθηση (slip) [1]. Η ολίσθηση λαμβάνει χώρα στο λεγόμενο επίπεδο ολίσθησης το οποίο διασχίζει η γραμμή διαταραχής και είναι ένα επίπεδο υψηλής ατομικής πυκνότητας [12]. Η κίνηση των διαταραχών λόγω των ασκούμενων τάσεων προσομοιάζει στον τρόπο κίνησης μιας κάμπιας, καθώς σταδιακά καταστρέφονται και ξαναδημιουργούνται δεσμοί [1, 11]. Στην περίπτωση των διαταραχών τύπου κοχλία η κίνηση λόγω των ασκούμενων διατμητικών τάσεων είναι κάθετη στη διεύθυνση των τάσεων, ενώ στην περίπτωση των διαταραχών ακμής παράλληλη. Τέλος, στην περίπτωση των μικτών διαταραχών η κατεύθυνση είναι μεταξύ της κάθετης και της παράλληλης διεύθυνσης προς την ασκούμενη τάση [1].

Μια διαταραχή ακμής είναι δυνατόν να κινείται στο επίπεδο ολίσθησης που βρίσκεται η γραμμή της και το διάνυσμα Burgers [2, 11]. Αυτός ο τρόπος κίνησης ονομάζεται



συντηρητικός και προκαλεί την ίδια μετατόπιση, είτε στις διαταραχές ακμής είτε στις διαταραχές κοιλία υπό την εφαρμογή ίδιου μεγέθους τάσεων [11]. Όσες διαταραχές μπορούν να ολισθήσουν ονομάζονται ολισθαίνουσες ή κινούμενες (glissile), ενώ όσες δεν μπορούν ονομάζονται στατικές ή ακίνητες (sessile) [8]. Στην περίπτωση των διαταραχών ακμής, η διαταραχή μπορεί να ολισθήσει μόνο σε ένα επίπεδο, σε αντίθεση με τη διαταραχή κοιλία η οποία λόγω της κυλινδρικής συμμετρίας που εμφανίζει δεν υπάρχει συγκεκριμένο επίπεδο ολίσθησης ώστε να περιορίζεται σε αυτό και η διαδικασία που απαιτείται για να κινηθεί σε άλλο επίπεδο ολίσθησης που έχει μια κοινή διεύθυνση ολίσθησης με το αρχικό επίπεδο ονομάζεται διασταυρούμενη ολίσθηση (cross-slip) [2, 11]. Με τον ίδιο τρόπο, η διαταραχή κοιλία μπορεί να αποφεύγει εμπόδια που εμφανίζονται στο δρόμο τους [11].

Για τις διαταραχές ακμής, είναι δυνατή η ολίσθηση προς άλλο επίπεδο, κάθετα στο επίπεδο ολίσθησης υπό προϋποθέσεις όπως σε υψηλές θερμοκρασίες, κάτι που ονομάζεται αναρρίχηση (climb) της διαταραχής. Η κίνηση αυτή θεωρείται μη-συντηρητική. Αυτό μπορεί να συμβεί λόγω της ύπαρξης πλεγματικών κενών ή ατόμων παρεμβολής. Επειδή όμως δεν υπάρχει πάντα ο απαιτούμενος αριθμός κενών ή ατόμων παρεμβολής και είναι δύσκολη η διάχυση, μόνο ένα κομμάτι της διαταραχής τελικά αναρριχάται. Η περιοχή όπου η διαταραχή μετατοπίζεται από ένα επίπεδο στο άλλο αποτελεί ένα πρόσθετο ευθύγραμμο τμήμα για την διαταραχή (jog), έχει διάνυσμα κάθετο στο επίπεδο ολίσθησης και μπορεί να δημιουργηθεί και στην περίπτωση όπου μια διαταραχή συναντήσει διασταυρούμενες διαταραχές κατά την κίνησή της [2, 11]. Τα τμήματα της διαταραχής που δεν αναρριχώνται (kinks), σε αντίθεση με τα πρόσθετα ευθύγραμμα τμήματα που δημιουργούνται κατά τη διασταύρωση διαταραχών άλλων διευθύνσεων κίνησης, μπορούν να κινηθούν και ουσιαστικά αποτελούν διαταραχές ακμής [11].

Συνήθως στην κρυσταλλική δομή, όπως προαναφέρθηκε, υπάρχει πάντα ένας αριθμός διαταραχών που εξαρτάται από το υλικό και τη διαδικασία παραγωγής του [11]. Πιο συγκεκριμένα, στα μέταλλα και τα κράματά τους υπάρχουν διαταραχές που οφείλονται στη διαδικασία της στερεοποίησης, σε πλαστική παραμόρφωση που οφείλεται σε κάποια κατεργασία ή λόγω θερμικών τάσεων που προέρχονται από ταχεία απόψυξη [11]. Προκειμένου να ποσοτικοποιηθεί ο βαθμός στον οποίο συγκεντρώνονται διαταραχές σε ένα υλικό, χρησιμοποιείται η έννοια της πυκνότητας διαταραχών, η οποία ορίζεται ως το συνολικό μήκος διαταραχών σε μοναδιαίο όγκο ή ως ο αριθμός των διαταραχών που διασχίζουν μια μοναδιαία επιφάνεια [1, 5]. Οι μονάδες της πυκνότητας διαταραχών εκφράζονται συνήθως είτε σε  $m^{-2}$ ,  $cm^{-2}$  ή  $mm^{-2}$ . Χαρακτηριστικές τιμές πυκνότητας διαταραχών είναι  $10^3 mm^{-2}$  για μέταλλα που έχουν στερεοποιηθεί με αυστηρά ελεγχόμενη διαδικασία και  $10^6-10^7 mm^{-2}$  στην περίπτωση της ανόπτησης και στις περιπτώσεις που το υλικό έχει υποστεί σε μεγάλο βαθμό πλαστική παραμόρφωση μπορεί να φτάσουν έως και  $10^9$  ή  $10^{10} mm^{-2}$  [1, 11]. Η πυκνότητα διαταραχών μπορεί να μειωθεί μέσω κατάλληλης θερμικής κατεργασίας, ενώ κρύσταλλοι μη μεταλλικών υλικών έχουν σημαντικά μικρότερη πυκνότητα διαταραχών, της τάξης των  $10^2-10^5 cm^{-2}$  [11].

### 1.3.3 Πεδία παραμόρφωσης

Η δυνατότητα των διαταραχών να κινηθούν και να πολλαπλασιαστούν, εξαρτάται και από τα πεδία παραμόρφωσης που αναπτύσσονται γύρω τους. Κατά την πλαστική παραμόρφωση των μετάλλων, ένα μικρό ποσοστό της ενέργειας που παράγεται αποθηκεύεται, ενώ το μεγαλύτερο ποσοστό απομακρύνεται με τη μορφή θερμότητας [1]. Το μεγαλύτερο ποσό αποθηκευμένης ενέργειας είναι ενέργεια λόγω παραμόρφωσης που σχετίζεται με τις διαταραχές. Καθώς γύρω από την γραμμή διαταραχής υπάρχει παραμόρφωση του κρυσταλλικού πλέγματος, τα άτομα σε αυτές τις περιοχές υφίστανται θλιπτικές, εφελκυστικές και διατμητικές παραμορφώσεις. Τα άτομα που βρίσκονται πάνω από τη γραμμή διαταραχής συμπιέζονται, ενώ άτομα που βρίσκονται κάτω από τη γραμμή διαταραχής εφελκύνονται. Στην περίπτωση των διαταραχών κοχλία, οι παραμορφώσεις προκύπτουν μόνο λόγω καθαρής διάτμησης και έχουν ακτινική συμμετρία [1, 2]. Αντίθετα, η διαταραχή ακμής έχει πιο σύνθετο τασικό και παραμορφωσιακό πεδίο, το οποίο μπορεί να προσεγγιστεί με συνθήκες επίπεδης παραμορφωσιακής κατάστασης.

Η επίδραση των πεδίων παραμόρφωσης φθίνει με την απόσταση από τη διαταραχή [1]. Όμως, παρόλα αυτά, καθώς η τάση που παράγεται είναι ανάλογη του μέτρου διάτμησης, ακόμα και σε απόσταση χιλιάδες φορές το μήκος του διανύσματος Burgers, η τάση μπορεί να είναι ίδιας τάξης μεγέθους με την τάση διαρροής, άρα η επίδραση του τασικού πεδίου έχει μεγάλο εύρος [11]. Για γειτονικές διαταραχές, είναι δυνατή η αλληλεπίδρασή τους λόγω των πεδίων αυτών και η αλληλεπίδραση αυτή μπορεί να οδηγήσει, είτε σε απωθητικές δυνάμεις, είτε σε ελκτικές δυνάμεις ανάλογα με το πρόσημο των διαταραχών [1,2]. Με αυτό τον τρόπο, μπορούν οι διαταραχές να απομακρυνθούν μεταξύ τους ή να εξουδετερωθούν ώστε τα επιπλέον ημιεπίπεδα να γίνουν ένα ενιαίο επίπεδο και σε κάθε περίπτωση, οι τελικές θέσεις των διαταραχών είναι τέτοιες ώστε να επιτυγχάνεται η ελάχιστη συνολική ενέργεια παραμόρφωσης του κρυσταλλικού πλέγματος [1,2]. Για παράδειγμα, εάν δύο ομόσημες διαταραχές συνδυαστούν, το συνολικό διάνυσμα Burgers θα είναι  $2b$  και η ενέργεια παραμόρφωσης  $4b^2$ , ενώ εάν απωθήσουν η μία την άλλη θα είναι  $2b^2$ . Η ύπαρξη των παραμορφωσιακών πεδίων είναι σημαντική για τη σκλήρυνση των μετάλλων.

### 1.3.4 Συστήματα ολίσθησης

Στα μονοκρυσταλλικά υλικά, οι διαταραχές δημιουργούνται στις ελεύθερες επιφάνειες αλλά και λόγω κατακρημνισμάτων, οξειδίων, άλλων φάσεων του υλικού, κτλ. Πηγές διαταραχών μπορεί να είναι και υπάρχουσες διαταραχές, ενώ σε πολυκρυσταλλικά υλικά οι διαταραχές δημιουργούνται και σε όρια κόκκων ή λόγω επιφανειακών τάσεων [1, 11]. Οι διαταραχές μπορούν να διασταυρωθούν και να πολλαπλασιαστούν. Πιο συγκεκριμένα, καθώς μια διαταραχή κινείται στο επίπεδο ολίσθησής της, μπορεί να συναντήσει άλλες διαταραχές που διασχίζουν το ίδιο επίπεδο. Όπως αναφέρθηκε στην υποενότητα 1.3.2, τότε δημιουργούνται πρόσθετα ευθύγραμμα τμήματα που ανήκουν στη διαταραχή, τα οποία ονομάζονται στην αγγλόφωνη βιβλιογραφία jogs και kinks, αντίστοιχα, μεταξύ των σημείων που η διαταραχή διακόπτεται από τις άλλες διαταραχές. Η δημιουργία ενός jog βρίσκεται εκτός του επιπέδου της αρχικής διαταραχής και έχει διάνυσμα Burgers ίδιο με το διάνυσμα Burgers της διασταυρούμενης διαταραχής, οδηγεί σε αύξηση του μήκους της διαταραχής

και αύξηση της ενέργειας του κρυστάλλου, ενώ δυσκολεύει την κίνηση της διαταραχής συμβάλλοντας στο φαινόμενο της εργοσκλήρυνσης που θα περιγραφεί σε επόμενη υποενότητα [12]. Αντίθετα, αν διασταυρωθούν δύο διαταραχές με παράλληλα διανύσματα Burgers τα ευθύγραμμα τμήματα που δημιουργούνται παραμένουν στο ίδιο επίπεδο ολίσθησης, ονομάζονται kinks στην αγγλόφωνη βιβλιογραφία και σε αντίθεση με τα jogs δεν εμποδίζουν την κίνηση των διαταραχών καθώς «απορροφούν» ατέλειες ή πλεγματικά κενά ώστε η διαταραχή να μπορεί να κινείται ακόμα και υπό μικρότερες διατμητικές τάσεις [12]. Όσον αφορά τον πολλαπλασιασμό των διαταραχών, η θεωρία αυτή αναπτύχθηκε μετά την παρατήρηση ότι ο μεγάλος αριθμός των διαταραχών που εμφανίζονται στα μέταλλα, ιδιαίτερα όταν αυτά έχουν δεχθεί μεγάλες παραμορφώσεις, δεν ήταν δυνατόν να προκαλείται μόνο από τις αρχικές πηγές διαταραχών. Ο πολλαπλασιασμός των διαταραχών θεωρείται ότι προέρχεται από τις λεγόμενες πηγές Frank-Read και ουσιαστικά οι νέες διαταραχές προκύπτουν από τμήματα προηγούμενων διαταραχών που καμπυλώθηκαν, σχημάτισαν βρόχους και τελικά αποκόπηκαν [12].

Η κίνηση των διαταραχών δε γίνεται με την ίδια ευκολία σε οποιοδήποτε κρυσταλλογραφικό επίπεδο και κρυσταλλογραφική διεύθυνση. Ανάλογα με την κρυσταλλική δομή του υλικού, υπάρχουν συγκεκριμένα επίπεδα στα οποία πραγματοποιείται η ολίσθηση, τα οποία έχουν αναφερθεί ως επίπεδα ολίσθησης [1]. Ο συνδυασμός επιπέδου και διεύθυνσης ολίσθησης ορίζει ένα σύστημα ολίσθησης. Το σύστημα ολίσθησης είναι κατάλληλο ώστε να ελαχιστοποιείται η παραμόρφωση του πλέγματος που οφείλεται στην κίνηση μιας διαταραχής [1]. Έτσι, το επίπεδο ολίσθησης είναι το επίπεδο που έχει την πυκνότερη διάταξη για την κάθε κρυσταλλική δομή, ενώ η διεύθυνση ολίσθησης είναι αυτή που κατευθύνεται στο επίπεδο με την πυκνότερη διάταξη ατόμων [1].

**Πίνακας 1.1.** Συστήματα ολίσθησης για διάφορες κρυσταλλικές δομές και υλικά [1, 10].

Υλικό	Επίπεδο ολίσθησης	Διεύθυνση ολίσθησης	Συνολικά συστήματα ολίσθησης
Cu, Al, Ni, Ag, Au, Pb, $\gamma$ Fe (FCC)	{111}	$\langle 1\bar{1}0 \rangle$	12
$\alpha$ -Fe, W, Mo (BCC)	{110}	$\langle \bar{1}11 \rangle$	12
$\alpha$ -Fe, W, Na (BCC)	{211}	$\langle \bar{1}11 \rangle$	12
$\alpha$ -Fe, K (BCC)	{321}	$\langle \bar{1}11 \rangle$	24
Cd, Zn, Mg, Ti, Be (HCP)	{0001}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	3
Ti, Mg, Zr (HCP)	{10 $\bar{1}$ 0}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	3
Ti, Mg	{10 $\bar{1}$ 1}	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	6

Στον πίνακα 1.1 παρουσιάζονται τα συστήματα ολίσθησης, για τις τρεις βασικότερες κρυσταλλικές δομές. Μπορεί εύκολα να διαπιστωθεί ότι το κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα περιλαμβάνει τα περισσότερα συστήματα ολίσθησης, ενώ το εξαγωνικό πυκνής διάταξης τα λιγότερα [10]. Επίσης, για τις κρυσταλλικές δομές BCC και HCP ορισμένα συστήματα ολίσθησης μπορούν να ενεργοποιηθούν μόνο σε υψηλές θερμοκρασίες [1]. Ο αριθμός των πιθανών συστημάτων ολίσθησης για κάθε δομή έχει άμεση επίδραση στις ιδιότητες των υλικών, καθώς μέταλλα με δομή FCC και BCC είναι συνήθως όλκιμα, γιατί επιτρέπουν πιο εύκολα την πλαστική παραμόρφωση σε κάποιο σύστημα ολίσθησης [1]. Αντιθέτως, λόγω του μειωμένου αριθμού συστημάτων ολίσθησης, στα μέταλλα με κρυσταλλική δομή HCP παρουσιάζεται μειωμένη όλκιμότητα και περισσότερο ψαθυρή συμπεριφορά [1, 10].

Η μελέτη της ολίσθησης διευκολύνεται με τη χρήση του διανύσματος Burgers. Η διεύθυνση του διανύσματος Burgers είναι ίδια με τη διεύθυνση ολίσθησης, ενώ το μέτρο του ίσο με την μοναδιαία απόσταση ολίσθησης για κάθε κρυσταλλική δομή, που αντιστοιχεί στο μικρότερου μήκους διάνυσμα πλέγματος [1,2]. Έτσι για κάθε μία από τις συνήθεις κρυσταλλικές δομές, τα αντίστοιχα διανύσματα Burgers ορίζονται ως εξής (όπου με  $a$  συμβολίζεται σε κάθε περίπτωση η πλεγματική σταθερά) [1]:

$$\vec{b}_{FCC} = \frac{a}{2} \langle 110 \rangle \quad (1.2)$$

$$\vec{b}_{BCC} = \frac{a}{2} \langle 111 \rangle \quad (1.3)$$

$$\vec{b}_{HCP} = \frac{a}{3} \langle 11\bar{2}0 \rangle \quad (1.4)$$

Στην περίπτωση των μονοκρυσταλλικών υλικών είναι δυνατόν να εξηγηθεί ευκολότερα η έννοια της ολίσθησης. Ακόμα και στην περίπτωση που η φόρτιση είναι θλιπτική ή εφελκυστική υπάρχουν συνιστώσες σχετικές με διάτμηση και το μέτρο τους εξαρτάται από το μέτρο της επιβληθείσας τάσης και τον προσανατολισμό του επιπέδου ολίσθησης και της διεύθυνσης ολίσθησης [1,5,10]. Αν ονομαστεί η γωνία μεταξύ της κατεύθυνσης της ολίσθησης και της επιβληθείσας τάσης  $\lambda$ , τότε η διατμητική δύναμη κατά τη διεύθυνση ολίσθησης για να κινηθεί η μια διαταραχή σε αυτό το σύστημα ολίσθησης ορίζεται ως εξής [5]:

$$F_r = F \cos \lambda \quad (1.5)$$

Εάν διαιρεθεί η σχέση 1.5 κατά μέλη με το εμβαδό της επιφάνειας του επιπέδου ολίσθησης  $A = A_0 / \cos \phi$ , όπου με  $\phi$  συμβολίζεται η γωνία μεταξύ του κάθετου διανύσματος στο επίπεδο ολίσθησης και τη διεύθυνση της επιβληθείσας τάσης, λαμβάνεται η έκφραση του λεγόμενου νόμου του Schmid ως εξής [5]:

$$\tau_r = \sigma \cos \phi \cos \lambda \quad (1.6)$$

, όπου  $\sigma$  η κάθετη συνιστώσα της επιβληθείσας τάσης. Σε ένα από τα διάφορα συστήματα ολίσθησης η τιμή του  $\tau_r$  μεγιστοποιείται. Όταν η τιμή της  $\tau_r$  ξεπεράσει μια κρίσιμη τιμή τάσης, η οποία είναι η ελάχιστη τιμή διατμητικής τάσης για να μπορεί να ξεκινήσει η

ολίσθηση αρχίζει να παραμορφώνεται πλαστικά το υλικό [1, 5]. Η τιμή αυτή είναι μια σημαντική ιδιότητα του υλικού, γιατί ουσιαστικά προσδιορίζει τη διαρροή του. Η τάση που απαιτείται για την εκκίνηση της διαρροής λύνοντας τη σχέση 1.6 ως προς την κάθετη τάση σ είναι:

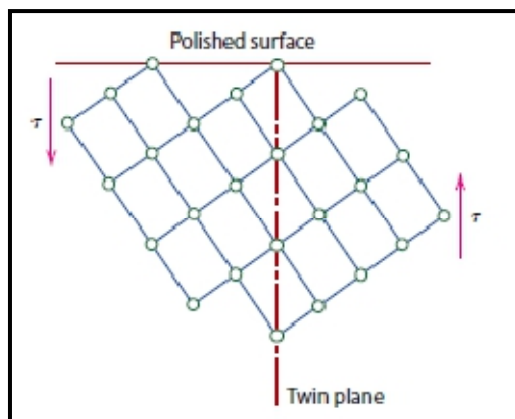
$$\sigma_y = \frac{\tau_{crss}}{(\cos\phi \cos\lambda)_{max}} \quad (1.7)$$

Από τη σχέση 1.7, προκύπτει ότι η ελάχιστη τάση που απαιτείται όταν οι γωνίες φ και λ είναι 45° είναι διπλάσια της κρίσιμης διατμητικής τάσης [1]. Όταν η παραμόρφωση ενός μονοκρυσταλλικού υλικού είναι εκτεταμένη, η ολίσθηση μπορεί να συμβεί και κατά μήκος ενός δεύτερου συστήματος ολίσθησης [1]. Ειδικότερα στα υλικά με δομή HCP, λόγω του περιορισμένου αριθμού συστημάτων ολίσθησης είναι δυνατόν για κάποιους προσανατολισμούς κρυσταλλογραφικών επιπέδων και διευθύνσεων η κρίσιμη διατμητική τάση να είναι μηδενική άρα το υλικό να οδηγηθεί άμεσα σε θραύση [1]. Γενικά, οι κρίσιμες διατμητικές τάσεις στα υλικά με δομή FCC και HCP (για ολίσθηση σε συγκεκριμένα επίπεδα) είναι αρκετά χαμηλές, λόγω της ύπαρξης των επιπέδων με πυκνή διάταξη, ενώ για υλικά με δομή BCC κυμαίνονται σε τιμές περίπου 100 φορές μεγαλύτερες [5, 10].

Υπό προϋποθέσεις είναι δυνατός ο διαχωρισμός των διαταραχών σε επιμέρους διαταραχές, τις μερικές διαταραχές. Για παράδειγμα, ένα είδος μερικών διαταραχών είναι οι διαταραχές Shockley. Ο λόγος για τον οποίο ένα διάνυσμα Burgers διαχωρίζεται είναι προκειμένου να ξεπεράσει ένα εμπόδιο ο ευκολότερος δρόμος είναι περάσει δίπλα από τις πλευρές του εμποδίου [11].

### 1.3.5 Διδυμία

Πέραν της ολίσθησης είναι δυνατόν για κάποια μέταλλα να προκύψει πλαστική παραμόρφωση, μέσω ενός άλλου μηχανισμού [1, 11]. Βέβαια η διδυμία δεν παίζει ιδιαίτερα σημαντικό ρόλο στην παραμόρφωση ευρέως χρησιμοποιούμενων μετάλλων όπως ο χαλκός και το αλουμίνιο, αν και μπορεί να παρατηρηθεί υπό συνθήκες σε όλες τις συνήθεις κρυσταλλικές δομές [2]. Λόγω διατμητικών δυνάμεων, είναι δυνατόν να μετατοπιστούν άτομα κατά διαφορετικές αποστάσεις ώστε στη μια πλευρά ενός επιπέδου τα άτομα να βρίσκονται σε θέσεις κατοπτρικές των ατόμων που βρίσκονται στην άλλη άκρη του επιπέδου, όπως φαίνεται στο σχήμα 1.4 [1,11]. Η δημιουργία της διδυμίας υπό μηχανικά φορτία γίνεται συνήθως πολύ γρήγορα, σχεδόν με την ταχύτητα του ήχου (σε χρόνο λίγων μs ενώ η ολίσθηση συμβαίνει σε χρόνο ms) και οι νέες διδυμίες δημιουργούνται απότομα ενώ ταυτόχρονα σε ορισμένα υλικά παράγεται και ένας χαρακτηριστικός ήχος (π.χ. στον κασσίτερο) [2, 12]. Για κάθε κρυσταλλική δομή η διδυμία συμβαίνει σε συγκεκριμένο επίπεδο και συγκεκριμένη διεύθυνση [1, 11].



**Σχήμα 1.4.** Επίπεδο διδυμίας μετά από επιβληθείσα διατμητική τάση [1].

Κατά την διδυμία, η διατμητική παραμόρφωση είναι ομοιογενής σε αντίθεση με αυτό που συμβαίνει κατά την ολίσθηση. Επίσης, στην διδυμία υπάρχει επαναπροσανατολισμός κατά μήκος του επιπέδου διδυμίας και η μετατόπιση των ατόμων είναι μικρότερη από την διατομική απόσταση, καθώς η απόσταση που διανύει το κάθε άτομο αποτελεί ένα ποσοστό της διατομικής απόστασης και όχι μια ολόκληρη ατομική απόσταση ή ακέραια πολλαπλάσιά της όπως συμβαίνει κατά την ολίσθηση [1, 2, 11, 12]. Δύο είδη διδυμίας υπάρχουν, λόγω ανόπτωσης ή μηχανικής παραμόρφωσης [11, 12]. Διδυμία λόγω μηχανικής παραμόρφωσης εμφανίζουν κυρίως μέταλλα με δομή BCC και ιδίως HCP σε χαμηλές θερμοκρασίες και υψηλούς ρυθμούς παραμόρφωσης, καθώς σε αυτές τις συνθήκες δεν ευνοείται η ολίσθηση λόγω του περιορισμένου αριθμού συστημάτων ολίσθησης [1, 2, 11]. Αντίθετα, διδυμία λόγω ανόπτωσης εμφανίζεται πολύ συχνότερα σε υλικά με δομή FCC. Η ενέργεια του ορίου της διδυμίας είναι αρκετά χαμηλή σε σχέση με την ενέργεια που έχουν τα όρια των κόκκων, αλλά εάν η ενέργεια της διεπαφής είναι μεγαλύτερη από αυτή των ορίων των κόκκων η εμφάνιση διδυμίας λόγω ανόπτωσης είναι σπάνια, όπως στο αλουμίνιο. Επίσης, η τάση που προκαλεί τη διδυμία είναι συνήθως μεγαλύτερη της τάσης που απαιτείται για ολίσθηση και γι' αυτό υπερισχύει ο δεύτερος τρόπος παραμόρφωσης, όμως σε χαμηλές θερμοκρασίες όπου η κρίσιμη τιμή τάσης για ολίσθηση αυξάνεται, αυξάνεται η πιθανότητα της εμφάνισης διδυμίας.

Άλλοι παράγοντες που επηρεάζουν τη διδυμία είναι η ύπαρξη ξένων ατόμων στην κρυσταλλική δομή, που ευνοεί τη διδυμία στα υλικά με δομή FCC και BCC καθώς και η προφόρτιση του υλικού που οδηγεί σε παρεμπόδιση της διδυμίας [2]. Η συνολική παραμόρφωση που δημιουργείται λόγω της διδυμίας είναι σχετικά μικρή σε σχέση με αυτή κατά την ολίσθηση γιατί επηρεάζει ένα πολύ μικρό ποσοστό του κρυσταλλικής δομής του υλικού [10]. Παρόλα αυτά, η σημασία της διδυμίας έγκειται στο ότι συμβάλλει στο επαναπροσανατολισμό του κρυσταλλικού πλέγματος και δημιουργεί έτσι κατάλληλες συνθήκες για να ξεκινήσει η ολίσθηση από νέα συστήματα ολίσθησης που τοποθετήθηκαν σε κατάλληλο προσανατολισμό [1, 10].

### 1.3.6 Εργοσκλήρυνση και διαταραχές

Η εργοσκλήρυνση είναι το φαινόμενο κατά το οποίο ένα όλκιμο μέταλλο γίνεται σκληρότερο και πιο ανθεκτικό όσο παραμορφώνεται πλαστικά [1]. Έχει προαναφερθεί ότι η

πυκνότητα διαταραχών στα μέταλλα αυξάνεται με την αύξηση της παραμόρφωσης, καθώς οι διαταραχές πολλαπλασιάζονται και δημιουργούνται νέες με αποτέλεσμα οι αποστάσεις μεταξύ τους να μειώνονται. Το αποτέλεσμα είναι ότι η κίνηση των διαταραχών παρεμποδίζεται από την ύπαρξη των άλλων διαταραχών, που κυρίως ασκούν σε αυτές απωθητικές δυνάμεις [1]. Η παρεμπόδιση της κίνησης των διαταραχών δυσχεραίνει την πλαστική παραμόρφωση και άρα το υλικό γίνεται σκληρότερο και αυξάνεται η μηχανική του αντοχή [1, 2].

Ενώ στα πολυκρυσταλλικά υλικά η καμπύλη τάσης-παραμόρφωσης κατά τη φάση της εργοσκήρυνσης έχει παραβολική μορφή, στην περίπτωση των μονοκρυστάλλων η μορφή της καμπύλης παρουσιάζει σημαντικές αποκλίσεις και επηρεάζεται ιδιαίτερα εκτός άλλων, από την κρυσταλλική δομή, τον προσανατολισμό των κρυστάλλων και τη θερμοκρασία [2, 11]. Ο εκθέτης κράτυνσης μπορεί να ποσοτικοποιήσει το βαθμό στον οποίο το κάθε υλικό επιδέχεται την εργοσκήρυνση [5]. Για παράδειγμα, τα υλικά με δομή HCP, που ολισθαίνουν μόνο σε ένα σύστημα ολίσθησης, εμφανίζουν πολύ χαμηλό ρυθμό κράτυνσης, σε αντίθεση με τα μέταλλα με κυβική κρυσταλλική δομή [2,5]. Καθώς η συμπεριφορά του υλικού κατά την εργοσκήρυνση είναι ιδιαίτερα πολύπλοκη στην περίπτωση των υλικών με πολλά συστήματα ολίσθησης, όπως τα υλικά με δομή FCC, οι περισσότερες μελέτες έχουν γίνει σε αυτά τα υλικά [2]. Η μελέτη μετάλλων με δομή FCC οδήγησε στον προσδιορισμό των τριών βασικών σταδίων της εργοσκήρυνσης, αν και ορισμένες πειραματικές μελέτες υποδεικνύουν την ύπαρξη πέντε συνολικά σταδίων [11]. Τα μέταλλα με μικρή τιμή ενέργειας σφαλμάτων επιστοίβασης εμφανίζουν σε θερμοκρασία περιβάλλοντος και τα τρία βασικά στάδια, ενώ τα υπόλοιπα μέταλλα μόνο τα δύο. Το πρώτο στάδιο ορίζεται από την ελεύθερη κίνηση των διαταραχών λόγω ολίσθησης και αρχίζει μετά τη διαρροή όπου επικρατεί ιδιαίτερα χαμηλός ρυθμός κράτυνσης [2,11]. Επειδή σε αυτό το στάδιο ο μηχανισμός είναι η ολίσθηση (glide), η πυκνότητα διαταραχών αυξάνεται και η παρεμπόδιση της κίνησης είναι ελάχιστη. Σύμφωνα με τον Mitchell, η διατμητική τάση συνδέεται με την πυκνότητα διαταραχών από τη σχέση [11]:

$$\tau = \frac{1}{2} G b \rho^{1/2} \quad (1.8)$$

Το πρώτο στάδιο εργοσκήρυνσης παρατηρείται με σχεδόν παρόμοιο τρόπο στην περίπτωση των υλικών με δομή HCP, για τα οποία γενικά ο ρυθμός κράτυνσης είναι παρόμοιας τάξης μεγέθους με τα υλικά με δομή FCC ενώ και τα υλικά με δομή BCC μπορεί να εμφανίσουν παρόμοια συμπεριφορά ανάλογα με τη θερμοκρασία που επικρατεί και την καθαρότητά τους [2,11]. Επίσης, ο προσανατολισμός του κρυστάλλου έχει σημαντική επίδραση στην εμφάνιση αυτού του σταδίου της εργοσκήρυνσης γιατί σχετίζεται με την ολίσθηση. Τέλος, η μείωση της θερμοκρασίας παρατείνει το πρώτο στάδιο. Κατά το πρώτο στάδιο οι διαταραχές κινούνται στο σύστημα ολίσθησης με τη μεγαλύτερη κρίσιμη διατμητική τάση και διανύουν μεγάλες αποστάσεις, της τάξεως των 100 μm. Οι διαταραχές κοχλία εμφανίζονται πιο σπάνια σε αυτό το στάδιο, κυρίως σε υλικά που έχουν χαμηλή τιμή ενέργειας σφαλμάτων επιστοίβασης.

Κατά το δεύτερο στάδιο της εργοσκήρυνσης, η καμπύλη τάσεων-παραμορφώσεων είναι σχεδόν γραμμική και η διατμητική τάση συνδέεται με την πυκνότητα παραμόρφωσης με τη σχέση:

$$T = \tau_0 + \alpha G b \rho^{1/2} \quad (1.9)$$

Όπου  $\tau_0$  είναι η τάση λόγω τριβής που αντιτίθεται στην κίνηση της διαταραχής και  $\alpha$  είναι μια εμπειρική σταθερά με τιμή περίπου 1/3.

Το δεύτερο στάδιο εμφανίζεται μετά το πρώτο εν μέσω συνεχούς παραμόρφωσης, συνήθως ως συνέπεια της ταυτόχρονης ολίσθησης σε δύο ή περισσότερα συστήματα ολίσθησης. Πιο συγκεκριμένα, στο δεύτερο στάδιο αυξάνεται ο πολλαπλασιασμός και η κίνηση δευτερευουσών διαταραχών [8] διότι οι συνθήκες είναι κατάλληλες για να επιτευχθεί η κρίσιμη τιμή διατμητικής τάσης και σε δευτερεύοντα συστήματα ολίσθησης [8]. Παρότι η παραμόρφωση λόγω ολίσθησης σε ένα μόνο σύστημα ολίσθησης είναι εύκολη, η ολίσθηση ταυτόχρονα σε πολλαπλά συστήματα ολίσθησης απαιτεί μεγαλύτερη αρχική τάση και έτσι είναι δυνατό να επιτευχθεί μόνο μετά τη διαρροή. Αξίζει να σημειωθεί ότι η πυκνότητα των πρωτευουσών και δευτερευουσών διαταραχών είναι περίπου ίση, αν και μόνο οι πρώτες συνεισφέρουν ουσιαστικά στην πλαστική παραμόρφωση [8]. Παράλληλα, οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ πρωτευουσών και δευτερευουσών διαταραχών οδηγούν σταδιακά στην παρεμπόδιση της ολίσθησης. Ο υψηλότερος ρυθμός κράτυνσης οδηγεί στην παρεμπόδιση της κίνησης των διαταραχών για τρεις πιθανούς λόγους: μέσω αλληλεπίδρασης των τασικών πεδίων των διαταραχών, μέσω αλληλεπιδράσεων που δημιουργούν ακίνητους βρόχους, είτε μέσω της αλληλοδιείσδυσης ενός συστήματος ολίσθησης σε ένα άλλο που δημιουργεί τα επιπλέον ευθύγραμμα τμήματα που αποκαλούνται jogs [12]. Το δεύτερο στάδιο μπορεί να προκύψει μέσω ολίσθησης σε συγκεκριμένα επίπεδα και σε υλικά με δομή HCP, ενώ υπό πολύ συγκεκριμένες συνθήκες παρατηρείται και στα υλικά με δομή BCC. Κατά το στάδιο αυτό ο ρυθμός κράτυνσης αυξάνει σημαντικά, από 3 έως και 10 φορές σε σχέση με τον αντίστοιχο ρυθμό του πρώτου σταδίου [2, 8].

Το τρίτο στάδιο της εργοσκλήρυνσης αφορά τη δυναμική επαναφορά και το χαρακτηριστικό του είναι η διαρκής μείωση του ρυθμού εργοσκλήρυνσης. Ο όρος δυναμική επαναφορά σχετίζεται με την μεταβολή της κρυσταλλικής δομής υπό την επίδραση τάσεων κατά το στάδιο αυτό [8]. Η παραβολική μορφή της καμπύλης κατά τη διάρκεια αυτού του σταδίου έχει σαφείς ομοιότητες με την καμπύλη της κράτυνσης των πολυκρυσταλλικών υλικών, ενώ ο ρυθμός κράτυνσης είναι σημαντικά μειωμένος σε σχέση με το δεύτερο στάδιο [2,11]. Σε αυτό το στάδιο, η εργοσκλήρυνση επηρεάζεται άμεσα από τη θερμοκρασία και το ρυθμό παραμόρφωσης και παρατηρείται μια σχετική μείωση της τάσης κατά τη διάρκεια της παραμόρφωσης σε αντίθεση με το δεύτερο στάδιο. Η αρχή του τρίτου σταδίου συμβαίνει όταν οι διαταραχές εγκαταλείπουν τα αρχικά επίπεδα ολίσθησής τους, κάτι που συμβαίνει συνήθως μέσω διασταυρούμενης ολίσθησης διαταραχών τύπου κοχλία, εκτός των περιπτώσεων όπου σε ιδιαίτερα υψηλές θερμοκρασίες οι διαταραχές ακμής μετακινούνται με αναρρίχηση [8]. Τέλος, καθώς το τρίτο στάδιο σχετίζεται με την διασταυρούμενη ολίσθηση των διαταραχών τύπου κοχλία, η ενέργεια των σφαλμάτων επιστοίβασης επηρεάζει την εργοσκλήρυνση, καθώς υλικά με μεγάλη τιμή ενέργειας σφαλμάτων επιστοίβασης παρουσιάζουν λιγότερη σκλήρυνση.

Για την εξήγηση των σταδίων της εργοσκλήρυνσης έχουν προταθεί διάφορες θεωρίες [2, 8]. Για το πρώτο στάδιο, η πρώτη θεωρία που είχε αναπτυχθεί ήταν η θεωρία του Taylor. Η



θεωρία αυτή έχει ιδιαίτερη σημασία και δίνει τη δυνατότητα να εξηγηθεί το φαινόμενο κλίμακας που παρατηρείται κατά τις μικροκατεργασίες και τις νανοκατεργασίες. Σύμφωνα με τη θεωρία του Taylor ορισμένες διαταραχές συσσωρεύονται μέσα στην κρυσταλλική δομή και αποτελούν εμπόδια για την κίνηση των άλλων διαταραχών αφού έχουν διανύσει μια συγκεκριμένη μέση απόσταση [2]. Η διαμητρική τάση σε αυτή την περίπτωση ισούται με την τάση που απαιτείται να υπερνικήσει την αλληλεπίδραση δύο διαταραχών ακμής σε παράλληλα επίπεδα ολίσθησης με τη μεταξύ τους απόσταση ίση με  $l$  [8]. Με τις θεωρήσεις αυτές τελικά η σχέση τάσης- παραμόρφωσης καταλήγει σε μια παραβολική μορφή που, όπως προαναφέρθηκε, είναι επαρκής για να περιγράψει την παραμόρφωση των πολυκρυσταλλικών υλικών αλλά όχι των μονοκρυστάλλων. Μια τροποποιημένη θεωρία είναι αυτή του Mott, κατά την οποία στη διαδικασία σκλήρυνσης δε συμμετέχουν μόνο μεμονωμένες διαταραχές αλλά ένα μεγάλο πλήθος διαταραχών και η θεωρία του Seeger. Διάφορες θεωρίες έχουν διατυπωθεί για την εξήγηση των άλλων σταδίων της εργοσκλήρυνσης, κυρίως του δεύτερου, αλλά ακόμη δεν υπάρχει μια ευρέως αποδεκτή θεωρία η οποία να περιγράφει όλες τις πτυχές του φαινομένου της εργοσκλήρυνσης.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

### Μικροκατεργασίες

Αφού ολοκληρώθηκε η σύντομη αναφορά στις βασικές έννοιες της επιστήμης των υλικών που σχετίζονται με την παρούσα διατριβή, κρίνεται σκόπιμο να γίνει μια βιβλιογραφική ανασκόπηση αναφορικά με τις μικροκατεργασίες και τη μοντελοποίησή τους με υπολογιστικές μεθόδους. Στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιαστούν συνοπτικά οι μικροκατεργασίες, με ιδιαίτερη έμφαση στις μικροκατεργασίες αποβολής υλικού.

#### 2.1 Γενικά στοιχεία για τις μικροκατεργασίες

##### 2.1.1 Εισαγωγή

Ο όρος μικροκατεργασίες χρησιμοποιείται για να περιγράψει τις κατεργασίες που οδηγούν στην παραγωγή αντικειμένων ή χαρακτηριστικών σε αντικείμενα των οποίων τουλάχιστον οι δύο διαστάσεις είναι μικρότερες του 1 mm. Η επίτευξη των μικροκατεργασιών απαιτεί δεξιότητες και γνώσεις από πολλά διαφορετικά επιστημονικά πεδία και δίνει την δυνατότητα να κατασκευαστούν πολύ εξειδικευμένες 3D δομές για διάφορα είδη υλικών, που βρίσκουν εφαρμογές σε τομείς αιχμής όπως η αεροναυπηγική, οι τηλεπικοινωνίες, η ενέργεια και η βιοϊατρική [13].

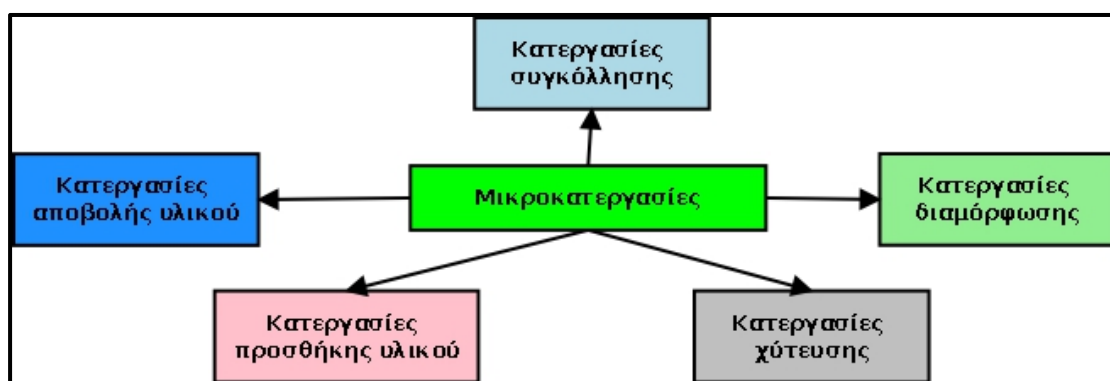
Οι απαρχές της τεχνολογίας των μικροκατεργασιών ξεκίνησαν την δεκαετία του 1950 στα Bell Laboratories με την κατασκευή των πρώτων μικροσυστημάτων. Μια άλλη σημαντική εξέλιξη στην ιστορία των μικροκατεργασιών είναι η ανάπτυξη της τεχνολογίας των MEMS (μικρο-ηλεκτρονικομηχανικά συστήματα) τη δεκαετία του 1990. Γενικά οι μικροκατεργασίες είναι απαραίτητες, λόγω της ολοένα αυξανόμενης ανάγκης για μικρότερα, ολοκληρωμένα συστήματα με μεγαλύτερες δυνατότητες όπως κινητά τηλέφωνα, υπολογιστές, μικρο-στρόβιλοι, κυψέλες καυσίμου, εναλλάκτες θερμότητας, συστήματα ιατρικού ελέγχου και διάγνωσης, ρομποτικές διατάξεις, κ.α. [13]. Ορισμένες ειδικές απαιτήσεις για αυτά τα συστήματα, που συνιστούν μερικές φορές προκλήσεις για τους κατασκευαστές είναι οι καλές μηχανικές ιδιότητες, το μικρό κόστος, η χρήση εξειδικευμένων κραμάτων και σύνθετων υλικών, η κατασκευή ειδικών γεωμετριών, η μείωση του όγκου των κατασκευών, κ.α. [14, 15].

Ενώ αρχικά οι λιθογραφικές μέθοδοι ήταν ιδιαίτερα διαδεδομένες για την κατασκευή των μικροαντικειμένων, παρ'όλα αυτά οι περισσότερες κατηγορίες κατεργασιών που χρησιμοποιούνται ευρέως στη μακροκλίμακα μπορούν να βρουν εφαρμογή σήμερα και στη μικροκλίμακα [16]. Αυτές οι κατηγορίες κατεργασιών θα παρουσιαστούν συνοπτικά στις επόμενες ενότητες αυτού του κεφαλαίου.

##### 2.1.2 Κατηγοριοποίηση μικροκατεργασιών

Οι μικροκατεργασίες μπορούν να κατηγοριοποιηθούν με διάφορους τρόπους σύμφωνα με τη σχετική βιβλιογραφία. Μια κατηγοριοποίηση βασίζεται στην προσέγγιση που

ακολουθείται για την κατεργασία ενός αντικειμένου και διακρίνει δύο κατηγορίες: την προσέγγιση top-down, κατά την οποία ξεκινώντας με ένα μεγαλύτερο κομμάτι καταλήγουμε στην τελική επιθυμητή μορφή και την προσέγγιση bottom-up κατά την οποία το τελικό αντικείμενο δομείται από μικρότερες μονάδες, έως και άτομο προς άτομο [13]. Άλλες κατηγοριοποιήσεις διακρίνουν τις κατεργασίες ανάλογα με το αν χρησιμοποιούν κάποια μέθοδο λιθογραφίας [17], αν είναι σχετικές με την κατεργασία των MEMS ή γενικότερα των ημιαγωγών ή ανάλογα με την ενέργεια που προσδίδεται στο υπό κατεργασία αντικείμενο για να μορφοποιηθεί [13,18]. Σε μια άλλη κατηγοριοποίηση διαχωρίζονται οι μικροκατεργασίες σε κατεργασίες αφαίρεσης υλικού, προσθετικές, συγκολλήσεις, μάζας, νανο-αποπεράτωσης [19], ενώ σε άλλη κατηγοριοποίηση όπως φαίνεται στο σχήμα 2.1, συμπεριλαμβάνονται ξεχωριστά και οι κατεργασίες διαμόρφωσης.



**Σχήμα 2.1.** Κατηγοριοποίηση μικροκατεργασιών.

Εκτός από τις γενικές κατηγορίες μικροκατεργασιών, υπάρχει η δυνατότητα χρήσης υβριδικών μικρο-κατεργασιών, συνδυάζοντας για παράδειγμα τις κατεργασίες αφαίρεσης και προσθήκης υλικού ή τις κατεργασίες αποβολής υλικού και συγκόλλησης [20]. Ένας γενικότερος ορισμός προσδιορίζει τις υβριδικές κατεργασίες ως αυτές που συνδυάζουν διαφορετικά είδη κατεργασιών ή διαφορετικά είδη ενέργειας στην ίδια ή σε άλλη χρονική στιγμή και περιοχή του αντικειμένου [20]. Στη συνέχεια της υποενότητας 2.1 θα παρουσιαστούν οι βασικές κατηγορίες μικροκατεργασιών, όπως απεικονίζονται στο σχήμα 2.1 και σε επόμενες υποενότητες θα δοθεί έμφαση στις μικροκατεργασίες αποβολής υλικού και τη μικρο-λείανση. Μια **σύμβαση** που θα χρησιμοποιηθεί στο παρόν κεφάλαιο, αλλά και στα επόμενα, είναι ότι για συντομία το **κατεργαζόμενο τεμάχιο** θα αναφέρεται με τη συντομογραφία **TE**, ενώ το **κοπτικό εργαλείο** (εάν υπάρχει) με τη συντομογραφία **KE**.

### **2.1.3 Μικροκατεργασίες αποβολής υλικού**

Στην κατηγορία αυτή, όπως παρατηρείται από το σχήμα 2.1, ανήκουν συμβατικές μικροκατεργασίες, όπως η μικρο-τόρνευση, μικρο-διάτρηση, το μικρο-φρεζάρισμα, η μικρο-λείανση και η μικρο-στίλβωση, αλλά και μη-συμβατικές κατεργασίες όπως η μικρο-υδροκοπή, η μικρο-ηλεκτροδιάβρωση και οι μικροκατεργασίες με χρήση δέσμης laser, plasma ή ηλεκτρονίων [13]. Στις πιο σημαντικές από αυτές τις κατεργασίες θα γίνει ξεχωριστή αναφορά στην υποενότητα 2.2, η οποία είναι αφιερωμένη στις μικροκοπές και στην υποενότητα 2.3, που είναι αφιερωμένη στη μικρο-λείανση.

### 2.1.4 Μικροκατεργασίες διαμόρφωσης

Όπως θα γίνει αργότερα εμφανές και στην περίπτωση των μικροκοπών, οι μικροκατεργασίες διαμόρφωσης αποτελούν σε σημαντικό βαθμό «μικροσκοπικές» εκδοχές των αντίστοιχων κατεργασιών της μακροκλίμακας. Επομένως, σε αυτή την κατηγορία ανήκουν, μεταξύ άλλων, κατεργασίες όπως η μικρο-σφυρηλάτηση, μικρο-διέλαση, μικρο-απότμηση και μικρο-βαθεία κοίλανση [13]. Η συστηματική μελέτη αυτών των κατεργασιών ξεκίνησε μετά τη δεκαετία του 1990, καθώς προηγουμένως προτιμούνταν οι μικροκατεργασίες αποβολής υλικού στις περισσότερες εφαρμογές [21]. Οι κατεργασίες αυτές επιτρέπουν ικανοποιητική παραγωγικότητα, διαστατική ακρίβεια και καλές μηχανικές ιδιότητες των αντικειμένων [15]. Συνήθη προβλήματα κατά τις μικροκατεργασίες διαμόρφωσης είναι τα φαινόμενα κλίμακας, η τριβή και επιφανειακές δυνάμεις που οδηγούν σε ανεπιθύμητες παραμορφώσεις [14].

Ειδικότερα, τα φαινόμενα κλίμακας θέτουν σημαντικά εμπόδια στην διεξαγωγή των μικροκατεργασιών και προκειμένου να υπερνικηθούν αυτά τα εμπόδια, απαιτείται έρευνα για να κατανοηθεί καλύτερα η επίδραση του υλικού και η φύση της παραμόρφωσης και της τριβής στη μικροκλίμακα, καθώς η συμπεριφορά του υλικού στη μικροκλίμακα διαφέρει σημαντικά [14, 15]. Συγκεκριμένα, στις μικροκατεργασίες διαμόρφωσης, η παραμορφωμένη περιοχή αποτελείται από μικρό αριθμό κόκκων, καθιστώντας την θεώρηση του συνεχούς μέσου ανακριβή και η ροή του υλικού εξαρτάται από το μέγεθος και το προσανατολισμό μεμονωμένων κόκκων, με αποτέλεσμα ο μηχανισμός παραμόρφωσης να αλλάζει σημαντικά [14]. Το φαινόμενο κλίμακας στις μικροκατεργασίες διαμόρφωσης σχετίζεται με την αντοχή του υλικού, την ελαστική επαναφορά, την ανισοτροπία, τη θραύση, την τριβή και την τραχύτητα της επιφάνειας [14, 15, 21]. Επομένως η επιλογή των κατάλληλων συνθηκών, αλλά και της κατάλληλης διάταξης (setup) για τις μικροκατεργασίες διαμόρφωσης δεν είναι τριτοβάθμια διαδικασία, στην οποία οι παράμετροι αυτών των κατεργασιών στη μακροκλίμακα μετατρέπονται απλά με βάση λόγους ομοιότητας [16]. Άλλα προβλήματα που πρέπει να υπερνικηθούν κατά τις κατεργασίες αυτές είναι η κατασκευή των καλουπιών και του απαραίτητου εξοπλισμού, η συγκράτηση των κομματιών, η χάρη μεταξύ κομματιού και καλουπιού και η ακρίβεια της μέτρησης των τελικών διαστάσεων [14, 21].

Στη συνέχεια θα περιγραφούν συνοπτικά οι κυριότερες μικροκατεργασίες διαμόρφωσης.

#### 2.1.4.1 Μικρο-σφυρηλάτηση

Η μικρο-σφυρηλάτηση αποτελεί κατεργασία που επιτρέπει τη διαμόρφωση μικροαντικειμένων με εξαιρετικές μηχανικές ιδιότητες με υψηλή παραγωγικότητα και σχετικά χαμηλό κόστος. Παραδείγματα αντικειμένων που κατασκευάζονται μέσω της μικρο-σφυρηλάτησης αποτελούν πτερύγια ψύξης για εναλλάκτες θερμότητας, μικρο-πτερύγια για μικρο-στροβίλους ή καλούπια για φακούς μεγάλης ακριβείας [13]. Όπως προαναφέρθηκε, και σε αυτή την κατεργασία επιδρά το φαινόμενο κλίμακας, κάτι που σημαίνει ότι οι απαιτήσεις ισχύος είναι μεγαλύτερες αναλογικά με το μέγεθος των αντικειμένων σε σχέση με τη μακροκλίμακα και η μικροδομή του υλικού επιδρά σημαντικά στην κατεργασία. Όπως και στη μακροσκοπική σφυρηλάτηση, υπάρχει και η δυνατότητα υπερπλαστικής διαμόρφωσης κατά τη σφυρηλάτηση [22].

#### 2.1.4.2 Μικρο-διέλαση

Η μικρο-διέλαση έχει μελετηθεί εκτενώς σε σύγκριση με τις άλλες μικροκατεργασίες διαμόρφωσης, αναφορικά με την επίδραση παραμέτρων όπως το μέγεθος κόκκων, η τριβή στη διεπιφάνεια εμβόλου, ΤΕ και μήτρας και η θερμοκρασία διεξαγωγής της κατεργασίας [15]. Όπως και στην κατεργασία της διέλασης στη μακροκλίμακα, υπάρχουν διάφορες παραλλαγές της μικρο-διέλασης, όπως η άμεση και η έμμεση [15, 22]. Κατά τη μικρο-διέλαση, η τριβή επιδρά όχι μόνο στο φορτίο διέλασης, αλλά και στην τελική γεωμετρία του αντικειμένου [15]. Όπως και άλλες μικροκατεργασίες διαμόρφωσης, η μικρο-διέλαση παρουσιάζει υψηλή παραγωγικότητα με ελάχιστο όγκο απορριπτέου υλικού (scrap) και ενδείκνυται για μεγάλους όγκους παραγωγής. Η μικρο-διέλαση χρησιμοποιείται για την παραγωγή διαφόρων αντικειμένων που απαιτούνται σε εφαρμογές μικροτεχνολογίας, όπως μικροσκοπικά γρανάζια για MEMS, μικρο-σωληνάκια για microfluidics, εφαρμογές μικρο-χειρουργικής, μικρο-καθετήρες κ.α. Οι δυνατότητες αυτής της τεχνολογίας αναφορικά με την παραγωγή σωλήνων είναι έως και 100 μm διάμετρο και 50 μm πάχος τοιχώματος. Μια άλλη ενδιαφέρουσα εφαρμογή της μικρο-διέλασης είναι η αλλαγή της επιφανειακής δομής των υλικών, ώστε να αποκτήσουν επιθυμητές ιδιότητες αναφορικά με την τριβή, υδροφοβικότητα και μεταφορά θερμότητας. Ειδικότερα, σε εφαρμογές βιοϊατρικής, όπως τα μικρο-σωληνάκια, απαιτείται οι επιφάνειες να έχουν ελάχιστη τριβή, ώστε να μπορούν να χρησιμοποιηθούν με ασφάλεια και να μην απαιτείται η χρήση επιπλέον ουσιών για τη μείωση της τριβής [13].

#### 2.1.4.3 Μικρο-βαθεία κοίλανση

Η μικρο-βαθεία κοίλανση χρησιμοποιείται για την κατασκευή μικρών αντικειμένων με μορφή κοίλου κυλίνδρου ή κελύφους όπως ρουλεμάν, κελύφη για μπαταρίες, προστατευτικά βαλβίδων κτλ. ή ορθογωνικών αντικειμένων από μεταλλικό έλασμα με υψηλές απαιτήσεις ακρίβειας στις ανοχές και τη μορφή, καθώς και με υψηλή ποιότητα επιφανείας [13,15, 22]. Η τριβή στη διεπιφάνεια ΤΕ και εργαλείου επηρεάζει ιδιαίτερα την ποιότητα της επιφανείας και το σχηματισμό ελαττωμάτων στο τελικό αντικείμενο και γι' αυτό το λόγο χρησιμοποιούνται διάφορα είδη λιπαντικών [15]. Καλό είναι να αποφεύγεται η κατασκευή αντικειμένων με μεγάλη τιμή λόγου επιφανείας προς όγκο, διότι αυτό αυξάνει κατακόρυφα την τριβή [22]. Κατά τη μικρο-βαθεία κοίλανση μπορούν να χρησιμοποιηθούν διάφορα υλικά, όπως χαλκός, ανοξείδωτος χάλυβας, κράματα μαγνησίου, μολυβδαινίου, χαλκού, νικελίου και τιτανίου, αλλά και πολύτιμα μέταλλα όπως ο άργυρος, ο λευκόχρυσος και ο χρυσός [13]. Αντικείμενο έρευνας στη μικρο-βαθεία κοίλανση έχει αποτελέσει η κατεργασιμότητα, μέσω υπολογισμού του οριακού λόγου κοίλανσης, συνήθως με τη βοήθεια λογισμικού πεπερασμένων στοιχείων, ώστε να επιλέγονται συνθήκες που μειώνουν το κίνδυνο εμφάνισης ελαττωμάτων [15, 22].

#### 2.1.4.4 Μικρο-τύπωση

Η μικρο-τύπωση (micro-stamping) χρησιμοποιείται για την κατασκευή μικροσκοπικών δομών σε μεγάλες επιφάνειες, όπως κανάλια, προεξοχές και πτερύγια, οι οποίες χρησιμοποιούνται σε μεγάλο βαθμό στη μικρο-ηλεκτρονική για τη ψύξη και την παραγωγή ή αποθήκευση ενέργειας. Περιλαμβάνει διάφορες επιμέρους κατεργασίες, όπως απότμηση, τύπωση/εγχάραξη (embossing) και κάμψη. Μέσω της μικρο-τύπωσης επιτυγχάνεται υψηλή

παραγωγικότητα, διαστατική ακρίβεια και άριστες μηχανικές ιδιότητες, καθιστώντας την κατάλληλη κατεργασία για μεγάλους όγκους παραγωγής με μικρό κόστος [13].

#### 2.1.4.5 Μη συμβατικές κατεργασίες διαμόρφωσης

Δύο από τις πιο συχνά χρησιμοποιούμενες μη συμβατικές μικροκατεργασίες διαμόρφωσης είναι το μικρο-hydroforming και η μικροδιαμόρφωση με χρήση laser. Η κατεργασία μικρο-hydroforming, όπως και η μικρο-τύπωση, έχουν ως σκοπό τη διαμόρφωση ενός μεταλλικού ελάσματος με καλούπια αλλά στο μικρο-hydroforming η διαμόρφωση επιτυγχάνεται μέσω ρευστού υπό υψηλή πίεση και το έλασμα οδηγείται προς το μοναδικό καλούπι μέσω της πίεσης του ρευστού [13].

Η μικροδιαμόρφωση με laser είναι μια μέθοδος που δε συνδέεται με φθορά εργαλείου, είναι φιλική προς το περιβάλλον, γιατί δε χρησιμοποιεί χημικές ουσίες και παράγει ελάχιστο scrap. Σε αυτή την κατηγορία ανήκουν κατεργασίες όπως η μικρο-τύπωση με laser (indirect laser shock micro embossing), laser cladding, laser peen forming, μικρο-βαθεία κοίλανση με laser (laser shock micro deep-drawing), και κάμψη ελάσματος με laser (laser bending). Σε αυτές τις κατεργασίες, η διαμόρφωση προκύπτει λόγω υψηλών θερμικών τάσεων που ασκούνται στο υλικό. Επίσης το laser χρησιμοποιείται συνήθως και ως βοηθητική τεχνολογία για τις συμβατικές κατεργασίες διαμόρφωσης προκειμένου π.χ. να μειώσει την ελαστική επαναφορά ή ανεπιθύμητη παραμόρφωση ελασμάτων [13].

#### 2.1.5 Μικρο-συγκολλήσεις

Ο όρος μικρο-συγκόλληση σχετίζεται με την συγκόλληση κομματιών που έχουν τουλάχιστον μία διάσταση στο εύρος μεταξύ κάποιες εκατοντάδες νανομετρα και 100 μm. Μικρο-συγκολλήσεις έχουν εφαρμοστεί για πρώτη φορά από τη δεκαετία του 1950 για βιοϊατρικές και αργότερα για αεροναυπηγικές εφαρμογές. Διακρίνονται τέσσερις μεγάλες κατηγορίες μικρο-συγκολλήσεων: οι συγκολλήσεις στερεάς κατάστασης, οι ετερογενείς συγκολλήσεις (μαλακή/σκληρή), οι συγκολλήσεις τήξης και με κολλητική ουσία [13].

Οι συγκολλήσεις στερεάς κατάστασης επιτυγχάνονται κυρίως μέσω άσκησης πίεσης χωρίς τήξη, καθώς η διάχυση οδηγεί στη συγκόλληση των επιφανειών. Στις περιπτώσεις σκληρής συγκόλλησης ή συγκόλλησης τήξης, η ένωση επιτυγχάνεται μέσω τήξης και στερεοποίησης του μετάλλου. Στην πρώτη περίπτωση η τήξη επέρχεται στο πληρωτικό υλικό της συγκόλλησης, ενώ στη δεύτερη τοπικά στα μέταλλα που συγκολλούνται [13]. Τέλος, στην περίπτωση της συγκόλλησης με κολλητική ουσία, χρησιμοποιούνται οργανικές κολλητικές ουσίες για να ενωθούν δύο κομμάτια. Οι μέθοδοι που χρησιμοποιούν δέσμη υψηλής ενέργειας, όπως δέσμη laser ή ηλεκτρονίων έχουν το πλεονέκτημα ότι μπορούν να επιτύχουν αποτελεσματικότερα την τοπική πρόσδοση θερμότητας σε κλίμακα λίγων μm, χωρίς να αυξηθεί ιδιαίτερα η θερμοκρασία στις υπόλοιπες περιοχές των αντικειμένων [22].

Η συγκόλληση μέσω δέσμης ηλεκτρονίων είναι κατάλληλη για υψηλής ακρίβειας συγκολλήσεις μετάλλων, λόγω της εντοπισμένης πρόσδοσης θερμότητας και της σχετικά περιορισμένου μεγέθους ραφής. Επομένως, μέσω αυτής της μεθόδου μπορεί να συγκολληθούν τοπικά αντικείμενα ευαίσθητα σε υψηλές θερμοκρασίες, διμεταλλικά ελάσματα και αντικείμενα πολύπλοκης μορφής σε διάφορες κατευθύνσεις και επίπεδα.

Η μικρο-συγκόλληση με δέσμη laser χρησιμοποιείται για να γίνουν συγκολλήσεις σε πληθώρα απαιτητικών εφαρμογών στη βιοϊατρική και την βιομηχανία ηλεκτρονικών [13]. Με κατάλληλη ισχύ, μπορούν να παραχθούν διάφορες γεωμετρίες ραφής, είναι εφικτή η επαναληψιμότητα με υψηλή ποιότητα ακόμα και για υλικά με επικαλύψεις, η θερμικά επηρεασμένη ζώνη είναι περιορισμένη και τα μηχανικά και θερμικά φορτία είναι χαμηλά [23]. Μέσω ειδικών διατάξεων laser, όπως τα femtosecond laser είναι δυνατή η συγκόλληση ακόμα και στη νανοκλίμακα [24].

### **2.1.6 Μικρο-χύτευση**

Οι κύριες κατεργασίες μικρο-χύτευσης είναι η χύτευση με μόνιμο καλούπι και χύτευση ακριβείας [22]. Μέσω αυτών των κατεργασιών, κατασκευάζονται διάφορα αντικείμενα σε μικροκλίμακα σε μεγάλες ποσότητες. Μέσω μικρο-χύτευσης είναι δυνατόν να κατασκευαστούν δομές με μεγάλο λόγο μήκους προς διάμετρο και πολύπλοκες καμπύλες επιφάνειες και ενδείκνυται για διάφορες εφαρμογές βιοϊατρικής, όπως στη χειρουργική και την οδοντιατρική αλλά και για μηχανολογικές εφαρμογές [22].

Η μία από τις κύριες κατεργασίες μικρο-χύτευσης είναι η μικρο-χύτευση με τριχοειδή δράση. Σε αυτή την κατεργασία, χρησιμοποιείται ένα μόνιμο καλούπι που περιλαμβάνει κοιλότητες κατασκευασμένες με λείανση υψηλής ακριβείας. Οι κοιλότητες αυτές μπορεί να πληρωθούν είτε μέσω αναρρόφησης είτε μέσω προώθησης. Στην πρώτη περίπτωση, το τήγμα αναρροφάται σε ένα ειδικά επικαλυμμένο καλούπι μέσω του τριχοειδούς φαινομένου, ενώ στη δεύτερη περίπτωση ασκείται πίεση στο καλούπι για να μετακινηθεί το επιπλέον τήγμα μέσω μιας σχισμής. Με αυτή την κατεργασία, οι γεωμετρίες που μπορεί να επιτευχθούν περιορίζονται σε αυτές που μπορούν να κατασκευαστούν μέσω της δράσης του τριχοειδούς φαινομένου [13].

Η δεύτερη από τις κύριες κατεργασίες μικρο-χύτευσης είναι η μικρο-χύτευση μέσω της τεχνικής του χαμένου κεριού. Αυτή η κατεργασία δεν εμφανίζει τους προαναφερθέντες περιορισμούς για τη μικρο-χύτευση. Στην περίπτωση αυτή, ένα μεγαλύτερο εύρος γεωμετριών μπορεί να κατασκευαστεί, χρησιμοποιώντας ένα μεγάλο μικροδομημένο μοντέλλο [13]. Το πλαστικό μοντέλλο που έχει κατασκευαστεί μέσω χύτευσης με έγχυση έχει ενσωματωθεί σε ένα στρώμα από γύψο και έπειτα ξηραίνεται και συσσωματώνεται. Στη συνέχεια το προθερμασμένο καλούπι πληρώνεται με μεταλλικό τήγμα, συνήθως μέσω φυγοκέντρισης και αφού αφαιρεθεί το μοντέλλο από το χυτό, η δομή του καθαρίζεται και απομακρύνονται τα επιθυμητά αντικείμενα [13]. Η μέθοδος αυτή παρουσιάζει μικρότερο κόστος όσον αφορά την κατασκευή πολύπλοκων μορφών, σε σχέση με τις κατεργασίες λείαν υψηλής ακριβείας. Οι σημαντικότερες διαφορές μεταξύ των παραλλαγών της μεθόδου χύτευσης χαμένου κεριού στη μικρο και μακροκλίμακα είναι η πολυπλοκότητα των μοντέλλων που χρησιμοποιούνται, η χρήση προθέρμανσης και εξωτερικού φορτίου για την πλήρωση της κοιλότητας με τήγμα. Τέλος, η χύτευση υπό κενό έχει επίσης προταθεί για την κατασκευή αντικειμένων στη μικροκλίμακα [22].

### **2.1.7 Μικροκατεργασίες προσθήκης υλικού**

Οι κατεργασίες προσθήκης υλικού (additive manufacturing) αποτελούν ένα σύγχρονο εναλλακτικό τρόπο για την κατασκευή τριδιάστατων αντικειμένων σε ένα μεγάλο εύρος

εφαρμογών [13]. Σε ορισμένες περιπτώσεις, απαιτείται η κατασκευή μικροσκοπικών εξαρτημάτων ή μικροσκοπικών δομών σε ένα μεγαλύτερο αντικείμενο π.χ. στο τομέα της βιοϊατρικής ή των ηλεκτρονικών και επομένως είναι σημαντικό να υπάρχει η δυνατότητα χρήσης των κατεργασιών προσθήκης υλικού και στην μικροκλίμακα [13]. Ορισμένες από τις κατεργασίες προσθήκης υλικού έχουν τη δυνατότητα να παράξουν αντικείμενα ή δομές με διαστάσεις στη μικροκλίμακα και χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες, τις πολλαπλών κλιμάκων (scalable) κατεργασίες, που μπορούν να χρησιμοποιηθούν τόσο στη μακρο όσο και τη μικροκλίμακα, τις τεχνικές 3D direct writing που εφαρμόζονται μόνο στη μικροκλίμακα και υβριδικές κατεργασίες [18, 25]. Στη συνέχεια θα γίνει σύντομη αναφορά στις κατεργασίες που ανήκουν στην πρώτη κατηγορία.

Η μικροστερεολιθογραφία (MSL) είναι μια κατεργασία στην οποία χρησιμοποιείται μια πηγή υπεριώδους ακτινοβολίας για να στερεοποιήσει ένα υγρό φωτοπολυμερές. Μέσω αυτής της κατεργασίας με δέσμες διαμέτρου λίγων μικρομέτρων η στερεοποίηση επιτυγχάνεται σε μια πολύ μικρή περιοχή, ώστε να μπορούν να παραχθούν αντικείμενα με πάχος 1-10  $\mu\text{m}$  [25]. Η κατεργασία MSL έχει ακρίβεια μικρότερη του μικρομέτρου στους τρεις άξονες και η διάμετρος της δέσμης είναι μικρότερη της διαμέτρου που χρησιμοποιείται στην μακροσκοπική SL, της τάξης των λίγων  $\mu\text{m}$  [18]. Υπάρχουν δύο τεχνικές MSL που χρησιμοποιούνται εκτενώς, η MSL σάρωσης και η MSL προβολής. Στην περίπτωση της MSL σάρωσης, το φωτοπολυμερές στερεοποιείται σημείο-σημείο σε κάθε στρώση ενώ στην MSL προβολής, μια ολόκληρη στρώση φωτοπολυμερούς υφίσταται σκλήρυνση ταυτόχρονα μέσω μιας μάσκας [25]. Στην τελευταία περίπτωση, ο χρόνος της κατεργασίας είναι δυνατόν να μειωθεί αισθητά [18]. Καθώς στην MSL το ελάχιστο πάχος της στρώσης περιορίζεται από το ιξώδες και τις επιφανειακές τάσεις της φωτοπολυμεριζόμενης ρητίνης, αναπτύχθηκε μια άλλη τεχνική που ονομάζεται πολυμερισμός δύο φωτονίων (2PP), η οποία επίσης σχετίζεται με τη λιθογραφία και μπορεί να παράξει ιδιαίτερα πολύπλοκες δομές στη μικρο και νανοκλίμακα [18, 25]. Στη μέθοδο αυτή χρησιμοποιείται ένα ultrafast laser, το οποίο είναι ικανό να παρέχει αρκετά υψηλή ενέργεια φωτονίων. Με την απελευθέρωση δύο φωτονίων, μια ελεύθερη ρίζα μπορεί να εκκινήσει τη διαδικασία του πολυμερισμού και μέσω ρύθμισης της ισχύος του laser είναι δυνατόν να υπερβεί το όριο για πολυμερισμό μόνο στην περιοχή κοντά στο κέντρο της δέσμης, ώστε να αυξάνεται η ακρίβεια [25].

Διάφορες μέθοδοι τήξεως κλίνης κόνεως (powder bed fusion) είναι επίσης δυνατόν να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή μικροσκοπικών αντικειμένων, όπως η SLM (Selective Laser Melting) και SLS (Selective Laser Sintering).

Στην κατεργασία SLS, μια δέσμη laser σαρώνει επιλεκτικά στρώσεις από λεπτόκοκκη σκόνη πολυμερούς πάνω σε μια βάση και όταν δημιουργηθεί η τρέχουσα στρώση, παρέχεται εκ νέου ποσότητα σκόνης που στρώνεται από πάνω και η διαδικασία αυτή συνεχίζεται μέχρι να δημιουργηθεί όλο το επιθυμητό αντικείμενο [25]. Καθώς οι πιο λεπτόκοκκες σκόνες επηρεάζονται περισσότερο από την υγρασία και την οξείδωση, πρέπει να χρησιμοποιείται θάλαμος κενού [18]. Σε παρόμοιες αρχές βασίζεται και η κατεργασία SLM, αλλά σε αυτή την περίπτωση δίνεται ιδιαίτερη έμφαση στη ρύθμιση της θερμοκρασίας κατά τη διάρκεια της κατασκευής του αντικειμένου, καθώς μπορεί να απαιτηθούν επιπλέον δομές για την αποφυγή υπερβολικού ποσού θερμότητας ή μεγάλες παραμορφώσεις. Στην περίπτωση της



μικροκατεργασίας SLM η χρήση ιδιαίτερα λεπτόκοκκης σκόνης οδηγεί σε επιτάχυνση της τήξης. Στην περίπτωση της κατεργασίας SLS οι συνήθεις μηχανές έχουν περιορισμούς στην παραγωγή μικροαντικειμένων με διαστάσεις κάτω των 500  $\mu\text{m}$ , λόγω της διαμέτρου του laser που χρησιμοποιούν και απαιτείται η χρήση ιδιαίτερα λεπτόκοκκης σκόνης [25].

Η μέθοδος προσθήκης υλικού μέσω εκτόξευσης συνδετικής ουσίας (binder jetting) είναι ιδιαίτερα κατάλληλη για την εκτύπωση μικροαντικειμένων με χρήση διαφόρων υλικών όπως κεραμικά, μέταλλα και πολυμερή [18]. Μέσω της ελεγχόμενης εκτόξευσης μιας υγρής ουσίας (με τη μορφή μελανιού) επιτυγχάνεται η ένωση σωματιδίων του επιθυμητού υλικού σε μορφή σκόνης και καθώς το υγρό εναποτίθεται σε κάθε στρώση, δημιουργείται σιγά-σιγά ένα στερεό αντικείμενο. Πιο συγκεκριμένα, η υγρή συγκολλητική ουσία εναποτίθεται στην άνω επιφάνεια της κλίνης κόνεως, μέσω μιας κεφαλής έγχυσης, με αποτέλεσμα στα σημεία που εναποτέθηκε να συνενώνονται τα σωματίδια της σκόνης. Στη συνέχεια παρέχεται εκ νέου ποσότητα σκόνης, γίνεται η ομοιόμορφη εναπόθεσή της στην επιφάνεια του TE και συνεχίζεται η διαδικασία μέχρι να δημιουργηθεί το τελικό αντικείμενο, το οποίο πρέπει να υποστεί μια επιπρόσθετη διεργασία, προκειμένου να βελτιωθούν οι μηχανικές του ιδιότητες.

Η επίτευξη της υψηλής ακρίβειας για εφαρμογές μικροτεχνολογίας είναι εφικτή μέσω ειδικών πιεζοηλεκτρικών κεφαλών εκτύπωσης. Μια άλλη κατεργασία έκχυσης είναι η μέθοδος προσθήκης υλικού μέσω εκτόξευσης δέσμης υλικού, η οποία εμπορικά ονομάζεται Polyjet ή Multijet. Σε αυτή την μέθοδο πραγματοποιείται έκχυση του υλικού σε μορφή σταγονιδίων πάνω σε μια επιφάνεια και στη συνέχεια στερεοποίηση. Η στερεοποίηση επιτυγχάνεται μέσω ψύξης π.χ. με κρυσταλλοποίηση ή υαλοποίηση, μέσω συνδυασμού χημικών διεργασιών που εκκινούνται από μια πηγή φωτός που οδηγεί σε σκλήρυνση ενός φωτοευαίσθητου πολυμερούς ή εξάτμιση ενός διαλύτη [18, 25]. Στη μέθοδο αυτή χρησιμοποιούνται δύο δεξαμενές, η μία για το κυρίως υλικό και η άλλη για το υποστηρικτικό υλικό. Το υποστηρικτικό υλικό αφαιρείται πολύ εύκολα, καθώς έχει διαφορετική χημική σύσταση από το κύριο υλικό. Οι δύο κύριες τεχνικές για την εκτόξευση δέσμης υλικού είναι, η συνεχής έκχυση και η έκχυση κατά προτίμηση. Στην περίπτωση της συνεχούς έκχυσης, το υγρό έχει μικρότερο ιξώδες και μεγαλύτερη ταχύτητα έκχυσης [18]. Στην περίπτωση των μικροκατεργασιών, προτιμάται η τεχνολογία Drop on Demand, μέσω της οποίας η έκχυση δεν είναι συνεχής αλλά το ακροφύσιο ενεργοποιείται από ηλεκτρικούς παλμούς όταν απαιτείται [25].

Η μέθοδος εναπόθεσης νήματος είναι πιο ευρέως διαδεδομένη μέθοδος προσθήκης υλικού σε μακροσκοπικό επίπεδο, η οποία βασίζεται στην τήξη και στερεοποίησή του [13]. Στην κεφαλή εξώθησης υπάρχουν αντιστάσεις που διατηρούν το πολυμερές σε θερμοκρασία ανώτερη του σημείου τήξης του, με αποτέλεσμα να μπορεί να ρέει εύκολα διαμέσου του στομίου και να δημιουργεί τη στρώση του υλικού. Καθώς το υλικό ρέει από το στόμιο, το λιωμένο πολυμερές προσκολλάται στο κατώτερο στρώμα και σκληραίνει. Μέσω της μετακίνησης του τραπέζιου, είναι δυνατή η εναπόθεση των επόμενων στρώσεων. Στην περίπτωση των μικροκατεργασιών, είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθεί ένα ακροφύσιο με διάμετρο μικρομέτρων. Αυτή η κατηγορία μεθόδων δεν είναι η πιο διαδεδομένη στις μικροκατεργασίες για 3D συμπαγή αντικείμενα, λόγω των περιορισμών που υπάρχουν από τις απαιτήσεις για ακριβή ροή του λιωμένου υλικού και τις απαιτήσεις του συστήματος

ελέγχου, αλλά λόγω του ότι δημιουργούνται αναπόφευκτα κενά μεταξύ των στρώσεων του υλικού σε κάθε κατεύθυνση, είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθεί αυτή η μέθοδος για πορώδεις δομές ή ικρίσματα στη μικροκλίμακα για εφαρμογές βιοϊατρικής και ηλεκτρονικής [18, 25].

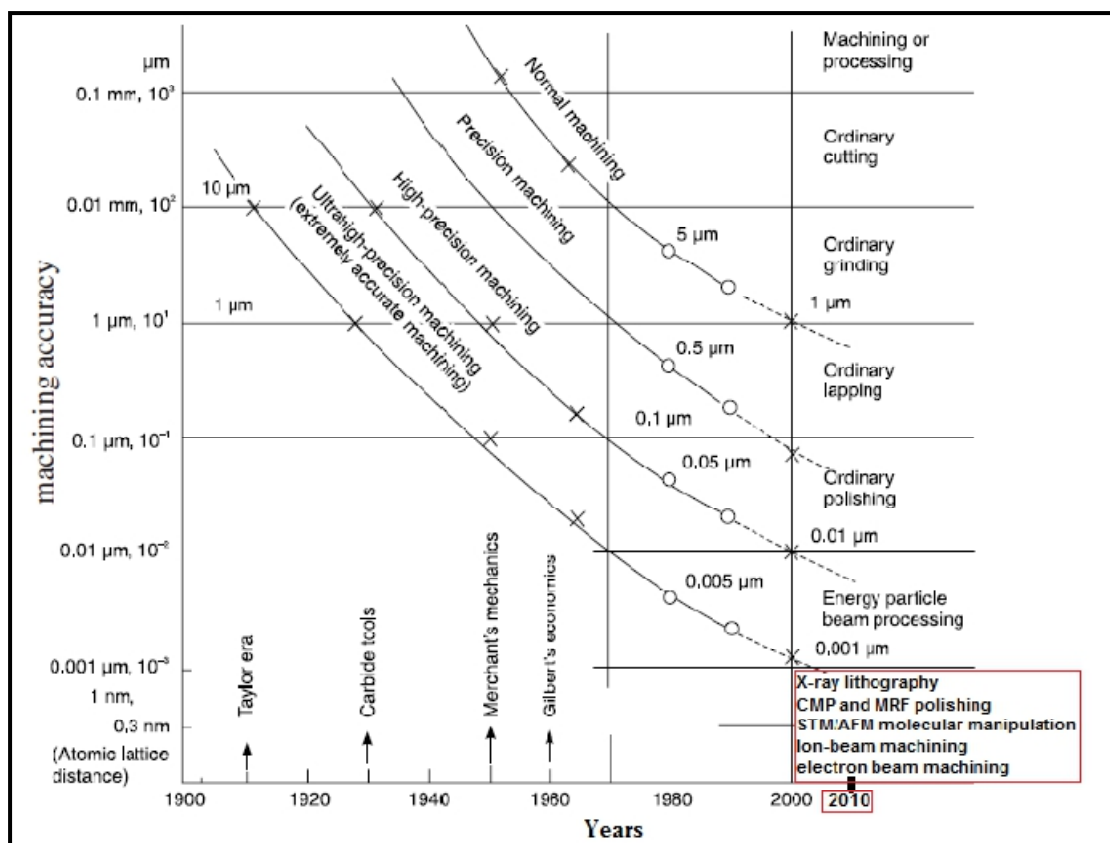
## 2.2 Μικροκατεργασίες αποβολής υλικού

### 2.2.1 Εισαγωγή

Στην παρούσα ενότητα θα δοθεί έμφαση κυρίως στις μικροκατεργασίες αποβολής υλικού, όπως προαναφέρθηκε στην ενότητα 2.1.

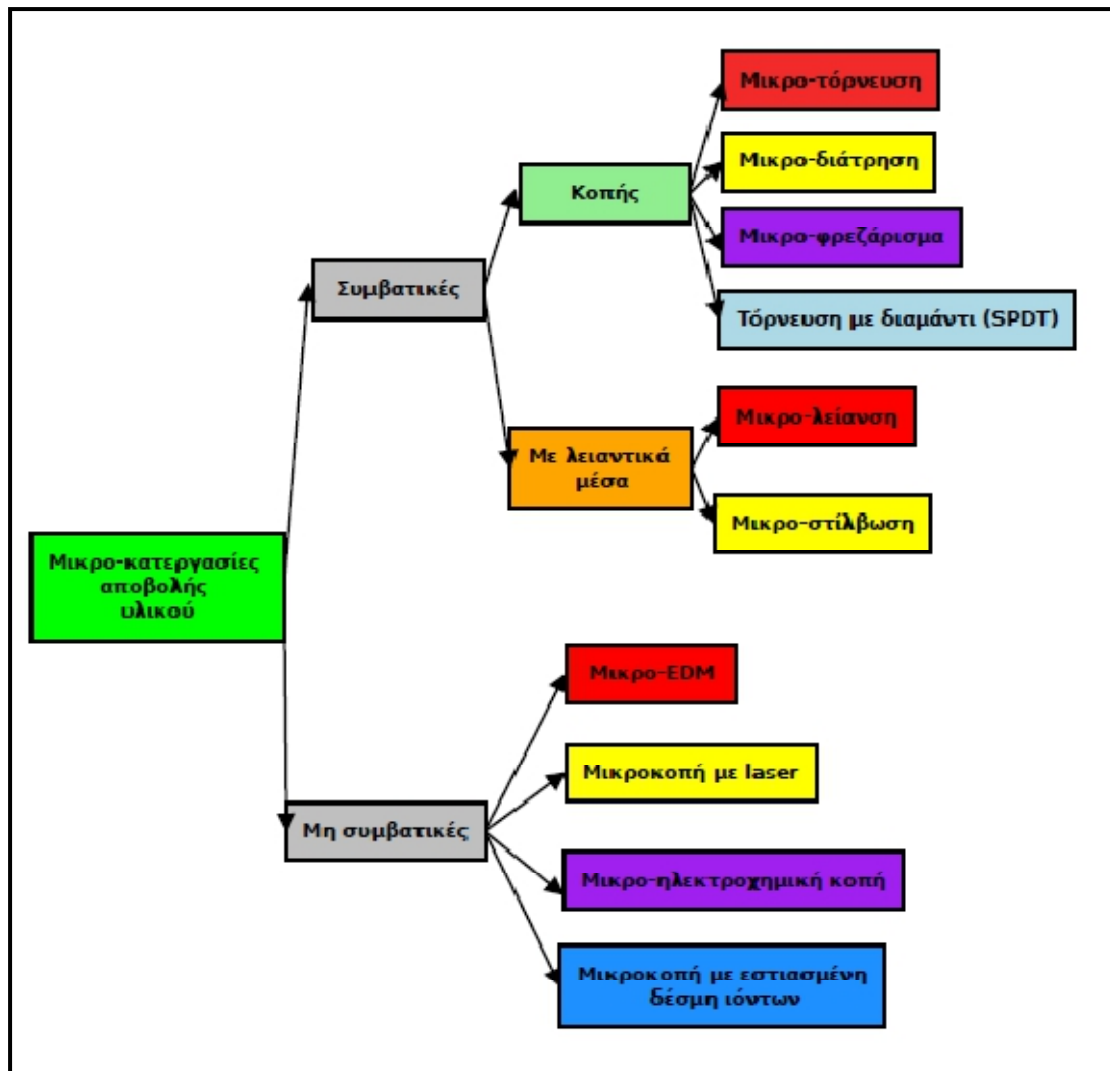
Είναι γεγονός ότι οι μη-λιθογραφικές μέθοδοι, όπως οι συμβατικές και μη-συμβατικές μικροκατεργασίες αποβολής υλικού, θεωρούνται ένας σχετικά πρόσφατος επιστημονικός τομέας, καθώς η μελέτη τους ξεκίνησε πριν από τρεις δεκαετίες περίπου [26]. Η ανάγκη της χρήσης αυτών των μεθόδων βελτίωσης της ακρίβειας των κατεργασιών και της κατασκευής ιδιαίτερα μικροσκοπικών δομών πηγάζει από τις απαιτήσεις διαφόρων βιομηχανιών, όπως η αυτοκινητοβιομηχανία και η αεροπορική βιομηχανία, η αμυντική βιομηχανία, η βιομηχανία ηλεκτρονικών, οι τηλεπικοινωνίες και η βιοϊατρική βιομηχανία [17, 27].

Σε αυτές τις βιομηχανίες, υπάρχει ανάγκη για την παραγωγή προϊόντων στη μέσο (500μm-10mm) και μικροκλίμακα (1-500 μm) [28] μέσω κατεργασιών αποβολής υλικού που μπορούν να αποδώσουν σε κομμάτια μεγαλύτερων διαστάσεων χαρακτηριστικά και δομές με μεγάλη ακρίβεια και οι οποίες θα χαρακτηρίζονταν κατεργασίες ακριβείας (precision machining) ή κατεργασίες λίαν υψηλής ακριβείας (ultra high precision machining) [26, 29]. Όπως θα φανεί και στη συνέχεια, υπάρχουν διαφορές μεταξύ μικροκατεργασιών και κατεργασιών υψηλής και λίαν υψηλής ακριβείας, όμως είναι σημαντικό να τονίσουμε και ότι οι σχετικές έννοιες δεν είναι σταθερές, αλλά αλλάζουν με την πάροδο του χρόνου, καθώς οι τεχνολογικές δυνατότητες αυξάνονται όπως φαίνεται και στο σχήμα 2.2. Το σχήμα αυτό αποτελεί το γνωστό διάγραμμα του Taniguchi, που προτάθηκε το 1974 και απεικονίζει τις εξελίξεις στην ακρίβεια των κατεργασιών αποβολής υλικού [27, 30]. Η ύπαρξη κάποιου κατώτερου ορίου βρίσκεται στην κλίμακα των ατόμων, κάτι που είχε επισημανθεί από την περίφημη ομιλία του Richard Feynman "There is plenty of room at the bottom" [27]. Σύμφωνα με τους Simoneau et al. [31], η μικροκοπή συμβαίνει όταν το πάχος απαραμόρφωτου αποβλίπτου είναι μικρότερο από το μέσο μέγεθος κόκκου των μικρότερων κόκκων του υλικού [32]. Όταν το υλικό που αποβάλλεται είναι εξαιρετικά μικρή ποσότητα, τότε έχει επιτευχθεί η μετάβαση στη νανο-κλίμακα [29]. Η έννοια των λίαν υψηλής ακριβείας κατεργασιών είναι αλληλένδετη με την νανοτεχνολογία και περιλαμβάνει, όχι μόνο τις ίδιες τις κατεργασίες αλλά και τις εργαλειομηχανές που απαιτούνται, καθώς και την τεχνολογία της μετρολογίας που απαιτείται για την εξακρίβωση της διαστασιολογικής ακρίβειας των κομματιών [27].



**Σχήμα 2.2.** Διάγραμμα του Taniguchi για την ακρίβεια των διαφόρων ειδών κατεργασιών [33].

Όπως και οι υπόλοιπες κατηγορίες μικροκατεργασιών που περιγράφηκαν συνοπτικά στην προηγούμενη ενότητα, οι μικροκατεργασίες αποβολής υλικού αποσκοπούν στην παραγωγή μικρο-εξαρτημάτων όπως μικροκαλούπια, ιατρικά εξαρτήματα, MEMS, αισθητήρες, μικροκινητήρες κ.α., απαραίτητων σε διάφορους τομείς όπως η βιοιατρική, η ρομποτική, η αυτοκινητοβιομηχανία, η αεροπορική βιομηχανία και η μικροηλεκτρονική [17, 28, 34]. Οι γενικές απαιτήσεις των μικροκατεργασιών είναι ακρίβεια και επαναληψιμότητα, ενώ είναι αναγκαίο να λαμβάνεται σοβαρά υπόψη και το κόστος [34]. Είναι δυνατόν να διακριθούν διάφορες κατηγορίες μικροκατεργασιών αποβολής υλικού, ανάλογα με το είδος της ενέργειας που χρησιμοποιείται [28]. Οι διάφορες κατηγορίες μικροκατεργασιών αποβολής υλικού απεικονίζονται στο σχήμα 2.3.



**Σχήμα 2.3.** Κατηγορίες μικροκατεργασιών αποβολής υλικού.

Οι μικροκοπές, όπως και οι αντίστοιχες κοπές στη μακροκλίμακα, σχετίζονται με κατεργασίες στις οποίες η κοπή διεξάγεται μέσω εργαλείων με καθορισμένες κοπτικές ακμές. Οι βασικότερες, συμβατικές κατεργασίες μηχανικής μικροκοπής είναι η μικρο-τόρνευση, η μικρο-διάτρηση και το μικρο-φρεζάρισμα. Στην κατηγορία των προηγμένων, μη-συμβατικών κατεργασιών μικροκοπής συμπεριλαμβάνονται κατεργασίες στις οποίες χρησιμοποιείται μηχανική, θερμική και χημική ενέργεια [28]. Εναλλακτικά ο διαχωρισμός αυτός γίνεται σε είδη κατεργασιών ανάλογα με τη φύση της αποβολής υλικού ως φυσικές, χημικές και μηχανικές [27,29]. Ενώ οι εφαρμογές που σχετίζονται με τις δύο πρώτες κατηγορίες είναι πιο εξειδικευμένες, οι μηχανικές κατεργασίες αποβολής υλικού έχουν ευρύτερο φάσμα εφαρμογών, λόγω του ότι μπορούν να κατεργαστούν διάφορες κατηγορίες υλικών [29]. Στη συνέχεια οι κατηγορίες αυτές μπορούν να υποδιαιρεθούν σε κοπές και κατεργασίες αποβολής υλικού με λειαντικά μέσα, στις οποίες κυριαρχούν η μικρο-λείανση και η μικρο-στίλβωση [29].

### **2.2.2 Συμβατικές μικροκατεργασίες αποβολής υλικού**

Οι συμβατικές μικροκατεργασίες αποβολής υλικού άρχισαν να χρησιμοποιούνται ως εναλλακτικές καθιερωμένων μικρο-κατεργασιών, όπως η μικρο-ηλεκτροδιάβρωση (μικρο-EDM) λόγω της υψηλής παραγωγικότητας, σχετικά χαμηλού κόστους και ικανότητάς τους να κατεργαστούν ένα μεγάλο εύρος υλικών [35]. Γενικά για να χαρακτηριστεί μια κατεργασία ως μικροκοπή, πρέπει να λαμβάνεται υπόψη όχι μόνο το μέγεθος του αντικειμένου ή της δομής που πρέπει να δημιουργηθεί, αλλά και το μέγεθος του εργαλείου ή της εργαλειομηχανής που χρησιμοποιείται. Όπως προαναφέρθηκε, ορισμένοι ερευνητές θέτουν τα όρια των μικροκοπών μεταξύ 1  $\mu\text{m}$  - 1mm ή ακόμα και 1-100  $\mu\text{m}$ , με τις κοπές στις οποίες οι διαστάσεις της παραγόμενης δομής είναι σε μεγαλύτερη κλίμακα να χαρακτηρίζονται ως μακρο-κοπές και τις κατεργασίες που διεξάγονται σε μικρότερη κλίμακα νανοκοπές [34].

Συνήθως ορισμένοι ερευνητές συγκρίνουν τις μικροκατεργασίες αποβολής υλικού με τις κατεργασίες αποβολής υλικού λίαν υψηλής ακριβείας, παρόλα αυτά υπάρχουν ορισμένες διαφορές μεταξύ των δύο εννοιών, όπως προαναφέρθηκε. Στις κατεργασίες μικροκοπής κατατάσσονται η μικρο-τόρνευση, το μικρο-φρεζάρισμα, η μικρο-διάτρηση, η μικρο-λείανση, ενώ στις κατεργασίες λίαν υψηλής ακριβείας η τόρνευση με διαμάντι και το fly-cutting [26]. Αξίζει να διευκρινιστεί ότι με τον όρο fly-cutting, ειδικά στις κατεργασίες λίαν υψηλής ακριβείας, υποδηλώνεται η κατεργασία με ειδικό εργαλείο μίας κοπτικής ακμής από διαμάντι που προσαρμόζεται σε περιστρεφόμενη άτρακτο [36].

Στην πρώτη κατηγορία, χρησιμοποιούνται διάφορα είδη ΚΕ, το μέγεθος του ΤΕ είναι συνήθως 1  $\mu\text{m}$  έως 1 mm, μπορούν να παραχθούν πλήρως 3Δ αντικείμενα με μεγάλη πολυπλοκότητα, η απόλυτη ακρίβεια είναι συνήθως κάτω από 10 $\mu\text{m}$  και μπορεί να επιτευχθεί τραχύτητα κατώτερη των 100 nm [26]. Στη δεύτερη κατηγορία χρησιμοποιούνται εργαλεία μόνο από διαμάντι, συνήθως μονοκρυσταλλικό λόγω της μεγάλης σκληρότητάς του, το μέγεθος του ΤΕ μπορεί να είναι άνω του 1 mm, συνήθως κατεργάζονται κομμάτια εκ περιστροφής, η απόλυτη ακρίβεια είναι κάτω του 1  $\mu\text{m}$  και η τραχύτητα κάτω των 20 nm [26].

Μέσω των συμβατικών μικροκατεργασιών δεν είναι δυνατόν να κατασκευαστούν χαρακτηριστικά μικροεξαρτημάτων με διάσταση κάτω των 10 $\mu\text{m}$  ή να επιτευχθούν τόσο μικρές ανοχές, όσο αυτές των μη-συμβατικών κατεργασιών, αλλά το βασικότερο τους πλεονέκτημα είναι ο μεγαλύτερος ρυθμός αποβολής υλικού και η δυνατότητα να γίνει κατεργασία οποιουδήποτε είδους υλικού [37]. Επιπλέον, είναι δυνατόν να κατασκευαστούν πολύπλοκες 3Δ γεωμετρίες [37]. Προκειμένου να αξιοποιούνται τα πλεονεκτήματα διαφόρων ειδών μικροκατεργασιών, ορισμένοι ερευνητές τονίζουν την σημασία της πραγματοποίησης συνδυασμού κατεργασιών για την κατασκευή των επιθυμητών μικροαντικειμένων [38]. Τέλος, είναι δυνατόν να βελτιωθεί η απόδοση των μικροκατεργασιών μέσω χρήσης βοηθητικών τεχνολογιών, όπως ταλαντώσεις και δέσμης laser για τη μείωση των δυνάμεων, τη βελτίωση της ευστάθειας της κατεργασίας και τη μείωση της φθοράς του εργαλείου [26].

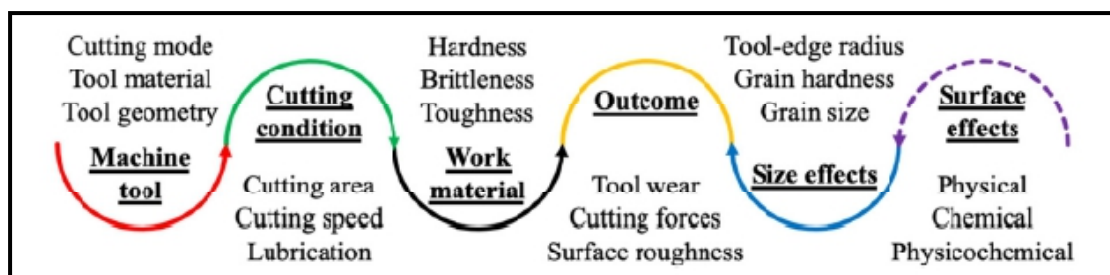
Σχετικά με τις κατεργασίες μικροκοπής, ορισμένοι ορίζουν την μετάβαση από τη μακροκλίμακα στη μικροκλίμακα σε σχέση με τον όγκο του υλικού που αφαιρείται και την

ακτίνα της κοπτικής ακμής ή σε σχέση με το μέγεθος κόκκου και την ακτίνα της κοπτικής ακμής, ενώ άλλοι απλώς θεωρούν ότι οι μικροκοπές σχετίζονται με την κατασκευή δομών στη μικροκλίμακα. Όσο ο όγκος του υλικού που αποβάλλεται γίνεται μικρότερος και η παραμόρφωση συγκεντρώνεται τοπικά, η μετάβαση αυτή, όπως και σε άλλες κατηγορίες μικροκατεργασιών δεν είναι εύκολη, ιδιαίτερα από την πλευρά των εργαλειομηχανών, διότι εμφανίζονται διάφορα φαινόμενα κλίμακας [26, 28]. Όπως θα αναφερθεί και στη συνέχεια, διάφορες θεωρήσεις που έχουν ισχύ στη μακροκλίμακα δεν ισχύουν στη μικροκλίμακα, όπως η θεώρηση ομογενούς και συνεχούς μέσου για τα υλικά και πρέπει να λαμβάνεται υπόψη το μέγεθος κόκκων και η ακτίνα της κοπτικής ακμής [32]. Λόγω αυτών των φαινομένων, παρατηρούνται σημαντικές διαφορές από τις κατεργασίες της μακροκλίμακας στο σχηματισμό του αποβλίττου, το ελάχιστο πάχος αποβλίττου, τις δυνάμεις κοπής και τη φθορά του κοπτικού εργαλείου [39]. Επιπλέον ο έλεγχος όλων των παραμέτρων που επηρεάζουν την ακρίβεια της κατεργασίας δεν είναι πάντα εφικτός ώστε οι κατεργασίες αυτές να χαρακτηρίζονται αιτιοκρατικές, ιδιαίτερα όσο οι διαστάσεις και οι ανοχές βρίσκονται σε εξαιρετικά χαμηλές κλίμακες, για λόγους που δεν μπορούν να εξηγηθούν με βάση όλα όσα είναι γνωστά για τις κατεργασίες στη μακροκλίμακα [29].

Τα τελευταία 20 χρόνια έχει παρατηρηθεί μια αύξηση της τάξης του 20% ετησίως για τις μικροκατεργασίες στη βιομηχανία, κάτι που αντανακλάται και στις μικροκοπές [35]. Καθώς η γνώση σχετικά με τις κατεργασίες της μακροκλίμακας δε μπορεί να μεταφερθεί απευθείας στη μικροκλίμακα, η αύξηση της σημασίας των μικροκοπών στη βιομηχανία επηρεάζεται από την πρόοδο της έρευνας αναφορικά με την κατανόηση των φαινομένων που σχετίζονται με αυτές, των μηχανισμών κοπής και την αντιμετώπιση διαφόρων προβλημάτων που προκύπτουν κατά τις μικροκοπές, ιδίως την κατεργασιμότητα των υλικών στη μικροκλίμακα [32, 37, 40, 41]. Όταν οι κατεργασίες παύουν να διεξάγονται στην μακροκλίμακα και προσεγγίζουν τις θεμελιώδεις δομές των υλικών, είναι απαραίτητες οι γνώσεις σε πιο εξειδικευμένα θέματα της επιστήμης των υλικών, της φυσικής και της χημείας, προκειμένου να είναι δυνατόν να σχεδιαστούν επιτυχώς οι μικρο και νανοκατεργασίες [29]. Εκτός των πειραματικών μελετών, υπάρχει πληθώρα μελετών με αναλυτικά και αριθμητικά μοντέλα για την έρευνα των φαινομένων που συμβαίνουν κατά τις μικροκατεργασίες, ορισμένα εκ των οποίων θα περιγραφούν σε επόμενη ενότητα. Στην επόμενη υποενότητα, θα αναφερθούν ορισμένα γενικά θέματα που αφορούν όλες τις συμβατικές μικροκατεργασίες κοπής και επηρεάζουν σημαντικά τα προϊόντα που παράγονται.

### **2.2.3 Χαρακτηριστικά φαινόμενα που συμβαίνουν κατά τις μικροκοπές**

Παρότι όπως θα φανεί και στη συνέχεια, οι μικροκοπές παρουσιάζουν παρόμοια κινηματική με τις κοπές στη μακροκλίμακα, η μετάβαση στη μικροκλίμακα δεν είναι μια απλή υπόθεση [17]. Καθώς οι διαστάσεις μικραίνουν, δε σημαίνει ότι μεταβάλλονται αναλογικά όλα τα σχετικά μεγέθη των κατεργασιών. Διάφορα θέματα προκύπτουν, καθώς το πάχος του απαραμόρφωτου αποβλίττου (ΠΑΑ) γίνεται συγκρίσιμο με την ακτίνα του ΚΕ ή το μέγεθος κόκκου του υλικού του ΤΕ [17]. Ορισμένα από τα βασικότερα, τα οποία θα αναλυθούν στη συνέχεια, παρουσιάζονται στο σχήμα 2.4.



**Σχήμα 2.4.** Παράγοντες που επηρεάζουν τις μικροκατεργασίες αποβολής υλικού [42].

Οι παράγοντες που επηρεάζουν τις μικροκατεργασίες αποβολής υλικού μπορούν να διαχωριστούν σε εξωτερικούς και εσωτερικούς [17]. Στους εξωτερικούς παράγοντες συγκαταλέγονται μακροσκοπικές ιδιότητες των υλικών, χαρακτηριστικά του εξοπλισμού και της εργαλειομηχανής, καθώς και η επίδραση του μεγέθους της ακτίνας καμπυλότητας του ΚΕ, η επίδραση της αρνητικής γωνίας αποβλίττου, οι συνθήκες επαφής ΤΕ-ΚΕ και το ελάχιστο ΠΑΑ [17, 26]. Στους εσωτερικούς παράγοντες συγκαταλέγονται κυρίως παράγοντες που έχουν να κάνουν με την μικροδομή των υλικών όπως το μέγεθος κόκκου, το μέσο ελεύθερο μήκος των διαταραχών, και η μέση απόσταση μεταξύ δευτερευουσών φάσεων ή κατακρημνισμάτων [17, 26], κάποια από τα οποία θα αναφερθούν ξανά στη συνέχεια. Όλα αυτά τα θέματα επηρεάζουν τις δυνάμεις κατεργασίας και την ειδική ενέργεια, τη διαδικασία παραγωγής αποβλίττου, την ποιότητα επιφανείας και τη φθορά του ΚΕ [26]. Όπως θα γίνει εμφανές στη συνέχεια, η ύπαρξη φαινομένων κλίμακας παίζει καθοριστικό ρόλο, σχεδόν σε όλα τα θέματα που αφορούν τις μικροκοπές.

Η εξήγηση των φαινομένων κλίμακας διαχωρίζεται γενικά σε δύο κατηγορίες θεωριών, αυτές που σχετίζουν τα φαινόμενα κλίμακας με τις ιδιότητες των υλικών και αυτές που είναι ανεξάρτητες από τις ιδιότητες των υλικών. Στη δεύτερη κατηγορία ανήκουν θεωρίες που σχετίζονται με την κοπτική ακμή και την επίδραση της τριβής [28]. Όπως θα εξηγηθεί στη συνέχεια της ενότητας αυτής, στη μικροκλίμακα τα ΚΕ δε μπορεί να θεωρηθούν απολύτως αιχμηρά και έτσι, λόγω της καμπυλότητας της κοπτικής ακμής το εργαλείο συμπεριφέρεται σαν αμβλύ όταν το ΠΑΑ είναι της ίδιας τάξης μεγέθους με την ακτίνα της κοπτικής ακμής, με αποτέλεσμα να δημιουργούνται δυνάμεις άρωσης (ploughing) και αρνητική φαινόμενη γωνία αποβλίττου, που αυξάνει σημαντικά τις δυνάμεις [28]. Επίσης, καθώς το απόβλιττο ολισθαίνει πάνω στην επιφάνεια αποβλίττου του ΚΕ, προκαλείται φαινομενικά αύξηση του συντελεστή τριβής και προκύπτει διάχυση ενέργειας λόγω του φαινομένου που ονομάζεται στην αγγλόφωνη ορολογία rubbing και συμβαίνει όταν το ΚΕ με το ΤΕ βρίσκονται σε απλή επαφή λόγω τριβής χωρίς πλαστική παραμόρφωση ή αφαίρεση υλικού. Η ενέργεια αυτή είναι μικρότερη μόνο από την ενέργεια λόγω πλαστικής παραμόρφωσης στην πρωτεύουσα ζώνη παραμόρφωσης. Το φαινόμενο αυτό εξηγείται καθώς όταν μειώνεται το ΠΑΑ, μειώνεται η θερμοκρασία στην περιοχή επαφής ΚΕ-ΤΕ με αποτέλεσμα την ύπαρξη αυξημένης αντοχής του υλικού του ΤΕ στη διεπαφή και άρα την ανάπτυξη μεγαλύτερων δυνάμεων επαφής [26].

Ένα γενικό πρόβλημα στις μικροκοπές είναι τα χαρακτηριστικά και η διάρκεια ζωής του ΚΕ. Τα ΚΕ στις μικροκοπές παίζουν ιδιαίτερα σημαντικό ρόλο για την ομαλή διεξαγωγή της κατεργασίας. Σε μια εξαιρετικά αναλυτική ανασκόπηση των ΚΕ που χρησιμοποιούνται κατά τις μικροκοπές αλλά και των μεθόδων κατασκευής τους, οι Oliaei et al. [43] διέκριναν τις

βασικότερες προκλήσεις που εμφανίζονται σχετικά με τα ΚΕ στη μικρο-κλίμακα. Μία από τις βασικότερες απαιτήσεις προκλήσεις είναι η προσαρμογή των ΚΕ στις ιδιαίτερες συνθήκες που λαμβάνουν χώρα κατά τις κατεργασίες και τα υλικά των χρησιμοποιούμενων ΤΕ. Άλλες προκλήσεις που πρέπει να υπερνικηθούν ή να επιλυθούν κατάλληλα, είναι η ανυπαρξία συστηματικού τρόπου για το σχεδιασμό των ΚΕ, καθώς και η επιλογή της κατάλληλης κατεργασίας για την κατασκευή τους.

Η γενική μορφή των ΚΕ είναι παρόμοια με αυτή των συνηθισμένων ΚΕ με μικρότερες διαστάσεις, κάτι που θέτει πολύ πιο αυστηρές προδιαγραφές στην κατασκευή τους κατά την οποία το σημαντικότερο πρόβλημα αποτελούν οι ταλαντώσεις, λόγω της σχετικά χαμηλής στιβαρότητας των ΚΕ [26,28]. Γενικά, η διάρκεια ζωής ενός ΚΕ μειώνεται σημαντικά λόγω των φαινομένων κλίμακας, της ελαστικής επαναφοράς, των αρνητικών γωνιών αποβλίπτου και των ανομοιογενειών των υλικών [26]. Η χρήση διαφόρων ειδών επικαλύψεων και διαφόρων ειδών γεωμετρίας της κοπτικής ακμής αποτελεί σήμερα πεδίο έρευνας. Λόγω της εξαιρετικής δυσκολίας στην κοπή και επομένως χαμηλής κατεργασιμότητάς τους, κεραμικά υλικά όπως το καρβίδιο του βολφραμίου προτιμώνται ως υλικά ΚΕ ή επικαλύψεις. Τα εργαλεία που κατασκευάζονται από διαμάντι, παρότι είναι κατάλληλα για εφαρμογές λίαν υψηλής ακριβείας έχουν το μειονέκτημα ότι δεν μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την κοπή σιδηρούχων υλικών, καθώς η φθορά τους είναι ιδιαίτερα μεγάλη λόγω χημικής συνάφειας. ΚΕ από πολυκρυσταλλικό διαμάντι με τυχαία μορφολογία κόκκων έχουν μεγαλύτερη διάρκεια ζωής και ανθεκτικότητα σε σχέση με τα κοινά εργαλεία. Επίσης ιδιαίτερη έμφαση πρέπει να δίνεται στην αντοχή της κοπτικής ακμής τόσο σε μηχανικά όσο και θερμικά φορτία [34].

Η φθορά του ΚΕ επηρεάζει σημαντικά τις ανοχές των μικροαντικειμένων που παράγονται και απαιτείται διαρκής έλεγχος των εργαλείων για πρόληψη της θραύσης τους. Η σκλήρυνση των ΚΕ με χρήση laser είναι μια τεχνική που μπορεί να συμβάλει στην περαιτέρω ενίσχυση της ικανότητάς τους. Επίσης, για τον περιορισμό της φθοράς των ΚΕ ενδείκνυται η χρήση υγρού κοπής [28]. Λόγω των περιβαλλοντικών επιπτώσεων που προκύπτουν από τη χρήση κοπτικών υγρών με τοξικά συστατικά, συνιστάται η χρήση φιλικών προς το περιβάλλον υγρών σε συνδυασμό με κάποια σύγχρονη τεχνική, όπως η ελάχιστη ποσότητα λίπανσης (MQL) [35]. Εξάλλου η χρήση της κλασσικής τεχνικής ψύξης δεν είναι κατάλληλη για τις μικροκατεργασίες, καθώς η πίεση του υγρού επηρεάζει τη συμπεριφορά του κοπτικού [30].

Στις μικροκοπές δεν αλλάζει μόνο το μέγεθος του ΚΕ, αλλά και η γεωμετρία του. Για παράδειγμα τα ΚΕ φρεζαρίσματος και διάτρησης έχουν λιγότερα πτερύγια για να επιτρέπουν τη ροή του αποβλίπτου, ενώ το στέλεχος του ΚΕ είναι μικρότερου μήκος για να αυξάνεται η δυσκαμψία, να μειώνονται οι ταλαντώσεις και να διατηρείται η ακρίβεια τοποθέτησης του ΚΕ [34]. Επίσης, η μικροδομή του ΚΕ παίζει σημαντικό ρόλο στην αντίστασή του σε φθορά και τη σκληρότητά του και προτιμώνται τα λεπτόκοκκα υλικά [26].

Η φθορά των ΚΕ στη μικροκοπή, όπως θα αναφερθεί και στη συνέχεια, δεν είναι βαθμιαία όπως στις μακροσκοπικές κοπές όπου εμφανίζονται συνήθως τρία στάδια, αλλά συχνά μετά από τα δύο πρώτα στάδια, αφού το εργαλείο υποστεί φθορά και αύξηση της ακτίνας της κοπτικής ακμής, η φθορά προκύπτει συνήθως άμεσα χωρίς προειδοποίηση [26, 34]. Ένας



από τους μηχανισμούς φθοράς που έχει προταθεί για τις μικροκοπές είναι η προσκόλληση του αποβλίττου στο ΚΕ, το οποίο στα κονδύλια ή τα δράπανα φράσσει το χώρο που κινείται το απόβλιττο ανάμεσα στα πτερύγια (clogging) και οδηγεί σε απότομη αύξηση των τάσεων. Άλλοι μηχανισμοί που έχουν προταθεί είναι θραύση λόγω κόπωσης και λόγω υπερβολικής τάσης για εργαλεία με κοπτική ακμή που έχει αμβλυνθεί [30]. Στην περίπτωση της φθοράς λόγω κόπωσης δημιουργούνται ρωγμές λόγω της κόπωσης που προκύπτει, καθώς η χρήση υψηλών ταχυτήτων περιστροφής σημαίνει ότι το εργαλείο υφίσταται ένα μεγάλο αριθμό επαναλαμβανόμενων κύκλων φόρτισης. Η εμφάνιση υπερβολικής τάσης δεν είναι ασυνήθιστη στις μικροκοπές, παρότι οι δυνάμεις κοπής είναι σχετικά χαμηλές είναι αρκετά μικρή η επιφάνεια επαφής [34]. Τα μικρά βάθη κοπής κατά τις μικροκατεργασίες οδηγούν σε μεγαλύτερη τριβή μεταξύ ΚΕ και ΤΕ, κάτι που επιβαρύνει τη φθορά [26]. Η πρόβλεψη της φθοράς του ΚΕ, μπορεί να γίνει μέσω της μέτρησης δυνάμεων κοπής, έλεγχο του μεγέθους του γρεζιού ή μέσω ακουστικών σημάτων [26].

Η χρήση επικαλύψεων στα ΚΕ είναι ευρέως διαδεδομένη, καθώς βελτιώνει σημαντικά την απόδοσή τους, εξαλείφοντας την ανάγκη για ένα εργαλείο κατασκευασμένο εξ'ολοκλήρου από ένα ιδιαίτερα σκληρό υλικό, κάτι που θα αύξανε σημαντικά το κόστος τους [35]. Η χρήση επενδεδυμένων εργαλείων είναι σημαντική για τις μικροκατεργασίες υψηλών ταχυτήτων με ή χωρίς υγρό κοπής [26]. Συνήθως η εναπόθεση των επικαλύψεων γίνεται μέσω CVD ή PVD. Οι επικαλύψεις μέσω PVD μπορούν να είναι λεπτότερου πάχους, μεγαλύτερη σκληρότητα, να μην περιέχουν ρωγμές, να εμφανίζουν θλιπτικές παραμένουσες τάσεις και να εναποτίθεται σε πολλαπλές στρώσεις όμως εμφανίζουν μικρότερη προσκολλησιμότητα σε σχέση με τις επικαλύψεις μέσω CVD [26]. Τα πιο συνηθισμένα υλικά που χρησιμοποιούνται για επικαλύψεις είναι κράματα με βάση το τιτάνιο, διαμάντι, καρβίδιο του πυριτίου ή νιτρίδιο του βορίου. Λόγω της επικάλυψης που αυξάνει τις διαστάσεις του εργαλείου, επηρεάζονται οι δυνάμεις της κατεργασίας με αποτέλεσμα να είναι απαραίτητος ο προσδιορισμός του κατάλληλου πάχους της επίστρωσης προκειμένου το εργαλείο να μην υποστεί πρόωρη θραύση [28]. Η χρήση της επίστρωσης δίνει επιπλέον τη δυνατότητα να χρησιμοποιηθούν μεγαλύτερες ταχύτητες κοπής, μειώνει το μέγεθος του γρεζιού και αυξάνει την αντίσταση σε χημικούς παράγοντες [26,35].

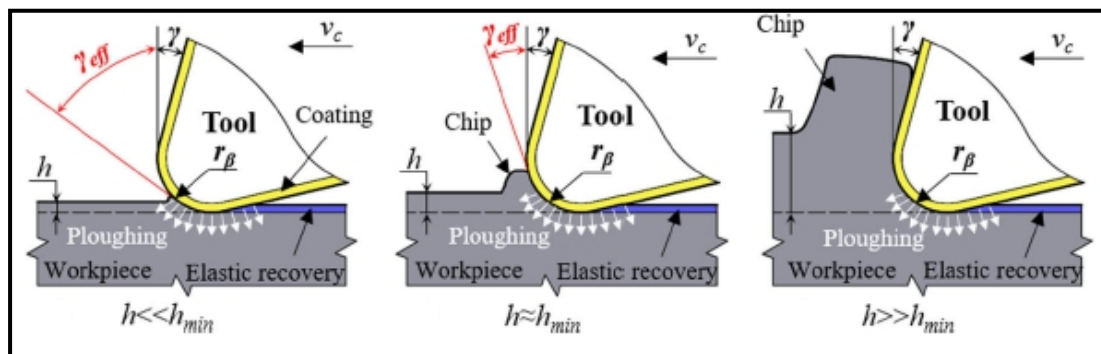
Η χρήση επιστρώσεων από διαμάντι είναι συχνά δύσκολη, καθώς δεν είναι εύκολο να συγκολληθεί η επίστρωση στο υλικό του κοπτικού λόγω μεγάλης διαφοράς σκληρότητας. Οι κεραμικές επιστρώσεις προσφέρουν καλή αντίσταση σε φθορά και σε υψηλές θερμοκρασίες, με μικρότερο σχετικά κόστος. Επίσης, ο συνδυασμός διαφόρων κεραμικών υλικών μπορεί να έχει ακόμα καλύτερη απόδοση, όπως και οι επιστρώσεις με βάση το βολφράμιο που εμφανίζει υψηλή σκληρότητα έως τους 4000°C. Η μονή επίστρωση είναι σχετικά οικονομική, αλλά η χρήση περισσότερων της μίας στρώσεων γίνεται ολοένα και πιο συνηθισμένη, καθώς μπορούν να συνδυαστούν τα επωφελή χαρακτηριστικά διαφόρων υλικών σε σχέση με την αντοχή, προσκόλληση, δυσθραυστότητα και σκληρότητα και να μειωθεί η τάση για σχηματισμό ρωγμών [35].

Οι αυτοδιεγειρούμενες ταλαντώσεις είναι ο πιο συνηθισμένος τρόπος ταλάντωσης που εμφανίζεται κατά τις κοπές λόγω της επαφής ΚΕ και ΤΕ [35]. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται και δυναμική αστάθεια, και σε αυτό συνεισφέρουν διάφορα άλλα φαινόμενα όπως η

αύξηση της ειδικής δύναμης κοπής και η ανομοιογένεια του υλικού του τεμαχίου [37]. Ιδιαίτερα στις μικρο-κατεργασίες όπως το μικρο-φρεζάρισμα, λόγω της ιδιαίτερα μικρής διαμέτρου του εργαλείου, οι ταλαντώσεις μπορούν εύκολα να οδηγήσουν σε θραύση του εργαλείου, οδηγώντας επίσης σε απαράδεκτη ποιότητα επιφάνειας του ΤΕ. Καθώς το πλάτος των ταλαντώσεων στις μικρο-κατεργασίες είναι ιδιαίτερα μικρό, καθίσταται εξαιρετικά δύσκολο να εντοπιστεί από τους συνηθισμένους αισθητήρες [35]. Επίσης, σε χαμηλές προώσεις είναι δυνατόν η εξαναγκασμένη ταλάντωση του ΚΕ, σε συνδυασμό με την ελαστική επαναφορά του υλικού, να οδηγήσουν σε ασταθείς συνθήκες κοπής.

Στις συνήθεις κατεργασίες κοπής, το βάθος κοπής ή το ΠΑΑ είναι αρκετά μεγαλύτερα από την ακτίνα καμπυλότητας της κοπτικής ακμής, επομένως θεωρείται ότι το ΚΕ μπορεί να αφαιρέσει υλικό από το ΤΕ και να σχηματίσει απόβλιττο [39]. Ένα βασικό χαρακτηριστικό των μικροκοπών όμως είναι ότι οι διαστάσεις της κοπτικής ακμής στις μικροκοπές είναι συγκρίσιμες με τις τιμές του βάθους κοπής και της πρόωσης ανά δόντι, ώστε να καθίσταται η αποβολή υλικού μέσω αποβλίττου ένα μη-τετριμμένο θέμα [28, 34]. Πιο συγκεκριμένα, στις μικροκοπές εμφανίζεται η έννοια του ελάχιστου ΠΑΑ, το οποίο αποτελεί ένα σημαντικό κριτήριο για την δυνατότητα δημιουργίας αποβλίττου [39, 44] και ήδη από τη δεκαετία του 1990, διάφοροι ερευνητές είχαν τονίσει ότι υπό συγκεκριμένες συνθήκες είναι αδύνατη η δημιουργία αποβλίττου, με επακόλουθα την χαμηλή διαστατική ακρίβεια και ποιότητα επιφανείας [34, 37].

Όταν το ΠΑΑ είναι μικρότερο από το ελάχιστο πάχος αποβλίττου, το υλικό πιέζεται κατά την επαφή του με το εργαλείο προς την περιοχή κάτω από αυτό, και όταν αυτό απομακρυνθεί, επανέρχεται στην αρχική του κατάσταση μέσω ελαστικής επαναφοράς, η οποία υπερिशύει της πλαστικής παραμόρφωσης, με την τελευταία να οδηγεί σε μείωση της ποιότητας επιφανείας [26, 44]. Όσο το ΠΑΑ δεν υπερβαίνει την τιμή του ελάχιστου ΠΑΑ, τα φαινόμενα της απλής επαφής και της άρωσης μπορεί να συμβαίνουν διακοπτόμενα [26]. Όταν το ΠΑΑ είναι ίσο με την ελάχιστη τιμή του, αρχίζει να δημιουργείται απόβλιττο λόγω διάτμησης, αλλά ταυτόχρονα λαμβάνει χώρα εν μέρει ελαστική παραμόρφωση και επαναφορά, ώστε το υλικό που αποβάλλεται να είναι λιγότερο από το αναμενόμενο και η ειδική δύναμη είναι ακόμα υψηλή, καθώς επικρατούν φαινόμενα άρωσης [26, 44]. Όταν ξεπεραστεί η τιμή του ελάχιστου ΠΑΑ, η ελαστική παραμόρφωση μειώνεται και παράγεται κανονικά απόβλιττο στη ζώνη διάτμησης λόγω ευσταθών συνθηκών πλαστικής παραμόρφωσης [26, 44]. Οι τρεις διαφορετικές συνθήκες απεικονίζονται στο σχήμα 2.5, όπου με  $h$  συμβολίζεται το ΠΑΑ και με  $h_{min}$  το ελάχιστο ΠΑΑ.



Σχήμα 2.5. Συνθήκες μικροκοπής ανάλογα με τις τιμές του ΠΑΑ [44].

Ο εντοπισμός των συνθηκών που οδηγούν σε παρόμοια φαινόμενα αυξημένων δυνάμεων άρωσης ή ελαστικής επαναφοράς πραγματοποιείται σε σχέση με την ακτίνα της κοπτικής ακμής [37]. Συγκεντρωτικά, οι βασικοί μηχανισμοί που συναντώνται στις κοπές είναι η διάτμηση που οδηγεί σε θραύση του υλικού, η άρωση που οδηγεί σε πλαστική παραμόρφωση και η απλή επαφή ή ολίσθηση, που σχετίζεται μόνο με ελαστική επαναφορά [34]. Ουσιαστικά, ο λόγος του βάθους κοπής προς την ακτίνα της κοπτικής ακμής προσδιορίζει εάν ο κύριος μηχανισμός θα είναι ολίσθηση, άρωση ή κοπή [30]. Λόγω αυτών των φαινομένων, η καμπυλότητα της κοπτικής ακμής δε μπορεί να αμεληθεί κατά τις μελέτες, όπως στις μακροσκοπικές κοπές και επηρεάζει την φαινόμενη γωνία αποβλίττου  $\gamma_{eff}$  που σχηματίζεται κατά την κοπή, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.5, οδηγώντας σε μεγάλες αρνητικές φαινόμενες γωνίες αποβλίττου που ενισχύουν τις δυνάμεις άρωσης, δυσχεραίνουν τη δημιουργία αποβλίττου και μειώνουν την ποιότητα επιφανείας [34, 37, 39]. Στην περίπτωση των αρνητικών γωνιών αποβλίττου, το υλικό που ρέει γύρω από την κοπτική ακμή διαχωρίζεται σε ένα σημείο που ονομάζεται στάσιμο σημείο (stagnation point) ή ουδέτερο σημείο, μέσω του οποίου είναι δυνατόν να υπολογιστεί το ελάχιστο ΠΑΑ και το αντίθετο. Πιο συγκεκριμένα, όσο μεγαλύτερη είναι η φαινόμενη γωνία αποβλίττου, τόσο μεγαλύτερο γίνεται το ελάχιστο ΠΑΑ. Το υλικό πάνω από το ουδέτερο σημείο, το οποίο επηρεάζεται από την τριβή μεταξύ TE και της επιφάνειας του κοπτικού, ρέει ως απόβλιττο κατά μήκος της πλευράς αποβλίττου, ενώ το υλικό που ρέει κάτω από την ακμή του κοπτικού οδηγεί σε φαινόμενο άρωσης [41].

Επιπλέον, οι παρατηρήσεις αυτές θέτουν έναν περιορισμό στο επιτεύξιμο βάθος κοπής με ένα συγκεκριμένο ΚΕ καθώς, όσο μικρότερη είναι η ακτίνα καμπυλότητας, τόσο μικρότερο θα είναι και το ελάχιστο δυνατό βάθος [34]. Ορισμένοι ερευνητές παρατήρησαν ότι ελάχιστο ΠΑΑ εξαρτάται και από το υλικό του TE, καθώς το πιο όλκιμα υλικά εμφανίζουν μεγαλύτερη τιμή ελάχιστου ΠΑΑ, τις συνθήκες τριβής, αλλά ακόμα και τη στιβαρότητα της εργαλειομηχανής [26, 34, 39]. Διάφορα πειράματα έδειξαν ότι για διάφορα υλικά το ελάχιστο ΠΑΑ προκύπτει ίσο με το 5-40% της ακτίνας της κοπτικής ακμής [34]. Η φθορά της κοπτικής ακμής οδηγεί στην αύξηση του μεγέθους της ακτίνας καμπυλότητάς της, με αποτέλεσμα να αυξάνεται το ελάχιστο ΠΑΑ και να προκύπτουν συνθήκες άρωσης [34].

Η μικροδομή του TE είναι άλλος ένας σημαντικός παράγοντας κατά τις μικροκοπές και αποτελεί έναν από τους κύριους παράγοντες, σχετικούς με τα φαινόμενα κλίμακας στις μικροκοπές [30, 37]. Το TE στις μικροκοπές δέχεται μεγάλες παραμορφώσεις, παρόμοιες με αυτές στις κατεργασίες μεσο και μακροκλίμακας, της τάξης του 1.0-5.0 και ρυθμούς παραμόρφωσης μεταξύ  $10^2$ - $10^6$   $s^{-1}$ . Εκτός από τις μεγάλες παραμορφώσεις, το υλικό υπόκειται και σε υψηλές θερμοκρασίες [26]. Γενικά η επίδραση της κλίμακας είναι εμφανής στην πλαστική συμπεριφορά, δηλαδή τη μόνιμη παραμόρφωση, καθώς η ελαστική συμπεριφορά του υλικού δεν επηρεάζεται από την κλίμακα [26]. Δύο είναι οι συνθήκες για την εμφάνιση των φαινομένων κλίμακας, όταν το μέγεθος κόκκου είναι συγκρίσιμο με μια χαρακτηριστική κλίμακα (intrinsic size effect) ή όταν το υλικό έχει εξαιρετικά μικρό πάχος, ώστε ο μηχανισμός παραμόρφωσης να αλληλεπιδρά με ελεύθερες επιφάνειες και διεπιφάνειες (extrinsic size effect) [26]. Καθώς το μέγεθος κόκκου στα περισσότερα μεταλλικά υλικά είναι της τάξης των 100 nm - 100μm, είναι συγκρίσιμο με το βάθος κοπής και τη πρόωση ανά δόντι των μικροκοπών και η επίδραση των ορίων των κόκκων δε μπορεί

να αμεληθεί. Αυτό σημαίνει ότι οι κόκκοι, είτε αποκόπτονται από το υλικό, είτε εκλεπτύνονται [26].

Στα περισσότερα μέταλλα, οι μηχανικές ιδιότητες επηρεάζονται κυρίως από την παρουσία και την κινητικότητα των διαταραχών. Όσο μειώνεται το μέγεθος κόκκου, η απόσταση μεταξύ μιας διαταραχής και ενός ορίου κόκκων μειώνεται, η ευκολία κίνησης των διαταραχών επηρεάζεται από διάφορα εμπόδια, όπως τα όρια κόκκων και ατέλειες και η αντοχή του υλικού αυξάνει, επηρεάζοντας σημαντικά την κατεργασιμότητά του [34]. Λόγω των μικρότερων διαστάσεων, στις μικροκοπές μειώνεται όμως και η πιθανότητα ύπαρξης μιας ατέλειας όπως μια διαταραχή, η οποία αποτελεί σημείο εκκίνησης της πλαστικής παραμόρφωσης, με αποτέλεσμα η αντοχή του υλικού να εμφανίζεται μεγαλύτερη από την πραγματική και η κοπή ενός ευκατέργαστου υλικού να είναι όμοια στη μικροκλίμακα με την κοπή ενός δυσκατέργαστου υλικού [26, 45]. Πέραν αυτού, έχει παρατηρηθεί ότι σε μικρές κλίμακες μήκους η κλίση της παραμόρφωσης λαμβάνει ιδιαίτερα μεγάλες τιμές και επομένως η τάση επηρεάζεται, όχι μόνο από την παραμόρφωση σε ένα σημείο, αλλά και από τη γειτονική περιοχή [26].

Αυτή η παρατήρηση οδήγησε στην υιοθέτηση της θεωρίας της κλίσης παραμόρφωσης (strain gradient) για την εξήγηση του φαινομένου κλίμακας στις μικροκοπές, ιδιαίτερα για συνθήκες χαμηλών ταχυτήτων κοπής και ΠΑΑ μικρότερο των 10 $\mu\text{m}$  [26]. Το μέγεθος κόκκου επηρεάζει σε ένα βαθμό τις μικροκοπές, καθώς τα πιο λεπτόκοκκα υλικά εμφανίζουν μεγαλύτερη αντοχή, σύμφωνα με το φαινόμενο Hall-Petch [26]. Επίσης, η ακτίνα της κοπτικής ακμής είναι συγκρίσιμη του μεγέθους κόκκου, κάτι που καθιστά εσφαλμένη τη θεώρηση ότι το υλικό του TE είναι ιστροπικό και ομογενές και έχει αποδειχθεί πειραματικά ότι η κρυσταλλογραφική διεύθυνση των κόκκων του υλικού μπορεί να επηρεάσει τις κατεργασίες λίαν υψηλής ακριβείας. Η επίδραση είναι εμφανής, τόσο στις δυνάμεις όσο και στις ταλαντώσεις, που μπορεί να προκαλέσουν πρόωρη θραύση στο KE [37]. Επίσης, οι μηχανισμοί κοπής κατά τη μικροκοπή διαφορετικών ειδών υλικών όπως πολυκρυσταλλικά, μονοκρυσταλλικά ή άμορφα παρουσιάζουν σημαντική διαφορά [30].

Μια άλλη εξήγηση για το φαινόμενο κλίμακας λόγω μικροδομής, με βάση μια τροποποιημένη θεωρία πλαστικότητας, σχετίζεται με τη θεωρία σκλήρυνσης του Taylor που συνδέει την τάση ροής με τη ρίζα της πυκνότητας των γεωμετρικά αναγκαίων διαταραχών, λαμβάνοντας υπόψη την κλίση της παραμόρφωσης [41]. Αργότερα, προτάθηκε η ενσωμάτωση και των στατιστικά αποθηκευμένων διαταραχών στον υπολογισμό και με τη χρήση μιας παραμέτρου που ονομάζεται παράγοντας του Nye, η οποία λαμβάνει υπόψη αν το υλικό είναι μονοκρυσταλλικό ή πολυκρυσταλλικό και συνδέθηκε η πραγματική κλίση παραμόρφωσης με την πυκνότητα των γεωμετρικά αναγκαίων διαταραχών [41]. Προκειμένου να εφαρμοστεί αυτή η θεωρία χρειάζεται να υπολογιστεί μια χαρακτηριστική κλίμακα μήκους του υλικού που προσδιορίζει την κρίσιμη διάσταση για εμφάνιση του φαινομένου κλίμακας. Επίσης, ο υπολογισμός της κλίσης παραμόρφωσης στην περίπτωση των μικροκοπών μπορεί να πραγματοποιηθεί και απευθείας, μέσω μοντέλων που σχετίζονται με τις ζώνες παραμόρφωσης κατά τη μικροκοπή [41].

Ο ρυθμός παραμόρφωσης επηρεάζει περισσότερο τη συμπεριφορά του υλικού στις μικροκοπές γιατί, όσο μικραίνει το ΠΑΑ, ιδιαίτερα για τιμές κάτω των 50 $\mu\text{m}$ , η τάση στην

ζώνη διάτμησης παραμένει ίδια, αλλά ο ρυθμός παραμόρφωσης αυξάνει αντιστρόφως ανάλογα με το ΠΑΑ και έτσι αυξάνει ιδιαίτερα η τάση [26]. Σε μεγαλύτερες τιμές ΠΑΑ υπάρχει και η επίδραση της θερμοκρασίας η οποία, καθώς μειώνεται για μικρότερο ΠΑΑ, οδηγεί σε αύξηση της αντοχής σε διάτμηση του υλικού [26]. Τέλος, οι κρυσταλλογραφικοί προσανατολισμοί του υλικού και η ύπαρξη περισσότερων φάσεων, επιδρούν ως ένα βαθμό στις μικροκοπές. Στα μακροσκοπικά πολυκρυσταλλικά υλικά, η ανισοτροπία που οφείλεται στον κρυσταλλογραφικό προσανατολισμό και οδηγεί σε διαφορετικές τιμές κρίσιμης διατμητικής τάσης σε κάθε επίπεδο, δεν επηρεάζει τη συμπεριφορά του υλικού, καθώς ο τυχαίος προσανατολισμός κάθε κόκκου οδηγεί σε ισότροπη συμπεριφορά συνολικά. Στην περίπτωση όμως των μικροκοπών που η παραμόρφωση ασκείται σε λίγους μόνο κόκκους ή σε μεμονωμένους κόκκους, η ανισοτροπία έχει εμφανή επίδραση. Επίσης, όταν η κοπή συμβαίνει στη μικροκλίμακα είναι δυνατόν το ΚΕ να συναντά διάφορες φάσεις, κατά τη διάρκεια της κοπής των οποίων, οι διαφορετικές ιδιότητες οδηγούν σε σημαντικές διαφοροποιήσεις των δυνάμεων [26].

Μια παράμετρος σχετική με το φαινόμενο κλίμακας στις μικροκοπές είναι η ειδική δύναμη ή ειδική ενέργεια κοπής [17]. Η ειδική δύναμη κοπής ορίζεται ως η ενέργεια που καταναλώνεται για την αποβολή ενός μοναδιαίου όγκου υλικού [26]. Επομένως, καθώς αυξάνεται η ειδική δύναμη ή ενέργεια που απαιτείται για αποβολή μοναδιαίου όγκου, σημαίνει ότι αυξάνεται η δυσκολία για την αποβολή υλικού [17]. Συγκεκριμένα, στη μικροκλίμακα παρατηρείται ότι η ειδική δύναμη κοπής αυξάνεται με μη-γραμμικό τρόπο με μειούμενο βάθος κοπής και με μειούμενο λόγο ΠΑΑ προς ακτίνα κοπτικής ακμής [34, 37]. Γενικά, η συμπεριφορά αυτή της ειδικής δύναμης κοπής εξηγείται με δύο διαφορετικούς τρόπους. Ο ένας είναι η αύξηση της αντοχής του υλικού, λόγω της αύξησης του ρυθμού παραμόρφωσης στην πρωτεύουσα ζώνη παραμόρφωσης όταν το ΠΑΑ είναι πολύ μικρό ή λόγω της απουσίας ατελειών στη μικροκλίμακα και ο δεύτερος είναι λόγω της τιμής της ακτίνας του ΚΕ [26].

Εκτός από τα φαινόμενα κλίμακας, στις μικροκατεργασίες είναι αρκετά σημαντικά και φαινόμενα που σχετίζονται με την επιφάνεια του ΤΕ, τα αποκαλούμενα φαινόμενα επιφανείας, τα οποία έχουν μελετηθεί σε πολύ μικρότερο βαθμό απ' ότι τα φαινόμενα κλίμακας [42]. Υπάρχουν διάφορες ομοιότητες μεταξύ των δύο κατηγοριών φαινομένων, όπως η εξάρτησή τους από την κλίμακα μεγέθους και η επίδραση της μικροδομής σε αυτές [42].

Τα φαινόμενα επιφανείας διακρίνονται σε φυσικά, χημικά και φυσικοχημικά [42]. Τα φυσικά φαινόμενα επιφανείας αποτελούν ουσιαστικά εμπόδια, τα οποία αλλοιώνουν τη ροή του υλικού κατά τις κατεργασίες κοπής και μπορεί να προέρχονται από κάποια χημική αντίδραση ή επιβληθέντα περιορισμό. Οι περιορισμοί μπορεί να είναι απαραμόρφωτοι ή να επιδέχονται παραμόρφωση. Τα φυσικά φαινόμενα επιφανείας σχετίζονται με επικαλύψεις των επιφανειών ή παράγοντες που σχετίζονται με τα εργαλεία και τις συνθήκες που επιβάλλονται κατά την κατεργασία. Τα χημικά φαινόμενα επιφανείας προέρχονται από την επίδραση χημικών ουσιών σε χημικά ενεργά υλικά ΤΕ και οδηγούν σε πλήρη αλλαγή του μηχανισμού κοπής από μηχανικό σε χημικό, οπότε και η ίδια η μικροκατεργασία χαρακτηρίζεται πλέον ως μη-συμβατική. Τέλος, τα φυσικοχημικά φαινόμενα επιφανείας είναι ιδιαίτερα σημαντικά, διότι προέρχονται τόσο από φαινόμενα

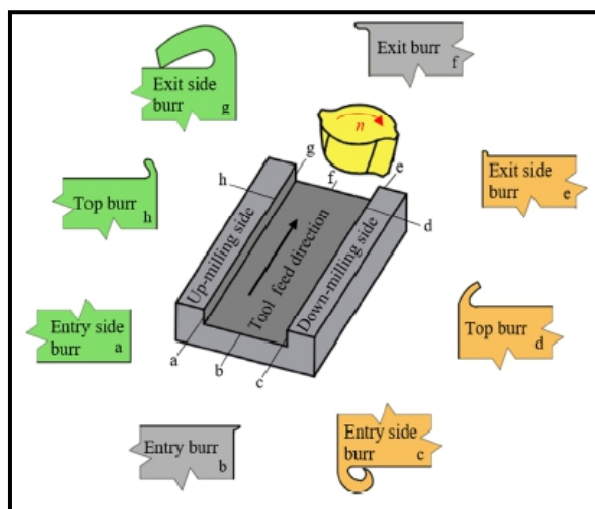
σχετικά από τη χημική δράση όσο και τη μηχανική, καθώς η πρώτη μπορεί να οδηγήσει σε αλλοίωση των μηχανικών ιδιοτήτων. Τα φαινόμενα αυτά σχετίζονται με τη δράση των υγρών κοπής, οξειδίων που αναπτύσσονται στην επιφάνεια, κ.α. Η επίδραση αυτών των φαινομένων αφορά τόσο τις δυνάμεις κατεργασίας και τη ροή του αποβλίττου, όσο και τους μηχανισμούς παραμόρφωσης και έχει αποδειχθεί ότι εξαρτάται από το μέγεθος κόκκου [42].

Η μικρο-κατεργασία ψαθυρών υλικών, όπως ύαλοι και κεραμικά, αποτελεί μια ακόμα πρόκληση. Στις κατεργασίες της μακροκλίμακας, τα σχετικά μεγάλα βάθη κοπής οδηγούν σε δημιουργία ρωγμών τόσο στην επιφάνεια όσο και κάτω από αυτή και επομένως διάφοροι ερευνητές μελέτησαν την κατεργασία ψαθυρών υλικών σε συνθήκες "όλκιμης κοπής" (ductile mode machining) [28]. Τα όλκιμα υλικά εμφανίζουν συνήθως συνεχή απόβλιττα σε μεγάλο εύρος ΠΑΑ χωρίς να παρατηρείται θραύση. Έχει παρατηρηθεί ότι, όταν η κατεργασία διεξάγεται με μια τιμή βάθους κοπής και κάτω σε σχέση με την ακτίνα της κοπτικής ακμής ή εάν η γωνία αποβλίττου είναι αρνητική, τα ψαθυρά υλικά κόβονται με παρόμοιο τρόπο με τα όλκιμα, παρουσιάζοντας καλή ποιότητα επιφανείας και απουσία ρωγμών. Επομένως, όταν ο όγκος του υλικού που δέχεται την παραμόρφωση είναι μικρός, τότε είναι δυνατόν να υπάρξει πλαστική συμπεριφορά, ακόμη και σε ψαθυρά υλικά και να αποφευχθεί η θραύση, καθώς η ενέργεια της πλαστικής παραμόρφωσης εξαρτάται από τον όγκο ενώ η ενέργεια θραύσης από την επιφάνεια [26].

Επίσης η αποφυγή των ρωγμών έχει αποδειχθεί ότι συμβαίνει όταν η διατμητική τάση στην περιοχή σχηματισμού του αποβλίττου είναι μεγαλύτερη της κρίσιμης τιμής για σχηματισμό αποβλίττου και ο παράγοντας έντασης τάσεων είναι μικρότερος από την δυσθραυστότητα του υλικού. Λόγω της εξαιρετικά μικρής τιμής του βάθους, ορισμένες φορές η κατεργασία διεξάγεται σε επίπεδο νανο-κατεργασίας [26]. Παρόλα αυτά, δεν είναι δυνατόν να επιτευχθεί αυτό το είδος κοπής σε όλα τα ψαθυρά υλικά [28]. Η κρίσιμη τιμή ΠΑΑ εξαρτάται από το υλικό του ΤΕ, αλλά και τα χαρακτηριστικά του ΚΕ [26]. Τεχνικές με τις οποίες επιτυγχάνεται η όλκιμη κοπή είναι η τórνευση με διαμάντι, το fly-cutting, ακόμα και το μικρο-φρεζάρισμα υπό προϋποθέσεις [26].

Η δημιουργία γρεζιού (bugr) είναι εμφανής και στη μικροκλίμακα, αλλά δεν μπορούν να εφαρμοστούν άμεσα οι τεχνικές εξάλειψής του ή ελέγχου του μεγέθους του, όπως εφαρμόζονται στη μακροκλίμακα, λόγω του πολύ μικρού μεγέθους του γρεζιού [17, 45]. Ανάλογα με τη θέση, τους όπως φαίνεται στο σχήμα 2.6, τα γρέζια κατηγοριοποιούνται ως γρέζια εισόδου, εξόδου, άνω και κάτω επιφάνειας, ενώ ανάλογα με τη μορφή τους, διακρίνονται σε κυρίως γρέζια, βελονοειδή γρέζια, γρέζια με μορφή πτερού και δευτερεύοντα γρέζια [26, 44]. Στη μικροκοπή υπάρχουν τρεις μηχανισμοί σχηματισμού γρεζιού, όπως η εγκάρσια παραμόρφωση, κατά την οποία το υλικό συμπιέζεται λόγω φαινομένων άρωσης π.χ. πάνω στις πλευρές ενός αυλακιού, η κάμψη του αποβλίττου, κατά την οποία το απόβλιττο δεν αποκόπτεται από το ΤΕ και η απόξεση της επιφάνειας από το απόβλιττο (tearing) [44, 45]. Ουσιαστικά το γρέζι δημιουργείται εάν το ΚΕ παραμορφώνει μεν πλαστικά το υλικό του ΤΕ, αλλά δεν το απομακρύνει. Το γρέζι μπορεί να εξαλειφθεί, είτε μετά την κατεργασία είτε κατά τη διάρκεια της κατεργασίας, μέσω κατάλληλης επιλογής ταχύτητας κοπής ή διαφορετικής στρατηγικής κοπής [44, 45]. Η ύπαρξη του γρεζιού δεν οδηγεί σε μαλάκωμα του υλικού του ΤΕ, αλλά επηρεάζει αισθητά την ποιότητα

επιφανείας και δεν επιτρέπει την εύκολη συνεργασία του παραγόμενου κομματιού με τα συνεργαζόμενα [44].



**Σχήμα 2.6.** Πιθανές θέσεις εμφάνισης γρεζιού [44].

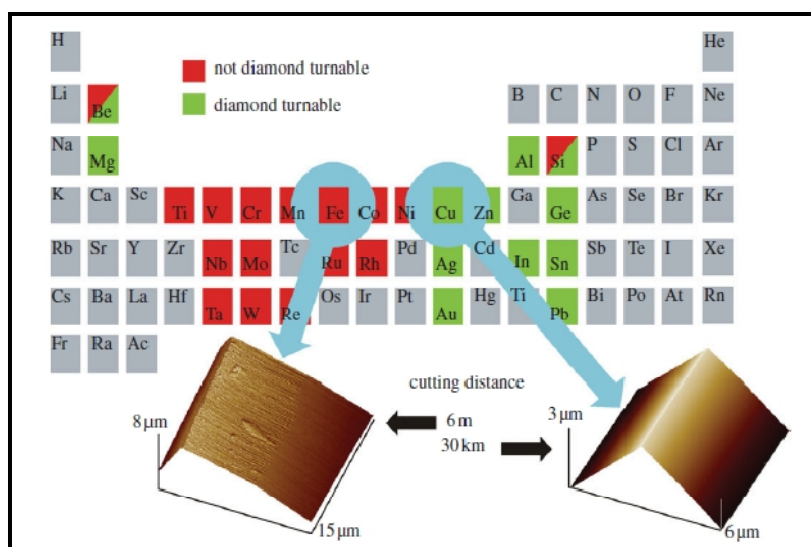
Έχει παρατηρηθεί ότι στις μικροκοπές, τα γρέζια είναι αναλογικά μεγαλύτερα απ' ό τι στις κοπές στη μακροκλίμακα, σχεδόν ιδίων διαστάσεων με τις διάφορες δομές που δημιουργούνται στη μικροκλίμακα και η απομάκρυνσή τους αποτελεί μια πρόκληση, ενώ μεγάλες τιμές λόγου ακτίνας κοπτικού προς ΠΑΑ οδηγούν σε παραγωγή περισσότερων γρεζιών [17, 26, 44]. Συνήθως, τα πιο όλκιμα υλικά εμφανίζουν μεγαλύτερο μέγεθος γρεζιού [26]. Επίσης, η ταχύτητα κοπής, καθώς και η στρατηγική κοπής, όπως π.χ. η επιλογή ομόρροπου ή αντίρροπου φρεζαρίσματος επηρεάζουν την δημιουργία γρεζιού [17].

Δύο είναι τα βασικά είδη εργαλειομηχανών που χρησιμοποιούνται στις μικροκατεργασίες κοπής, οι μηχανές λίαν υψηλής ακρίβειας ή κέντρα μικροκατεργασιών και επιτραπέζιες μικρο-εργαλειομηχανές που κατασκευάζονται από ερευνητές [26]. Οι εργαλειομηχανές στις μικροκατεργασίες απαιτείται να διαθέτουν αυξημένη στατική στιβαρότητα, ελάχιστα σφάλματα κίνησης, να διαθέτουν υψηλή δυναμική στιβαρότητα, ώστε μπορούν να δρουν ως αποσβεστήρες των ταλαντώσεων που προκύπτουν από τις κατεργασίες και να διαθέτουν μηχανισμούς εξουδετέρωσης της επίδρασης των θερμικών φορτίων π.χ. διαστολές στα διάφορα μέρη της εργαλειομηχανής [26, 28]. Επίσης είναι απαραίτητο να ελέγχεται η ζυγοστάθμιση της μηχανής και η ακρίβειά της σε επίπεδο κατώτερο της μικροκλίμακας [34]. Οι βασικές προϋποθέσεις για τις εργαλειομηχανές είναι να επιτυγχάνουν τουλάχιστον 50000 grm και να διαθέτουν στέρεες βάσεις, ώστε να υπάρχει μόνωση από θερμότητα και ταλαντώσεις [34]. Συνήθως με τις μεγαλύτερες εργαλειομηχανές επιτυγχάνεται παραγωγή αντικειμένων με απλούστερες γεωμετρίες και μεγάλη αξία όπως προϊόντα οπτικής [26]. Οι μικρότερες εργαλειομηχανές επηρεάζονται λιγότερο από τις περιβαλλοντικές συνθήκες, καταναλώνουν λιγότερη ενέργεια και παρέχουν καλύτερη διαστασιακή ακρίβεια [26].

Οι μικροκατεργασίες με ΚΕ από διαμάντι χρησιμοποιούνται ιδιαίτερα για την κατασκευή σύνθετων οπτικών επιφανειών εξολοκλήρου ή έστω σε κάποιο στάδιο της κατασκευής τους, οι οποίες είτε δε θα μπορούσαν να κατασκευαστούν καθόλου, είτε θα κατασκευάζονταν με

ιδιαίτερα μεγάλο κόστος [29]. Το διαμάντι προτιμάται ως υλικό στην περίπτωση κοπής σκληρών υλικών, όπως τα κεραμικά [26]. Στις μικροκατεργασίες με διαμάντι η κοπτική ακμή έχει ιδιαίτερα μικρή ακτίνα, της τάξης των 100 nm και έτσι μπορεί να επιτευχθεί τραχύτητα επιφανείας μεταξύ 1-10 nm, ανάλογα με τις συνθήκες κατεργασίας και το υλικό. Οι κατεργασίες αυτές έγιναν εφικτές μέσω εξελίξεων της τεχνολογίας κατά την πάροδο των τελευταίων 50 ετών [26, 29]. Παρότι αναφέρθηκε ότι η μικροκατεργασία με διαμάντι έχει αρκετά πλεονεκτήματα, αξίζει να αναφερθεί ότι υπάρχουν περιορισμοί στην ακρίβεια που είναι δυνατό να επιτευχθεί με αυτά τα εργαλεία και οφείλονται σε διάφορες αιτίες, όπως την εργαλειομηχανή, την κινηματική της κατεργασίας και τις ταλαντώσεις. Επίσης το κόστος του ΚΕ από διαμάντι είναι ιδιαίτερα μεγάλο, περίπου 20 φορές σε σχέση με ένα επενδεδυμένο μικροεργαλείο καρβιδίου [26].

Τέλος, η φθορά των ΚΕ από διαμάντι αποτελεί μια ιδιαίτερη περίπτωση, καθώς είχε παρατηρηθεί πειραματικά ότι ενώ κάποια υλικά ακόμα και μετά από αρκετό χρόνο κοπής δεν προκαλούσαν φθορά στο διαμάντι, σε άλλες περιπτώσεις η φθορά ήταν ακαριαία, κάτι που δε μπορούσε να εξηγηθεί από τις ιδιότητες των υλικών. Αργότερα, θεωρήθηκε ότι η σημασία της χημικής φύσης της φθοράς είναι μεγάλη στη περίπτωση του διαμαντιού και έτσι έγινε δυνατόν να εξηγηθεί η συμπεριφορά του. Ειδικότερα όμως για το σίδηρο, η αιτία που προτάθηκε είναι η ύπαρξη των μονήρων ηλεκτρονίων στη στιβάδα 3d του ατόμου του σιδήρου. Στο σχήμα 2.7 παρουσιάζονται τα διάφορα υλικά που χρησιμοποιούνται σε εφαρμογές μηχανικού και η ικανότητά τους να κατεργαστούν με διαμάντι [26, 29]. Γενικά, όσο περισσότερα είναι τα μονήρη ηλεκτρόνια της στιβάδας d, τόσο μεγαλύτερη είναι η φθορά λόγω των σύμπλοκων που δημιουργούνται μεταξύ άνθρακα και μετάλλου. Αξίζει να τονιστεί ότι το διαμάντι μπορεί να χρησιμοποιηθεί και ως υλικό επικάλυψης, μέσω της μεθόδου CVD. Η επικάλυψη διαμαντιού εμφανίζει παρόμοιες ιδιότητες με το φυσικό διαμάντι και παρόμοια απόδοση στην κοπή, αλλά επιπλέον είναι δυνατή η κοπή και των σιδηρούχων υλικών με εργαλεία με επικάλυψη διαμαντιού [26]. Με εργαλεία διαμαντιού είναι δυνατή η κατεργασία fly cutting για τη διάνοιξη αυλακιών, σχισμών ή ακόμα και πρισματικές δομές [26].



**Σχήμα 2.7.** Υλικά του περιοδικού πίνακα που μπορούν να κατεργαστούν με διαμάντι ή όχι [29].



#### **2.2.4 Μικροτόρνευση**

Η μικρο-τόρνευση παρουσιάζει αρκετές ομοιότητες με την τórνευση στη μακροκλίμακα [35]. Η μικρο-τόρνευση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την κατασκευή μικροεξαρτημάτων από διάφορα υλικά όπως χάλυβα, αλουμίνιο και κράματα χαλκού και εξαρτημάτων με μεγάλο λόγο διαστάσεων (aspect ratio), όπως μικρο-πείρους με διάμετρο μερικών δεκάδων μικρομέτρων και μήκος έως μερικά χιλιοστά [26, 28]. Η διεξαγωγή της κατεργασίας για την παραγωγή τέτοιων κομματιών, τα οποία είναι εύκολο να υποστούν θραύση κατά την κατεργασία τους ή να έχουν μικρή διαστατική ακρίβεια, απαιτεί τη χρήση μιας καλά ζυγοσταθμισμένης εργαλειομηχανής, κατάλληλης για συνθήκες κοπών λίαν υψηλής ακριβείας [26, 34]. Η κατεργασία διεξάγεται με χρήση ειδικά κατασκευασμένων ΚΕ και σε σχέση με τα μικροεργαλεία της διάτρησης και του φρεζαρίσματος, τα οποία είναι ευρέως διαθέσιμα, η κατασκευή εργαλείων για τη μικρο-τόρνευση δεν είχε την αντίστοιχη εξέλιξη, είτε διότι δόθηκε περισσότερη έμφαση στην κατασκευή εργαλείων για τις άλλες δύο κατεργασίες λόγω των περισσότερων εφαρμογών τους, είτε επειδή δεν χρειάζονται απαραίτητα μικρο-εργαλεία για τη διεξαγωγή της μικρο-τόρνευσης [26]. Σε αρκετές περιπτώσεις, τα μικρο-εργαλεία είναι βελτιστοποιημένα για συγκεκριμένες εφαρμογές και έχουν συγκεκριμένα σχήματα [26]. Συνήθως οι διάμετροι των μικρο-εργαλείων κυμαίνονται από 15-100  $\mu\text{m}$  και η ακτίνα της κοπτικής ακμής έως 40 nm [26]. Οι ταχύτητες περιστροφής στη μικρο-τόρνευση είναι της τάξης των 1000-10000 rpm σε εμπορικές μικρο-εργαλειομηχανές, πολύ μικρότερες από αυτές του μικρο-φρεζαρίσματος [26].

Όπως και στην περίπτωση άλλων ειδών μικροκατεργασιών, η ύπαρξη φαινομένων κλίμακας λόγω διαφόρων παραγόντων δημιουργεί δυσκολίες στην ομαλή διεξαγωγή της μικρο-τόρνευσης και οι συνιστώμενες συνθήκες δε μπορούν να προκύψουν με βάση τις αντίστοιχες συνθήκες της τórνευσης στη μακροκλίμακα [26, 28]. Το υλικό του ΚΕ είναι συνήθως υψηλής σκληρότητας, όπως το πολυκρυσταλλικό διαμάντι ή το καρβίδιο του βολφραμίου, ακόμα και ταχυχάλυβας και προτιμώνται συνήθως αρκετά μεγαλύτερες ταχύτητες περιστροφής απ' ό,τι στην τórνευση σε μακροκλίμακα [26, 28, 35]. Μια σημαντική ιδιότητα που πρέπει να έχει το εργαλείο της μικρο-τόρνευσης είναι η δυναμική δυσκαμψία, που ορίζεται ως ο λόγος της ασκούμενης δύναμης προς τη μετατόπιση. Η ύπαρξη αυτοδιεγειρόμενων ταλαντώσεων, κυρίως λόγω ακατάλληλης στιβαρότητας της μηχανής, αυξάνει την πιθανότητα θραύσης του ΚΕ [35]. Κατά τη μικρο-τόρνευση, συνήθως μπορούν να επιτευχθούν διάμετροι της τάξης των 100  $\mu\text{m}$ , με τραχύτητα επιφανείας μεταξύ 0.05-0.30  $\mu\text{m}$ , αν και έχουν επιτευχθεί πειραματικά διάμετροι, της τάξης λίγων  $\mu\text{m}$  [39].

Η επίδραση των δυνάμεων της κατεργασίας είναι αρκετά μεγαλύτερη στην ποιότητα των κατεργασμένων κομματιών, απ' ό,τι στη μακροκλίμακα και γι'αυτό απαιτείται ιδιαίτερη προσοχή. Τα βέλη κάμψης που μπορεί να λάβει το κομμάτι κατά την κατεργασία αποτελούν επίσης άλλο ένα πρόβλημα κατά τη μικρο-τόρνευση, με αποτέλεσμα να προτιμώνται κατάλληλες τεχνικές που μπορούν να περιορίσουν τα μεγάλα βέλη κάμψης όπως το step turning, που δημιουργεί επιφάνειες με σημαντική διαφορά διαμέτρων [28].

Οι εργαλειομηχανές που χρησιμοποιούνται για τη μικρο-τόρνευση κατασκευάζονται με παρόμοιο τρόπο με τις παραδοσιακές εργαλειομηχανές, αλλά δίνεται μεγάλη έμφαση στην ακρίβεια. Συνήθως ενσωματώνονται σε αυτές τις εργαλειομηχανές διατάξεις που

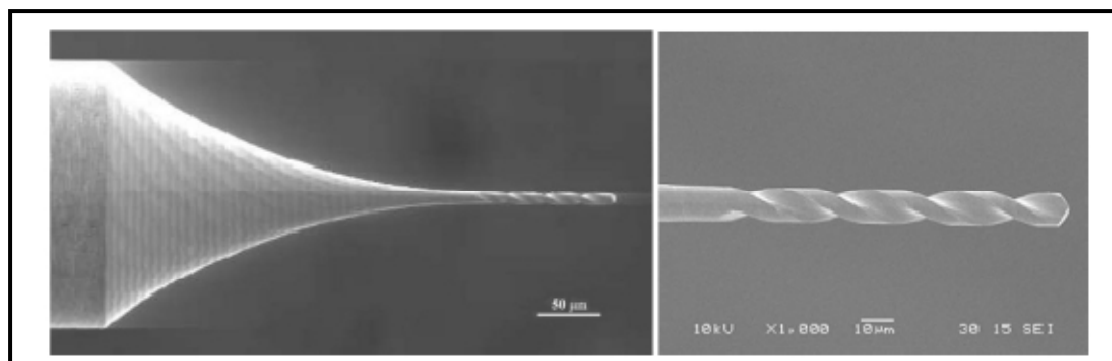
επιτρέπουν την καλύτερη επιτήρηση της κατεργασίας, όπως δυναμόμετρα ακριβείας για να ελέγχεται η δύναμη που ασκείται στο μικρο-ΚΕ ή ένα οπτικό μικροσκόπιο, ώστε να μπορεί ο χειριστής να παρακολουθεί την εξέλιξη της κατεργασίας [28]. Όπως και στην τórνευση στη μακροκλίμακα, η ταχύτητα κοπής, η ταχύτητα πρόωσης και το βάθος κοπής επηρεάζουν τις δυνάμεις της κατεργασίας, αλλά η ταχύτητα πρόωσης είναι η πιο σημαντική παράμετρος. Επίσης, η ταχύτητα πρόωσης επιδρά πολύ περισσότερο στην τραχύτητα, απ' ό,τι στην τórνευση στη μακροκλίμακα [35]. Οι ειδικές εργαλειομηχανές για μικρο-τórνευση, σε σχέση με τις συμβατικές μηχανές για λίαν υψηλής ακριβείας τórνευση είναι μικρότερου κόστους, εμφανίζουν καλύτερη δυναμική συμπεριφορά, έχουν καλύτερη ενεργειακή απόδοση, μικρότερα λειτουργικά κόστη και μεγαλύτερη ευελιξία [26]. Στις βιομηχανικού τύπου εργαλειομηχανές συγκαταλέγονται οι μηχανές Swiss type και οι μηχανές λίαν υψηλής ακριβείας μικρο-τórνευσης. Τέλος, υπάρχουν διάφορες μικρές εργαλειομηχανές κατασκευασμένες σε εργαστήρια [26].

Κατά τη μικρο-τórνευση, όπως και σε όλες τις μικροκατεργασίες κοπής εμφανίζονται ορισμένα φαινόμενα κλίμακας που οδηγούν τα ΤΕ να πλησιάζουν πιο εύκολα στο όριο της αντοχής τους. Οι δυνάμεις της κατεργασίας οδηγούν σε καμπτική (δύναμη άπωσης) και θλιπτική παραμόρφωση τα ΤΕ, όπως και σε λυγισμό (η δύναμη κοπής) και αυτά πρέπει να λαμβάνονται υπόψη κατά την εκλογή των τιμών των παραμέτρων της κατεργασίας.

### **2.2.5 Μικρο-διάτρηση**

Η μικρο-διάτρηση είναι ένας οικονομικός τρόπος για τη διάνοιξη μικροσκοπικών οπών σε διάφορα κομμάτια [28]. Συμβατικά, η μικρο-διάτρηση ορίζεται ως η κατεργασία μέσω της οποίας επιτυγχάνεται η διάνοιξη οπών διαστάσεων από 1  $\mu\text{m}$  έως 1 mm [46]. Παρόλα αυτά, δεν υπάρχουν κάποια κοινά αποδεκτά όρια, καθώς άλλοι ερευνητές θεωρούν ότι η μικρο-διάτρηση σχετίζεται με την διάνοιξη οπών μικρότερων από 500 $\mu\text{m}$  έως τα 30-50 $\mu\text{m}$  με μικρο-δράπανα [35, 46].

Με αυτή την κατεργασία είναι δυνατό να διανοιχθούν οπές σε διάφορα είδη υλικών, όπως μέταλλα, πολυμερή, κεραμικά και σύνθετα υλικά [28]. Μία από τις βασικές εφαρμογές της μικρο-διάτρησης είναι η διάνοιξη οπών σε ηλεκτρονικά μικρο-εξαρτήματα, όπως πλακέτες (PCB) οι οποίες χρησιμοποιούνται ολοένα και περισσότερο, λόγω της τάσης για κατασκευή προηγμένων ολοκληρωμένων κυκλωμάτων για κινητά τηλέφωνα και υπολογιστές [46]. Η μικρο-διάτρηση αρχικά δεν είχε μελετηθεί ιδιαίτερα, καθώς είναι δύσκολη η κατασκευή των μικρο-δραπάνων, όμως από τα τέλη της δεκαετίας του 1980, η χρήση των εργαλειομηχανών CNC οδήγησε στην ανάγκη να μελετηθεί η μικρο-διάτρηση [35, 46]. Σήμερα, οι ερευνητές ασχολούνται με τη βελτίωση της απόδοσης της μικρο-διάτρησης και διάφορες μελέτες έχουν διεξαχθεί αναφορικά με την γεωμετρία και την επικάλυψη του ΚΕ, με το σχηματισμό γρεζιού, τη μορφολογία του αποβλίπτου, την επίδραση του ψυκτικού υγρού, την ποιότητα των οπών και τις συνθήκες της κατεργασίας [28, 46]. Μέσω της μικρο-διάτρησης, είναι δυνατόν να παραχθούν πιο βαθιές οπές απ' ό,τι με άλλες κατεργασίες [46]. Παρότι συνήθως τα μικρότερα εμπορικά διαθέσιμα μικρο-δράπανα έχουν διάμετρο κοντά στα 50  $\mu\text{m}$  όπως φαίνεται στο σχήμα 2.8, πειραματικά η μικρότερη οπή που έχει παραχθεί είναι 6.7  $\mu\text{m}$  και παρήχθη με μικρο-δράπανο διαμέτρου 6  $\mu\text{m}$  [30, 35, 39], με την τραχύτητα να κυμαίνεται από 0.05-0.30  $\mu\text{m}$  [39].



**Σχήμα 2.8.** Μορφή μικρο-δραπάνου σε φωτογραφία από μικροσκόπιο SEM [46].

Η επίδραση της επικάλυψης του ΚΕ είναι ιδιαίτερα σημαντική κατά τη μικρο-διάτρηση για την αύξηση της διάρκειας ζωής του ΚΕ, όπως και ο τρόπος ψύξης. Όπως και στην περίπτωση της μικρο-τόρνευσης, τα κοπτικά εργαλεία από διαμάντι χρησιμοποιούνται και στη μικρο-διάτρηση για μη-σιδηρούχα υλικά, όπως κράματα χαλκού, αλουμίνιο, τιτάνιο και νικέλιο καθώς υπάρχει χημική συνάφεια μεταξύ άνθρακα και σιδήρου [28]. Η επιλογή της κατάλληλης ταχύτητας κοπής είναι σημαντική και εξαρτάται από την σκληρότητα του υλικού [28]. Οι ταχύτητες περιστροφής μπορεί να φτάνουν τις 100000 RPM σε ορισμένες περιπτώσεις, ώστε να μειωθούν οι δυνάμεις [35]. Λόγω υψηλών δυνάμεων, είναι δυνατόν να υποστεί θραύση το ΚΕ και μπορούν να συμβούν ταλαντώσεις λόγω προχωρημένης φθοράς των ακμών του δράπανου. Ένας τρόπος για να προληφθεί η πρόωρη θραύση του ΚΕ, η οποία στη μικρο-διάτρηση μπορεί να συμβεί πριν ξεπεραστεί το όριο της φθοράς είναι η μελέτη του σήματος των ακουστικών συχνοτήτων [35, 46]. Η εξάλειψη των ταλαντώσεων μπορεί επίσης να επιτευχθεί μέσω διαφορετικής τεχνικής διάτρησης, δηλαδή με το δράπανο να κόβει και στη συνέχεια να αποσύρεται, πριν διεισδύσει εκ νέου στο ΤΕ [35]. Κατά τη μικρο-διάτρηση έχουν παρατηρηθεί φαινόμενα κλίμακας που σχετίζονται με την άρωση, τη μικροδομή και τη ψευδοκόψη [28]. Ειδικότερα όσον αφορά τις ταλαντώσεις στη μικρο-διάτρηση, αυτές αφορούν τόσο καμπτικές όσο και ταλαντώσεις λόγω στρέψης οι οποίες δεν εμφανίζονται στην τórνευση ή το φρεζάρισμα [26].

Στη μικρο-διάτρηση μπορούν να χρησιμοποιηθούν διαφορετικά είδη δραπάνων για διαφορετικές εφαρμογές. Στις περισσότερες περιπτώσεις χρησιμοποιείται το ελικοειδές δράπανο, το οποίο όμως στη μικρο-διάτρηση παρουσιάζει απρόβλεπτη συμπεριφορά, καθώς μπορεί να υποστεί θραύση χωρίς να έχει φθαρεί ιδιαίτερα λόγω των σχετικά υψηλών φορτίων που δέχεται. Αυτό σημαίνει ότι η επιλογή των κατάλληλων παραμέτρων είναι ιδιαίτερα κρίσιμη στη μικρο-διάτρηση [46]. Ανάλογα με τη διάμετρό τους τα μικρο-τρύπανια χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες και ο σχεδιασμός της γεωμετρίας τους εξαρτάται άμεσα από τις διαστάσεις τους, προκειμένου να αποφεύγονται ανεπιθύμητα φαινόμενα, όπως η αύξηση της θερμοκρασίας λόγω τριβής, κάτι που οδηγεί τελικά σε χαμηλότερη ποιότητα οπών και να είναι δυνατόν να απομακρύνονται τα απόβλητα [46]. Επίσης, η γωνία κορυφής είναι καθοριστική για την ομαλή διεξαγωγή της μικρο-διάτρησης, ιδίως στα πρώτα στάδια, γιατί επηρεάζει ιδιαίτερα τις δυνάμεις, το μέγεθος του αποβλίττου και τη φθορά του ΚΕ [46]. Μεγαλύτερες γωνίες κορυφής πρέπει να χρησιμοποιούνται σε σκληρότερα υλικά. Εκτός από τη γεωμετρία του μικρο-δραπάνου, σημαντικό ρόλο παίζει και το μήκος

του, καθώς μικρότερο μήκος δραπάνου σημαίνει μεγαλύτερη στιβαρότητα, πιο ευσταθή κατεργασία και μεγαλύτερη διάρκεια ζωής του κοπτικού [46].

Οι συνθήκες που επικρατούν κατά τη μικρο-διάτρηση οδηγούν σε υψηλά μηχανικά και θερμικά φορτία στο δράπανο, με αποτέλεσμα να οδηγείται στη θραύση λόγω κόπωσης. Το κατάλληλο υλικό δραπάνου εξαρτάται από διάφορους παράγοντες, όπως επαρκή σκληρότητα, εξαιρετική αντοχή σε φθορά, επαρκή στιβαρότητα και δυσθραυστότητα. Όπως και στα κοπτικά εργαλεία που χρησιμοποιούνται σε άλλες μικροκατεργασίες, οι επιλογές είναι περιορισμένες, λόγω των αυστηρών προδιαγραφών και επομένως τα συνήθη υλικά δραπάνων είναι το καρβίδιο του βολφραμίου (WC), cermet, το πολυκρυσταλλικό διαμάντι αλλά και ο ταχυχάλυβας λόγω της χαμηλότερης τιμής του [28]. Μειονέκτημα των κεραμικών κοπτικών εργαλείων είναι η ψαθυρότητά τους, η οποία στην περίπτωση του WC μπορεί να αντιμετωπιστεί χρησιμοποιώντας νανοκρυσταλλικό WC ή πυρήνα από άλλο υλικό και επίστρωση από WC. Όσον αφορά τον ταχυχάλυβα, παρότι είναι υποδεέστερος των άλλων υλικών, ένα είδος ταχυχάλυβα που παράγεται με κωνιομεταλλουργία και περιέχει κράμα κοβαλτίου είναι δυνατόν να εμφανίζει όλκιμη συμπεριφορά, με ορισμένα χαρακτηριστικά που έχουν τα καρβίδια [46].

### **2.2.6 Μικρο-φρεζάρισμα**

Το μικρο-φρεζάρισμα εμφανίζει αρκετές ομοιότητες με το φρεζάρισμα στη μακροκλίμακα και λόγω των πλεονεκτημάτων που έχει, θεωρείται ως μία από τις πιο ανερχόμενες μικροκατεργασίες κοπής τα τελευταία χρόνια σε βιομηχανικό επίπεδο. Μέσω του μικρο-φρεζαρίσματος μπορούν να κατεργαστούν διάφορα υλικά, τόσο υψηλής όσο και χαμηλής αντοχής, ανεξάρτητα από τις θερμικές και ηλεκτρικές τους ιδιότητες [35]. Γενικά, το μικρο-φρεζάρισμα είναι παρόμοιο με το παραδοσιακό φρεζάρισμα από την άποψη της κινηματικής της κατεργασίας, αλλά διαφέρει σε ορισμένα στοιχεία όπως [44]: α) το μέγεθος του ΚΕ, το οποίο είναι προφανώς αρκετά μικρότερο, αλλά και το λόγο μήκους προς διάμετρο του ΚΕ που είναι αρκετά μεγάλος, β) το ΠΑΑ, το οποίο είναι συγκρίσιμο με την ακτίνα της κοπτικής ακμής ή το μέγεθος κόκκου, γ) το μέγεθος του γρεζιού, σε σχέση με το μέγεθος των δομών που δημιουργούνται, δ) την επίδραση της στιβαρότητας και των δυναμικών χαρακτηριστικών της εργαλειομηχανής και ε) την ανάγκη επιτήρησης της κατεργασίας, προκειμένου να αποφευχθεί γρήγορη φθορά του ΚΕ. Επίσης είναι γεγονός ότι κατά το μικρο-φρεζάρισμα χρησιμοποιούνται πολύ μεγαλύτερες ταχύτητες περιστροφής, τουλάχιστον της τάξης των 100000 RPM [35, 44], γιατί όσο η διάμετρος του εργαλείου γίνεται μικρότερη, η ταχύτητα περιστροφής πρέπει να γίνει αρκετά μεγαλύτερη, ώστε να επιτευχθεί η απαιτούμενη ταχύτητα κοπής και η παραγωγικότητα [41].

Επίσης και οι άλλες παράμετροι της κατεργασίας λαμβάνουν αντίστοιχα μικρότερες τιμές, όπως πρόωση ανά δόντι της τάξης του 1 $\mu\text{m}$ /δόντι και βάθη κοπής δεκάδες  $\mu\text{m}$  [40]. Η πρόωση ανά δόντι και ανά ακτίνα του ΚΕ, είναι μεγαλύτερη στο μικρο-φρεζάρισμα, καθώς και ο λόγος της απόκλισης λόγω κακής ευθυγράμμισης του εργαλείου προς τη διάμετρο του εργαλείου και αποτελούν αιτίες της γρήγορης φθοράς του ΚΕ [41]. Είναι απαραίτητο να ληφθούν υπόψη αυτές οι διαφορές, προκειμένου να προβλεφθούν οι μηχανισμοί κοπής στο μικρο-φρεζάρισμα [41]. Στο μικρο-φρεζάρισμα αυλακίων, το πλάτος που είναι δυνατόν να επιτευχθεί είναι συνήθως έως 50  $\mu\text{m}$ , αλλά έχουν αναφερθεί και αυλάκια με πλάτος

λίγων  $\mu\text{m}$ , με την ελάχιστη ακρίβεια να είναι της τάξης των 10 nm [39]. Στο μικρο-φρεζάρισμα, λόγω του μικρού ΠΑΑ, που είναι συγκρίσιμο με την ακτίνα καμπυλότητας της κοπτικής ακμής υπάρχει η περίπτωση να μην σχηματιστεί απόβλιττο, ενώ παράλληλα εμφανίζονται φαινόμενα κλίμακας και οι δυνάμεις άρωσης γίνονται πιο σημαντικές. Άλλα φαινόμενα που καθιστούν το μικρο-φρεζάρισμα αρκετά διαφορετικό από το φρεζάρισμα στην μακροκλίμακα σχετίζονται με τις ιδιότητες των υλικών, όπως η επίδραση του μεγέθους κόκκου [40]. Γενικά, η κατεργασιμότητα των υλικών στη μικροκλίμακα μέσω μικρο-φρεζαρίσματος μπορεί να διαφέρει από αυτή που έχει παρατηρηθεί στη μακροκλίμακα [26].

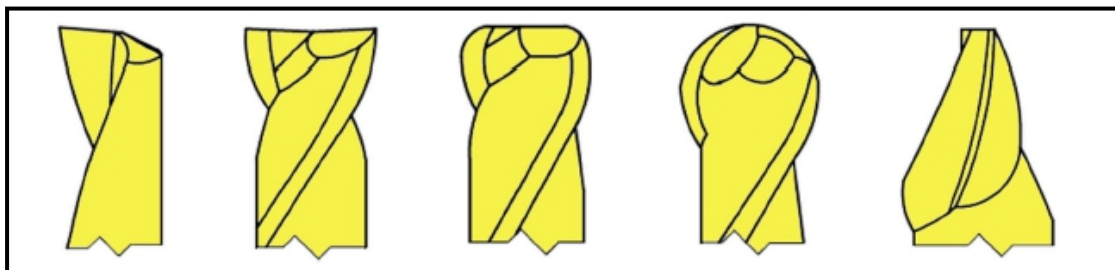
Η απόδοση του μικρο-φρεζαρίσματος χαρακτηρίζεται από ένα συνδυασμό διαφόρων παραγόντων συμπεριλαμβανόμενης και της διαστατικής ακρίβειας, ποιότητας επιφανείας, φθοράς εργαλείου, δημιουργίας αποβλίττου, σχηματισμού γρεζιού, κοπτικών δυνάμεων και ισχύος κτλ. Όλες οι γνωστές παράμετροι της κατεργασίας παίζουν το ρόλο τους και απαιτείται η βελτιστοποίησή τους, προκειμένου να επιτευχθεί το επιθυμητό αποτέλεσμα, αλλά στις μικροκατεργασίες επιβάλλονται και ορισμένοι επιπλέον περιορισμοί. Για παράδειγμα, η ταχύτητα κοπής υπόκειται σε περιορισμούς λόγω των διαθέσιμων ταχυτήτων κοπής των εργαλειομηχανών. Η πορεία του ΚΕ πρέπει να προγραμματιστεί με έμφαση στις πιο μικρές ανοχές για την επίτευξη μεγαλύτερης ακρίβειας, αλλά πρέπει να αποφεύγονται και τα υπερβολικά φορτία στο ΚΕ [28]. Επίσης η στρατηγική φρεζαρίσματος παίζει ιδιαίτερα σημαντικό ρόλο, όπως και η χρήση κοπτικού υγρού [26].

Όπως προαναφέρθηκε, τα φαινόμενα κλίμακας εμφανίζονται και στο μικρο-φρεζάρισμα. Καθώς η κοπή στο μικρο-φρεζάρισμα είναι διακοπτόμενη, το πάχος αποβλίττου κάθε φορά κυμαίνεται από μηδέν έως την τιμή της πρόωσης ανά δόντι. Γι'αυτό το λόγο, πάντα εμφανίζονται δυνάμεις άρωσης ή λόγω απλής επαφής καθώς, αναπόφευκτα κάποιες στιγμές η τιμή του ΠΑΑ είναι μικρότερη της ελάχιστης [28, 44]. Τις στιγμές που το ακτινικό βάθος κοπής είναι μικρότερο από το ελάχιστο ΠΑΑ, η άρωση είναι σημαντική, ενώ όταν είναι μεγαλύτερο του, υπερσχύει η διάτμηση και παράγεται απόβλιττο. Έτσι, σε περιπτώσεις όπου η διάμετρος του ΚΕ είναι μικρότερη του πλάτους του κομματιού, παρατηρούνται περιοχές άρωσης στην αρχή και στο τέλος του τόξου επαφής του ΚΕ με το ΤΕ, ενώ στις υπόλοιπες περιοχές δημιουργείται κανονικά απόβλιττο. Όταν η τιμή της πρόωσης ανά δόντι είναι μικρότερη από το ελάχιστο ΠΑΑ, τότε είναι δυνατόν σε συνεχόμενες περιστροφές του ΚΕ να μη δημιουργηθεί καθόλου απόβλιττο, λόγω της άρωσης και ελαστικής επαναφοράς του υλικού του ΤΕ [26, 44]. Επίσης, στοιχεία της μικροδομής, όπως το μέγεθος κόκκου και η ύπαρξη δευτερευουσών φάσεων, οδηγούν σε διαφοροποίηση των μηχανισμών κοπής, με αποτέλεσμα να παρατηρούνται σημαντικές αλλαγές στην ποιότητα επιφανείας [26].

Ένα άλλο πρόβλημα κατά το μικρο-φρεζάρισμα είναι η κακή ευθυγράμμιση ή εκκεντρότητα μεταξύ του άξονα περιστροφής της ατράκτου και του άξονα συμμετρίας του ΚΕ, που ονομάζεται στην αγγλόφωνη ορολογία runout. Παρότι μικρές τιμές runout είναι αμελητέες για το συμβατικό φρεζάρισμα, στο μικρο-φρεζάρισμα μπορεί να οδηγήσουν σε αστάθεια και μεγάλες διακυμάνσεις των δυνάμεων. Επιπλέον, καθώς λόγω της εκκεντρότητας κάποιες κοπτικές ακμές είναι δυνατόν να μην κόβουν, προκαλείται ανομοιόμορφη φθορά

[26]. Προκειμένου να αντιμετωπιστεί αυτό το φαινόμενο, είναι αναγκαίο να υπάρχουν εξαιρετικά ακριβείς συναρμογές μεταξύ άξονα και συγκρατητή του ΚΕ [26].

Το μικρο-φρεζάρισμα χρησιμοποιείται για την κατασκευή σύνθετων μικροαντικειμένων και δομών, όπως μικροκαλούπια, μικροσκοπικοί οδοντωτοί τροχούς, μικροπτέρυγες και μικροεναλλάκτες θερμότητας [28]. Συνήθως προτιμώνται εργαλειομηχανές με πολλούς άξονες, για να υπάρχει η δυνατότητα παραγωγής τόσο σύνθετων μικροαντικειμένων [35]. Η κατεργασία αυτή ανταγωνίζεται άλλες όπως η EDM, λόγω του μεγαλύτερου ρυθμού αποβολής υλικού, ο οποίος μπορεί να φτάσει και έως πέντε φορές πάνω από αυτόν των μη-συμβατικών κατεργασιών [35], της μειωμένης επίδρασης της θερμότητας και του μικρότερου χρόνου κατεργασίας [28]. Τα εργαλεία του μικρο-φρεζαρίσματος μπορεί να είναι κονδύλια με ένα, δύο ή περισσότερα πτερύγια και επίπεδη ή ημισφαιρική απόληξη, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.9, και συνήθως κατασκευάζονται από ιδιαίτερα σκληρά υλικά, όπως καρβίδιο του βολφραμίου και διαμάντι [28, 44]. Το σώμα του εργαλείου είναι συμπαγές, με διάμετρο αρκετά μεγαλύτερη από τη διάμετρο της απόληξης που περιλαμβάνει την επιθυμητή γεωμετρία [41]. Συνήθεις διάμετροι των ΚΕ (στο κάτω μέρος) είναι από 25μm έως 0.1 mm, με ορισμένα πειραματικά εργαλεία να φτάνουν σε ακόμα μικρότερες διαστάσεις [28, 35], παρότι άλλοι ερευνητές συμπεριλαμβάνουν στο μικρο-φρεζάρισμα και τα εργαλεία με διάμετρο 100-500 μm και ακτίνα κοπτικής ακμής από 1-10μm, ενώ η πιο συνηθισμένη γωνία έλικας είναι 30° [40]. Τα ΚΕ κατασκευάζονται με ειδικές τεχνικές συνήθως μέσω EDM, laser ή δέσμης ιόντων όμως για ακόμα μικρότερα ΚΕ απαιτείται περαιτέρω εξέλιξη αυτών των κατεργασιών [35].



**Σχήμα 2.9.** Διάφορα είδη κονδυλιών μικρο-φρεζαρίσματος [44].

Πιο συγκεκριμένα, τα καλύτερα υλικά ΚΕ πρέπει να έχουν υψηλή σκληρότητα, επαρκή δυσθραυστότητα και χημική ευστάθεια σε υψηλές θερμοκρασίες, αν και κανένα υλικό δεν διαθέτει όλα τα παραπάνω χαρακτηριστικά μαζί σε μεγάλο βαθμό. Τα πιο συνηθισμένα υλικά ΚΕ για μικρο-φρεζάρισμα είναι καρβίδια, κεραμικά, κυβικό βοριοιτρίδιο, διαμάντι, ακόμα και ταχυάλυβας [28]. Το πιο ευρέως χρησιμοποιούμενο υλικό είναι λεπτόκοκκο καρβίδιο του βολφραμίου με δεσμούς κοβαλτίου, λόγω του χαμηλού κόστους, υψηλής σκληρότητας, μεγάλης ανοχής και ικανοποιητικής αντίστασης σε φθορά [26]. Το ποσοστό του χρωμίου επηρεάζει τις ιδιότητες του ΚΕ, καθώς μικρότερη ποσότητα κοβαλτίου οδηγεί σε μεγαλύτερη σκληρότητα και ψαθυρότητα των υλικών.

Οι επικαλύψεις βοηθούν στην καλύτερη απόδοση του ΚΕ και αυξάνουν τη διάρκεια της ζωής του. Στο μικρο-φρεζάρισμα χρησιμοποιούνται συχνά επικαλύψεις στα ΚΕ, για να είναι εφικτή η κατεργασία των δυσκατέργαστων υλικών [35]. Όταν χρησιμοποιούνται εργαλεία με επικάλυψη, οι απαιτήσεις περιλαμβάνουν όχι μόνο την υψηλή σκληρότητα και

αντίσταση σε φθορά και χημικούς παράγοντες, αλλά και την κατάλληλη μικροδομή, ώστε να δημιουργούν επιφάνειες με καλή ποιότητα και να μην οδηγούν σε αυξημένη τριβή [40]. Τα πιο συνηθισμένα υλικά επικαλύψεων βασίζονται στο τιτάνιο, αλλά τα τελευταία χρόνια το ενδιαφέρον για επικαλύψεις από διαμάντι αυξάνεται [26].

Τα ΚΕ του μικρο-φρεζαρίσματος αντιμετωπίζουν το πρόβλημα της πρόωρης φθοράς, λόγω των εξαιρετικά υψηλών ταχυτήτων περιστροφής που χρησιμοποιούνται κατά την κατεργασία, προκειμένου να αυξηθεί ο ρυθμός αποβολής υλικού, κάτι που τα καθιστά ακατάλληλα για χρήση [35]. Εκτός των υπερβολικών φορτίων, η προσκόλληση του αποβλίττου στα πτερύγια του ΚΕ είναι άλλη μια αιτία πρόωρης θραύσης του ΚΕ, που τελικά οδηγεί σε υψηλότερες θερμοκρασίες και τάσεις στις ακμές του ΚΕ [26].

Το φαινόμενο των αυτοδιεγειρούμενων ταλαντώσεων (chattering) είναι ιδιαίτερα εμφανές στο μικρο-φρεζάρισμα και επηρεάζει σημαντικά την ποιότητα επιφανείας, καθώς και τη διάρκεια ζωής του ΚΕ [28, 44]. Πιο συγκεκριμένα, κατά το μικρο-φρεζάρισμα, λόγω των μεγαλύτερων απαιτήσεων είναι απαραίτητο να ελέγχονται κατάλληλα οι δυνάμεις και η ακρίβεια. Οι δυνάμεις πρέπει να μην οδηγούν σε αυξημένη πιθανότητα θραύσης και η επιλογή της ταχύτητας κοπής πρέπει να είναι τέτοια, ώστε να μειώνονται οι δυνάμεις και να αποφεύγονται οι ταλαντώσεις και τα μεγάλα βέλη κάμψης στο εργαλείο λόγω της μικρής διαμέτρου του και ανεπαρκούς δυσκαμψίας του, προκειμένου να διεξάγεται ομαλά η κατεργασία [44, 45]. Πιο συγκεκριμένα, στο μικρο-φρεζάρισμα οι ταλαντώσεις προκαλούνται από το ίδιο το κοπτικό και όχι λόγω της δύναμης αλληλεπίδρασης με το ΤΕ, διότι είναι αρκετά μικρή. Όσον αφορά τα βέλη κάμψης, αυτά αποτελούν ένα συνηθισμένο πρόβλημα κατά το μικρο-φρεζάρισμα, λόγω του μικρού μεγέθους του εργαλείου και σχετίζονται με τη στιβαρότητά του [35, 40]. Με κατάλληλη μελέτη των συνθηκών της κατεργασίας μπορεί να αποφευχθούν τα μεγάλα βέλη κάμψης, για παράδειγμα με αύξηση της ταχύτητας περιστροφής. Για παράδειγμα, η ευστάθεια της κατεργασίας μπορεί να βελτιωθεί, λόγω του φαινομένου άρωσης ή με αύξηση της επιφάνειας επαφής μεταξύ της επιφάνειας ελευθερίας του ΚΕ και του αποβλίττου [44]. Τέλος, η αντιμετώπιση του γρεζιού κατά το μικρο-φρεζάρισμα μπορεί να επιτευχθεί μέσω επιλογής κατάλληλου ΚΕ, στρατηγικής ψύξης, παραμέτρων κατεργασίας, στρατηγικής κοπής κ.α. [26].

Οι εργαλειομηχανές για μικρο-φρεζάρισμα πρέπει να έχουν υψηλή στατική και δυναμική στιβαρότητα (απόσβεση), θερμική ευστάθεια και ακρίβεια κίνησης. Όπως έχει προαναφερθεί, απαιτείται επίσης να επιτυγχάνονται ιδιαίτερα υψηλές ταχύτητες περιστροφής, ώστε να μεγιστοποιείται ο ρυθμός αποβολής υλικού. Όπως και στις άλλες μικρο-κατεργασίες κοπής, διάφορα είδη εργαλειομηχανών συναντώνται, τόσο εμπορικά όπως οι εργαλειομηχανές λίαν υψηλής ακριβείας όσο και σε επίπεδο εργαστηρίου, όπως οι επιτραπέζιες μικρο-μηχανές [26].

### **2.2.7 Τόρνευση με διαμάντι μίας κοπτικής ακμής**

Η κοπή με διαμάντι είναι μια κατεργασία που έχει χρησιμοποιηθεί για αιώνες σε εφαρμογές κατασκευής επιφανειών με υψηλή ακρίβεια [26]. Η τόρνευση με διαμάντι μίας κοπτικής ακμής (single point diamond turning, SPDT) είναι μία από τις πιο εξελιγμένες μικρο-κατεργασίες ακριβείας, στην οποία χρησιμοποιείται ένα ΚΕ από εξαιρετικά σκληρό,

υψηλής καθαρότητας διαμάντι σε εργαλειομηχανές υψηλής ακριβείας. Αυτές οι εργαλειομηχανές διαθέτουν ακριβείς μηχανισμούς κίνησης για ομαλή λειτουργία, εξαιρετικά στέρεες εδράσεις και έδρανα με στρώση υγρού, ώστε να ελέγχεται η σχετική κίνηση εργαλείου και TE με ακρίβεια που αγγίζει το επίπεδο των νανομέτρων [26]. Επιπλέον με την πρόοδο της τεχνολογίας, ενσωματώθηκαν στις εργαλειομηχανές υψηλής ακριβείας ενεργά συστήματα θερμικής σταθεροποίησης, συμβολόμετρα laser για έλεγχο της κίνησης της μηχανής και συστήματα απομόνωσης από ταλαντώσεις. Με αυτά τα χαρακτηριστικά, η ακρίβεια των μηχανών αυτών βρίσκεται στο εύρος 50-1000 nm, για εξαρτήματα που φτάνουν έως το 1m [26].

Η ικανότητα κατεργασίας των διαμαντιών, φυσικών ή συνθετικών για την κατασκευή ΚΕ με κοπτικές ακμές που έχουν ακτίνα καμπυλότητας στην νανοκλίμακα, καθώς και η κατανόηση της συμπεριφοράς του διαμαντιού, οδήγησε στην χρήση του για κοπή ιδιαίτερα σκληρών και ψαθυρών υλικών, τα οποία είναι δυνατόν να κατεργαστούν σαν όλκιμα επιτυγχάνοντας υψηλή ποιότητα επιφανείας [27]. Η κατεργασία SPDT είναι κατάλληλη για την κατεργασία οπτικών επιφανειών και εκτός των άλλων, μαλακών υλικών, όπως χαλκό και αλουμίνιο που είναι δύσκολο να κατεργαστούν με άλλο τρόπο [26]. Όπως προαναφέρθηκε σε προηγούμενη υποενότητα, δεν είναι δυνατό να κατεργαστούν όλα τα υλικά μέσω ΚΕ από διαμάντι, γιατί η χημική συνάφεια μεταξύ των υλικών ΚΕ και TE οδηγεί σε γρήγορη φθορά του ΚΕ. Προκύπτει ότι, λόγω της ηλεκτρονιακής τους δομής, τα μαλακά μέταλλα είναι γενικά κατεργάσιμα με διαμάντι, ενώ τα σιδηρούχα υλικά, το τιτάνιο, το χρώμιο και το καθαρό νικέλιο όχι [26]. Εκτός σπάνιων εξαιρέσεων, ιδίως τα υλικά με πολλά μονήρη ηλεκτρόνια στη στιβάδα d δεν είναι κατεργάσιμα, ενώ αυτά με ένα όπως το δημήτριο και ο λευκόχρυσος, υπό προϋποθέσεις μπορεί να είναι [26]. Μέσω της κατεργασίας SPDT είναι δυνατό να κατασκευαστούν διάφορες μικρο-δομές με εφαρμογές κυρίως στην οπτική, αλλά και στην αυτοκινητοβιομηχανία, βιοϊατρική και ενέργεια [26].

### **2.2.8 Μη-συμβατικές μικροκατεργασίες αποβολής υλικού**

Εκτός από τις συμβατικές κατεργασίες αποβολής υλικού που προαναφέρθηκαν, ορισμένες μη-συμβατικές μικροκατεργασίες αποβολής υλικού είναι αρκετά διαδεδομένες. Στην παρούσα υποενότητα, θα γίνει σύντομη αναφορά στη μικρο-ηλεκτροδιάβρωση (micro EDM), στη μικροκατεργασία με χρήση laser, στη μικρο-ηλεκτροχημική κοπή και στην κοπή με εστιασμένη δέσμη ιόντων.

#### **2.2.8.1 Μικρο-ηλεκτροδιάβρωση (micro-EDM)**

Η κατεργασία μικρο-EDM είναι μια μέθοδος κατάλληλη για την κατασκευή σύνθετων μορφών και χαρακτηριστικών με μεγάλο λόγο διαστάσεων, λόγω των αμελητέων δυνάμεων που ασκούνται στο τεμάχιο και της καλής επαναληψιμότητας [28, 39]. Διάφορα υλικά όπως χάλυβες, αλλά και ηλεκτρικά αγώγιμα κεραμικά μπορούν να κατεργαστούν μέσω της μικρο-EDM [39]. Διακρίνονται πέντε βασικές παραλλαγές της μικρο-EDM: η EDM βύθισης, η EDM σύρματος, στην οποία χρησιμοποιείται σύρμα διαμέτρου έως και 20 μm για την κατεργασία υλικών με καλή ηλεκτρική αγωγιμότητα, η EDM για μικρο-διάτρηση, στην οποία χρησιμοποιούνται συνήθως ηλεκτρόδια με διάμετρο μικρότερη των 100 μm, η EDM για μικρο-φρεζάρισμα και η EDM για μικρο-λείανση [28, 39]. Μέσω μικρο-EDM, μπορούν να



κατασκευαστούν καλούπια για οπτικές εφαρμογές [28]. Παρότι ο μηχανισμός αποβολής υλικού είναι παρόμοιος με αυτό της EDM στη μακροκλίμακα, υπάρχουν περισσότεροι περιορισμοί στο χειρισμό των ηλεκτροδίων και την προετοιμασία της κατεργασίας [39]. Στη μικρο-EDM, η φθορά του ηλεκτροδίου αποτελεί έντονο πρόβλημα με άμεσες συνέπειες στην ποιότητα επιφανείας των παραγόμενων μικρο-εξαρτημάτων [39]. Το πρόβλημα της φθοράς του ηλεκτροδίου μπορεί να αντιμετωπιστεί με διάφορους τρόπους, όπως η χρήση εξειδικευμένων υλικών ή τροποποίηση της τροχιάς που ακολουθείται κατά την κατεργασία [39].

#### 2.2.8.2 Μικροκατεργασία με χρήση laser

Η μικροκατεργασία με χρήση laser είναι μια ευρέως διαδεδομένη μέθοδος για διάφορες εφαρμογές όπως διάνοιξη οπών, αυλακιών και άλλων διαμορφώσεων, καθώς και για μορφοποίηση επιφανειών με συγκεκριμένα μοτίβα [39]. Η αποβολή υλικού επιτυγχάνεται μέσω της τήξης και εξάτμισης και μπορεί να επιτευχθεί υψηλή ακρίβεια με περιορισμένη θερμική επιβάρυνση, ενώ είναι δυνατόν να κατεργαστούν σχεδόν όλα τα είδη υλικών. Πιο συγκεκριμένα, η μικρο-διάτρηση με laser έχει αποδειχθεί ότι είναι μια οικονομική μέθοδος για τη διάνοιξη μικρο-οπών σε μικρή απόσταση μεταξύ τους. Η διάσταση της οπής εξαρτάται από τη διάμετρο της δέσμης του laser, η οποία κυμαίνεται από μερικά μm έως δεκάδες μm. Προκειμένου να παράγονται οπές καλύτερης ποιότητας, είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθεί υποβοήθηση και από ταλαντώσεις. Το φρεζάρισμα με laser έχει περισσότερες δυνατότητες από το συμβατικό φρεζάρισμα, καθώς προσφέρει μεγαλύτερη ευελιξία στην εναλλαγή μεταξύ των στρατηγικών κοπής και ενδείκνυται για την κατασκευή πλήρως 3D κατασκευών. Σε αντίθεση με τις συμβατικές μικροκοπές, δεν υπάρχει το πρόβλημα της υπερβολικής φθοράς του κοπτικού εργαλείου και μπορεί να γίνει εύκολα η κατεργασία ιδιαίτερα σκληρών υλικών. Καθοριστικός παράγοντας για την μικροκοπή με laser είναι, εκτός της στρατηγικής κοπής που ακολουθείται, και η διάρκεια του παλμού [39].

#### 2.2.8.3 Μικρο-ηλεκτροχημική κοπή

Η μικρο-ηλεκτροχημική κοπή (ECM) αποτελεί μια αρκετά υποσχόμενη μέθοδο μικροκοπών, καθώς μέσω αυτής μπορεί να επιτευχθεί υψηλή παραγωγικότητα, καλή ποιότητα επιφανείας και διαστατική ακρίβεια για ένα μεγάλο εύρος υλικών. Η κατεργασία αυτή διαφέρει από την κλασική ECM, όσον αφορά τις παραμέτρους κατεργασίας, τους παλμούς και το διάκενο ηλεκτροδίου-TE. Στη μικρο-ECM, το εργαλείο αποτελεί την κάθοδο και το TE την άνοδο, ενώ και τα δύο βρίσκονται σε ηλεκτρολυτικό περιβάλλον. Ο ηλεκτρολύτης είναι συνήθως άλας και η αποβολή υλικού λαμβάνει χώρα από την άνοδο, καθώς τη διαπερνά το ρεύμα. Είναι δυνατό να χρησιμοποιηθεί και κατάλληλη μάσκα. Η παροχή ρεύματος με παλμούς παρέχει περισσότερες δυνατότητες στην μικρο-ECM, ενώ απαιτείται χαμηλή πυκνότητα ρεύματος και τάση για να διεξαχθεί η αποβολή υλικού με τον κατάλληλο τρόπο, χωρίς γρήγορη κατανάλωση της καθόδου και με αυξημένη ακρίβεια [28].

#### 2.2.8.4 Μικροκοπή με εστιασμένη δέσμη ιόντων

Η μικροκοπή με εστιασμένη δέσμη ιόντων (Focused Ion Beam, FIB) είναι μια μη συμβατική μικροκατεργασία, κατά την οποία μια δέσμη ιόντων προσπίπτει στην επιφάνεια του προς κατεργασία δοκιμίου με τρόπο αντίστοιχο της λειτουργίας του ηλεκτρονικού

μικροσκοπιου σάρωσης (SEM), αφαιρώντας του υλικό [28]. Πιο συγκεκριμένα, όταν η δέσμη ιόντων προσπίπτει στην επιφάνεια του υλικού υπό συνθήκες κενού, τα άτομα της επιφάνειας δέχονται ενέργεια η οποία εάν υπερβεί την ενέργεια συνοχής τους, τα άτομα αυτά θα έχουν τόσο αυξημένη κινητική ενέργεια ώστε να εκτοξευτούν από την επιφάνεια [27, 39]. Συνήθως, στην FIB η δέσμη ιόντων έχει γκαουσιανή μορφή [27]. Η υπεροχή αυτής της κατεργασίας σε σχέση με τις υπόλοιπες είναι ότι έχει ευαισθησία σε επίπεδο νανομέτρων κατά την αφαίρεση υλικού, χωρίς να απαιτεί την χρήση συστήματος ελέγχου κίνησης λίαν υψηλής ακριβείας. Μέσω της FIB μπορούν να δημιουργηθούν δομές με εξαιρετικά υψηλή ακρίβεια, έως και σε επίπεδο 50 nm και γι' αυτό χρησιμοποιείται εκτενώς στην βιομηχανία ηλεκτρονικών, αλλά και σε άλλες εφαρμογές λίαν υψηλής ακριβείας όπως οπτικές, μηχανολογικές και βιοχημικές. Μία σημαντική εφαρμογή που σχετίζεται με τις μικροκοπές είναι η κατασκευή ΚΕ από διάφορα υλικά μέσω FIB [39].

## 2.3 Μικρολείανση

### 2.3.1 Εισαγωγή

Η μικρο-λείανση αποτελεί μια κατεργασία αποβολής υλικού με λειαντικά μέσα (abrasive machining), κατά την οποία το υλικό που αποβάλλεται είναι σε τάξη μεγέθους μικρο ή και νανοκλίμακας, ενώ το μέγεθος των αντικειμένων που κατεργάζονται κυμαίνεται από μερικά μικρόμετρα, έως εκατοντάδες μικρόμετρα. Η κατεργασία αυτή χρησιμοποιείται συνήθως ως η τελική κατεργασία για την αποπεράτωση μικρο-εξαρτημάτων [47]. Σε αντίθεση με άλλες κατεργασίες αποβολής υλικού στη μικρο και νανοκλίμακα, με τις οποίες συνήθως κατεργάζονται όλκιμα ή υλικά μέτριας σκληρότητας, παρότι συνήθως επιτυγχάνονται μικρότερες ταχύτητες απ' ότι στο φρεζάρισμα, η μικρο-λείανση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την κατεργασία διαφόρων ψαθυρών ή σκληρών υλικών όπως γυαλί, γερμάνιο, καρβίδια, κεραμικά και άλλα σκληρά υλικά για την κατασκευή διαφόρων μικρο-εξαρτημάτων, όπως εξαρτήματα μικρο-ηλεκτρονικής, μικρο-αισθητήρες, διατάξεις micro-fluidics, εδράνων, οδοντωτών τροχών, εκκεντροφόρων αξόνων και πτερύγων στροβιλομηχανών [47, 48]. Παρότι για αρκετές εφαρμογές χρησιμοποιούνται καθιερωμένες μέθοδοι, όπως η LIGA (Lithographie, Galvanoformung, Abformung δηλαδή λιθογραφία, ηλεκτροεπιμετάλλωση και τύπωση) και η FIB, το υψηλό κόστος αυτών των μεθόδων, ειδικά για περιορισμένη παραγωγή, καθιστά κατεργασίες όπως η μικρο-λείανση πιθανές εναλλακτικές [49].

Επίσης, ένας άλλος λόγος για την επιλογή της μικρο-λείανσης είναι ότι οι εναλλακτικές μέθοδοι που μπορούν να εφαρμοστούν στη μικρο-κλίμακα έχουν διάφορα μειονεκτήματα, όπως η μEDM που εμφανίζει γρήγορη φθορά και απαιτεί αγώγιμες επιφάνειες και η κατεργασία με laser που οδηγεί σε θερμική καταπόνηση την επιφάνεια του TE [50]. Η ανάγκη για εφαρμογή της κατεργασίας αυτής, σχετίζεται σε ένα βαθμό από τις ανάγκες της βιομηχανίας οπτικών για την κατασκευή καλουπιών για μικροφακούς με διαστάσεις μερικών εκατοντάδων μm. Με βάση τις μελέτες που έχουν γίνει σχετικά με τις συνθήκες κατά τη μικρο-λείανση, τις μεθόδους αναγέννησης των εργαλείων-τροχών και την ποιότητα επιφανείας, προκύπτει ότι η κατεργασία αυτή μπορεί να αποδώσει επιφάνειες με πολύ καλύτερη ποιότητα επιφανείας και ελάχιστο γρέζι, σε σχέση με άλλες κατεργασίες και μπορεί επιπλέον να εφαρμοστεί σε αντικείμενα με 3D δομές μεγέθους δεκάδων

μικρομέτρων [47, 51]. Πιο συγκεκριμένα, μέσω της μικρο-λείανσης προσφέρεται μεγαλύτερη ευελιξία και επιτυγχάνεται καλύτερη διαστατική ακρίβεια για ιδιαίτερα πολύπλοκα κομμάτια [52].

Η επίτευξη της υψηλής ποιότητας και ακρίβειας προϋποθέτει εργαλειομηχανές ακριβείας με μεγάλη στιβαρότητα και τροχούς με χαμηλό ρυθμό φθοράς [52]. Παρότι αρκετά στοιχεία της μικρο-λείανσης προσομοιάζουν την μακροσκοπική λείανση, λόγω των φαινομένων κλίμακας, όπως και στις άλλες μικροκατεργασίες υπάρχουν διάφορες ιδιαιτερότητες [48]. Για παράδειγμα, όσο μικραίνει η διάμετρος των λειαντικών τροχών, οι δυνάμεις άρωσης και η παραμόρφωση του λειαντικού τροχού γίνεται ολοένα πιο σημαντικές, αλλά και η γεωμετρία του τροχού, καθώς και η συμπεριφορά του διαφέρουν σημαντικά [48, 52]. Επίσης, καθώς το ΠΑΑ πλησιάζει ή είναι μικρότερο του μεγέθους κόκκου, κατά τη λείανση οι λειαντικοί κόκκοι συναντούν τα όρια των κόκκων του υλικού ή κόβουν στο εσωτερικό του κόκκου και έτσι πρέπει να υπερνικηθούν οι δυνάμεις συνοχής των ατόμων, προκειμένου να δημιουργηθεί απόβλιττο και να αφαιρεθεί υλικό [53]. Άλλες βασικές διαφορές μεταξύ λείανσης και μικρο-λείανσης είναι ο πολύ μικρότερος λόγος βάθους κοπής προς της ακτίνα καμπυλότητας της ακμής του κόκκου (0.1-1 στη μικρο-λείανση αντί για 50-100), η σημασία των δυνάμεων άρωσης (γύρω στο 20-30%), η τριβή που σχετίζεται με τις δυνάμεις άρωσης, η θεώρηση της γωνίας αποβλίττου ως κυμαινόμενης, αντί για σταθερά αρνητικής και ο ρυθμός αποβολής υλικού (MRR), που είναι 1-3 τάξεις μεγέθους μικρότερος [51].

### **2.3.2 Βασικά χαρακτηριστικά μικρο-λείανσης**

Κατά την κατεργασία όλκιμων υλικών, δημιουργείται απόβλιττο λόγω ισχυρής πλαστικής παραμόρφωσης και διάτμησης στην περιοχή επαφής ΚΕ-ΤΕ [52]. Κατά την κατεργασία ψαθυρών υλικών, όπως προαναφέρθηκε γενικά για τις μικροκατεργασίες κοπής, υπάρχει η δυνατότητα κατεργασίας τους με συνθήκες που να προσομοιάζουν την όλκιμη κοπή ή ένα συνδυασμό όλκιμης και ψαθυρής κοπής. Όπως είναι αναμενόμενο, η ψαθυρή κοπή οδηγεί σε πλαστική παραμόρφωση, απομάκρυνση μικρών κομματιών από τις ακμές του ΚΕ αλλά και έντονη δημιουργία ρωγμών στο υλικό στην εγκάρσια (αποβολή υλικού) και ακτινική διεύθυνση, καθώς και χαμηλή ποιότητα επιφανείας, ενώ η όλκιμη κοπή δημιουργεί ένα στρώμα υλικού κοντά στην επιφάνεια με αμελητέα παραμόρφωση, όμως η επίτευξη των κατάλληλων συνθηκών για όλκιμη κοπή προκύπτει για βάθη κοπής κοντά στη νανοκλίμακα [47, 52]. Για παράδειγμα, έχει βρεθεί ότι για το μονοκρυσταλλικό πυρίτιο, η τιμή αυτή είναι κάτω των 10 nm, μια τιμή που είναι ίσως μη επιτεύξιμη πάντα [54].

Η μετάβαση από τις συνθήκες ψαθυρής σε όλκιμη κοπή αμφισβητείται από ορισμένους ερευνητές και ακόμα δεν έχουν κατανοηθεί πλήρως οι μηχανισμοί αποβολής υλικού κατά την όλκιμη κοπή [47]. Η μετάβαση θεωρείται ότι σχετίζεται με την εντατική κατάσταση στην περιοχή κοπής, γι' αυτό και η κρίσιμη τιμή του ΠΑΑ υπολογίζεται με βάση τις μηχανικές ιδιότητες του υλικού [52]. Επειδή το ΠΑΑ κατά τη μικρο-λείανση είναι μεταβλητό από 0 έως μια μέγιστη τιμή, είναι δυνατόν κάποιες στιγμές να υπάρχει όλκιμη και κάποιες φορές ψαθυρή κοπή, όπως συμβαίνει και στο μικρο-φρεζάρισμα. Καθώς η μικρο-λείανση επηρεάζεται από αρκετές παραμέτρους, ορισμένες εκ των οποίων έχουν στοχαστική φύση και στο αποτέλεσμα επιδρά σημαντικά και η μικροδομή, όπως και ένας συνδυασμός μηχανισμών αποβολής υλικού, είναι δύσκολο να εξηγηθεί απολύτως η όλκιμη κοπή, αν και

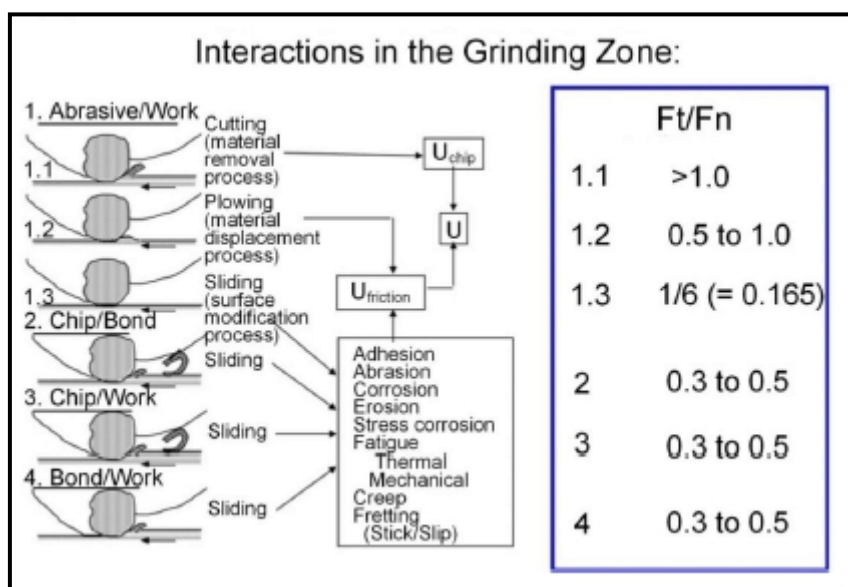
έχει επισημανθεί από ορισμένους ερευνητές η ιδιαίτερη σημασία μεμονωμένων παραμέτρων όπως η ταχύτητα κοπής [47, 49]. Παρόλα είναι δυνατή η πειραματική εκτίμηση του οριακού ΠΑΑ, μέσω δοκιμών με έναν κόκκο [52]. Για τη διευκόλυνση της κατεργασίας ψαθυρών υλικών έχουν προταθεί υβριδικές κατεργασίες, όπως η χρήση δονήσεων που οδηγούν σε μείωση των δυνάμεων, των θερμικών φορτίων, της τραχύτητας, αλλά και αύξηση του κρίσιμου ΠΑΑ ή η εφαρμογή ειδικού χημικού διαλύματος για την τροποποίηση της επιφάνειας του ΤΕ, ώστε να αυξηθεί η ποιότητα της επιφάνειας και η διάρκεια ζωής του ΚΕ [54].

Κατά τη μικρο-λείανση, όπου ο όγκος του υλικού που αποβάλλεται είναι εξαιρετικά μικρός, είναι σημαντικό η κατεργασία να γίνεται σε ένα βήμα, με όσο το δυνατόν πιο ευνοϊκές συνθήκες για την επίτευξη της καλύτερης δυνατής ποιότητας επιφάνειας. Η φθορά των λειαντικών κόκκων κατά τη μικρο-λείανση είναι ένα πολύ σημαντικό θέμα, ειδικά κατά την κατεργασία υλικών υψηλής σκληρότητας [47, 52]. Επειδή οι λειαντικοί τροχοί είναι μικρότεροι και οι ενεργοί κόκκοι πολύ λιγότεροι απ' ό,τι στη συμβατική λείανση, η αλληλεπίδρασή τους με την επιφάνεια έχει πιο εμφανή αποτελέσματα. Για τον περιορισμό της φθοράς, απαιτείται εκτός της κατανόησης της επίδρασης των διαφόρων παραμέτρων της κατεργασίας και η κατανόηση της επίδρασης των χαρακτηριστικών του λειαντικού τροχού όπως το σχήμα, το ύψος και το μέγεθος των κόκκων και ο ρυθμός φθοράς του τροχού [47].

Η αποβολή υλικού κατά την μικρο-λείανση προκύπτει μέσω επαναλαμβανόμενης διείσδυσης, ολίσθησης και εγχάραξης των λειαντικών μέσων στο ΤΕ σε σχετικά μεγάλες ταχύτητες και εκτός από τα μηχανικά φορτία λόγω δυνάμεων και ταλαντώσεων, υπάρχουν και έντονα θερμικά φορτία και πιθανή χημική δράση μέσω της αλληλεπίδρασης των λειαντικών κόκκων και του ψυκτικού υγρού ή του υλικού του ΤΕ [48, 55]. Καθώς οι διαστάσεις είναι πολύ μικρές, οι ζώνες παραμόρφωσης είναι επίσης εξαιρετικά μικρές και οι ρυθμοί παραμόρφωσης που αναπτύσσονται ορισμένες φορές ιδιαίτερα μεγάλοι (της τάξης των  $10^7$ - $10^8$   $s^{-1}$ ) [56]. Ειδικότερα, για βάθη μερικών  $\mu m$  ή μικρότερα ευνοούνται ιδιαίτερα οι δυνάμεις άρωσης και απλής επαφής, που ουσιαστικά είναι αποτέλεσμα αλληλεπιδράσεων τριβολογικής καθαρά φύσης, γιατί τα βάθη αυτά είναι συγκρίσιμα με το μέγεθος των ακμών των κόκκων [52, 56].

Λόγω της τυχαιότητας της κατανομής των λειαντικών κόκκων και της μορφής τους, η αποβολή υλικού θεωρείται ως ένα γεγονός που διέπεται από τυχαιότητα και κατά το οποίο πολλαπλοί κόκκοι συμμετέχουν στην κατεργασία, αυξάνοντας την πολυπλοκότητα της φθοράς [55]. Σε αντίθεση με τη μακροσκοπική λείανση, το απόβλιττο δημιουργείται στην καμπυλότητα της ακμής των κόκκων και έτσι, όπως και στις άλλες μικροκατεργασίες αποβολής υλικού, διακρίνονται τρεις καταστάσεις, ανάλογα με το ΠΑΑ [51, 52]. Γενικότερα για τη λείανση, διακρίνονται έξι πιθανές καταστάσεις, λόγω της επαφής στοιχείων του τροχού με το ΤΕ, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.10 [56]. Σε σχέση με τις αλληλεπιδράσεις λειαντικού κόκκου/ΤΕ, για τιμές του συντελεστή τριβής  $\mu > 1$  ( $F_t/F_n > 1$ ) κυριαρχεί η δημιουργία αποβλίττου (ενώ για  $\mu < 1$  κυριαρχεί η δημιουργία επιφανειακών ρωγμών), για  $\mu$  από 0.5-1 επικρατούν συνθήκες άρωσης (μετατόπιση υλικού) και για μικρές τιμές του συντελεστή τριβής, κοντά στο 1/6, ολίσθηση (σαν επιφανειακή κατεργασία). Όταν αλληλεπιδρά το απόβλιττο με δεσμούς ή με το ΤΕ έχουμε ολίσθηση με  $\mu = 0.3$ -0.5, και όταν

ο δεσμός έρχεται σε επαφή με το ΤΕ επίσης ολίσθηση, με παρόμοιο  $\mu$  [56]. Κατά την άρωση, δημιουργούνται συνθήκες παρόμοιες με τις υδροστατικές τάσεις σε μια πλαστική ζώνη διάτμησης, ενώ κατά την ολίσθηση η επαπτομενική συνιστώσα είναι ανάλογη με την τάση διαρροής σε διάτμηση και η κάθετη δύναμη ανάλογη με τη σκληρότητα του πιο μαλακού σώματος [56]. Όσο αυξάνεται η φθορά των κόκκων και υφίστανται άμβλυση, αυξάνεται η άρωση και η ολίσθηση, με αποτέλεσμα η επιφάνεια του ΤΕ να μορφοποιείται με ανεξέλεγκτο τρόπο, κάτι που μπορεί να αποφευχθεί με έγκαιρη αναγέννηση του τροχού [56].



**Σχήμα 2.10.** Πιθανές περιπτώσεις επαφής κατά τη μικρο-λείανση [56].

Για ψαθυρά ή ιδιαίτερα σκληρά υλικά, προτιμώνται λειαντικά μέσα από διαμάντι. Ειδικά στην περίπτωση των ψαθυρών υλικών, η κάθετη συνιστώσα της δύναμης παίζει κρίσιμο ρόλο κατά το προσδιορισμό του μηχανισμού αποβολής υλικού, ο οποίος μπορεί να σχετίζεται με δημιουργία αποβλίττου λόγω εγκάρσιας ρωγμής, απομάκρυνσης κόκκου ή μικροκοπή. Στον προσδιορισμό αυτών των μηχανισμών υπολογίζονται τα χαρακτηριστικά της τοπογραφίας του τροχού, οι ιδιότητες του υλικού και οι συνθήκες κατεργασίας, όπως η ταχύτητα πρόωσης, η ταχύτητα περιστροφής του τροχού και το βάθος κοπής. Για την εκχόνδριση προτιμητέος είναι ο πρώτος μηχανισμός, ο οποίος οδηγεί σε μεγάλο ρυθμό αποβολής υλικού, αλλά και κακή ποιότητα επιφανείας λόγω των ρωγμών. Για να αποφευχθεί αυτός ο μηχανισμός στη μικρο-λείανση, απαιτείται συνήθως ένα πολύ μικρό βάθος κοπής προκειμένου να επιτευχθεί η μετάβαση στην όγκιμη κοπή. Διάφοροι ερευνητές έχουν συνδέσει αυτή την τιμή με τις ιδιότητες του υλικού, καθώς όμως ορισμένα κεραμικά μπορεί να εμφανίσουν μεγάλη ανισοτροπία, ο υπολογισμός των κατάλληλων συνθηκών μπορεί να προέλθει μόνο από πιο λεπτομερείς προσομοιώσεις [47].

Οι μηχανισμοί αποβολής υλικού κατά τη λείανση έχουν μελετηθεί μέσω μοντέλων για τη δοκιμή σκληρομέτρησης (indentation) ή εγχάραξης (scratching), αλλά η χρήση τους για την κατανόηση της μετάβασης από την ψαθυρή στην όγκιμη κοπή δεν είναι εύκολη υπόθεση. Μέσω αυτών των μοντέλων αλλά και αντίστοιχων πειραμάτων, μπορεί να μελετηθεί η συμπεριφορά των υλικών σε συνθήκες παρόμοιες με ορισμένα στάδια της λείανσης και

κατά τη θραύση, ώστε να μπορεί να εκτιμηθεί το οριακό βάθος κοπής για την όλκιμη κοπή. Ειδικότερα, μέσω της εγχάραξης, είναι δυνατή μια καλύτερη προσέγγιση των αποτελεσμάτων της πραγματικής κατεργασίας, καθώς μπορεί να προσομοιωθεί η κινηματική της αποβολής υλικού για διάφορα βάθη και μέσω πειραμάτων και παρατηρήσεων σε μικροσκόπια, να εντοπιστούν οι συνθήκες που μειώνουν την εμφάνιση ρωγμών. Τέλος, η προσέγγιση ενός κόκκου αποτελεί την πιο ρεαλιστική αντιμετώπιση της κατεργασίας, διότι επιτρέπει εκτός των άλλων, τη χρήση ρεαλιστικών ταχυτήτων και λόγω του ότι ο αριθμός των κόκκων είναι μικρότερος όπως και ο όγκος του αποβαλλόμενου υλικού, η μελέτη της αλληλεπίδρασης ενός κόκκου με το υλικό του ΤΕ αποκτά μεγαλύτερη σημασία [47, 52]. Πειραματικά, μπορεί να επιτευχθεί μέσω προσκόλλησης ενός λειαντικού κόκκου από διαμάντι σε ένα χαλύβδινο στέλεχος με κωνική απόληξη, το οποίο προσδένεται στην περιφέρεια ενός χαλύβδινου τροχού. Καθώς το ΤΕ έχει μια ελαφριά κλίση κατά τη διάρκεια της κατεργασίας, το βάθος κοπής ξεκινάει από μερικά νανόμετρα και προσεγγίζει σταδιακά μερικές εκατοντάδες νανόμετρα. Επιπλέον, είναι δυνατόν να μελετηθεί η επίδραση πολλαπλών κόκκων, με την προσαρμογή των αντίστοιχων στελεχών στον τροχό. Γενικά, στη μικρο και νανοκλίμακα είναι απαραίτητη η διεξαγωγή προσομοιώσεων με στόχο τη μελέτη της πλαστικής παραμόρφωσης που υφίσταται το υλικό κατά την επαφή με το λειαντικό κόκκο, καθώς και την επίδραση ατελειών και της φθοράς του λειαντικού κόκκου [47].

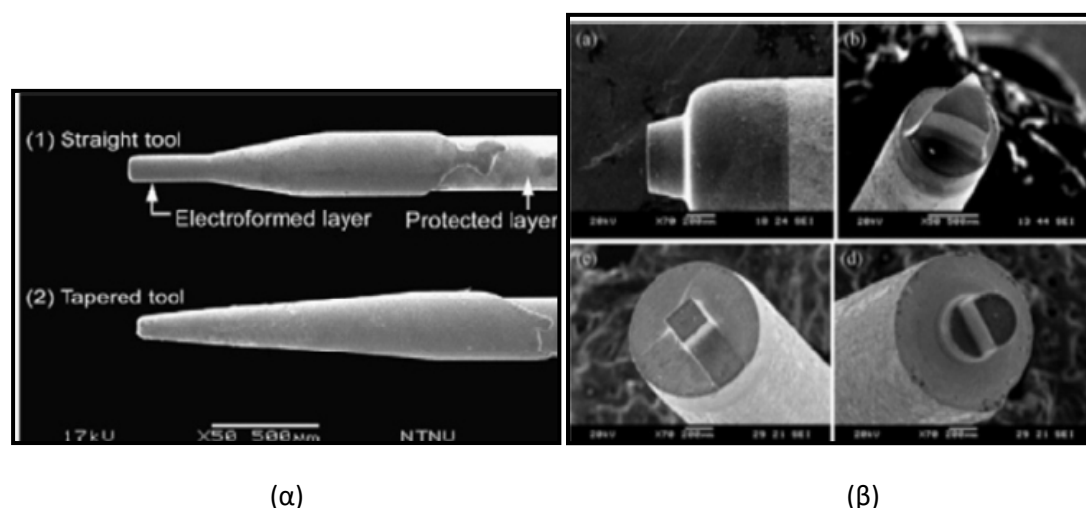
Η φθορά στη μικρο-λείανση οφείλεται σε διάφορους μηχανισμούς, όπως την άμβλυση των ακμών των κόκκων (επιπεδότητα), θραύση των κόκκων λόγω θερμομηχανικών φορτίων, απομάκρυνση των κόκκων από το συνδετικό υλικό ή φθορά του δεσμού. Μελέτες έχουν δείξει ότι χαμηλές ταχύτητες κοπής, υψηλές προώσεις και βάθη κοπής χωρίς χρήση υγρού κοπής αυξάνουν τη φθορά, καθώς και οι κόκκοι μικρότερων διαστάσεων και συγκέντρωσης [50]. Στα πρώτα στάδια της φθοράς παρατηρείται άμβλυση των κόκκων και μικρο-θραύσεις, στη συνέχεια κατά το στάδιο της μόνιμης κατάστασης εμφανίζεται φθορά εκτριβής, ενώ αργότερα εμφανίζεται μακρο-θραύση και η απομάκρυνση των κόκκων [52, 55]. Ενώ η μακρο-θραύση οδηγεί σε γρήγορη φθορά του λειαντικού τροχού και μείωση της ποιότητας επιφάνειας, η μικρο-θραύση μπορεί να είναι και ευνοϊκή, καθώς οδηγεί στην αύξηση της οξύτητας των ακμών των λειαντικών κόκκων. Έτσι, θα πρέπει να αυξηθεί η περίοδος μόνιμης κατάστασης του λειαντικού τροχού και να αποφευχθούν οι μακρο-θραύσεις και οι αποκολλήσεις [55]. Η φθορά του λειαντικού τροχού οδηγεί σε αύξηση των δυνάμεων, του θορύβου, των ταλαντώσεων και μείωση της ποιότητας της επιφάνειας και της διαστατικής ακρίβειας του ΤΕ [55].

Λόγω του μικρού μεγέθους του λειαντικού τροχού, οι δυνάμεις επηρεάζουν ιδιαίτερα την ακρίβεια της κατεργασίας, καθώς εκτός της φθοράς, της εκκεντρότητας του ΚΕ, των σφαλμάτων τοποθέτησης, οι ταλαντώσεις είναι σχετικά μεγάλες [52, 54]. Οι δυνάμεις επηρεάζονται από το υλικό και τη γεωμετρία του τροχού, την τριβή, τις ιδιότητες του ΤΕ καθώς και τις συνθήκες κατεργασίας όπως το ΠΑΑ. Όταν το ΠΑΑ προσεγγίζει τη διάσταση των κόκκων, οι δυνάμεις αυξάνουν ραγδαία, όπως και σε συγκεκριμένους κρυσταλλογραφικούς προσανατολισμούς. Επίσης η ειδική ενέργεια λείανσης αναδεικνύεται σε μέτρο της κατεργασιμότητας και οι τιμές της είναι μεγάλες, λόγω ελαστικών και πλαστικών παραμορφώσεων όπως και της ολίσθησης. Για τη λείανση μορφής, ενώ τα περισσότερα κομμάτια με αξονοσυμμετρική μορφή λειαινούνται με την συμβατική τεχνική

της εγκάρσιας λείανσης, μπορεί να χρησιμοποιηθεί και η παράλληλη λείανση, για την αύξηση της ποιότητας επιφανείας και της διάρκειας ζωής του τροχού [47].

### 2.3.3 Λειαντικοί τροχοί για μικρο-λείανση

Όπως και στις άλλες μικροκατεργασίες αποβολής υλικού, εντοπίζονται διαφορές στα εργαλεία που χρησιμοποιούνται στις παραλλαγές των συμβατικών κατεργασιών στη μικροκλίμακα. Επομένως, είναι αναμενόμενο να γίνουν αντίστοιχες διαπιστώσεις και για τη μικρο-λείανση. Κατά την κατεργασία της λείανσης μικροσκοπικών αντικειμένων, η χρήση συμβατικών λειαντικών τροχών δεν είναι κατάλληλη, και περιορίζεται σε πολύ απλές εφαρμογές [48]. Γι'αυτό στη μικρο-λείανση χρησιμοποιούνται λειαντικοί μικρο-τροχοί με μεγάλη ποικιλία μορφών, που κατασκευάζονται μέσω διαφόρων κατεργασιών όπως EDM, κατεργασία με laser, ηλεκτροεπιμετάλλωση, ψεκασμό εν ψυχρώ, CVD [52, 54]. Συνήθως έχουν την μορφή «μολυβιού», όπως φαίνεται στο σχήμα 2.11, διότι αποτελούνται από ένα μακρύ κυλινδρικό στέλεχος, του οποίου η άκρη είναι ειδικά κατεργασμένη, ώστε να έχει τη μορφή μικρο-εργαλείου και στα αγγλικά ονομάζονται micro-pencil tools [49]. Ορισμένα από τα συνηθέστερα είδη είναι, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.11: κυκλικής, τριγωνικής, τετραγωνικής ή ημικυκλικής (D) μορφής, όπως και ημισφαιρικοί ή κωνικοί τροχοί με γωνία  $60^\circ$  ή  $90^\circ$  και κυλινδρικά εργαλεία κατασκευασμένα μέσω εξάχνωσης με laser [51].



**Σχήμα 2.11.** (α) και (β) Βασικές μορφές μικρο-τροχών [51].

Όπως αναμένεται, η γεωμετρία του τροχού επηρεάζει την απόδοση του τροχού, και έτσι έχει παρατηρηθεί ότι η μορφή D οδηγεί σε μικρότερες δυνάμεις, καλύτερη διαστατική ακρίβεια και χαμηλότερη φθορά μαζί το κυκλικό εργαλείο, το οποίο οδηγεί σε καλύτερη ποιότητα επιφανείας σε σχέση με τα άλλα υλικά [52]. Οι δεσμοί στους μικρο-τροχούς είναι συνήθως μεταλλικοί, από ηλεκτροεπιμετάλλωση, υαλοποίηση ή υβριδικοί [52]. Συγκρίσεις μεταξύ διαφορετικών ειδών μικρο-τροχών ή μελέτες σχετικά με την απόδοση ενός συγκεκριμένου είδους τροχών έχουν παρουσιαστεί στη σχετική βιβλιογραφία, όπως οι εργασίες των Li et al. και Ren et al. Στην εργασία των Li et al. [57] συγκρίθηκαν μικρο-τροχοί που είχαν παραχθεί με διάφορες μεθόδους και παρατηρήθηκε ότι την καλύτερη απόδοση, όσον αφορά την ποιότητα επιφανείας και τη φθορά είχε ο τροχός κατασκευασμένος μέσω CVD, ενώ τη δεύτερη καλύτερη απόδοση είχε ο τροχός κατασκευασμένος με

ηλεκτροεπιμετάλλωση, που είναι πιο ευρέως διαθέσιμος. Επίσης συμπέραναν, ότι για τη χαμηλότερη δυνατή φθορά απαιτείται μικρή διάμετρος κόκκων, μικρή διάμετρος κοπτικού εργαλείου, χαμηλή πρόωση και τιμή ταχύτητας περιστροφής γύρω στα 80000 rpm, ενώ η κατεργασία μαλακών υλικών οδήγησε γενικά σε μικρότερη φθορά. Η αξιολόγηση των αποτελεσμάτων βασίστηκε σε δύο αδιάστατες ποσότητες, το λόγο  $\delta$  και το λόγο  $\eta$ , που αντιστοιχούσαν στην μείωση της διαμέτρου και του αριθμού των κόκκων του τροχού, αντίστοιχα [57]. Οι Ren et al. [53] διεξήγαγαν επίσης πειράματα με εργαλεία ηλεκτροεπιμεταλλωμένου διαμαντιού διάφορων διαμέτρων, με διάφορα μεγέθη κόκκων και υπό διάφορες συνθήκες. Συμπέραναν ότι η τραχύτητα μειώνεται σε κάθε περίπτωση με την πρόωση και με μικρότερο μέγεθος κόκκου, καθώς και με αυξανόμενη ταχύτητα περιστροφής του τροχού, μειωμένο βάθος κοπής και μεγαλύτερη διάμετρο KE [53].

Οι διαστάσεις των λειαντικών μικρο-τροχών, συνήθως κυμαίνονται από λίγα  $\mu\text{m}$  έως 2 mm ενώ πειραματικά έχει δημιουργηθεί εργαλείο διαμέτρου 4  $\mu\text{m}$  με κόκκους 0.1-0.2  $\mu\text{m}$  από διαμάντι μέσω ηλεκτροεπιμετάλλωσης [52]. Ένας περιοριστικός παράγοντας για τη δημιουργία μικροσκοπικών εργαλείων λείανσης είναι και το σφάλμα λόγω κακής ευθυγράμμισης, κατά την συγκράτηση ή επανατοποθέτηση του υλικού, το οποίο οδηγεί σε χαμηλή ποιότητα επιφανείας και διάρκεια ζωής του KE [49]. Έχει αναφερθεί ότι οι μικρο-τροχοί με διάμετρο κάτω των 50  $\mu\text{m}$  εμφανίζουν σχετικά γρήγορη φθορά, ώστε να μην είναι ακόμα κατάλληλοι για βιομηχανική χρήση, καθώς ακόμα και σε χαμηλές προώσεις υπάρχει μια μικρή πιθανότητα να χάσουν το στρώμα των λειαντικών μέσων μετά από διαδρομή μικρότερη του 1 mm [50]. Η προετοιμασία του λειαντικού τροχού πρέπει να γίνεται με προσοχή, καθώς λόγω των μικρών διαστάσεων, ο αριθμός των κόκκων είναι μικρός και έτσι εσφαλμένες ενέργειες μπορούν να οδηγήσουν σε απώλεια σημαντικού ποσοστού από τους συνολικούς κόκκους.

Η γνώση της τοπογραφίας του λειαντικού τροχού στη μικροκλίμακα είναι ιδιαίτερα σημαντική, λόγω του μικρού αριθμού κόκκων, προκειμένου να επιτευχθούν ευνοϊκές συνθήκες κοπής αλλά και να γίνει με τον κατάλληλο τρόπο η αναγέννησή του [47]. Έτσι γίνεται χαρακτηρισμός της τοπογραφίας μέσω SEM, εκτιμάται η πραγματική πυκνότητα κόκκων ανά  $\text{mm}^2$  και μέσω σύγκρισης με την πραγματική, διαπιστώνεται η επιτυχία της διαδικασίας αναγέννησης του τροχού. Μέσω παρατηρήσεων σε SEM είναι δυνατός ο υπολογισμός του ύψους των λειαντικών κόκκων και της γεωμετρίας τους και ο υπολογισμός της φθοράς τους. Στη μικρο-λείανση, είναι απαραίτητη η υλοποίηση αλγορίθμων αντιστάθμισης για την αύξηση της διαστατικής ακρίβειας και αποφυγής της έντονης φθοράς [47]. Επιπλέον, η χρήση υψηλών ταχυτήτων περιστροφής είναι αναγκαία, ώστε ακόμα και για μικροσκοπικούς τροχούς η γραμμική ταχύτητα να είναι ικανοποιητική και να αποφεύγεται η αυξημένη ολίσθηση και η χαμηλή παραγωγικότητα [47]. Αναφορικά με τη χρήση κοπτικού υγρού κατά τη μικρο-λείανση, η χρήση συμπιεσμένου θερμού αέρα, καθώς και η χρήση της τεχνικής MQL έχει χρησιμοποιηθεί με επιτυχία, προκειμένου να μειωθούν οι δυνάμεις και η φθορά του τροχού [51].

Οι μικρο-τροχοί που κατασκευάζονται από διαμάντι, διαχωρίζονται σε δύο επιμέρους κατηγορίες, αυτούς που κατασκευάζονται με πυροσυσσωμάτωση και αυτούς που είναι επενδεδυμένοι. Τα πυροσυσσωματωμένα εργαλεία από PCD συγκολλώνται στο στέλεχος του εργαλείου και έπειτα κατεργάζονται μέσω λίαν υψηλής ακριβείας λείανσης ή μικρο-

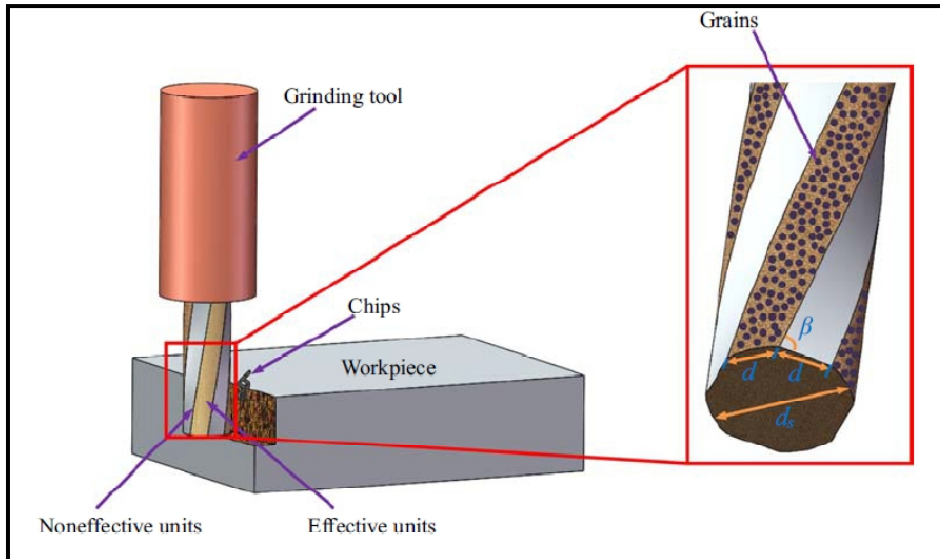


EDM, ενώ στην άλλη κατηγορία οι λειαντικοί κόκκοι από διαμάντι προσκολλώνται στην επιφάνεια του σώματος του εργαλείου π.χ. μέσω ηλεκτροεπιμετάλλωσης ή ηλεκτροεπιμετάλλωσης και διαμόρφωσης (ευθεία ή κωνικά εργαλεία) [57]. Άλλοι ερευνητές έχουν κατασκευάσει εργαλεία μέσω επιμετάλλωσης (electroless) ή CVD.

Η ηλεκτροεπιμετάλλωση είναι μια διεργασία μέσω της οποίας χρησιμοποιείται ηλεκτρικό ρεύμα για να γίνει καταλυτική αναγωγή των μεταλλικών ιόντων ενός διαλύματος, ώστε να δημιουργηθεί μια μεταλλική επικάλυψη πάνω σε ένα ηλεκτρόδιο, το οποίο αποτελεί το υπόστρωμα στο οποίο θα προσκολληθούν οι λειαντικοί κόκκοι. Η επιμετάλλωση (electroless plating) είναι μια αποκλειστικά χημική διεργασία, στην οποία η αναγωγή των μεταλλικών ιόντων προκύπτει από ένα αναγωγικό μέσο που βρίσκεται μέσα στο ίδιο το διάλυμα και οδηγεί σε σκληρότερους δεσμούς και ομοιόμορφη επικάλυψη [58].

Στην περίπτωση των λειαντικών μέσων από διαμάντι, παρότι οδηγούν σε χαμηλή φθορά και σταθερότητα του σχήματος του τροχού, λόγω της μη ομαλής φύσης τους, όταν ο τροχός κατασκευάζεται με συμβατικές μεθόδους οδηγεί σε τυχαίους κρυσταλλογραφικούς προσανατολισμούς, διακύμανση του ύψους προεξοχής του κόκκου από το δεσμό και ανομοιόμορφες αποστάσεις μεταξύ των κόκκων. Ειδικότερα στη μικρο-λείανση, αυτά τα προβλήματα οδηγούν σε πρόωρη μείωση της απόδοσης του τροχού. Για το λόγο αυτό, μπορούν να κατασκευαστούν τροχοί με συγκεκριμένα μοτίβα των κόκκων, αλλά στην περίπτωση των μικρο-λειαντικών τροχών αυτό δεν είναι εφικτό, από ένα μέγεθος κόκκων και μικρότερο. Διάφοροι ερευνητές διερεύνησαν τη χρήση βιο-εμπνευσμένων μοτίβων και παρατήρησαν ότι αυτοί οι τροχοί είχαν άριστη απόδοση και αντίσταση στη φθορά [55]. Επίσης, προσπάθειες που έγιναν για την κατασκευή μικρο-τροχών μέσω ηλεκτροδιάβρωσης και κοπής με laser, παρ' ότι αύξησαν την απόδοση του τροχού εμφάνισαν τα ίδια προβλήματα λόγω ανομοιόμορφου μεγέθους, σχήματος και διακένου. Γι' αυτό το λόγο, διάφοροι ερευνητές μελέτησαν εναλλακτικούς τρόπους κατασκευής των τροχών, όπως μέσω φρεζαρίσματος με laser ή εξάχνωσης.

Η μέθοδος αυτή οδήγησε σε σημαντικά μειωμένη τραχύτητα και κυμάτωση (waviness) της επιφάνειας, καθώς και πιο ομοιόμορφη κατανομή φορτίου στους κόκκους και ροή αποβλίττου σε σχέση με τους μικρο-τροχούς που είχαν κατασκευαστεί με συμβατικά υλικά [59]. Ένα εναλλακτικό είδος λειαντικού μικρο-τροχού που προσφέρει μειωμένες δυνάμεις, θερμοκρασίες και ειδική ενέργεια είναι οι τροχοί με μη-συνεχείς περιοχές με λειαντικούς κόκκους που οδηγούν σε συνθήκες διακοπτόμενης λείανσης, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.12. Αυτοί οι λειαντικοί τροχοί μπορεί να έχουν τις περιοχές με τους λειαντικούς κόκκους σε ευθείες διατάξεις ή σε ελικοειδείς. Η σύγκριση αυτών των μικρο-τροχών με τους συνηθισμένους, έδειξε ότι για χαμηλή ταχύτητα πρόωσης, όσον αφορά την ποιότητα επιφανείας υπερέρχουν οι συμβατικοί μικρο-τροχοί, ενώ στις μεγαλύτερες υπερέρχουν τα άλλα είδη τροχών, διότι έχουν καλύτερη ικανότητα αποβολής υλικού. Επίσης, οι δυνάμεις των ασυνεχών ΚΕ είναι χαμηλότερες των συμβατικών τροχών και οι μικρότερες δυνάμεις επιτυγχάνονται για τα εργαλεία με λιγότερες περιοχές με λειαντικούς κόκκους, ενώ η ικανότητα απομάκρυνσης αποβλίττων είναι μεγαλύτερη για τα ίδια εργαλεία με περισσότερες περιοχές με λειαντικούς κόκκους [60].



**Σχήμα 2.12.** Λειαντικοί μικρο-τροχοί με ασυνεχείς επιφάνειες [60].

Οι παραδοσιακές μέθοδοι κατασκευής λειαντικών τροχών που βασίζονται στην κονιομεταλλουργία εφαρμόζονται σπάνια στην κατασκευή μικρο-τροχών, λόγω της σχετικά χαμηλής τους ακρίβειας και πολυπλοκότητας, καθώς δεν μπορούν να αποδώσουν ιδιαίτερα μικρές διαμέτρους [58, 61]. Γι' αυτό προτιμώνται κυρίως τεχνικές επιμετάλλωσης ή ηλεκτροεπιμετάλλωσης, προκειμένου να κατασκευαστούν μικρο-τροχοί από προηγμένα λειαντικά μέσα με μεταλλικούς δεσμούς [61]. Ειδικότερα, η μέθοδος της ηλεκτροεπιμετάλλωσης προτιμάται λόγω του μικρότερου κόστους. Μέσω αυτών των μεθόδων δημιουργούνται τροχοί μεγέθους 100-500  $\mu\text{m}$  [61]. Η ηλεκτροεπιμετάλλωση επιτρέπει ομοιόμορφη επικάλυψη σε σύνθετες μορφές, ενώ η επιμετάλλωση συνθέτων επιτρέπει την προσθήκη σκληρών σωματιδίων όπως διαμαντιού, καρβιδίου του πυριτίου και κυβικού βοριονιτρίτη στο διάλυμα της επιμετάλλωσης, οδηγώντας σε μεγαλύτερη αντίσταση σε φθορά και απόξεση [61]. Το μειονέκτημα της ηλεκτροεπιμετάλλωσης είναι ότι μόνο ένα στρώμα λειαντικών μέσων ενσωματώνεται στο μεταλλικό δεσμό, με υψηλές παραμένουσες τάσεις που μειώνουν τη ζωή του τροχού και ανομοιόμορφη κατανομή λειαντικών μέσων, ενώ η επιμετάλλωση συνθέτων μπορεί να επιτύχει αρκετά ομοιόμορφες κατανομές [61].

Η κατασκευή του μικρο-τροχού αρχίζει με την κατεργασία του υποστρώματος στο οποίο θα εναποτεθεί η επικάλυψη. Αυτό μπορεί να είναι ένα κυλινδρικό στέλεχος από υλικό συμβατό με το υλικό της επίστρωσης, όπως ο χάλυβας [61]. Αφού διαμορφωθεί κατάλληλα η άκρη του στελέχους, ώστε να γίνει ημισφαιρική με διάμετρο αρκετά μικρότερη από την επιθυμητή, γίνονται διάφορες διεργασίες στο υπόστρωμα, προκειμένου να είναι καθαρό από οξείδια, σκόνη και άλλες ακαθαρσίες ώστε να διευκολυνθεί η δημιουργία των δεσμών με την επικάλυψη [61]. Μετά τα διάφορα στάδια της επιμετάλλωσης, δίνεται έμφαση στην ομοιόμορφη κατανομή των κόκκων μέσω ανάδευσης. Στο τέλος, διεξάγονται δοκιμαστικές κοπές προκειμένου να αξιολογηθεί η απόδοση του μικρο-τροχού και να μελετηθεί η φθορά του [61].

Το στέλεχος του ΚΕ μπορεί να είναι κατασκευασμένο και από σκληρομέταλλο ή χάλυβα και έπειτα καλύπτεται από ένα στρώμα με λειαντικούς κόκκους που συγκρατούνται από μια

στρώση μεταλλικού υλικού. Συνήθως όταν χρησιμοποιούνται προηγμένα λειαντικά μέσα, επιλέγεται CBN για τα σιδηρούχα υλικά και διαμάντι για τα μη σιδηρούχα. Το σώμα του εργαλείου μπορεί να πάρει κατάλληλο σχήμα, ανάλογα με το χαρακτηριστικό που θα δημιουργηθεί όπως π.χ. ένα ημισφαίριο ή μια κωνική διατομή με οξείες γωνίες, κάτι που θα ήταν ιδιαίτερα δύσκολο να επιτευχθεί σε κεραμικά υλικά με άλλη μέθοδο [50].

Όπως και στις άλλες μικροκατεργασίες, ορισμένοι ερευνητές έχουν κατασκευάσει τις δικές τους εργαλειομηχανές με διάφορες δυνατότητες. Για παράδειγμα οι Aurich et al. [49] κατασκεύασαν μία επιτραπέζια εργαλειομηχανή λείανσης με διάφορες διατάξεις, σχετικές τόσο με την κατασκευή των κοπτικών εργαλείων, όσο και της ίδιας της κατεργασίας της λείανσης. Αρχικά, το εργαλείο από καρβίδιο του βολφραμίου δημιουργείται μέσω λείανσης και κατεργάζεται περαιτέρω μέσω μικρο-EDM, προτού γίνει η τελική επικάλυψη. Η χρήση των εργαλείων αυτών σε δοκιμαστικές κοπές έδειξε ότι η δύναμη πρόωσης επηρεάζει ιδιαίτερα την ποιότητα επιφανείας, ότι το μικρότερο μέγεθος κόκκου οδηγεί σε καλύτερη ποιότητα επιφανείας και λιγότερες ρωγμές, όμως για αυξανόμενο MRR τα λεπτόκοκκα εργαλεία οδηγούν σε μεγαλύτερη αύξηση της τραχύτητας απ' ότι τα χονδρόκοκκα και εμφανίζουν μικρότερη διάρκεια ζωής [49].

### **2.3.4 Κατεργασία mill-grinding**

Μια άλλη ενδιαφέρουσα παραλλαγή της μικρο-λείανσης είναι η συνδυασμένη κατεργασία μικρο-φρεζαρίσματος και μικρο-λείανσης (mill-grinding). Η κατεργασία αυτή έχει χρησιμοποιηθεί και σε εφαρμογές λίγο μεγαλύτερων διαστάσεων, που δε μπορούν να συγκαταλεγούν στις μικρο-κατεργασίες, αλλά παρόλα αυτά υπάρχουν κοινά στοιχεία στις δύο περιπτώσεις [62]. Επίσης ο συνδυασμός λείανσης με άλλη κατεργασία έχει πραγματοποιηθεί και σε περίπτωση κοινής διάτρησης με λείανση [63, 64]. Οι πρώτες εφαρμογές αυτής της κατεργασίας αναφέρονται από την προηγούμενη δεκαετία [65]. Βασικός στόχος της κατεργασίας αυτής είναι να επιτευχθεί υψηλή ποιότητα επιφανείας και αποφυγή σχηματισμού γρεζιού, με ταυτόχρονη αύξηση του ρυθμού αποβολής υλικού, κάτι που δεν είναι εφικτό κατά τη μικρο-λείανση [65]. Επίσης με αυτό τον τρόπο αποφεύγεται η επιπλέον κατεργασία του TE, μειώνεται η επίδραση των σφαλμάτων λόγω της τοποθέτησης του KE και μειώνεται ο συνολικός απαιτούμενος χρόνος κατεργασίας [66]. Η διαδικασία της κατασκευής του εργαλείου είναι αντίστοιχη με τη διαδικασία κατασκευής των μικρο-λειαντικών τροχών που έχει ήδη περιγραφεί. Οι κόκκοι τοποθετούνται ως επικάλυψη σε ένα μικρο-κονδύλι, στην πίσω επιφάνεια της κοπτικής ακμής, η οποία δεν συμβάλλει στην αποβολή υλικού, ώστε αρχικά να πραγματοποιείται αποβολή υλικού από το κονδύλι και μετά λείανση, επιτυγχάνοντας έτσι και τους δύο στόχους με υψηλή παραγωγικότητα [65, 67]. Επίσης, λόγω του ότι κατά το στάδιο της λείανσης πραγματοποιείται σε μικρό βαθμό αφαίρεση υλικού από τους λειαντικούς κόκκους, είναι δυνατόν να αφαιρεθεί υλικό που συνήθως παραμένει μεταξύ δύο διαδοχικών τροχιών των ακμών του εργαλείου κατά την κοπή [68]. Η τοποθέτηση των λειαντικών κόκκων στο μικρο-εργαλείο επιτυγχάνεται μέσω των προαναφερθεισών μεθόδων, όπως η ηλεκτροεπιμετάλλωση ή cold spray [67, 68]. Συνήθως, οι κόκκοι που χρησιμοποιούνται είναι όπως στις περισσότερες εφαρμογές μικρο-λείανσης σκληρά υλικά, όπως το CBN και το σώμα του κονδυλίου κεραμικό υλικό όπως καρβίδιο του βολφραμίου [66].

Μέσω αυτής της συνδυασμένης κατεργασίας μπορούν να πραγματοποιηθεί το μικρο-φρεζάρισμα στα τοιχώματα ενός αντικειμένου ή να κατασκευαστούν αυλάκια και ταυτόχρονα να πραγματοποιείται η λείανσή τους [68]. Όπως όλες οι κατεργασίες στη μικροκλίμακα, και αυτή η κατεργασία επηρεάζεται από τα φαινόμενα κλίμακας και γι' αυτό το λόγο έχουν διεξαχθεί σχετικές προσομοιώσεις π.χ. προκειμένου να υπολογιστεί το ελάχιστο ΠΑΑ [67].

Όσον αφορά την ποιότητα επιφανείας, αν και παρατηρήθηκαν επιπλέον σημάδια στις επιφάνειες λόγω της επαφής των λειαντικών κόκκων με αυτές, διαπιστώθηκε ότι για ίδιο βάθος κοπής, η τραχύτητα ήταν μειωμένη στη συνδυασμένη κατεργασία, ενώ οι σημαντικότερες διαφορές διαπιστώθηκαν για μικρές προώσεις και μεγάλες ταχύτητες περιστροφής, ιδιαίτερα άνω των 20000 rpm. Επίσης, μελέτες έχουν δείξει ότι η χρήση των λειαντικών κόκκων δε δημιουργεί πάντα βελτίωση στην επιφάνεια, σε σχέση με το απλό κονδύλι αλλά μόνο από ένα συγκεκριμένο μέγεθος κόκκου και κάτω και η κατά την κατεργασία πλευρικών επιφανειών, η διαφορά με το απλό φρεζάρισμα είναι μεγαλύτερη απ' ότι στην κατεργασία αυλακίων [66, 68]. Παρόλα αυτά, η τραχύτητα κατά τη συνδυασμένη κατεργασία είναι μεγαλύτερη από αυτή της καθαρής μικρο-λείανσης [62]. Τέλος, για την αποφυγή γρήγορης φθοράς πρέπει να χρησιμοποιηθεί μικρό μέγεθος λειαντικού κόκκου.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

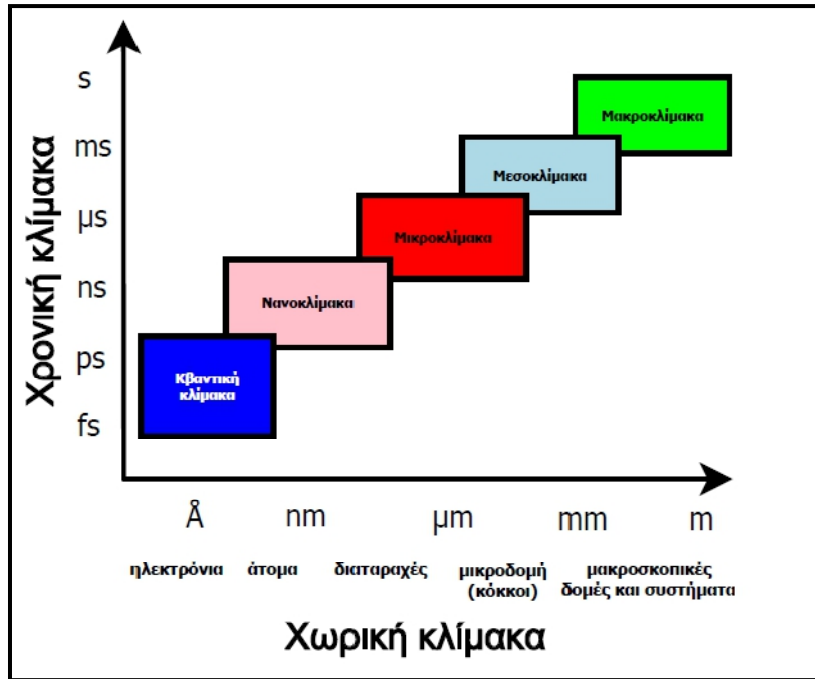
### Νανοκατεργασίες: Πειράματα, προσομοιώσεις και εφαρμογές

#### 3.1 Νανοκατεργασίες

##### 3.1.1 Εισαγωγή

Όπως έγινε σαφές στις προηγούμενες υποενότητες, έχουν πραγματοποιηθεί αρκετές μελέτες στον τομέα των μικροκατεργασιών και ειδικότερα στις μικροκατεργασίες αποβολής υλικού τις τελευταίες δεκαετίες διαπιστώνεται σημαντική ανάπτυξη. Παρόλα αυτά υπάρχουν διάφορες εφαρμογές, τόσο σε πειραματικό όσο και βιομηχανικό επίπεδο στις οποίες υπάρχει η ανάγκη για αντικείμενα ή δομές με διαστάσεις ακόμα μικρότερες. Σε αυτές τις περιπτώσεις, η κλίμακα μεγέθους βρίσκεται στο επίπεδο των νανομέτρων, ή αλλιώς τη νανοκλίμακα, και οι αντίστοιχες κατεργασίες οι οποίες πραγματοποιούνται ονομάζονται νανοκατεργασίες. Σε αυτό το επίπεδο, οι διαφορές με τις μακροσκοπικές κατεργασίες είναι σημαντικά περισσότερες και δεν υπάρχουν εμφανείς αναλογίες, όπως μεταξύ μακροκλίμακας και μικροκλίμακας π.χ. στις περιπτώσεις της τόννευσης και του φρεζαρίσματος. Παρότι συνήθως στον τομέα των νανοκατεργασιών κυριαρχούν μη-συμβατικές κατεργασίες όπως αυτές με χρήση laser ή εστιασμένης δέσμης ιόντων, υπάρχουν περιπτώσεις στις οποίες είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθούν μηχανικές νανοκατεργασίες, δηλαδή κατεργασίες στις οποίες, μέσω επαφής ενός σώματος από σκληρό υλικό και ενός μαλακότερου συμβαίνει αποβολή υλικού.

Η νανοτεχνολογία ως όρος έχει οριστεί με διάφορους εναλλακτικούς τρόπους σε διάφορες εποχές. Για παράδειγμα, ο Taniguchi όρισε τη νανοτεχνολογία ως την κατεργασία, διαχωρισμό, στερεοποίηση και παραμόρφωση υλικών σε επίπεδο ατόμων ή μορίων [69]. Ένας πιο πρόσφατος ορισμός αναφέρει ότι η νανοτεχνολογία είναι η κατανόηση και έλεγχος της ύλης σε διαστάσεις μεταξύ 1 και 100 νανομέτρων, όπου υπάρχει η δυνατότητα καινοτόμων εφαρμογών, λόγω των ιδιαίτερων φαινομένων που επικρατούν σε αυτή την κλίμακα [69]. Η κλίμακα μήκους μεταξύ 1-100 nm ορίζεται συνήθως ως νανοκλίμακα [70]. Στο σχήμα 3.1 απεικονίζονται οι διάφορες κλίμακες του χώρου και του χρόνου καθώς και οι αντίστοιχες δομές που παρατηρούνται σε κάθε κλίμακα.



Σχήμα 3.1. Χρονικές και χωρικές κλίμακες.

Ο όρος νανοτεχνολογία εμπεριέχει δύο έννοιες, τις διάφορες δομές και υλικά στο επίπεδο της νανοκλίμακας, καθώς και τη διερεύνηση φαινομένων της νανοκλίμακας και χρήση τους προκειμένου να κατασκευαστούν νέα προϊόντα ή να δοθούν μεγαλύτερες δυνατότητες σε υπάρχοντα [70]. Η νανοτεχνολογία έχει ιδιαίτερα ευρύ πεδίο εφαρμογών σε διάφορα επιστημονικά πεδία, όπως η επιστήμη των υλικών, η χημεία, η ηλεκτρονική, η μοριακή βιολογία, η βιοϊατρική κτλ. [71]. Οι εξελίξεις στον τομέα της νανοτεχνολογίας επιταχύνθηκαν από τα μέσα του 20ου αιώνα, ενώ σημαντικό ορόσημο ήταν η εφεύρεση του μικροσκοπίου σήραγγας (Scanning Tunneling Microscopy, STM) το 1981, το οποίο για πρώτη φορά επέτρεψε την απεικόνιση δομών σε επίπεδο ατόμων [70]. Επίσης, η εφεύρεση του ατομικού μικροσκοπίου δύναμης (AFM) το 1986 προσέφερε ένα ιδιαίτερα χρήσιμο εργαλείο για την παρατήρηση της ύλης στην νανοκλίμακα με πολλές επιπλέον δυνατότητες [72]. Καθώς τα μικροσκόπια αυτά έχουν τη δυνατότητα να έρχονται σε επαφή με άτομα μέσω φυσικών ή χημικών αλληλεπιδράσεων, μπορούν να χρησιμοποιηθούν και για την τροποποίηση ή κατεργασία της επιφάνειας υποστρωμάτων από διάφορες κατηγορίες υλικών όπως μέταλλα, πολυμερή ή ημιαγωγούς [72, 73]. Για παράδειγμα, λίγα χρόνια αργότερα, το 1990 πραγματοποιήθηκε σε ερευνητικό κέντρο της IBM η πρώτη κατεργασία σχετική με τη μορφοποίηση της ύλης σε επίπεδο ατόμων [70]. Η σημασία του AFM ως εργαλείο για την κατεργασία μεταλλικών επιφανειών είχε επισημανθεί ήδη από τα μέσα της δεκαετίας του 90 [72].

Με τον όρο νανο-κατεργασίες ονομάζονται οι κατεργασίες στη νανοκλίμακα και αυτές που επιτυγχάνουν ακρίβεια νανομέτρων και αποτελούν το θεμέλιο της νανοτεχνολογίας καθώς ουσιαστικά συνδέουν τις θεωρητικές ανακαλύψεις της επιστήμης σχετικά με την ύλη σε επίπεδο νανοκλίμακας με την παραγωγή των αντίστοιχων προϊόντων. Η έννοια των νανο-κατεργασιών εμπεριέχει τόσο τις ίδιες τις κατεργασίες, όσο και τη μετρολογία στη νανοκλίμακα η οποία είναι απαραίτητη για την αξιολόγηση της ποιότητας των

παραγόμενων προϊόντων. Με παρόμοιο τρόπο όπως έχει ήδη αναφερθεί για τις μικροκατεργασίες, οι νανοκατεργασίες αφορούν είτε κομμάτια σχετικά μεγάλων διαστάσεων που περιλαμβάνουν νανο ή μικροδομές των οποίων ορισμένες διαστάσεις είναι στη νανοκλίμακα, είτε κομμάτια τα οποία έχουν διαστασιακή ακρίβεια σε επίπεδο νανοκλίμακας [70]. Οι νανοκατεργασίες περιλαμβάνουν τόσο "top-down" όσο και "bottom-up" προσεγγίσεις [74]. Ιδανικά, το ελάχιστο πάχος που μπορεί να αφαιρεθεί από ένα υλικό είναι ένα επίπεδο ατόμων και γι'αυτό το σκοπό έχουν εξεταστεί διάφορα είδη νανοκατεργασιών, όπως μηχανικές, μηχανοχημικές και ηλεκτροχημικές [72]. Ορισμένοι ερευνητές τα τελευταία χρόνια κατατάσσουν τις νανοκατεργασίες στην "3η γενιά" των κατεργασιών, συμβαδίζοντας σε γενικές γραμμές με τις αντίστοιχες βιομηχανικές επαναστάσεις, θεωρώντας ως πρώτη γενιά την εποχή πριν την πρώτη βιομηχανική επανάσταση και τη δεύτερη γενιά ως την εποχή μέχρι τα μέσα του 20ου αιώνα όπου η ακρίβεια είχε φτάσει έως μερικές δεκάδες μμ. Στη σημερινή εποχή και στο προσεχές μέλλον, όπως θα αναφερθεί στη συνέχεια, η ακρίβεια θα αγγίξει το επίπεδο των μεμονωμένων ατόμων [75].

Στη σχετική βιβλιογραφία, οι νανοκατεργασίες χωρίζονται σε τρεις επιμέρους "γενιές". Στην πρώτη γενιά ανήκουν νανοδομές που εντάσσονται σε μακρο ή μικροσκοπικά συστήματα π.χ. ως επικαλύψεις με νανοσωματίδια. Η δεύτερη γενιά των νανοκατεργασιών σχετίζεται, με ενσωματωμένα υποσυστήματα διαστάσεων νανομέτρων έως και λίγο κάτω του 1 μμ ενώ η τρίτη γενιά περιλαμβάνει ολοκληρωμένα συστήματα μεγέθους κάτω των 100 nm όπως αισθητήρες και άλλες διατάξεις π.χ. εντοπισμού DNA ή εντοπισμού διαφόρων χημικών και βιολογικών παραγόντων [69]. Τα συστήματα δεύτερης και τρίτης γενιάς αναμένεται να παραχθούν για εμπορική χρήση μέχρι το 2025 [69]. Ο γενικός στόχος των κατεργασιών στο προσεχές μέλλον βασίζεται στην ατομική κλίμακα και σχετίζεται κυρίως με τη μαζική παραγωγή διατάξεων διαστάσεων νανοκλίμακας, ώστε να αυξάνεται η αποδοτικότητα διαφόρων συστημάτων [72].

Ορισμένες από τις προκλήσεις που αντιμετωπίζει ο τομέας των νανοκατεργασιών είναι η επίτευξη της απαραίτητης διαστατικής ακρίβειας, η δημιουργία πολύπλοκων μορφών και η ανάπτυξη και κατεργασία καινοτομικών υλικών.

### **3.1.2 Γενική περιγραφή των νανοκατεργασιών**

Γενικά διακρίνονται τρεις επιμέρους κατηγορίες νανοκατεργασιών, οι νανοκατεργασίες αποβολής υλικού (στις οποίες ανήκουν οι μηχανικές νανοκατεργασίες, η νανολιθογραφία, νανοκατεργασίες με δέσμη υψηλής ενέργειας και νανοχάραξη), προσθήκης υλικού (π.χ. νανο-εναπόθεση) και αυτές για τις οποίες ισχύει η διατήρηση της μάζας (π.χ. νανοτύπωση).

Στις νανοκατεργασίες αποβολής υλικού με μηχανικό τρόπο (επαφή δύο ή περισσοτέρων σωμάτων) περιλαμβάνονται οι νανοκατεργασίες κοπής, λείανσης και στίλβωσης [70]. Καθώς στις νανοκοπές έχουμε ΠΑΑ στο επίπεδο της νανοκλίμακας, είναι συνήθως μικρότερο και από το μικρότερο μέγεθος κόκκου [75]. Παρότι έχουν επιτευχθεί πειραματικά ΠΑΑ έως και λίγων νανομέτρων μέσω λίαν υψηλής ακριβείας κοπή με διαμάντι, δεν είναι ακόμα εφικτή η κατεργασία μεμονωμένων στρωμάτων ατόμων μέσω αυτής της κατεργασίας [71]. Μέσω νανοκοπών είναι δυνατή η επίτευξη πολύ υψηλής ποιότητας

επιφανείας, πολύ υψηλής διαστατικής ακρίβειας αλλά και σχετικά γρήγορη αποβολή μεγάλων όγκων υλικού. Ένα παράδειγμα είναι η νανοκοπή fly cutting, με χρήση ειδικού σερβομηχανισμού που χρησιμοποιείται για ιεραρχικές δομές και βιομιμητικές επιφάνειες. Μέσω της νανοστίλβωσης επιτυγχάνονται λείες και ιδιαίτερα ανακλαστικές επιφάνειες, είτε μέσω μηχανικής είτε συνδυασμού μηχανικής και χημικής δράσης, οι οποίες χρησιμοποιούνται στην αεροδιαστημική, αλλά και μέσω δέσμης ρευστού [70, 71].

Για εφαρμογές στις οποίες απαιτείται διαστατική ακρίβεια της τάξης των νανομέτρων, είναι απαραίτητη η στίλβωση μετά την κοπή, καθώς έτσι αφαιρούνται και τα σημάδια που αφήνουν οι κατεργασίες και επηρεάζουν τις οπτικές ιδιότητες του TE, καθώς σχετίζονται με περίθλαση και διάθλαση του φωτός. Επίσης, καθώς η στίλβωση επιβαρύνει λιγότερο το κατεργαζόμενο τεμάχιο απ' ό,τι οι κλασικές κατεργασίες, μπορεί να χρησιμοποιηθεί και στην περίπτωση σκληρών και ψαθυρών υλικών. Μια σχετική εφαρμογή είναι η λείανση επιφανειών από λεπτό στρώμα νανοκρυσταλλικού διαμαντιού, κυρίως μέσω μηχανικής-χημικής στίλβωσης. Εκτός από τη στίλβωση με ελεύθερα λειαντικά μέσα, χρησιμοποιείται και η στίλβωση με λειαντικά μέσα προσαρμοσμένα σε σταθερή επιφάνεια, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε όλα τα γνωστά οπτο-ηλεκτρονικά υλικά όπως πυρίτιο, καρβίδιο του πυριτίου, γυαλί, νιτρίδιο και αρσενίδιο του γαλλίου [70]. Εκτός από τις "κλασικές" μεθόδους για νανοκατεργασίες, υπάρχουν και άλλες μέθοδοι που μπορούν να επιτύχουν τραχύτητες σε επίπεδα μικρότερα του νανομέτρου όπως η EEM (Elastic Emission Machining, κοπή με εκπομπή ελαστικών κυμάτων), κατά την οποία πολύ λεπτά λειαντικά μέσα (της τάξης των δεκάδων νανομέτρων) κατευθύνονται μέσω ειδικής διάταξης προς την επιφάνεια του TE και αφαιρούν υλικό μέσω χημικής αντίδρασης με την επιφάνεια [71].

Η νανολιθογραφία χρησιμοποιείται για την κατασκευή δομών, με τουλάχιστον μια διάσταση στη νανοκλίμακα. Διακρίνονται συνήθως δύο είδη νανολιθογραφίας, με ή χωρίς τη χρήση μάσκας. Το πρώτο είδος ενδείκνυται για μαζική παραγωγή και υλοποιείται με χρήση υπεριώδους ακτινοβολίας, ενώ στο δεύτερο χρησιμοποιείται μια δέσμη υψηλής ενέργειας όπως δέσμη ηλεκτρονίων ή FIB. Επίσης, είναι δυνατόν να υλοποιηθεί νανολιθογραφία μέσω AFM, κάτι που θα αναφερθεί ξανά στη συνέχεια. Όσον αφορά τις νανοκατεργασίες με χρήση δέσμης υψηλής ενέργειας, οι πιο συνηθισμένες είναι η FIB, η νανοκατεργασία με laser ή με δέσμη ηλεκτρονίων. Η FIB, όπως έχει ήδη αναφερθεί σε προηγούμενη ενότητα, χρησιμοποιείται στην κατασκευή κοπτικών εργαλείων για εφαρμογές λίαν υψηλής ακριβείας, αλλά και στην βιομηχανία των ηλεκτρονικών, στην επιστήμη των υλικών κ.α. Η κατεργασία FIB διεξάγεται σε μια διάταξη παρόμοια με αυτή ενός μικροσκοπίου SEM, μέσω της οποίας είναι δυνατή και η παρατήρηση και μέτρηση κατασκευών στη νανοκλίμακα [70]. Συνήθως χρησιμοποιείται μια δέσμη ιόντων γαλλίου που παρέχει ακρίβεια 10 nm, αλλά καθώς το γάλλιο είναι επιρρεπές σε ακαθαρσίες, η πηγή ιόντων ηλίου/νέου αποτελεί μια εξαιρετική εναλλακτική λύση, καθώς παρέχει ακρίβεια έως και 1 nm και λιγότερο [71]. Οι διαφορές αυτές σχετίζονται με την αλληλεπίδραση που έχουν τα ιόντα αυτά με τα άτομα της επιφάνειας [71].

Επιπλέον, μια παρόμοια κατεργασία που μπορεί να χρησιμοποιηθεί είναι η χρήση εστιασμένης δέσμης ηλεκτρονίων (focused electron beam), μέσω της οποίας έχουν επιτευχθεί ακρίβειες κάτω από 1 nm και έχει σημαντικές προοπτικές ως κατεργασία σε ατομική κλίμακα [71]. Μια ενδιαφέρουσα τεχνική νανοκατεργασίας που βασίζεται στην



χρήση laser είναι η κατεργασία FSLDW (femtosecond laser direct writing), η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την κατασκευή πρωτοτύπων στην μικροηλεκτρονική και οπτική βιομηχανία. Τέλος, η χρήση λιθογραφικών τεχνικών με βάση τη δέσμη ηλεκτρονίων χρησιμοποιείται συχνά στην κατασκευή ειδικών μοτίβων σε διάφορες δομές της νανοκλίμακας.

Η αξιολόγηση της ποιότητας και της διαστατικής ακρίβειας που προκύπτει από τις νανοκατεργασίες, πραγματοποιείται μέσω ειδικών οργάνων όπως μικροσκόπια με χρήση ακίδας (π.χ. STM, AFM), ειδικές μηχανές μέτρησης συντεταγμένων στη μικροκλίμακα (micro-CMM), αλλά και οπτικά συστήματα μέτρησης. Ειδικότερα για τα μικροσκόπια τα οποία κάνουν χρήση ακίδας, η δυνατότητα αυξημένης περιοχής σάρωσης στο επίπεδο XY και αυξημένης δυνατότητας κίνησης στον κατακόρυφο άξονα Z οδήγησε σε σημαντική αύξηση της ακρίβειάς τους. Παρόλα αυτά, η ταχύτητα των μετρήσεων συνήθως είναι πολύ μικρή, καθώς γίνεται σάρωση ανά γραμμή και γι' αυτό το λόγο σε διάφορες περιπτώσεις προτιμάται η σπειροειδής κίνηση για να μειωθεί ο απαιτούμενος χρόνος. Οι μηχανές micro-CMM διαθέτουν μια ειδική μικρο-ακίδα η οποία κινείται μέσω ενός ευέλικτου καμπτικού μηχανισμού και το εύρος μέτρησης μηκών στους τρεις άξονες είναι μερικές δεκάδες μm [70,71].

Στις νανοκατεργασίες υπάρχουν διάφορες ιδιαίτερες απαιτήσεις σχετικά με τις συνθήκες των αρχικών TE και του περιβάλλοντος στο οποίο διεξάγεται η κατεργασία. Για παράδειγμα, το πυρίτιο που χρησιμοποιείται σε εφαρμογές της ηλεκτρονικής πρέπει να είναι πολύ υψηλής καθαρότητας, τουλάχιστον 99.99999%. Επίσης, σε ορισμένες κατεργασίες απαιτείται η ύπαρξη συνθηκών κενού με πιέσεις της τάξης των  $10^{-9}$  -  $10^{-11}$  torr ή υψηλές θερμοκρασίες για προθέρμανση. Ένα άλλο ιδιαίτερο χαρακτηριστικό των νανοκατεργασιών είναι ότι η ειδική ενέργεια που απαιτείται είναι έως και 3-5 τάξεις μεγέθους υψηλότερη αυτής των συμβατικών κατεργασιών και διακρίνεται σε άμεση και έμμεση. Στην άμεση ενέργεια που καταναλώνεται, εκτός από αυτή που προσδίδεται στο τεμάχιο για την κατεργασία συμπεριλαμβάνεται και η ενέργεια που σχετίζεται με το σύστημα ελέγχου πίεσης και θερμοκρασίας, παραγωγής φωτονίων, ιόντων ή πλάσματος και για τις ανάγκες της μετρολογίας. Η έμμεση ενέργεια είναι η ενέργεια που σχετίζεται με το περιβάλλον της κατεργασίας π.χ. αυτή που απαιτείται για την απομάκρυνση επιβλαβών σωματιδίων [71,75].

### **3.1.3 Θεωρητική μελέτη νανοκατεργασιών**

Προκειμένου να κατανοηθούν οι βασικές αρχές και οι μηχανισμοί που εμφανίζονται στις νανοκατεργασίες, είναι απαραίτητη η θεωρητική μελέτη με χρήση μοντέλων και η πραγματοποίηση προσομοιώσεων, πριν διεξαχθούν κατάλληλα πειράματα για την επιβεβαίωση των μοντέλων. Οι πιο σημαντικές κατεργασίες προσθήκης υλικού στη νανοκλίμακα είναι οι PVD και CVD, οι οποίες έχουν αναφερθεί προηγουμένως και ως μέθοδοι σχετικές με την επικάλυψη των ΚΕ [70]. Σε αυτές τις κατεργασίες επιδρούν διάφοροι παράγοντες σε διαφορετικές κλίμακες, από το επίπεδο των ατόμων έως την μακροκλίμακα. Σε επίπεδο ατόμων, η συμπύκνωση ή κίνηση των ατόμων στην επιφάνεια του υποστρώματος πραγματοποιούνται μέσω δημιουργίας και θραύσης των ατομικών δεσμών και έτσι η ενέργεια των δεσμών και η διάταξη των ατόμων επηρεάζουν την αντοχή

της επίστρωσης [71]. Σε μεγαλύτερες κλίμακες επιδρά η τοπογραφία, οι ατέλειες και οι διαταραχές, καθώς και η εντατική κατάσταση και άλλοι παράγοντες. Στις κατεργασίες αφαίρεσης υλικού, η θραύση των ατομικών δεσμών αποτελεί ένα ιδιαίτερα σημαντικό στοιχείο της κατεργασίας και θεωρείται ότι ο αριθμός των δεσμών που έχουν υποστεί θραύση σχετίζεται τοπικά με την επιτεύξιμη ακρίβεια της κατεργασίας. Η δημιουργία ενός αποβλίττου οδηγεί σε θραύση μεγάλου αριθμού δεσμών κατά μήκος του επιπέδου διάτμησης [71].

Η υλοποίηση των νανοκατεργασιών κοπής μπορεί να γίνει μέσω ΚΕ με ακμή κλίμακας νανομέτρων και συστήματος ελέγχου κίνησης λίαν υψηλής ακριβείας, είτε μέσω της SPDT με ΠΑΑ στη νανοκλίμακα, μέσω ακριβούς ελέγχου της πρόωσης του εργαλείου [70]. Στις νανοκατεργασίες κοπής χρησιμοποιούνται συνήθως ΚΕ από διαμάντι με ακτίνα καμπυλότητας της κοπτικής ακμής της τάξης των 10-100 nm, πολύ μικρότερη από τις ακτίνες καμπυλότητας των υλικών από WC ή PCBN [75]. Όπως και στην περίπτωση των μικροκοπών, προφανώς πρέπει να συμπεριλαμβάνεται στα μοντέλα η επίδραση της καμπυλότητας της κοπτικής ακμής, που μπορεί να οδηγήσει σε αρνητικές γωνίες αποβλίττου και θλιπτικές τάσεις. Σε αυτή την περίπτωση, επηρεάζεται άμεσα η δομή του υλικού του ΤΕ, π.χ. μέσω μετασχηματισμών φάσης και μπορεί να υπάρξει εκτός από αυξημένη πλαστική παραμόρφωση, μετατροπή της κρυσταλλικής δομής σε άμορφη. Επιπλέον, η δημιουργία ατελειών όπως ρωγμές παρεμποδίζεται από τις θλιπτικές τάσεις, με αποτέλεσμα να επηρεαστούν οι συνθήκες όγκιμης κοπής των ψαθυρών υλικών.

Ο λόγος ΠΑΑ προς την ακτίνα καμπυλότητας της κοπτικής ακμής παίζει τον ίδιο ρόλο όπως στις μικροκοπές, αποτρέποντας τη δημιουργία αποβλίττου σε περιπτώσεις που η τιμή του λόγου είναι μικρότερη της κρίσιμης [70]. Έχει παρατηρηθεί ότι οι δυνάμεις κοπής μεταβάλλονται μη γραμμικά όταν ο λόγος αυτός είναι μικρότερος της μονάδας, ενώ για τιμές πολύ μεγαλύτερες της μονάδας η μεταβολή είναι γραμμική σε σχέση με τη μεταβολή του ΠΑΑ [75]. Όταν το ΠΑΑ είναι μικρότερο από την ελάχιστη τιμή επικρατεί ο μηχανισμός της ολίσθησης, μέσω του οποίου δε δημιουργείται απόβλιττο αλλά επηρεάζεται δυσμενώς η επιφάνεια, ενώ για μεγαλύτερες τιμές ΠΑΑ εμφανίζεται ο μηχανισμός της άρωσης, ο οποίος περιλαμβάνει και ροή υλικού γύρω από τις πλευρές της κοπτικής ακμής [75]. Ο μηχανισμός της εξώθησης (extrusion) εμφανίζεται όταν το ΠΑΑ είναι συγκρίσιμο με το ελάχιστο ΠΑΑ και οδηγεί σε δημιουργία αποβλίττου χωρίς διάτμηση, ενώ ο μηχανισμός διάτμησης εμφανίζεται ξεκάθαρα για τιμές μεγαλύτερης της ελάχιστης [75].

Λόγω της εμφάνισης των διαφόρων προαναφερθέντων μηχανισμών, όταν γίνεται κατεργασία σχισμών και αυλακιών μέσω νανοκατεργασιών κοπής π.χ. για εφαρμογές της ηλεκτρονικής ή βιοϊατρικής βιομηχανίας δημιουργείται φθορά λόγω απόξεσης (abrasion) στην επιφάνεια, η οποία οφείλεται γενικά στη τριβή μεταξύ δύο επιφανειών [76]. Η πειραματική διερεύνηση είναι δυνατόν να γίνει μέσω πειράματος νανο-εγχάραξης σε AFM [76]. Από παρόμοιες διερευνήσεις, προέκυψε ότι κάτω από ένα συγκεκριμένο βάθος κοπής η φθορά προκύπτει λόγω του μηχανισμού της άρωσης ενώ για λίγο μεγαλύτερα βάθη δημιουργείται μια μικτή ζώνη, με συνύπαρξη των μηχανισμών άρωσης και κοπής (δημιουργίας αποβλίττου). Ο χαρακτηρισμός των δύο περιοχών βασίστηκε στον όγκο των ατόμων που μετατοπίστηκαν στα άκρα του αυλακιού και στον όγκο του υλικού που αφαιρέθηκε. Ο συντελεστής τριβής αυξάνεται γραμμικά στην περιοχή της άρωσης ενώ

σταθεροποιείται στην περιοχή της κοπής [76]. Αξίζει να τονιστεί ότι κατά τις νανοκοπές όταν το υλικό του ΤΕ είναι μονοκρυσταλλικό, εκτός από την αυξημένη αντοχή εμφανίζεται ανισοτροπία, κάτι που πρέπει να ληφθεί υπόψη στις σχετικές μελέτες [75].

Ένα ιδιαίτερα ενδιαφέρον θέμα σχετικό με τις νανοκατεργασίες κοπής είναι η κοπή των ψαθυρών υλικών. Όπως προαναφέρθηκε στο κεφάλαιο των μικροκατεργασιών, όταν το ΠΑΑ λαμβάνει κατάλληλη τιμή είναι δυνατόν να επιτευχθούν συνθήκες όλκιμης κοπής (μέσω πλαστικής παραμόρφωσης και όχι διάδοσης ρωγμών) για τα ψαθυρά υλικά [75]. Ο τρόπος κοπής εξαρτάται από το εάν η διατμητική ή εφελκυστική τάση υπερβαίνει την κρίσιμη τιμή της σε κάποια διεύθυνση. Στο επίπεδο των ατόμων, δημιουργείται μια ζώνη μεγάλων παραμορφώσεων υπό εφελκυστικές τάσεις κοντά στην κοπτική ακμή στην οποία δημιουργούνται μικρορωγμές. Υπό τις κατάλληλες συνθήκες, όπως συγκεκριμένο εύρος αρνητικών γωνιών αποβλίπτου και χαμηλή ταχύτητα κοπής μπορεί να επιτευχθεί όλκιμη κοπή, καθώς η ανάπτυξη θλιπτικών τάσεων εμποδίζει τη δημιουργία μικρορωγμών. Επιπλέον, η φθορά του ΚΕ είναι ένα ιδιαίτερα σημαντικό θέμα κατά τις νανοκατεργασίες κοπής και μέσω κατάλληλων προσομοιώσεων είναι δυνατόν να ερευνηθεί η φύση της φθοράς και οι θεμελιώδεις μηχανισμοί που την προκαλούν [76]. Διάφοροι ερευνητές έχουν μελετήσει θέματα όπως π.χ. τον τριβοχημικό μηχανισμό φθοράς, τη γραφίτοποίηση του διαμαντιού, αλλά και τη διαφοροποίηση των μηχανισμών φθοράς ανάλογα με τον τρόπο κοπής π.χ. τη δημιουργία μικροκρατήρων και αφαίρεση υλικού από τις ακμές στη ψαθυρή κοπή ή την φθορά λόγω διάχυσης στην όλκιμη κοπή. Στην τελευταία περίπτωση, παρότι δεν δημιουργούνται ρωγμές, εμφανίζονται ατέλειες, διαταραχές, και αλλαγές φάσης οι οποίες μπορεί να επηρεάσουν τις ιδιότητες του τελικού προϊόντος [76].

### **3.1.4 Χρήση μικροσκοπίων ακίδα και άλλων διατάξεων για νανοκατεργασίες**

Προκειμένου να επιβεβαιωθούν τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, αλλά και να διερευνηθεί η συμπεριφορά των υλικών σε νανοκλίμακα και η κατεργασιμότητά τους μπορούν να διενεργηθούν διάφορες δοκιμές, όπως νανοσκληρομέτρηση αλλά και νανοεγχάραξη, που υλοποιούνται σε ένα μικροσκόπιο ατομικής δύναμης με ακίδα της οποίας η άκρη κατασκευάζεται από διαμάντι [70, 75, 76]. Οι συνθήκες διεξαγωγής των δοκιμών αυτών προσεγγίζουν γενικά τις κατεργασίες αποβολής υλικού, κατά τη διεξαγωγή τους διατηρείται σταθερό το βάθος κοπής και συμβάλλουν στην εκτίμηση των αναπτυσσόμενων δυνάμεων και του ρυθμού αποβολής υλικού. Για τη μελέτη των νανοκατεργασιών μπορεί να χρησιμοποιηθούν και μικροσκόπια SEM υψηλής ανάλυσης με κατάλληλες τροποποιήσεις [70]. Επειδή ουσιαστικά η εικόνα του SEM είναι μια διδιάστατη προβολή ενός 3D αντικειμένου, απαιτούνται ειδικές τεχνικές για το χαρακτηρισμό της κοπτικής ακμής π.χ. EBID-SEM (Electron Beam Induced Deposition SEM) [70]. Επίσης, μέσω AFM μπορεί να πραγματοποιηθεί η μικροσκοπία ατομικής δύναμης με αγώγιμη ακίδα (c-AFM) και η τομογραφική ΜΑΔ (T-AFM) [72]. Για καλύτερη μέτρηση γεωμετρικών μεγεθών ενδείκνυται η χρήση AFM αλλά σε περιπτώσεις πολύ μικρών διαστάσεων γίνεται χρήση μικροσκοπίων TEM ή φασματοσκοπίας Raman.

Παρ' όλα αυτά, τα μικροσκόπια που έχουν δυνατότητες απεικόνισης του μικρόκοσμου μπορούν να χρησιμοποιηθούν εκτός από την πραγματοποίηση πειραμάτων για χαρακτηρισμό υλικών και για την κατασκευή δομών, τόσο σε επίπεδες όσο και κυρτές

επιφάνειες, όπως αυλάκια διαστάσεων νανομέτρων και άλλες 2D ή 3D δομές [69, 73]. Η γενική αρχή λειτουργίας των νανοκατεργασιών με μικροσκοπία ακίδας (tip-based nanomanufacturing, TBN) βασίζεται στην προσέγγιση ή επαφή μιας ακίδας διαστάσεων nm (συνήθως το μέγεθος της άκρης της ακίδας κυμαίνεται από 2-10 nm έως δεκάδες nm ανάλογα με την εφαρμογή) με ένα υποστρώμα. Για την επίτευξη των κινήσεων αυτών, χρησιμοποιείται ένας κατάλληλος βρόχος ανάδρασης που μετράει την απόσταση μεταξύ ακίδας και υποστρώματος. Μέσω της ακίδας είναι δυνατόν να ασκηθούν μηχανικά, θερμικά ή ηλεκτρικά φορτία, να προκληθούν χημικές αντιδράσεις ή διάχυση ατόμων σε έναν όγκο μεταξύ της ακίδας και του υποστρώματος. Μέσω κατάλληλης διάταξης, στη συνέχεια η ακίδα μεταφέρεται σε επόμενες θέσεις για να ολοκληρωθεί η κατεργασία [70, 74].

Μέσω των μικροσκοπιών είναι δυνατόν να πραγματοποιηθούν τρία είδη νανοκατεργασιών: νανοκατεργασίες προσθήκης υλικού, επιφανειακές κατεργασίες στις οποίες λαμβάνει χώρα μεταφορά ατόμων καθώς και νανοκατεργασίες κοπής [71, 74]. Διάφορες κατεργασίες σχετικές με τη νανολιθογραφία που υλοποιούνται σε μικροσκοπία είναι η νανολιθογραφία ακίδας (dip pen nanolithography), θερμομηχανική ή χημική νανολιθογραφία [70, 73]. Εκτός από τις διάφορες κατεργασίες που μπορούν να πραγματοποιηθούν με τη βοήθεια μικροσκοπιών AFM και STM, μπορούν να πραγματοποιηθούν νανοκατεργασίες ακόμα και σε SEM ή STEM, το οποίο χρησιμοποιεί μια στοχευμένη δέσμη ηλεκτρονίων επιτυγχάνοντας ακρίβεια 0.2 nm [69, 71, 72]. Αυτό μπορεί να θεωρηθεί ότι αποτελεί μια εξέλιξη των κατεργασιών λίαν υψηλής ακριβείας της μεσο και μικροκλίμακας που έχουν ήδη περιγραφεί και καθώς δεν υπάρχουν ακόμα εργαλειομηχανές με δυνατότητες νανοκατεργασιών, η εκμετάλλευση των μικροσκοπιών ακίδας είναι μια εξαιρετική ευκαιρία [77]. Αξίζει να σημειωθεί ότι γενικά θεωρείται ότι οι νανοκατεργασίες με χρήση μικροσκοπιών ακίδας στις οποίες η ακίδα παίζει το ρόλο του ΚΕ, έχουν χαμηλότερο κόστος από τα συνήθη είδη νανοκατεργασιών, με μεγαλύτερη ακρίβεια και ευελιξία και το γεγονός ότι δεν απαιτούν κάποιο ιδιαίτερο περιβάλλον όπως κενό, ότι προσφέρουν τη δυνατότητα απεικόνισης των επιφανειών με υψηλή ανάλυση και καθιστούν δυνατό το χειρισμό της ύλης σε επίπεδο νανοκλίμακας, με ακρίβεια της τάξης του νανομέτρου είναι σημαντικά πλεονεκτήματα [73, 77].

Επιπλέον, η δυνατότητα πραγματοποίησης κατεργασιών στην οποίες χρησιμοποιούνται διάφορα είδη ενέργειας εκτός της μηχανικής, όπως ηλεκτρική, θερμική, χημική ή ενέργεια φωτονίων, και οι εφαρμογές τόσο σε αγώγιμες όσο και σε μη αγώγιμες επιφάνειες (σε αντίθεση με το STM) είναι ιδιαίτερα σημαντικές και καθιστούν τις νανοκατεργασίες με χρήση ακίδας ανταγωνιστικές των νανοκατεργασιών βασισμένων σε δέσμη ενέργειας [78]. Η χρήση παραπάνω της μίας πηγών ενέργειας στις TBN οδηγεί όμως σε δυσκολία ελέγχου της κατεργασίας [78]. Ειδικά αναφορικά με τη νανολιθογραφία, αρκετές παραλλαγές της που πραγματοποιούνται στο AFM είναι κατάλληλες για την κατασκευή ιεραρχικών μικροδομών και καινοτομικών δομών που εμφανίζουν ειδικά χαρακτηριστικά σε συγκεκριμένα σημεία [73]. Η τάση για τη χρήση AFM για νανοκατεργασίες εν μέρει καθοδηγείται από τις εξελίξεις στην μικροηλεκτρονική βιομηχανία, αλλά παρότι η χρήση των μικροσκοπιών αυτών για νανοκατεργασίες μελετάται κατά τις τελευταίες δεκαετίες, ακόμα δε θεωρείται κατάλληλη σε βιομηχανική κλίμακα [73, 78]. Καθώς το AFM αποτελεί εργαστηριακό εξοπλισμό, οι νανοκατεργασίες σε AFM δεν είναι να διεξαχθεί σε πολλαπλές κλίμακες τόσο εύκολα όσο η νανολιθογραφία, ώστε να είναι κατάλληλες για να

χρησιμοποιηθούν για μεγάλη παραγωγή όπου απαιτείται η πραγματοποίηση ιδιαίτερα υψηλής ακρίβειας κινήσεων για ένα μήκος που ξεπερνάει τη δυνατότητα των συνηθισμένων μικροσκοπίων ακίδας [78].

Δύο από τις δυνατότητες που έχει το AFM για επιφανειακές κατεργασίες είναι η τροποποίηση επιφανειών με χειρισμό μεμονωμένων ατόμων (atom manipulation), κατά την οποία δημιουργούνται μοτίβα με μεμονωμένα άτομα και η τοπική ανοδική οξειδωση, κατά την οποία δημιουργούνται μοτίβα με οξείδια που παράγονται μέσω αντιδράσεων [78]. Η νανολιθογραφία με ακίδα χρησιμοποιείται για μαλακές επιφάνειες με χρήση AFM και μόρια χημικών ουσιών που δρουν όπως το μελάνι των εκτυπωτών, δηλαδή διαχέονται από την ακίδα προς την επιφάνεια και ενώνονται μεταξύ τους μέσω χημικής προσρόφησης ή ηλεκτρομαγνητικών αλληλεπιδράσεων. Η εναπόθεση στην επιφάνεια προκύπτει, είτε όταν η ακίδα ακουμπήσει την επιφάνεια είτε μέσω ενός μνήσκου. Ορισμένα υλικά που έχουν χρησιμοποιηθεί ως υποστρώματα είναι ο χρυσός, το πυρίτιο, το οξείδιο του πυριτίου και το αρσενίδιο του γαλλίου ενώ τα "μελάνια" είναι οργανικά μακρομόρια, βιοπολυμερή ή αγωγίμα πολυμερή, μέταλλα και πρωτεΐνες [70].

Στη νανο-τύπωση χρησιμοποιείται μια ακίδα ώστε να πραγματοποιηθεί διαμόρφωση μιας επιφάνειας με παρόμοιο τρόπο με την μακροσκοπική κατεργασία. Πιο συγκεκριμένα, η ακίδα με προκαθορισμένη γεωμετρία για την κάθε επιθυμητή κατεργασία έρχεται σε επαφή με το υπόστρωμα και ασκεί μια συγκεκριμένη δύναμη σε αυτό, ώστε να υπάρξει πλαστική παραμόρφωση και να αποδοθεί το επιθυμητό μοτίβο στην επιφάνεια. Παρότι η κατεργασία μπορεί να υλοποιηθεί και σε διάταξη νανοσκληρομέτρησης, η χρήση AFM επιτρέπει υψηλότερη ακρίβεια ελέγχου της ασκούμενης δύναμης και της θέσης της ακίδας [70].

Η νανο-ηλεκτροδιάβρωση είναι άλλη μια κατεργασία που είναι δυνατόν να υλοποιηθεί σε μικροσκόπια με ακίδα. Σε αυτή την κατεργασία, επιτυγχάνεται αφαίρεση υλικού μέσω ηλεκτρικών εκκενώσεων σε μια περιοχή μεγέθους από λίγων Å έως δεκάδων νανομέτρων μεταξύ της ακίδας και της επιφάνειας του υποστρώματος, η οποία περιέχει διηλεκτρικό υγρό. Το υλικό της ακίδας είναι συνήθως κράμα λευκόχρυσου-ιριδίου ή βολφράμιο, το κενό μεταξύ της ακίδας και του υποστρώματος λίγα nm και η τάση που επιβάλλεται είναι εκατοντάδες mV. Επίσης, είναι η δυνατή και η ηλεκτροχημική κατεργασία στη νανοκλίμακα όπως και η κατεργασία με ακίδα με υποβοήθηση από δέσμη laser (η οποία επηρεάζει το ηλεκτρικό πεδίο) [69]. Ο συνδυασμός μηχανικής και χημικής δράσης μπορεί να οδηγήσει σε κατεργασίες με υψηλή διαστατική ακρίβεια, καθώς μέσω χημικών αντιδράσεων που προκαλούνται από μηχανική δράση, αφαιρούνται πολύ μικρές στρώσεις υλικού [72]. Κατά την ηλεκτροχημική κατεργασία με AFM, η ακίδα και το υπόστρωμα αποτελούν τα δύο ηλεκτρόδια και το ρόλο του ηλεκτρολύτη παίζει ένας μνήσκος νερού που δημιουργείται κατά τη ζεύξη ακίδας-υποστρώματος. Τα ηλεκτρόδια αυτά μπορεί να έχουν το ρόλο, είτε της ανόδου είτε της καθόδου, ανάλογα με τις συνθήκες και μέσω του ηλεκτρικού πεδίου που δημιουργείται ανάμεσά τους προκαλούν ηλεκτροχημικές αντιδράσεις στην επιφάνεια του υποστρώματος [74].

Ο μηχανισμός αποβολής υλικού εξαρτάται από διάφορους παράγοντες όπως τα υλικά ανόδου/καθόδου, η ταχύτητα της ακίδας, η επιβαλλόμενη δύναμη και τάση, η διάρκεια της

επιβαλλόμενης τάσης, η απόσταση των ηλεκτροδίων, η κατεύθυνση κίνησης της ακίδας, ακόμα και η υγρασία [72]. Εκτός από τη χημική δράση και η πρόσδοση θερμότητας μπορεί να επηρεάσει την κατεργασία, όπως γίνεται και στις συμβατικές κοπές καθώς η δράση της προθερμασμένης ακίδας οδηγεί σε μεταβολή των ιδιοτήτων των υλικών (μαλάκωμα των υλικών) και μειωμένες απαιτήσεις σε δύναμη [73, 78]. Επιπλέον όμως η θερμότητα οδηγεί στην ενεργοποίηση χημικών αντιδράσεων που προκαλούν θραύση των ατομικών δεσμών, ώστε να διευκολύνεται η αποβολή υλικού [78]. Η θερμαινόμενη ακίδα μπορεί να χρησιμοποιηθεί, τόσο για κατεργασίες προσθήκης όσο και για κατεργασίες αποβολής υλικού. Οι ακίδες αυτές κατασκευάζονται από νοθευμένο πυρίτιο, ώστε εάν περάσει ρεύμα διαμέσου τους λόγω του φαινομένου Joule προκαλούν την παραγωγή θερμότητας κοντά στην άκρη τους [74].

Οι νανοκατεργασίες αποβολής υλικού μέσω μηχανικής επαφής σε μικροσκοπία ακίδας δεν έχουν μελετηθεί σε τέτοιο βαθμό όπως οι αντίστοιχες κατεργασίες προσθήκης υλικού μέσω μικροσκοπίων [77]. Η διεξαγωγή των νανοκατεργασιών αυτών με ελεγχόμενο τρόπο σε σχέση με τις αντίστοιχες της μακρο και μικροκλίμακας εμφανίζει δυσκολίες, με αποτέλεσμα να μην υπάρχει πάντα η κατάλληλη επαναληψιμότητα [77]. Το πρόβλημα της μειωμένης επαναληψιμότητας μπορεί να αντιμετωπιστεί με το κατάλληλο υλικό και λογισμικό (hardware και software) ώστε να είναι αυξημένη η ακρίβεια τοποθέτησης της ακίδας και η κίνησή της [78]. Για να αντιμετωπιστεί σε κάποιο βαθμό το φαινόμενο της έντονης φθοράς της ακίδας, οι ακίδες κατασκευάζονται είτε από διαμάντι, είτε έχουν επικάλυψη διαμαντιού και σκληρών κεραμικών [74]. Μια σημαντική διαφορά που υπάρχει μεταξύ των συμβατικών κατεργασιών κοπής και της νανοκοπής σε AFM είναι ότι στη δεύτερη περίπτωση επιβάλλεται σταθερή δύναμη στην ακίδα για να επιτευχθεί η αποβολή υλικού, οδηγώντας σε μια διαφορετική λογική, πάνω στην οποία αναμένεται να βασιστούν οι ειδικές εργαλειομηχανές που θα πραγματοποιούν νανοκατεργασίες με παρόμοιο τρόπο με αυτόν που διεξάγονται στο AFM [73]. Η κατεργασία νανοκοπής στο AFM πραγματοποιείται συνήθως στο contact mode και το βάθος καθορίζεται έμμεσα, μέσω των επιβαλλόμενων συνθηκών, όπως η κάθετη δύναμη [73]. Σε ορισμένες περιπτώσεις όμως μπορεί να προτιμηθεί και η χρήση του tapping mode για επίτευξη συνθηκών δυναμικής άρωσης, κάτι που βελτιώνει την επαναληψιμότητα των κατασκευαζόμενων δομών [74].

Η αποβολή υλικού και ο καθορισμός της γεωμετρίας και των διαστάσεων των παραγόμενων δομών στη νανοκοπή μέσω AFM εξαρτάται από το κάθετο φορτίο, τη γωνία που σχηματίζει η ακίδα με την επιφάνεια και την εγκάρσια πρόωση, όπως και τη γεωμετρία της άκρης της ακίδας [77, 78]. Αρχικά η επιφάνεια παραμορφώνεται ελαστικά και όταν ξεπεραστεί το όριο διαρροής ξεκινάει η εγχάραξη. Διακρίνονται τρεις τρόποι κατεργασίας, η άρωση, η δημιουργία δομών με μορφή σφήνας και η κοπή με δημιουργία αποβλίπτου [77]. Προκειμένου να δημιουργηθούν πολύπλοκες δομές είναι απαραίτητο να είναι εκ των προτέρων γνωστή η σχέση μεταξύ της κάθετης δύναμης και του βάθους, η οποία μπορεί να προσδιοριστεί είτε μέσω πειραμάτων και ανάπτυξη εμπειρικών σχέσεων είτε μέσω αναλυτικού/θεωρητικού μοντέλου [73]. Αρκετές φορές επιλέγεται η χρήση παραπάνω από μίας τεχνικών νανοκατεργασίας για να αποφευχθούν πιθανές ατέλειες. Για παράδειγμα, προκειμένου να αποφευχθεί η στρέψη της ακίδας και η φθορά του άκρου της, είναι καλύτερο να διεξάγονται οι κατεργασίες σε "δυναμικές" συνθήκες αντί για "στατικές", για παράδειγμα όπως οι κατεργασίες που υποβοηθούνται από ταλαντώσεις [73]. Στην

περίπτωση της κατεργασίας νανο-αυλακιών, ένα ζήτημα που προκύπτει είναι η αδυναμία των συνηθισμένων διατάξεων AFM να πραγματοποιήσουν κατεργασία σε μεγάλα μήκη π.χ. της τάξης των εκατοντάδων μm ή ακόμα και χιλιοστών [73].

Στα μικροσκόπια ακίδας είναι περιορισμένη η δυνατότητα σάρωσης στο επίπεδο XY και κατακόρυφα, παρόλα αυτά η ακρίβεια που παρέχεται σχετικά με τη θέση είναι αποδεκτή για ορισμένες κατεργασίες, οι οποίες δε θα ήταν δυνατό να πραγματοποιηθούν αλλιώς [77]. Καθώς το AFM έχει σχεδιαστεί μόνο για απεικόνιση επιφανειών, για να μπορεί να ελεγχθεί με ακρίβεια η κάθετη δύναμη, απαιτείται επιπλέον σύστημα ελέγχου κλειστού βρόχου για υψηλή ακρίβεια. Στην περίπτωση κατεργασίας καμπύλης επιφάνειας απαιτείται η χρήση επιπλέον εξοπλισμού, όπως ένα ειδικό έδρανο ατράκτων πεπιεσμένου αέρα [73]. Επίσης, για κυρτές επιφάνειες είναι δυνατό να κατασκευαστούν ειδικές βάσεις, όπως μια βάση με δυνατότητα κίνησης σε πέντε άξονες οι οποίες κινούνται μέσω ειδικών επενεργητών [78].

Ένα άλλο πρόβλημα που έχει παρατηρηθεί κατά τις κατεργασίες αποβολής υλικού μέσω AFM που προσομοιάζουν την εγχάραξη, είναι ότι δημιουργείται συσσώρευση υλικού γύρω από τις κατεργασμένες περιοχές λόγω πλαστικής παραμόρφωσης, αντί να αποβάλλεται το υλικό ξεκάθαρα μέσω αποβλίττου και εμφανίζουν χαμηλή αποδοτικότητα, καθώς ο ρυθμός αποβολής υλικού είναι αρκετά μικρός [72, 79]. Για αυτό το λόγο προτάθηκε να χρησιμοποιηθεί ένας εναλλακτικός τρόπος κίνησης της ακίδας του AFM, με τρόπο που να προσομοιάζει τη διάτρηση ή το φρεζάρισμα. Πιο συγκεκριμένα, με χρήση ειδικού επενεργητή, επιτεύχθηκε η περιστροφή της ακίδας του AFM σε υψηλή συχνότητα και το υπόστρωμα διατηρούνταν σταθερό. Σε αυτή την περίπτωση υπερίσχυσε ο μηχανισμός διάτμησης και παρήχθη μακρύ καμπυλωμένο απόβλιττο [72]. Η διάταξη που χρησιμοποιείται σε παρόμοιες περιπτώσεις διαφέρει από τα συνήθη εμπορικά AFM, οδηγεί σε αυξημένη δυσκαμψία, δεν απαιτεί έλεγχο της δύναμης και οδηγεί σε αυξημένη παραγωγικότητα. [80, 81]. Άλλες δυνατότητες για την αύξηση της παραγωγικότητας των νανοκατεργασιών με AFM είναι η χρήση πολλαπλών ακίδων ή παραλληλοποίηση της κατεργασίας, η αύξηση της ακρίβειας των διαστάσεων και της γεωμετρίας της ακίδας, ώστε να αυξηθεί και η αξιοπιστία της κατεργασίας, αλλά και η αύξηση της ταχύτητας σάρωσης μέσω κατάλληλων συστημάτων αυτομάτου ελέγχου και η αποδοτικότερη διατήρηση της επιθυμητής απόστασης μεταξύ των ακίδων και του υποστρώματος [74, 78]. Η υλοποίηση της χρήσης πολλαπλών ακίδων επιτυγχάνεται με δύο τρόπους, την χρήση συστοιχίας "παθητικών" ακίδων ή "ενεργών" ακίδων [74]. Οι συστοιχίες παθητικών ακίδων προσκολλώνται στο μηχανισμό κίνησης και καθοδηγούνται για να πραγματοποιήσουν την κατεργασία, ενώ στις συστοιχίες ενεργών ακίδων, οι ακίδες μπορούν να ενεργοποιούνται επιλεκτικά με χρήση κατάλληλων αισθητήρων, ώστε να παράγονται συγκεκριμένα μοτίβα με μεγάλη ευελιξία [74].

Η χρήση ταλαντώσεων συμβάλλει στην ευκολότερη κατεργασία ιδιαίτερα σκληρών υλικών, καθώς οδηγεί σε μικρότερες απαιτούμενες δυνάμεις, μεγαλύτερη διάρκεια ζωής της ακίδας, ευστάθεια της κατεργασίας και καλύτερη ποιότητα επιφανείας [82]. Οι ταλαντώσεις μπορούν να είναι γραμμικές είτε ελλειπτικές. Παρόλη την πρόοδο που έχει συντελεστεί τα τελευταία χρόνια στον τομέα του νανοφρεζαρίσματος μέσω AFM, υπάρχει ακόμα σημαντικό ενδιαφέρον για ειδικές περιπτώσεις όπως η κατεργασία σκληρών

κεραμικών, καθώς δεν έχουν κατανοηθεί πλήρως τα φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα κατά τις νανοκατεργασίες, όπως οι μηχανισμοί αποβολής υλικού, το ελάχιστο ΠΑΑ, η μετάβαση από ψαθυρή σε όλκιμη κοπή και η επίδραση της κατεργασίας στην περιοχή κάτω από την επιφάνεια [79].

### **3.1.5 Μελέτες νανοκατεργασιών με χρήση μικροσκοπίων ακίδας**

Όπως αναλύθηκε στην προηγούμενη υποενότητα, η χρήση των μικροσκοπίων ακίδας για πραγματοποίηση νανοκατεργασιών ειδικότερα τις τελευταίες δύο δεκαετίες αυξάνεται, με αποτέλεσμα να έχει σημειωθεί πρόοδος στις δυνατότητες των μηχανικών νανοκατεργασιών, ώστε να μπορούν να χρησιμοποιηθούν στο μέλλον σε μεγαλύτερο εύρος εφαρμογών. Στην παρούσα υποενότητα παρουσιάζονται ενδεικτικά ορισμένες σχετικές μελέτες, προκειμένου να γίνει εμφανής η πρόοδος που έχει συντελεστεί σε αυτό τον τομέα, οι δυνατότητες των κατεργασιών TBN, αλλά και οι περιορισμοί τους και οι μέθοδοι που εφαρμόζονται για τη βελτίωση της αποδοτικότητάς τους.

#### **3.1.5.1 Νανοκατεργασίες σε AFM**

Οι Wang et al. [83] μελέτησαν την επίδραση της ανισοτροπίας του πυριτίου κατά τη νανοκοπή, πραγματοποιώντας κατεργασία σε διάφορες κατευθύνσεις, καθώς και τη φθορά της ακίδας. Παρατήρησαν την επίδραση του λόγου βάρους αυλακιού προς ύψος του συσσωρευμένου υλικού και διαπίστωσαν ότι συνδέεται με τη μετάβαση από συνθήκες άρωσης σε συνθήκες κοπής, για αυξανόμενες τιμές του λόγου. Επίσης, παρατηρήθηκε ότι το scratch ratio, δηλαδή ο λόγος του βάρους εγχάραξης προς την οριακή τιμή δύναμης συνδέεται με την κατεργασιμότητα. Τέλος, μέσω παρατήρησης της μικροδομής και της ανάπτυξης ρωγμών, εντοπίστηκαν οι συνθήκες μετάβασης από ψαθυρή σε όλκιμη κοπή.

Οι Ahn και Lee [84] πρότειναν τη χρήση ακουστικών κυμάτων για την επίβλεψη της νανοκοπής σε AFM. Παρατήρησαν ότι η μέθοδος αυτή μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον εντοπισμό της μετάβασης από συνθήκες άρωσης σε συνθήκες κοπής. Οι Brousseau et al. [85] κατασκεύασαν μια διάταξη για διάνοιξη αυλακιών σε μεγάλα μήκη (της τάξης των εκατοστών) με ικανοποιητική ταχύτητα (έως 32 mm/min), με χρήση ειδικών ραούλων σε AFM. Στα πειράματά τους παρατήρησαν επίσης τη σημασία της κατεύθυνσης κοπής. Η κατασκευή αυτής της διάταξης είναι πολλά υποσχόμενη για εφαρμογή στον τομέα των νανοκοπών, εάν λυθούν διάφορα τεχνικά προβλήματα.

Οι Cheng et al. [86] μελέτησαν τη δυνατότητα επιτήρησης της κατεργασίας της νανοκοπής σε AFM με αυτοματοποιημένο σύστημα που λαμβάνει ως είσοδο μετρήσεις μέσω της φωτοδιόδου του AFM, με έμφαση στην αποδοτικότητα της κατεργασίας και τη φθορά της ακίδας. Με βάση τις παρατηρήσεις τους, διαπιστώθηκε ότι η φθορά της ακίδας περιλαμβάνει τρία στάδια: την ομαλή κοπή, τη μεταβατική ζώνη και μη ομαλή κοπή λόγω αυξημένης φθοράς της ακίδας.

Οι Fang et al. [87] μελέτησαν την τραχύτητα επιφανείας σε σχέση με τις συνθήκες κατεργασίας και τη σκληρότητα του δοκιμίου. Οι Geng et al. [88] διεξήγαγαν πειραματική μελέτη σχετική με τους παράγοντες που επιδρούν στο βάθος των αυλακιών που παράγονται μέσω νανο-φρεζαρίσματος όπως η ασκούμενη δύναμη και η πρόωση.



Επιπλέον, η ίδια ερευνητική ομάδα σε άλλες μελέτες [89, 90] διερεύνησε την επίδραση παραγόντων όπως το κάθετο φορτίο, η ταχύτητα κοπής και η πρόωση κατά τη διάνοιξη νανοαυλακίων μήκους χιλιοστών σε AFM. Ανάλογα με τις συνθήκες, παρατήρησαν διαφορετικά είδη αποβλίττου, διαφορετικές συνθήκες αποβολής υλικού, όπως άρωση και κοπή και διαφορές στην ποιότητα επιφανείας. Επίσης, διερευνήθηκε η δυνατότητα αύξησης της ταχύτητας κατά την κατεργασία αυλακίων με AFM, ώστε να αυξηθεί σημαντικά ο ρυθμός αποβολής υλικού. Αρχικά, μελετήθηκε η επίδραση διαφόρων παραγόντων στο βάθος των αυλακίων και στην μορφή του αποβλίττου. Αναφορικά με την ταχύτητα, ο μηχανισμός που χρησιμοποίησαν επέτρεψε την αύξηση της ταχύτητας έως και στα 5 m/min.

Οι Huang et al. [91] διεξήγαν πειράματα νανο-εγχάραξης σε περιβάλλον αέρα και σε υδάτινο περιβάλλον για τον εντοπισμό της επίδρασης των παραμέτρων κατεργασίας στα γεωμετρικά χαρακτηριστικά των αυλακίων, το συντελεστή τριβής, τη μορφή του αποβλίττου και την κατεργασιμότητα πολυστρωματικών επικαλύψεων Cr<sub>2</sub>N/Cu. Οι Kawasegi et al. [92] πραγματοποίησαν νανοκοπή σε πυρίτιο, προκειμένου να μελετήσουν το επιτεύξιμο βάθος, τον τρόπο κοπής, τη φθορά της ακίδας υπό διάφορα επιβαλλόμενα φορτία, ταχύτητες και αριθμό πάσων. Οι Peng et al. [93] πραγματοποίησαν νανοκοπή αυλακίων σε αλουμίνιο. Υπογράμμισαν ότι η κατεργασία αυτή έχει χαμηλότερο κόστος σε σχέση με τη φωτολιθογραφία και προσδιόρισαν την επιβαλλόμενη δύναμη, ως σημαντικότερη παράμετρο ελέγχου του βάθους κοπής.

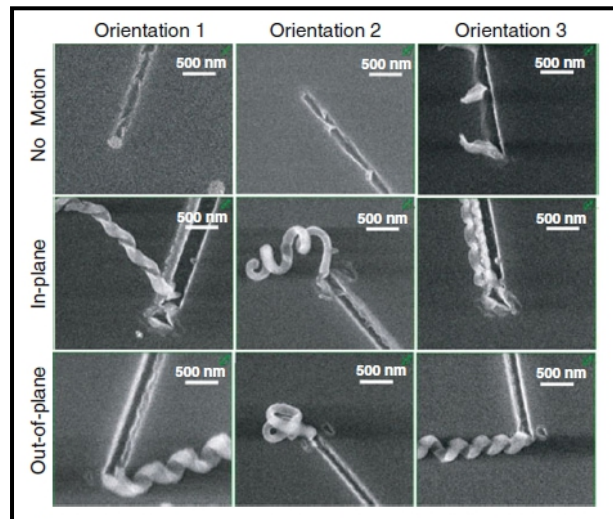
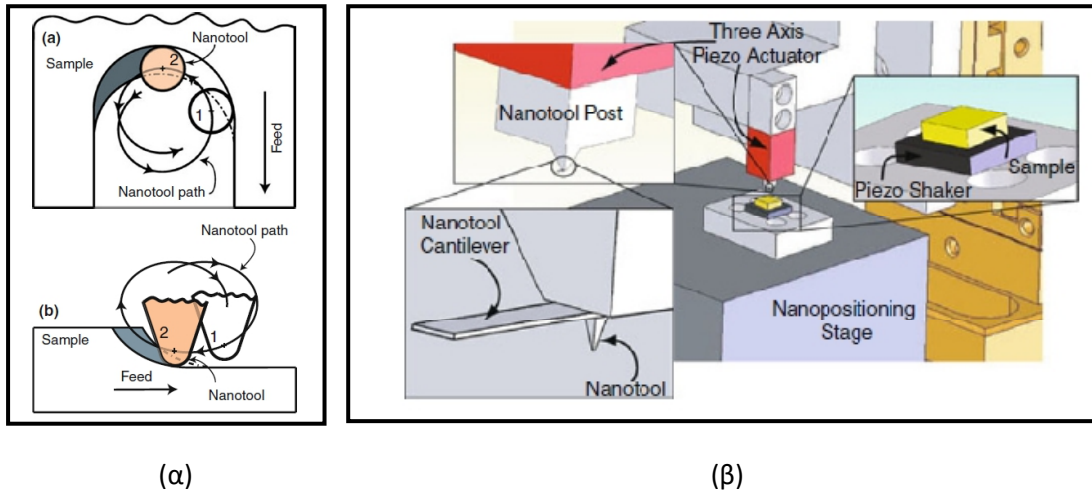
Οι Gozen και Ozdoganlar [80] πραγματοποίησαν νανοκατεργασία με περιστροφή της ακίδας με υψηλή ταχύτητα, με τρόπο που προσομοιάζει το νανοφρεζάρισμα, όπως απεικονίζεται στο σχήμα 3.2. Μετά από πειράματα με αυλάκια διαφορετικών διαμέτρων, διαπίστωσαν ότι κατά την κοπή επικρατούσαν συνθήκες έντονης διάτμησης, μακριά και καμπύλα απόβλιττα, μικρότερες δυνάμεις από την κατεργασία εγχάραξης.

Οι Yan et al. [94] κατασκεύασαν ένα νέο σύστημα για νανοκατεργασίες σε AFM με αρκετές ομοιότητες με τις συμβατικές εργαλειομηχανές, προκειμένου να μειώσουν τα μη-γραμμικά φαινόμενα και τη χαμηλή επαναληψιμότητα των νανοκοπών σε AFM. Διενεργήθηκαν πειράματα με διάφορες γεωμετρικές ακίδας, κατευθύνσεις κοπής, επιβαλλόμενες δυνάμεις, ταχύτητες κοπής και προώσεις, προκειμένου να ερευνηθεί η επίδρασή τους στο βάθος κοπής και στη συνέχεια δημιουργήθηκαν πιο σύνθετες 3D δομές.

Οι Zhang et al. [95] μελέτησαν την επίδραση της εγκάρσιας πρόωσης και της ταχύτητας κοπής στο μηχανισμό αποβολής υλικού και τη δημιουργία αποβλίττου κατά τις νανοκοπές στο AFM. Παρατήρησαν ότι η σημαντικότερη παράμετρος για τη μορφολογία του αποβλίττου ήταν η εγκάρσια πρόωση και ότι δημιουργήθηκαν 3 διαφορετικά είδη αποβλίττου ανάλογα με τις συνθήκες. Σε επόμενη μελέτη, οι Zhang et al. [96] διερεύνησαν το ελάχιστο ΠΑΑ, υπό διάφορες συνθήκες κατά τη νανοκοπή με AFM για δύο διαφορετικά υλικά (αλουμίνιο και χαλκός) και ανέπτυξαν εμπειρικές σχέσεις για την πρόβλεψη του ελάχιστου ΠΑΑ.

Οι Zhao et al. [97] πραγματοποίησαν κοπή πυριτίου με υπό διάφορα επιβαλλόμενα φορτία και ταχύτητες κοπής και παρατήρησαν τις αλλαγές στο ρυθμό αποβολής υλικού, τη μορφή του αποβλίττου και τη φθορά της ακίδας. Διαπίστωσαν ότι το AFM παρέχει καλή

δυνατότητα ελέγχου της κατεργασίας, της διαστατικής ακρίβειας και της ποιότητας επιφανείας του ΤΕ.



(γ)

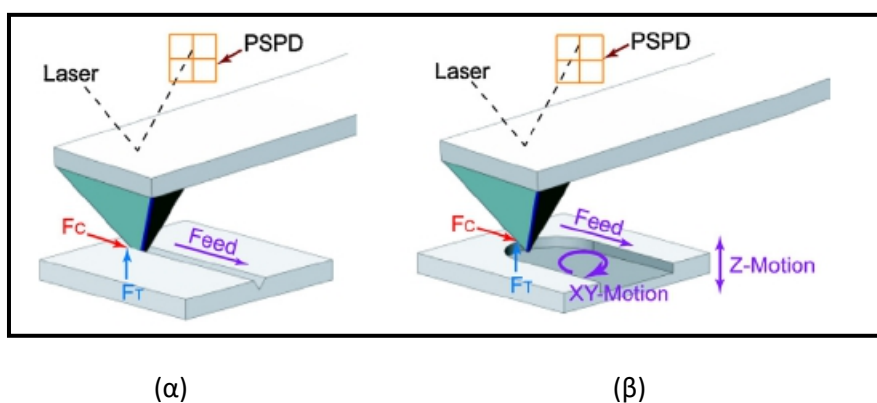
**Σχήμα 3.2.** (α) Αρχή νανο-φρεζαρίσματος, (β) Διάταξη νανοφρεζαρίσματος, (γ) Αυλάκια και απόβλιττο κατά το νανο-φρεζάρισμα [80].

Τέλος, οι Mekid et al. [98] τόνισαν την σημασία της χρήσης των μικροσκοπίων ακίδας στην εκπαίδευση μαθητών και φοιτητών προκειμένου να εξοικειωθούν με τη νανοτεχνολογία.

### 3.1.5.2 Νανοκατεργασίες σε AFM με υποβοήθηση

Λόγω της ιδιαίτερης σημασίας που έχει η χρήση υποβοήθησης από ταλαντώσεις στις νανοκοπές, έχουν πραγματοποιηθεί αρκετές σχετικές μελέτες. Η κινηματική της κατεργασίας απεικονίζεται στο σχήμα 3.3. Οι Deng et al. [99] πραγματοποίησαν νανοκοπές με υποβοήθηση από ταλαντώσεις (με κυκλική κίνηση στο  $xy$  επίπεδο και γραμμική στον  $z$ ) σε ένα ή περισσότερα πάσα, διερευνώντας την επίδραση διαφόρων παραμέτρων, όπως την επιβαλλόμενη δύναμη, το βαθμό επικάλυψης, το μέτρο της ταλάντωσης στον  $z$  άξονα και την ταχύτητα κοπής στην κατασκευή διαφόρων 3D νανοδομών. Οι ίδιοι συγγραφείς σε μετέπειτα μελέτη [100] επέκτειναν τις διερευνήσεις τους στο ίδιο αντικείμενο. Οι Kong et

α). [101] διεξήγαν πειράματα για να προσδιορίσουν τη συσχέτιση μεταξύ χαρακτηριστικών της γεωμετρίας των δομών που κατεργάζονταν και τις παραμέτρους κατεργασίας, όπως το πλάτος της ταλάντωσης, τη δύναμη και την πρόωση και κατασκεύασαν σχετικό εμπειρικό μοντέλο. Οι Kong et al. [102] επίσης μελέτησαν τρόπους για αύξηση της παραγωγικότητας και μείωση φθοράς της ακίδας, μέσω κυκλικής κίνησης της ακίδας κατά την κατεργασία, με τρόπο που να προσομοιάζει το φρεζάρισμα. Σε άλλη μια εργασία τους οι ίδιοι συγγραφείς [103] εστίασαν στην διερεύνηση της φθοράς της ακίδας, διενεργώντας χαρακτηρισμό του είδους της φθοράς ανάλογα με τις συνθήκες της νανοκοπής (δύναμη, πρόωση) και διέκριναν τρία επιμέρους στάδια. Οι Liu et al. [104] διεξήγαν πειράματα νανοκοπής υποβοηθούμενης με ταλαντώσεις στο tapping mode του AFM, με παράγοντες το πλάτος και τη συχνότητα της ταλάντωσης, την ακτίνα της ακίδας, τις μηχανικές ιδιότητες ακίδας και υποστρώματος. Οι Park et al. [105] μελέτησαν την επίδραση διαφορετικών τεχνικών ταλαντώσεων στη γεωμετρία των αυλακιών. Τα αποτελέσματα σχετικά με την απαιτούμενη δύναμη, την τριβή και τη δημιουργία γρεζιού έδειξαν ότι η τεχνική των ελλειπτικών ταλαντώσεων υπερτερεί της συμβατικής, καθώς αυξάνει την απόδοση της κατεργασίας.



**Σχήμα 3.3.** (α) Συμβατική νανοκατεργασία εγχάραξης (β) Νανοκατεργασία εγχάραξης υποβοηθούμενη από ταλαντώσεις [105].

Σχετικά με την κατεργασία φιλμ μικρού πάχους, οι Shi et al. [106] ανέπτυξαν μια παραλλαγή της νανοκοπής, χρησιμοποιώντας τη φάση της ταλάντωσης του προβόλου ως μέθοδο ελέγχου κλειστού βρόχου ώστε να μειωθούν τα φαινόμενα αφαίρεσης λιγότερου ή περισσότερου υλικού (overcutting και undercutting) και η φθορά της ακίδας. Με αυτό τον τρόπο, έγινε δυνατή η αποφυγή φαινομένου συσσώρευσης υλικού (εκτός του αποβλίττου) και η πρόβλεψη του βάθους έγινε πιο άμεσα δυνατή. Οι Zhou et al. [107] πραγματοποίησαν πειράματα νανοκατεργασίας σε AFM με υποβοήθηση από πηγή θερμότητας και ταλαντώσεις με ακίδα χαμηλής δυσκαμψίας. Παρατήρησαν ότι η θερμότητα χαμηλώνει τις απαιτήσεις σε δύναμη, μειώνει την δύναμη προσκόλλησης και δημιουργεί πιο ομοιόμορφα μοτίβα.

### 3.1.5.3 Νανοκατεργασίες σε άλλα μικροσκόπια και διατάξεις

Εκτός από τη χρήση μικροσκοπίων όπως το AFM, είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθούν πρωτότυπες διατάξεις με παρόμοιες βασικές αρχές, προκειμένου να πραγματοποιηθούν νανοκατεργασίες [73]. Οι πρώτες προσπάθειες ξεκίνησαν τουλάχιστον είκοσι χρόνια πριν, σχεδόν παράλληλα με τις πρώτες σοβαρές απόπειρες χρήσης των μικροσκοπίων ακίδας για

νανοκατεργασίες εκτός από τις δοκιμές σκληρομέτρησης και νανο-εγχάραξης. Εκτός από τις δυσκολίες επίτευξης ακρίβειας της τάξης των νανομέτρων στις διατάξεις, ένα σοβαρό πρόβλημα είναι ο μηχανισμός άσκησης της δύναμης, καθώς απαιτεί ακριβείς αισθητήρες και κατάλληλο σύστημα ελέγχου. Ένα παρόμοιο σύστημα κατασκευάστηκε από τους Gao et al. [108], το οποίο είχε δυνατότητες τόσο για δοκιμές, όσο και για νανοκοπές και μπορούσε να ενσωματωθεί σε κάποιο κατάλληλο οπτικό μικροσκόπιο ή SEM. Έγινε χρήση πιεζοηλεκτρικού μηχανισμού για την κίνηση του υποστρώματος στις τρεις διαστάσεις και χρησιμοποιήθηκαν αισθητήρες δύναμης με ακρίβεια κάτω του 1 mN. Μετά τη διαδικασία βαθμονόμησης παρατηρήθηκαν τα διάφορα προβλήματα που παρουσιάζουν αντίστοιχες διατάξεις, όπως ο ηλεκτρονικός θόρυβος, οι μηχανικές ταλαντώσεις και η επίδραση της θερμότητας.

Άλλη μια ιδιοκατασκευή με χρήση ακίδας και πλατφόρμα τοποθέτησης του υποστρώματος περιγράφηκε από τους Guo et al. [109], μέσω της οποίας μελετήθηκε η επίδραση διαφόρων παραμέτρων, όπως η κατεύθυνση κίνησης της ακίδας, η ταχύτητα, η πρόωση και η ασκούμενη δύναμη και αναπτύχθηκε κατάλληλο μοντέλο για την συσχέτιση αυτών των παραμέτρων με τη γεωμετρία των δομών που κατασκευάζονται. Στη σχετική βιβλιογραφία, αναφέρονται διάφορες παρόμοιες προσπάθειες καθώς και περιπτώσεις κατασκευής αισθητήρων δύναμης ή συστημάτων ελέγχου για να γίνεται εφικτή η λειτουργία μια τέτοιας διάταξης [110]. Έχουν αναφερθεί και περιπτώσεις στις οποίες χρησιμοποιείται κάποια άλλη εξειδικευμένη μηχανή κοπής για νανοκοπές, όπως ένας δισκοτόμος για εξαιρετικά λεπτά πάχη με τοποθετημένους αισθητήρες, στον οποίο έγινε χρήση ενός εργαλείου με ακτίνα καμπυλότητας ακμής 7 nm για τη νανοκατεργασία άμορφου πολυμερούς, κατά την οποία παρατηρήθηκαν ζώνες διάτμησης οι οποίες είχαν προβλεφθεί από μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων [111].

Τέλος, σε ορισμένες περιπτώσεις, όπως προαναφέρθηκε, έχουν χρησιμοποιηθεί ειδικές διατάξεις για νανοκατεργασίες σε μικροσκόπια SEM. Οι Fang et al. [112] κατασκεύασαν μια διάταξη νανοκοπής για χρήση σε μικροσκόπιο SEM και μελέτησαν την απόδοσή της και την ακρίβειά της. Η ακίδα μπορούσε να κινηθεί για 7  $\mu\text{m}$  με 0.6 nm ακρίβεια, με ακτίνα καμπυλότητας 43 nm. Το υλικό που κατεργάστηκαν ήταν πυρίτιο και κατά τα πειράματα με διαφορετικά βάθη κοπής παρατηρήθηκε η μορφή του αποβλίττου, η μετάβαση από συνθήκες ψαθυρής σε όλκιμη κοπή και διαπιστώθηκε η ικανοποιητική επαναληψιμότητα των αποτελεσμάτων. Οι Liao et al. [113] έκαναν χρήση μιας ακίδας AFM σε SEM, με ειδικό ελεγκτή με ανάδραση από εικόνες της επιφάνειας που κατεργάζεται. Μέσω μιας επαναληπτικής διαδικασίας, έγινε δυνατό να μειωθούν τα σφάλματα της κατεργασίας. Οι Liu et al. [114] επίσης χρησιμοποίησαν μια ειδική πλατφόρμα για νανοκοπές, για να μελετήσουν τις συνθήκες όλκιμης κοπής του πυριτίου σε SEM πραγματοποιώντας πειράματα με διαφορετική ακτίνα καμπυλότητας της ακίδας και διαφορετικούς κρυσταλλικούς προσανατολισμούς του υλικού του TE. Μέσω αυτών των πειραμάτων, έγινε δυνατή η μελέτη της μετάβασης από ψαθυρή σε όλκιμη κοπή και το ελάχιστο ΠΑΑ.

### **3.1.6 Εφαρμογές νανοκατεργασιών**

Προϊόντα νανοκατεργασιών μπορούν να χρησιμοποιηθούν στους τομείς της φωτονικής, της ενέργειας, της μικροηλεκτρονικής και της βιοτεχνολογίας. Μερικά παραδείγματα

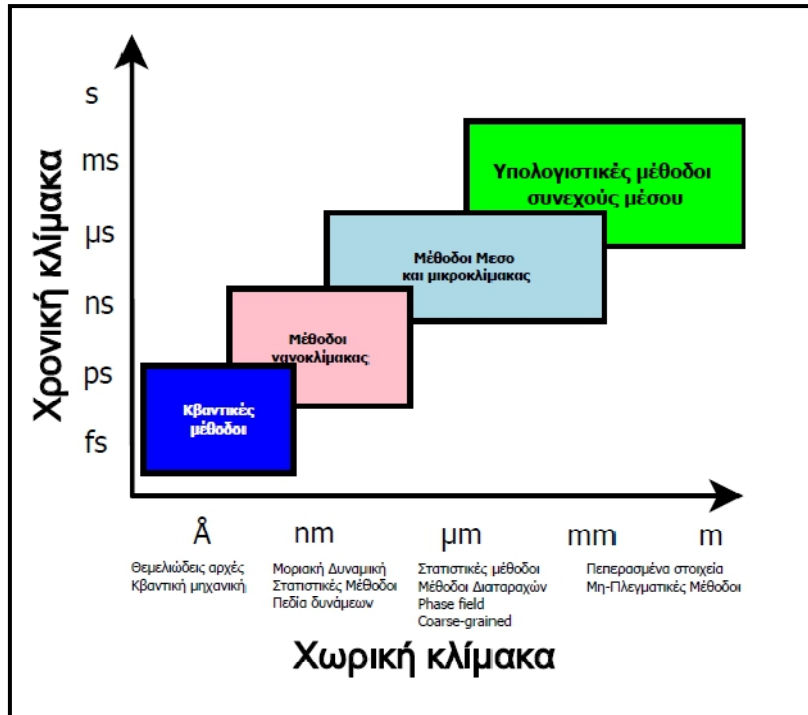
εφαρμογών των νανοκατεργασιών είναι η κατασκευή ειδικών αντιανακλαστικών επιφανειών για την αύξηση της απόδοσης των φωτοβολταϊκών, για συστήματα LED, η δημιουργία φακών ή συστοιχιών φακών με διαστατική ακρίβεια λίγων νανομέτρων για μεγάλα τηλεσκόπια, κατασκευή μπαταριών υψηλής απόδοσης, τα ολοένα μικρότερων διαστάσεων ηλεκτρονικά κυκλώματα που πλέον έχουν διαστάσεις συγκρίσιμες με το μέγεθος των ατόμων (γι'αυτό πλέον ονομάζονται "μοριακά κυκλώματα" και η αντίστοιχη τεχνολογία μοριακή ηλεκτρονική, *moletronics*) και επιτρέπουν σημαντική αύξηση των επιδόσεων των υπολογιστικών συστημάτων, τους κβαντικούς υπολογιστές, κατασκευή νανოსύνθετων επικαλύψεων για μεγάλη ανθεκτικότητα των κοπτικών εργαλείων στη φθορά, κατασκευή νανο-καλουπιών, στη βιοϊατρική π.χ. για τη μεταφορά και εισαγωγή φαρμάκων στον οργανισμό καθώς και διάφορες εφαρμογές βασισμένες στο βιομιμητισμό [70, 71, 77]. Ειδικότερα, στα διαστημικά τηλεσκόπια απαιτείται η τραχύτητα να είναι μικρότερη από  $4.4 \text{ \AA}$ , ώστε να εντοπίζεται το υπεριώδες φάσμα [69, 70].

### **3.2 Θεωρία της μεθόδου Μοριακής Δυναμικής και βήματα μοντελοποίησης κατεργασιών αποβολής υλικού στη νανοκλίμακα**

#### **3.2.1 Εισαγωγή**

Στην περίπτωση των κατεργασιών αποβολής υλικού στην νανο-κλίμακα, η χρήση μοντέλων πεπερασμένων στοιχείων (ΠΣ) δεν ενδείκνυται ή σταδιακά παύει να αποδίδει με ακρίβεια τις συνθήκες που επικρατούν κατά τις κατεργασίες σε αυτή την κλίμακα και επομένως, καθίσταται αναγκαία η μετάβαση σε μια μέθοδο η οποία μπορεί να περιγράψει με ακρίβεια τα φαινόμενα, αλλά και θα είναι περισσότερο συμβατή προς τους νόμους που διέπουν τη συμπεριφορά της ύλης σε αυτή την κλίμακα. Η πιο κατάλληλη μέθοδος για αυτό το σκοπό είναι η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής (ΜΔ), η οποία έχει τη δυνατότητα να λαμβάνει υπόψη εγγενώς τη διακριτή φύση της ύλης στη νανοκλίμακα και να προσεγγίζει τις αναπτυσσόμενες δυνάμεις, θερμοκρασίες και μεταβολές της μικροδομής του υλικού με μεγαλύτερη ακρίβεια. Προκειμένου να είναι δυνατόν να γίνει αντιληπτή η κλίμακα μεγέθους των νανοκατεργασιών, στο σχήμα 3.4 παρουσιάζονται οι χρονικές και χωρικές κλίμακες που αντιστοιχούν στο επίπεδο των νανοκατεργασιών ενώ στο Παράρτημα της διατριβής παρατίθεται πίνακας με τα προθέματα των μονάδων που χρησιμοποιούνται στο SI.

Η μέθοδος ΜΔ αναπτύχθηκε στις αρχές της δεκαετίας του 1950 από τους Alder και Wainwright [115] και είχε ως σκοπό τη μελέτη φαινομένων στο πεδίο της επιστήμης των υλικών. Είναι μια μέθοδος η οποία αντιμετωπίζει τα θεμελιώδη στοιχεία του TE ως σύνολα που αποτελούνται από διακριτές στοιχειώδεις οντότητες, οι οποίες είναι τα άτομα. Στις πρώτες προσομοιώσεις, χρησιμοποιήθηκε ένα απλό μοντέλο «σκληρών σφαιρών» [33]. Η αλληλεπίδραση μεταξύ σωμάτων σε αυτό το επίπεδο, παρ' ότι διέπεται από τις αρχές της κβαντικής φυσικής και πιο συγκεκριμένα της επίλυσης της εξίσωσης του Schrödinger, πραγματοποιεί μια προσέγγιση, υιοθετώντας κατάλληλες συναρτήσεις για να περιγράψουν την ενέργεια του συστήματος ατόμων και χρησιμοποιώντας το δεύτερο νόμο του Νεύτωνα της κλασικής φυσικής, υπολογίζονται οι τροχιές των ατόμων λόγω των αλληλεπιδράσεών τους.

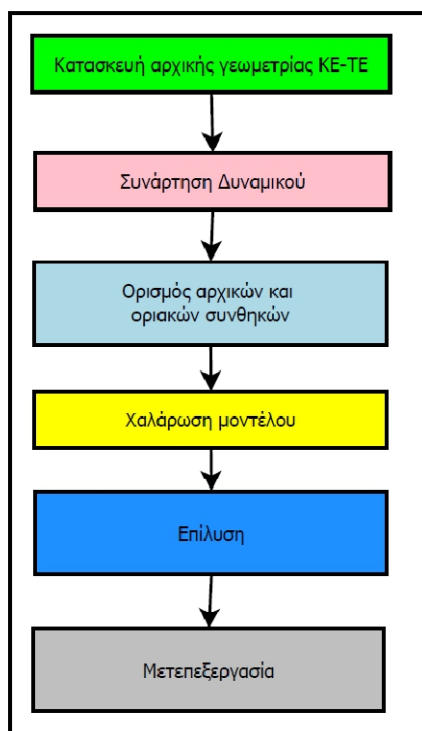


Σχήμα 3.4. Υπολογιστικές μέθοδοι σε διάφορες χρονικές και χωρικές κλίμακες.

Η υιοθέτηση της μεθόδου στον τομέα της μηχανολογίας επιχειρεί να συμβάλλει προς την κατανόηση των φυσικών φαινομένων που συμβαίνουν κατά τη διεξαγωγή των κατεργασιών αποβολής υλικού ή φαινομένων που σχετίζονται με την τριβολογική συμπεριφορά επιφανειών, κάτι που είναι ιδιαίτερα χρήσιμο λόγω των διαφόρων φαινομένων που συμπεριλαμβάνουν επαφή. Στην περίπτωση των νανο-κοπών, η μέθοδος της ΜΔ χρησιμοποιήθηκε για πρώτη φορά πριν από τρεις δεκαετίες από την ερευνητική ομάδα του Belak στις Ηνωμένες Πολιτείες. Οι πρώτες αυτές προσομοιώσεις αφορούσαν την λίαν υψηλής ακρίβειας κατεργασία τόσο μεταλλικών όσο και κεραμικών υλικών [116]. Στην υποενότητα 3.3 θα παρουσιαστούν αναλυτικά οι εφαρμογές της μεθόδων στις νανοκατεργασίες έως σήμερα.

### 3.2.2 Περιγραφή των σταδίων της προσομοίωσης κατεργασιών αποβολής υλικού μέσω ΜΔ

Οι προσομοιώσεις κατεργασιών αποβολής υλικού στη νανοκλίμακα μέσω της μεθόδου ΜΔ περιλαμβάνουν τα ίδια γενικά στάδια που περιλαμβάνουν και οι προσομοιώσεις μακροσκοπικών συστημάτων, δηλαδή την προεπεξεργασία για την κατασκευή του μοντέλου (κατασκευή γεωμετρίας ΚΕ και ΤΕ, ορισμός συναρτήσεων δυναμικού, επιβολή οριακών συνθηκών, επιλογή παραμέτρων επίλυσης) το στάδιο της επίλυσης και το στάδιο της μετεπεξεργασίας των αποτελεσμάτων του μοντέλου. Τα στάδια αυτά παρουσιάζονται σχηματικά στο διάγραμμα ροής του σχήματος 3.5 και περιγράφονται αναλυτικά στις επόμενες υποενότητες.



**Σχήμα 3.5.** Στάδια προσομοίωσης ΜΔ.

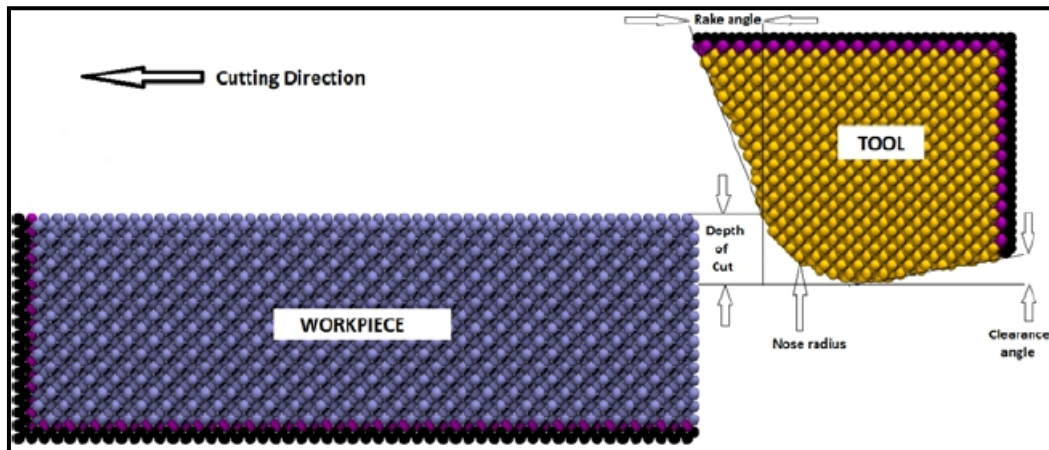
### 3.2.2.1 Κατασκευή της γεωμετρίας του υπολογιστικού μοντέλου

Η κατασκευή της γεωμετρίας του υπολογιστικού μοντέλου αποτελεί το πρώτο βήμα της ανάπτυξής του, όπως φαίνεται στο διάγραμμα ροής του σχήματος 3.5, κάτι που συμβαίνει σε όλα τα γνωστά είδη προσομοιώσεων. Η αξιόπιστη αναπαράσταση της γεωμετρίας του μοντέλου είναι θεμελιώδους σημασίας στις προσομοιώσεις ΜΔ και θα πρέπει το μοντέλο να προσεγγίζει όσο το δυνατόν τα πραγματικά συστήματα. Τα μοντέλα των προσομοιώσεων αποβολής υλικού στη νανοκλίμακα συνήθως αποτελούνται από το ΚΕ ή γενικότερα τα σώματα που δρουν ως ΚΕ π.χ. λειαντικοί κόκκοι, ακίδα AFM και το TE (substrate). Στη συνέχεια, θα περιγραφεί η κατασκευή των βασικών μορφών ΚΕ και TE που συναντώνται στη βιβλιογραφία των προσομοιώσεων των νανο-κατεργασιών αποβολής υλικού.

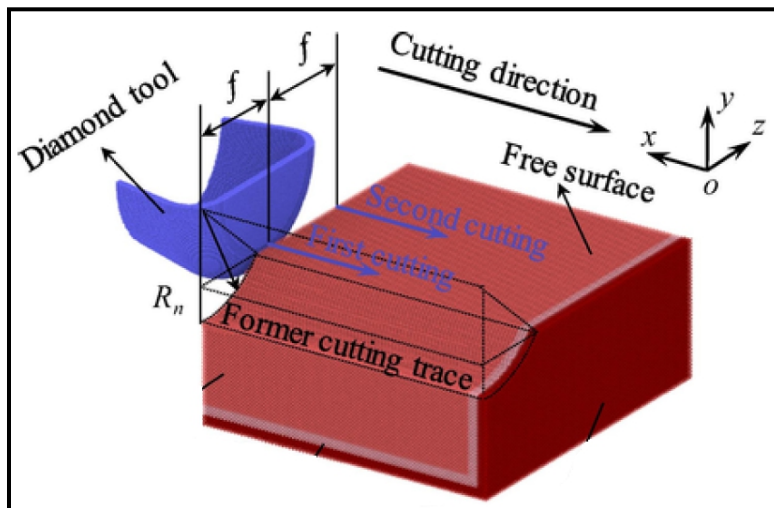
#### *Κατασκευή της γεωμετρίας του TE*

Η γεωμετρία του τεμαχίου στην απόλυτη σχεδόν πλειοψηφία των προσομοιώσεων νανο-κατεργασιών αποβολής υλικού μέσω ΜΔ είναι ιδιαίτερα απλή, καθώς το τεμάχιο αναπαρίσταται συνήθως ως ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο (box-shaped). Σε ορισμένες σπάνιες περιπτώσεις, οι οποίες κυρίως έχουν παρουσιαστεί πρόσφατα η γεωμετρία του δοκιμίου που χρησιμοποιείται είναι τροποποιημένη ώστε να λαμβάνει υπόψη την αποβολή υλικού που έλαβε χώρα σε προηγούμενη φάση της κατεργασίας, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.6β. Εκτός από αυτές τις περιπτώσεις, μοντέλα με ορισμένες τροποποιήσεις, είτε στη γεωμετρία είτε στη δομή των TE θα αναφερθούν στη συνέχεια, στην υποενότητα που αφορά τις εφαρμογές της μεθόδου ΜΔ στην προσομοίωση νανοκατεργασιών. Οι διαστάσεις των TE στα περισσότερα μοντέλα κυμαίνονται έως μερικές δεκάδες νανόμετρα και μερικές εκατοντάδες χιλιάδες άτομα, ενώ μόνο σε ελάχιστες περιπτώσεις με χρήση

μοντέλων πολλών εκατομμυρίων ατόμων, το μέγεθος του τεμαχίου σε τουλάχιστον μία διάσταση υπερβαίνει τα 100 nm.



(α)



(β)

**Σχήμα 3.6.** Χαρακτηριστικές μορφές ΤΕ στα μοντέλα ΜΔ των νανοκατεργασιών (α) Μοντέλο «ορθογωνικής» νανοκοπής, (β) πιο ρεαλιστικό μοντέλο νανοκοπής [117, 118].

Η κατασκευή της γεωμετρίας του δοκιμίου επιτυγχάνεται μέσω της ακριβούς αναπαράστασης της δομής του υλικού του δοκιμίου σε ατομικό επίπεδο. Εάν το υλικό έχει σαφή κρυσταλλική δομή (π.χ. FCC, BCC, HCP), τότε το δοκίμιο προκύπτει μέσω αντιγραφής της μοναδιαίας κυψελίδας κατά τον επιθυμητό αριθμό σε κάθε διάσταση, έχοντας ως δεδομένο τον επιθυμητό προσανατολισμό [119]. Σε αντίθεση με τις προσομοιώσεις πεπερασμένων στοιχείων, δεν υφίσταται η έννοια της πύκνωσης πλέγματος ή έστω διαστάσεων των σωματιδίων, όπως στις μη πλεγματικές μεθόδους, καθώς τα θεμελιώδη στοιχεία του μοντέλου, δηλαδή τα άτομα έχουν προφανώς προκαθορισμένο μέγεθος. Επίσης, πρέπει να ληφθεί υπόψη η αρχική θερμοκρασία του μοντέλου, ώστε σε επόμενο στάδιο (χαλάρωση του μοντέλου) να καταλήξουν τα άτομα στις επιθυμητές θέσεις λαμβάνοντας υπόψη και τις θερμικές ταλαντώσεις. Σε περίπτωση που το υλικό είναι



άμορφο, όπως μέταλλα σε υαλώδη κατάσταση, ακολουθείται μια πιο σύνθετη διαδικασία, η οποία προσομοιάζει τις θερμικές κατεργασίες που απαιτούνται για την παραγωγή αυτού του υλικού. Επιπλέον, στην περίπτωση που επιθυμείται η μοντελοποίηση πολυκρυσταλλικών υλικών, κραμάτων ή υλικών με διάφορες φάσεις, η κατασκευή της γεωμετρίας είναι πιο σύνθετη διαδικασία η οποία πρέπει να λαμβάνει υπόψη τις αλληλεπιδράσεις των διαφορετικών ειδών ατόμων ή κόκκων, ώστε το σύστημα να βρίσκεται σε ισορροπία πριν την κατεργασία.

Η πλειοψηφία των προσομοιώσεων διεξάγονται με την παραδοχή ότι η κατεργασία πραγματοποιείται εν κενώ, όπως στην περίπτωση των κατεργασιών που πραγματοποιούνται σε ηλεκτρονικά μικροσκόπια. Σπανιότερα χρησιμοποιούνται μοντέλα στα οποία μοντελοποιείται υγρό κοπής ή το περιβάλλον της κατεργασίας.

#### *Κατασκευή της γεωμετρίας του ΚΕ*

Η γεωμετρία του ΚΕ, όπως είναι προφανές, εξαρτάται από την κατεργασία η οποία πρέπει να προσομοιωθεί. Καθώς έχουν προσομοιωθεί διάφορα είδη κατεργασιών όπως νανο-τόρνευση, νανο-λείανση, νανο-στίλβωση, νανο-φρεζάρισμα κτλ., τα οποία παρουσιάζονται σε επόμενο υποκεφάλαιο, σε κάθε περίπτωση πρέπει να επιλεγεί η κατάλληλη μορφή του εργαλείου. Είναι γεγονός επίσης ότι ορισμένα εργαλεία αποτελούν πιστά αντίγραφα των αντίστοιχων εργαλείων που χρησιμοποιούνται σε μοντέλα της μακροκλίμακας, ιδίως αυτά των ορθογωνικών κοπών, ενώ σε άλλες περιπτώσεις αποτελούν τμήματα εργαλείων που χρησιμοποιούνται σε πραγματικές νανοκατεργασίες, όπως η ακίδα στην περίπτωση των νανοκοπών σε AFM.

Μια αρχική διαφοροποίηση που χρειάζεται να γίνει όσον αφορά τη μορφή του εργαλείου είναι ότι σε ορισμένες κατεργασίες χρησιμοποιείται ΚΕ, ενώ σε άλλες κατεργασίες χρησιμοποιούνται σωματίδια, είτε σε λειαντικό τροχό είτε ελεύθερα, τα οποία έχουν το ρόλο του ΚΕ. Σε περιπτώσεις γενικών νανοκοπών, το εργαλείο προσομοιώνεται λαμβάνοντας υπόψη τη γωνία αποβλίττου και ελευθερίας, καθώς και την καμπυλότητα της κοπτικής ακμής η οποία θεωρείται μεγέθους λίγων νανομέτρων. Σε άλλες περιπτώσεις μπορεί να μοντελοποιηθεί κάποιο ιδιαίτερο χαρακτηριστικό του ΚΕ όπως νανο-αυλάκια ή εγκοπές ή ακόμα σε ένα μοντέλο μεγάλων διαστάσεων να γίνει μοντελοποίηση μόνο της κοπτικής ακμής, με την κατάλληλη καμπυλότητα.

Στην περίπτωση που θεωρείται ότι το εργαλείο προσομοιώνει την επίδραση της ακίδας ενός μικροσκοπίου όπως AFM ή STM λαμβάνει μορφή κολουρου κώνου με καμπυλότητα, πυραμίδας ή ημισφαιρίου. Στην περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος ειδικότερα χρησιμοποιούνται περιστρεφόμενα εργαλεία σαν κονδύλια, τα οποία αποτελούνται από επίπεδα ατόμων που καθώς περιστρέφονται προσεγγίζουν την κατάσταση της διακοπτόμενης κοπής με πολλαπλές κοπτικές ακμές. Η τοποθέτηση και άλλων επιπέδων οδηγεί στη δημιουργία εργαλείων με περισσότερες κοπτικές ακμές. Τέλος, στις περιπτώσεις κατεργασίας με λειαντικούς κόκκους οι οποίοι θεωρούνται είτε ως τμήμα ενός λειαντικού τροχού, είτε ως μεμονωμένα σωματίδια, η μορφή τους ποικίλλει από απλή κυβική, σφαιρική μέχρι πολυεδρική και είναι δυνατό να προσομοιωθούν επίσης επιπλέον χαρακτηριστικά, όπως εγκοπές ή μοτίβα τα οποία είχαν κατασκευαστεί με laser.

### 3.2.2.2 Συνάρτηση Δυναμικού

Η συνάρτηση δυναμικού στις προσομοιώσεις ΜΔ σχετίζεται άμεσα με την μοντελοποίηση των αλληλεπιδράσεων των ατόμων και τις δυνάμεις που αναπτύσσονται κατά τις αλληλεπιδράσεις αυτές. Η συνάρτηση δυναμικού έχει το ρόλο του μοντέλου του υλικού που χρησιμοποιείται στις μακρο- και μικροσκοπικές προσομοιώσεις, δηλαδή περιγράφει τη θερμομηχανική συμπεριφορά του και ουσιαστικά αντιπροσωπεύει την δυναμική ενέργεια ενός συστήματος ατόμων τα οποία βρίσκονται σε συγκεκριμένες θέσεις. Η μορφή της πρέπει να μπορεί να αναπαραστήσει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ διαφορετικών ατόμων, οι οποίες συνήθως περιλαμβάνουν απωστικές και ελκυστικές δυνάμεις προκειμένου να υποδηλώσει αφενός την έλξη των ατόμων όταν βρίσκονται πιο μακριά από τη θέση ισορροπίας τους, αλλά και την απαραίτητη απώθηση όταν τείνουν να πλησιάσουν πέραν της θέσης ισορροπίας, λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli (Pauli exclusion principle) [120]. Όταν η απόσταση δύο ατόμων είναι σχετικά μεγάλη, η δύναμη αλληλεπίδρασης είναι πρακτικά μηδενική, οπότε στις προσομοιώσεις για λόγους εξοικονόμησης υπολογιστικών πόρων ορίζεται συνήθως ένα όριο ή απόσταση αποκοπής ώστε να μην υπολογίζονται οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ ατόμων που απέχουν περισσότερο από αυτή την απόσταση, κάτι που θα αναφερθεί παρακάτω στη μεθοδολογία υπολογισμού δυνάμεων.

Η συνάρτηση δυναμικού αποτελεί μια προσέγγιση της πραγματικότητας, καθώς δεν υπάρχει η δυνατότητα άμεσης επίλυσης σε λογικό χρονικό διάστημα της εξίσωσης Schrödinger της κβαντικής μηχανικής, που περιγράφει τα συστήματα της νανοκλίμακας [119]. Οι παράμετροι που περιέχονται στις συναρτήσεις δυναμικού προσδιορίζονται είτε από θεμελιώδεις προσομοιώσεις, είτε και σε συνάρτηση με διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα. Λόγω αυτού ονομάζονται και εμπειρικές συναρτήσεις δυναμικού. Ουσιαστικά, η έννοια της συνάρτησης δυναμικού σχετίζεται με τους ατομικούς δεσμούς και γι' αυτό, ανάλογα με το είδος του κάθε υλικού και τους δεσμούς που σχηματίζονται όπως περιγράφηκαν στο Κεφάλαιο 1, πρέπει να επιλεγεί η κατάλληλη συνάρτηση δυναμικού. Στη συνέχεια θα περιγραφούν διάφορες συναρτήσεις δυναμικού και θα εξηγηθούν τα χαρακτηριστικά και η χρησιμότητά τους.

#### *Συναρτήσεις δυναμικού Lennard-Jones και Morse*

Αρχικά, στις προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής χρησιμοποιήθηκαν απλές συναρτήσεις δυναμικού, όπως η συνάρτηση Lennard-Jones και Morse οι οποίες υπολογίζουν τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο σωμάτων και περιλαμβάνουν ένα απωστικό και ένα ελκυστικό κομμάτι γύρω από μια θέση ισορροπίας.

Η συνάρτηση δυναμικού Lennard-Jones αποτελεί ένα από τα απλούστερα μαθηματικά μοντέλα, τα οποία μπορούν να προσομοιώσουν την αλληλεπίδραση μεταξύ δύο ατόμων χωρίς ηλεκτρικό φορτίο σε σχέση με την μεταξύ τους απόσταση. Η συνάρτηση αυτή προτάθηκε από τον Sir John Lennard-Jones το 1924 [121] για την περιγραφή των αλληλεπιδράσεων μεταξύ ατόμων τελείων αερίων. Η συνάρτηση δυναμικού Lennard-Jones συναντάται συνήθως στην παρακάτω μορφή:

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] = \varepsilon \left[ \left( \frac{r_m}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_m}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (3.1)$$

Όπου με  $r_{ij}$  συμβολίζεται η απόσταση μεταξύ δύο ατόμων  $i$  και  $j$ , με  $\epsilon$  συμβολίζεται η ενεργειακή σταθερά (ή βάθος του πηγαδιού δυναμικού, που είναι ενδεικτικό της σφοδρότητας της αλληλεπίδρασης) και με  $\sigma$  συμβολίζεται η διάμετρος ενός από τα δύο άτομα (ή η απόσταση στην οποία δύο αλληλεπιδρώντα άτομα βρίσκονται σε ισορροπία). Στη σχέση 3.1, ο όρος  $r^{-12}$  αντιπροσωπεύει τον όρο που σχετίζεται με την απώθηση σε μικρές αποστάσεις λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli, εξαιτίας των επικαλυπτόμενων τροχιακών και ο όρος  $r^{-6}$  αναπαριστά τον όρο που σχετίζεται με την έλξη σε μεγάλες αποστάσεις και συνδέεται με δυνάμεις, όπως οι Van der Waals και London που ασκούνται σε μεγαλύτερες αποστάσεις. Επομένως, σε μικρές αποστάσεις τα άτομα απωθούνται, καθώς ο όρος  $r^{-12}$  είναι ισχυρότερος και η δυναμική ενέργεια λαμβάνει μεγάλες θετικές τιμές, ενώ όσο μεγαλώνει η απόσταση των ατόμων οι δυνάμεις γίνονται ελκτικές με την δυναμική ενέργεια να λαμβάνει ελαφρά αρνητικές τιμές και σε απόσταση ίση με  $\sigma$  τα άτομα παραμένουν σταθερά, εάν δεν ασκείται σε αυτά εξωτερική δύναμη. Τέλος, σε πολύ μεγάλες αποστάσεις η δύναμη γίνεται ουσιαστικά μηδενική. Παρότι μπορεί να προσεγγίσει σε ένα βαθμό τη συμπεριφορά ορισμένων μετάλλων, όπως αυτά με κυβικό πλέγμα [122], η συνάρτηση δυναμικού Lennard-Jones δε μπορεί πρακτικά να μοντελοποιήσει συστήματα με πιο σύνθετη συμπεριφορά από τα ευγενή αέρια και σήμερα σπάνια χρησιμοποιείται στις προσομοιώσεις νανοκατεργασιών. Παρόλα αυτά η συνάρτηση αυτή είναι ακόμα και σήμερα χρήσιμη, σε περιπτώσεις μοντελοποίησης ενός συστήματος αποτελούμενο από άτομα διαφορετικών στοιχείων όταν δεν έχει αναπτυχθεί κάποια πιο σύνθετη συνάρτηση δυναμικού.

Το δυναμικό Morse αναπτύχθηκε από το φυσικό Philip Morse το 1929 [123] και αποτελεί ένα μοντέλο που περιγράφει τη δυναμική ενέργεια λόγω των ατομικών αλληλεπιδράσεων διατομικών μορίων. Η προσέγγιση των αλληλεπιδράσεων αυτών μέσω του δυναμικού Morse λαμβάνει υπόψη ορισμένα αποτελέσματα της διάσπασης των ατομικών δεσμών και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να προσεγγιστεί η αλληλεπίδραση ατόμων και επιφανειών. Το δυναμικό αυτό περιλαμβάνει τρεις παραμέτρους και η έκφρασή του είναι η εξής [124]:

$$U(r_{ij}) = D_e(e^{-2a(r_{ij}-r_e)} - 2e^{-a(r_{ij}-r_e)}) \quad (3.2)$$

Η παράμετρος  $D_e$  αντιπροσωπεύει το «βάθος» του πηγαδιού δυναμικού ή αλλιώς την ενέργεια συνοχής μεταξύ δύο ατόμων (cohesive energy) [124], η οποία σχετίζεται με την ενέργεια που απαιτείται για το διαχωρισμό δύο ατόμων ( $D_0$  dissociation energy), που ορίζεται ως η απόσταση από την πρώτη έως την τελευταία στάθμη ενέργειας του ατόμου και έχει διαστάσεις ενέργειας (eV). Ο παράγοντας  $a$  σχετίζεται με το «πλάτος» του πηγαδιού δυναμικού, καθώς για μικρότερα  $a$  μεγαλώνει το πλάτος και έχει μονάδες αντίστροφου μήκους ( $\text{\AA}^{-1}$ ). Τα δύο αυτά μεγέθη συσχετίζονται με την «δυσκαμψία» ( $k_e$ ) του δεσμού, καθώς και με το μέτρο ελαστικότητας του υλικού, αν θεωρήσουμε ότι ο δεσμός προσομοιάζει σε ένα ελατήριο στο οποίο τα άκρα βρίσκονται δύο άτομα. Τότε ισχύει ότι:

$$a = \sqrt{\frac{k_e}{2D_e}} \quad (3.3)$$

Τέλος, η παράμετρος  $r_e$  αντιπροσωπεύει την απόσταση ισορροπίας ή το μήκος δεσμού και έχει διαστάσεις μήκους ( $\text{\AA}$ ). Έτσι ο όρος  $(r-r_e)$  αντιπροσωπεύει την παραμόρφωση του

ατομικού δεσμού. Παρόμοια με τη συνάρτηση Lennard-Jones, για μεγάλες αποστάσεις  $r$  η τιμή της συνάρτησης δυναμικού γίνεται πρακτικά μηδέν, ενώ η ελάχιστη τιμή της είναι  $-D_e$  στο σημείο ισορροπίας όπου  $r = r_e$ .

Στην περίπτωση του δυναμικού Morse έχουν υπολογιστεί σε διάφορες μελέτες οι τιμές των παραμέτρων του για διάφορα υλικά, κυρίως μεταλλικά με κυβική κρυσταλλική δομή [121, 125], με σημαντικότερη την εργασία του Girifalco [126]. Είναι γεγονός ότι η χρήση του για τη μοντελοποίηση ορισμένων μεταλλικών υλικών, κυρίως στο παρελθόν δεν είναι αβάσιμη, καθώς, σε μέταλλα με δεσμούς s-p το ποσό της ενέργειας των ατόμων που εξαρτάται από τη δομή θεωρείται ότι μπορεί να εκφραστεί με δυναμικά ζεύγους ατόμων όπως το Morse, ιδίως μέταλλα με κυβική δομή, με τα fcc να προσεγγίζονται με μεγαλύτερη ακρίβεια από τα bcc, όπως στην περίπτωση του χαλκού και του αλουμινίου [119, 122].

Το δυναμικό Morse χρησιμοποιείται επίσης και για την προσέγγιση των δυνάμεων αλληλεπίδρασης μεταξύ ατόμων διαφορετικών υλικών, όπως συμβαίνει στις νανοκατεργασίες αποβολής υλικού μεταξύ του ΚΕ και του ΤΕ. Παρότι μέσω της χρήσης του δυναμικού Morse δεν είναι δυνατή η προσέγγιση της επίδρασης του «μεταλλικού δεσμού», κάτι που οδηγεί σε ορισμένες περιπτώσεις σε αστάθεια των προσομοιώσεων ή πρόβλεψη της συμπεριφοράς τους με μειωμένη ακρίβεια και πλέον δε χρησιμοποιείται για τη μοντελοποίηση της συμπεριφοράς μετάλλων, είναι ακόμα σε ισχύ σε περιπτώσεις επαφής μετάλλων ή κεραμικών με άλλα υλικά, εάν δεν έχει αναπτυχθεί κάποια πιο εξειδικευμένη συνάρτηση για αυτό το σκοπό. Το δυναμικό Morse δεν μπορεί να εκτιμήσει σωστά το λόγο των σταθερών  $C_{12}$  και  $C_{44}$  ενός μεταλλικού υλικού, καθώς θεωρεί την ισότητα των ελαστικών σταθερών  $C_{12}$  και  $C_{44}$ , κάτι που δεν ισχύει για τα μέταλλα, σύμφωνα με τη σχέση του Cauchy (π.χ. έχει βρεθεί για το χαλκό ότι ο λόγος τους είναι 1.5) [120, 125]. Επιπλέον, καθώς στα μέταλλα, η θερμική αγωγιμότητα εξαρτάται από την κινητικότητα των ηλεκτρονίων, το δυναμικό Morse δε μπορεί να περιγράψει με ακρίβεια την αγωγή θερμότητας στα μέταλλα, διότι δε λαμβάνει υπόψη του τα ηλεκτρόνια [124].

#### *Συνάρτηση δυναμικού Embedded Atom Model (EAM)*

Η συνάρτηση δυναμικού Embedded Atom Model (EAM) αναπτύχθηκε το 1983 από τους Daw και Baskes [127], προκειμένου να μοντελοποιηθεί η συμπεριφορά των μεταλλικών δεσμών λαμβάνοντας υπόψη την επίδραση της πυκνότητας ηλεκτρονίων τοπικά. Η γενική συνάρτηση που περιγράφει τη δυναμική ενέργεια σε αυτή την περίπτωση περιλαμβάνει δύο μέρη, το ένα σχετικό με την πυκνότητα ηλεκτρονίων και το άλλο με έναν όρο δυναμικού δύο σωμάτων (pairwise potential) που μοιάζει με το Morse όπως φαίνεται στην παρακάτω εξίσωση:

$$V_i(r_{ij}) = F_\alpha \left( \sum_{i \neq j} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi_{\alpha\beta}(r_{ij}) \quad (3.4)$$

Σύμφωνα με αυτή την σχέση, η πυκνότητα ηλεκτρονίων υπολογίζεται ως ένα άθροισμα όλων των τοπικών πυκνοτήτων ηλεκτρονίων  $\rho_\beta$ , που αντιπροσωπεύουν τη συνεισφορά του ατόμων  $j$  τύπου  $\beta$  στη θέση του ατόμου  $i$ , και στο οποίο άθροισμα εφαρμόζεται η συνάρτηση  $F_\alpha$  (embedding function), που αντιπροσωπεύει την ενέργεια που απαιτείται για

τοποθετηθεί ένα άτομο  $i$  τύπου  $\alpha$  στο νέφος των ηλεκτρονίων [125]. Η συνάρτηση  $\phi_{\alpha\beta}$  αντιπροσωπεύει μια συνάρτηση δυναμικού δύο σωμάτων. Ο προσδιορισμός των συντελεστών του μοντέλου είναι δυνατός μέσω συναρτήσεων παλινδρόμησης, που κατασκευάζονται με βάση πειραματικά δεδομένα ή προσομοιώσεων μέσω θεμελιωδών μεθόδων. Μέχρι σήμερα έχουν αναπτυχθεί συναρτήσεις δυναμικού EAM για αρκετά υλικά, όπως και ενώσεις π.χ. πυρίτιο [128,129], γερμάνιο [129], μέταλλα HCP [130], νικέλιο [131,132], Cu, Ag, Au, Pd, Pt, Al and Pb [132]. Επίσης, έχουν προταθεί τροποποιημένες εκδοχές του δυναμικού EAM από ερευνητές, όπως ο Ackland [133], ο Mishin [134] ή ο Mendeleev [135], οι οποίες έχουν γνωρίσει ευρεία αποδοχή. Όπως προαναφέρθηκε, η χρήση του δυναμικού EAM σαφώς αυξάνει την ακρίβεια των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων, γιατί λαμβάνει υπόψη τη συμβολή των ηλεκτρονίων στη δυναμική ενέργεια ενός συστήματος ατόμων που επηρεάζονται σημαντικά από αυτά στην πράξη και είναι καταλληλότερη συνάρτηση από τις παλιότερα χρησιμοποιούμενες όπως η Lennard-Jones και η Morse.

#### *Συναρτήσεις δυναμικού τάξης δεσμών*

Με τον όρο τάξη δεσμών (bond order) ονομάζουμε τον αριθμό των χημικών δεσμών μεταξύ ενός ζεύγους ατόμων. Οι συναρτήσεις δυναμικού τάξης δεσμών (BOP) αποτελούν μια κατηγορία συναρτήσεων δυναμικού, στην οποία περιλαμβάνονται συναρτήσεις όπως η Tersoff [136], Brenner [137], REBO (εμπειρικό μοντέλο τάξης δεσμών για αντιδράσεις) [117], ABOP (αναλυτικό μοντέλο τάξης δεσμών) [117], AIREBO (προσαρμοστικό εμπειρικό μοντέλο τάξης δεσμών για αντιδράσεις) [138], ReaxFF [139] κ.α. Οι προαναφερθείσες συναρτήσεις δυναμικού μπορούν να λάβουν υπόψη πιο σύνθετες συμπεριφορές απ' ό,τι οι απλές συναρτήσεις δυναμικού και είναι ιδιαίτερα κατάλληλες για υλικά όπως οι ημιαγωγοί. Η γενική αρχή που διέπει αυτές τις συναρτήσεις είναι ότι η ισχύς των χημικών δεσμών εξαρτάται από το περιβάλλον του ατόμου και ειδικότερα τον αριθμό, τη γωνία και το μήκος των δεσμών. Αυτές οι συναρτήσεις μπορούν να περιγράψουν τη διάσπαση και τη δημιουργία χημικών δεσμών, σε αντίθεση με τις απλούστερες, καθώς περιλαμβάνουν όρους σχετικούς με τα χαρακτηριστικά των δεσμών [140]. Συνεπώς, η έκφραση ενός δυναμικού BOP περιλαμβάνει γενικά τους εξής όρους:

$$U_{ij}(r_{ij}) = U_{\text{απωθ.}}(r_{ij}) + b_{ijk}U_{\text{ελκ.}}(r_{ij}) \quad (3.5)$$

Από την παραπάνω σχέση μπορεί να γίνει κατανοητό ότι η δυναμική ενέργεια δεν εξαρτάται μόνο από την απόσταση μεταξύ δύο ατόμων, αλλά και από άλλα χαρακτηριστικά του περιβάλλοντός τους μέσω του όρου  $b$ , ο οποίος είναι όρος τριών σωμάτων, ιδιαίτερα κατάλληλος για συστήματα με ισχυρούς ομοιοπολικούς δεσμούς. Βέβαια υπάρχουν ακόμα ο όρος απώθησης και ο όρος των ελκτικών δυνάμεων, αλλά τροποποιημένοι με διάφορους τρόπους, όπως θα γίνει εμφανές στη συνέχεια καθώς, ανάλογα με τον κάθε ερευνητή, η γενική έκφραση των συναρτήσεων δυναμικού BOP περιλαμβάνει ορισμένους διαφορετικούς όρους.

Ο Tersoff [141] ήταν από τους πρώτους που ανέπτυξαν ένα μοντέλο BOP, το οποίο αποτελούνταν τόσο από όρους ζεύγους ατόμων όσο και όρους τριών σωμάτων. Η συνάρτηση αυτή αρχικά αναπτύχθηκε για τον άνθρακα και τις ενώσεις του, αλλά βρήκε εφαρμογή και σε άλλα υλικά, όπως το πυρίτιο και το γερμάνιο. Αν και αρχικά ο Tersoff είχε

χρησιμοποιήσει μόνο έναν όρο τριών σωμάτων, αργότερα εισήγαγε και ένα δεύτερο όρο [142]. Έτσι η εξίσωση της συνάρτησης δυναμικού Tersoff είναι η εξής:

$$U_{total} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} U_{ij}(r_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} f_{cut}(r_{ij}) [A_{ij}U^R(r_{ij}) - B_{ij}U^A(r_{ij})] \quad (3.6)$$

Όπου με  $U_{total}$  συμβολίζεται η συνολική δυναμική ενέργεια του συστήματος, η οποία προσδιορίζεται από διάφορους επιμέρους όρους και παραμέτρους όπως το  $f_{cut}$ , που αποτελεί μια συνάρτηση για ομαλή συμπεριφορά του δυναμικού στην περιοχή του ορίου αποκοπής. Με  $U^R$  και  $U^A$  συμβολίζονται οι όροι απώθησης και έλξης, ενώ οι αντίστοιχοι όροι τριών σωμάτων είναι οι  $A_{ij}$  και  $B_{ij}$ . Πιο συγκεκριμένα, οι όροι απώθησης και έλξης υπολογίζονται από τις ακόλουθες εκφράσεις:

$$U^R(r_{ij}) = Ae^{-\lambda_1 r_{ij}} \quad (3.7)$$

$$U^A(r_{ij}) = Be^{-\lambda_2 r_{ij}} \quad (3.8)$$

Όπου τελικά τα  $A$ ,  $B$ ,  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  αποτελούν συντελεστές της συνάρτησης δυναμικού και γενικά μπορεί να σημειωθεί ότι οι δύο όροι προσομοιάζουν σε όρους του δυναμικού Morse, λόγω της φθίνουσας εκθετικής μορφής τους. Η συνάρτηση αποκοπής  $f_{cut}$  προσδιορίζεται από την παρακάτω έκφραση:

$$f_{cut}(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin \left[ \pi \frac{(r_{ij} - R)}{2D} \right], & R - D < r_{ij} < R + D \\ 0, & r_{ij} > R + D \end{cases} \quad (3.9)$$

Και τελικά, οι όροι τριών σωμάτων δίνονται από τις παρακάτω εξισώσεις:

$$A_{ij} = (1 + \alpha^n \eta_{ij}^n)^{-\frac{1}{2n}} \quad (3.10)$$

$$B_{ij} = (1 + \beta^n \zeta_{ij}^n)^{-\frac{1}{2n}} \quad (3.11)$$

όπου

$$\eta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_{cut}(r_{ik}) \exp [\lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3] \quad (3.12)$$

$$\zeta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_{cut}(r_{ik}) G(\theta_{ijk}) \exp [\lambda_3^3 (r_{ij} - r_{ik})^3] \quad (3.13)$$

$$G(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{(d_0^2 + h - \cos(\theta_{ijk}))} \quad (3.14)$$

Συνολικά, στο μοντέλο Tersoff πρέπει να προσδιοριστούν 13 παράγοντες οι οποίοι είναι οι:  $A$ ,  $B$ ,  $R$ ,  $D$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $n$ ,  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ ,  $\lambda_3$ ,  $c_0$ ,  $d_0$ ,  $h$ .

Άλλες συναρτήσεις δυναμικού BOP που χρησιμοποιούνται σε προσομοιώσεις ΜΔ είναι η συνάρτηση του Brenner [137], η οποία διαφέρει από αυτή του Tersoff στον όρο  $A_{ij}$  που δε

χρησιμοποιείται και στη συνάρτηση αποκοπής που είναι διαφορετική. Ένα άλλο ευρέως χρησιμοποιούμενο δυναμικό BOP είναι το δυναμικό Stillinger-Weber, που είναι ιδιαίτερα κατάλληλο για να περιγράψει τη συμπεριφορά του πυριτίου [138] και δίνεται από τη γενική σχέση:

$$U(r_{ij}) = \frac{1}{2} \sum_{ij} \varphi(r_{ij}) + \sum_{ijk} g(r_{ij})g(r_{ik}) \left( \cos\theta_{ijk} + \frac{1}{3} \right)^2 \quad (3.15)$$

Άλλες προαναφερθείσες συναρτήσεις δυναμικού BOP όπως η ABOP, REBO ή AIREBO (τεσσάρων σωμάτων) γενικεύουν τη συνάρτηση δυναμικού Tersoff και βασίζονται περισσότερο σε θεμελιώδεις ιδιότητες, μοντελοποιώντας ακόμα πιο σύνθετες αλληλεπιδράσεις. Τέλος, συναρτήσεις δυναμικού όπως η ReaxFF είναι ιδιαίτερα κατάλληλες για τη μοντελοποίηση χημικών αντιδράσεων, διάσπασης και σχηματισμού δεσμών για διάφορα χημικά στοιχεία και ενώσεις.

### 3.2.2.3 Μέθοδοι υπολογισμού δυνάμεων

Ο υπολογισμός των δυνάμεων που ασκούνται σε κάθε άτομο του μοντέλου στο οποίο δεν έχει οριστεί κάποιος περιορισμός είναι ένα από τα πιο βασικά μέρη του αλγορίθμου προσομοίωσης ΜΔ όπως παρουσιάστηκε στο διάγραμμα ροής του σχήματος 3.5. Γι' αυτό το λόγο ο αλγόριθμος ο οποίος θα χρησιμοποιηθεί για το υπολογισμό των δυνάμεων, σε κάθε χρονικό βήμα απαιτείται να προσδιορίζει τα γειτονικά άτομα, των οποίων οι συνεισφορές στη συνολική δύναμη σε κάθε άτομο είναι πρακτικά μη μηδενικές, με αποδοτικό τρόπο. Η πιο απλοϊκή μέθοδος εύρεσης των γειτονικών ατόμων βασίζεται αρχικά στην αναζήτηση των ατόμων τα οποία απέχουν απόσταση ίση ή μικρότερη με την απόσταση αποκοπής της συνάρτησης δυναμικού και στη συνέχεια στην άθροιση των συνεισφορών λόγω της αλληλεπίδρασης των γειτονικών ατόμων [125]. Αυτή η μέθοδος είναι η λιγότερο αποδοτική και καθιστά απαγορευτικές τις προσομοιώσεις με μεγάλο πλήθος ατόμων.

Αντί να γίνεται ο έλεγχος όλων των ατόμων του συστήματος σε κάθε χρονικό βήμα, συνήθως υιοθετούνται πιο αποδοτικές τεχνικές. Για παράδειγμα, είναι δυνατόν να θεωρηθεί ένα εικονικό πλέγμα, μέσω του οποίου να εντοπίζονται ως γειτονικά τα άτομα που ανήκουν σε γειτονικά κελιά του πλέγματος. Η πιο ευρέως χρησιμοποιούμενη μέθοδος είναι η μέθοδος της λίστας γειτόνων (neighbor list). Στη λίστα αυτή αποθηκεύονται τα άτομα που βρίσκονται σε απόσταση έως την απόσταση αποκοπής. Οι λίστες δε χρειάζεται να ελέγχονται σε κάθε χρονικό βήμα, οδηγώντας σε επιτάχυνση των υπολογισμών, αλλά όσο πιο μεγάλη είναι η μετακίνηση των ατόμων και οι παραμορφώσεις πρέπει να ανανεώνονται πιο συχνά οι λίστες προκειμένου να είναι ευσταθής η επίλυση.

Σε κάθε περίπτωση η δύναμη ενός ζεύγους ατόμων  $i$  και  $j$  υπολογίζεται ως εξής [125]:  

$$\vec{F}_{ij} = -\frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r}$$
 δηλαδή ως η πρώτη παράγωγος της δυναμικής ενέργειας της μεταξύ τους αλληλεπίδρασης όταν βρίσκονται σε απόσταση  $r$ . Η άθροιση αυτών των συνεισφορών δίνει τη συνισταμένη δύναμη που ασκείται σε κάθε άτομο.

### 3.2.2.4 Αριθμητική ολοκλήρωση της εξίσωσης κίνησης

Η εξίσωση που διέπει την κίνηση των ατόμων στη μέθοδο της ΜΔ είναι ο δεύτερος νόμος του Νεύτωνα:

$$m \frac{d^2 \vec{x}_i}{dt^2} = \frac{d(m\vec{v}_i)}{dt} = \frac{d(\vec{p}_i)}{dt} = \sum \vec{F}_{ij} \quad (3.16)$$

Έτσι, καθώς έχει προηγηθεί ο υπολογισμός της συνισταμένης των δυνάμεων για κάθε άτομο με βάση κάποια από τις προαναφερθείσες μεθόδους, υπολογίζεται η επιτάχυνσή του και μέσω διπλής ολοκλήρωσης, η τροχιά που διαγράφει. Προκειμένου να επιλυθεί υπολογιστικά η εξίσωση 3.16, απαιτείται μια μέθοδος αριθμητικής ολοκλήρωσης μέσω της οποίας ανανεώνεται η θέση κάθε μη σταθερού ατόμου σε κάθε χρονικό βήμα, έως ότου η κατεργασία ολοκληρωθεί.

Ενώ στη βιβλιογραφία συναντώνται αρκετές μέθοδοι αριθμητικής ολοκλήρωσης οι οποίες θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν, είτε μέθοδοι όπως η Euler ή η Runge-Kutta, αλλά και οι μέθοδοι πρόβλεψης-διόρθωσης (predictor-corrector) στην πράξη το βασικό κριτήριο για την επιλογή της κατάλληλης μεθόδου ολοκλήρωσης είναι το υπολογιστικό κόστος σε σχέση με την απαιτούμενη ακρίβεια. Γι' αυτό το λόγο, εστιάζοντας στα διάφορα τμήματα ενός κώδικα ΜΔ, μπορεί να παρατηρηθεί ότι το πιο απαιτητικό υπολογιστικά κομμάτι είναι το κομμάτι υπολογισμού των δυνάμεων αλληλεπίδρασης κάθε ατόμου από τα γειτονικά του. Παρότι σε ορισμένες εργασίες έχουν χρησιμοποιηθεί μέθοδοι ολοκλήρωσης από την κατηγορία των μεθόδων πρόβλεψης-διόρθωσης, όπως η μέθοδος Gear [143], Nordsieck [144] ή Beeman [145], προτιμώνται μέθοδοι που απαιτούν όσο το δυνατόν λιγότερους υπολογισμούς δυνάμεων σε κάθε χρονικό βήμα, όπως η μέθοδος Verlet ή η μέθοδος Leapfrog που αποτελεί παραλλαγή της και απαιτεί μόνο έναν υπολογισμό δυνάμεων ανά χρονικό βήμα.

Λόγω της απλότητας, του χαμηλού υπολογιστικού κόστους αλλά και της αξιοπιστίας της, η μέθοδος Leapfrog έχει κυριαρχήσει καθολικά στις προσομοιώσεις ΜΔ και είναι η βασική επιλογή στα πιο ευρέως χρησιμοποιούμενα προγράμματα. Η μέθοδος αυτή ανήκει στην γενικότερη κατηγορία των μεθόδων αριθμητικής ολοκλήρωσης κατά Verlet και είναι μια ρητή μέθοδος. Επειδή η μέθοδος είναι ρητή, το χρονικό βήμα της ολοκλήρωσης πρέπει να υπολογιστεί έτσι ώστε να επιτυγχάνεται ευστάθεια στους υπολογισμούς [119]. Ωστόσο, μέχρι σήμερα δεν έχει οριστικά επιλυθεί το ζήτημα του ακριβούς υπολογισμού του μέγιστου δυνατού χρονικού βήματος, όπως για παράδειγμα σε άλλες ρητές μεθόδους, στις οποίες η χρήση χρονικών βημάτων σύμφωνα με το κριτήριο Courant μπορεί να προσδιορίσει με ακρίβεια τα όρια για ευσταθή επίλυση.

Η μέθοδος Verlet περιλαμβάνει τις εξής εκφράσεις στην περίπτωση της επίλυσης του δεύτερου νόμου του Νεύτωνα:

$$\vec{x}_1 = \vec{x}_0 + \vec{v}_0 \Delta t + \frac{1}{2} \vec{a}_0 \Delta t^2 \quad (3.17)$$

$$\vec{x}_{n+1} = 2\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1} + \vec{a}_n \Delta t^2, n = 1, 2, \dots, N \quad (3.18)$$



Όπου με  $\vec{x}_n$  συμβολίζεται το διάνυσμα θέσης των ατόμων του συστήματος στο χρονικό βήμα  $n$ , με  $\vec{v}_n$  συμβολίζεται το διάνυσμα της ταχύτητας των ατόμων του συστήματος, με  $\vec{a}_n$  συμβολίζεται το διάνυσμα της επιτάχυνσης των ατόμων του συστήματος, με  $\Delta t$  συμβολίζεται το χρονικό βήμα και με  $N$  συμβολίζεται ο συνολικός αριθμός χρονικών βημάτων της προσομοίωσης. Η μέθοδος Leapfrog ανήκει στις μεθόδους Verlet, όπου υπολογίζονται άμεσα οι ταχύτητες και διατυπώνεται ως εξής:

$$\vec{x}_n = \vec{x}_{n-1} + \vec{v}_{i-1/2}\Delta t \quad (3.19)$$

$$\vec{a}_n = F(\vec{x}_n) \quad (3.20)$$

$$\vec{v}_{n+1/2} = \vec{v}_{n-1/2} + \vec{a}_n\Delta t \quad (3.21)$$

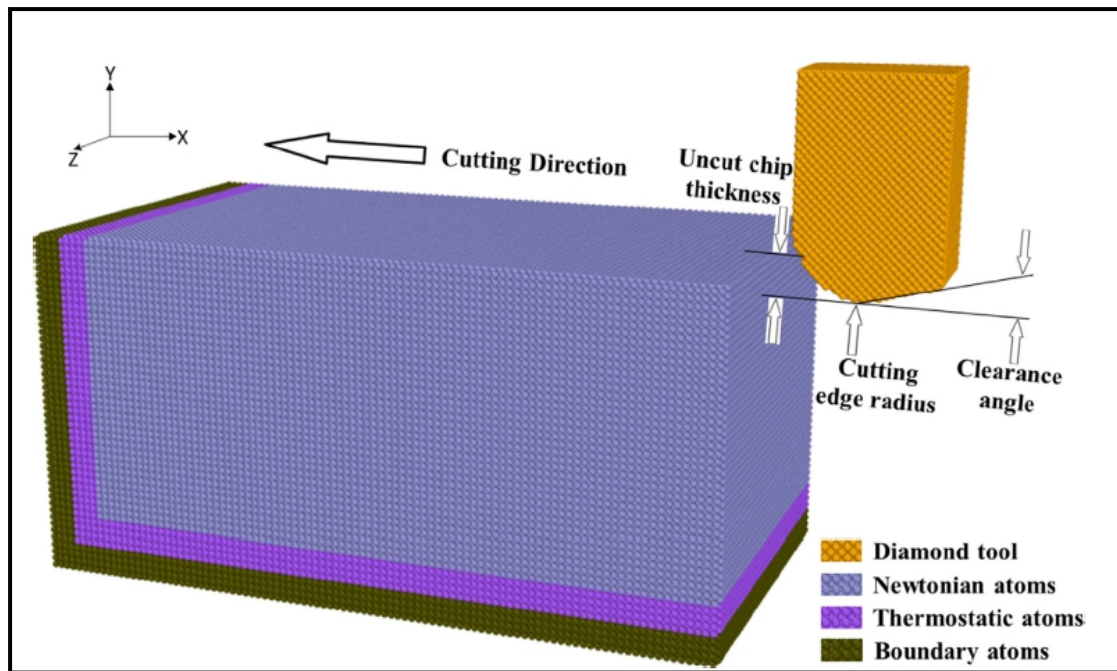
### Χρονικό βήμα ολοκλήρωσης

Όπως προαναφέρθηκε, κατά την αριθμητική ολοκλήρωση με τη μέθοδο Leapfrog είναι ιδιαίτερα σημαντικό να χρησιμοποιηθεί κατάλληλο χρονικό βήμα, προκειμένου να επιτευχθεί η ευστάθεια της επίλυσης. Παρόλα αυτά, η επιλογή του χρονικού βήματος υπόκειται σε διάφορους άλλους περιορισμούς. Για παράδειγμα, το χρονικό βήμα δε μπορεί να είναι εξαιρετικά μικρό, προκειμένου να μην αυξάνεται χωρίς λόγο το υπολογιστικό κόστος.

Είναι γεγονός ότι στη σχετική βιβλιογραφία των προσομοιώσεων νανοκατεργασιών με τη μέθοδο ΜΔ, πολύ σπάνια γίνεται λόγος για τον υπολογισμό του κατάλληλου βήματος ολοκλήρωσης και γενικά οι ερευνητές επιλέγουν εμπειρικά μια τιμή μεταξύ 0.1-10 fs, ή μεταξύ 0.1-1 fs [146, 147]. Η επιλογή του κατάλληλου χρονικού βήματος ολοκλήρωσης έχει σχετιστεί με παράγοντες, όπως η ταχύτητα του ήχου στο υλικό [148, 149, 150, 151], το πλάτος της θερμικής ταλάντωσης των ατόμων και η αντίστοιχη περίοδος ταλάντωσης [116,152]. Γι' αυτό ένας άλλος εμπειρικός κανόνας που έχει προταθεί είναι να επιλέγεται χρονικό βήμα τουλάχιστον μικρότερο του 10% της περιόδου θερμικής ταλάντωσης των ατόμων [119, 124]. Τέλος πρέπει να λαμβάνονται υπόψη και η επίδραση των αριθμητικών σφαλμάτων στρογγυλοποίησης, ανάλογα με το χρονικό βήμα που επιλέγεται [124].

### 3.2.2.5 Οριακές συνθήκες

Όπως σε όλα τα προβλήματα που περιγράφονται από διαφορικές εξισώσεις, απαιτείται ο ορισμός κατάλληλων οριακών συνθηκών, προκειμένου να ολοκληρωθεί ο ορισμός του μοντέλου. Στις προσομοιώσεις νανο-κατεργασιών αποβολής υλικού με τη μέθοδο ΜΔ διακρίνονται τέσσερα είδη οριακών συνθηκών: τα σταθερά ή οριακά άτομα (fixed/boundary atoms), τα Νευτώνια άτομα (newtonian atoms), τα άτομα θερμοστάτες (thermostat atoms) και οι περιοδικές οριακές συνθήκες. Τα τρία πρώτα είδη συνήθως αναφέρονται και ως ζώνες π.χ. ζώνη οριακών ατόμων, ζώνη Νευτώνιων ατόμων, καθώς οι αντίστοιχες οριακές συνθήκες εφαρμόζονται σε συγκεκριμένες περιοχές ή ζώνες του μοντέλου, όπως φαίνεται στο σχήμα 3.7.



**Σχήμα 3.7.** Οι ζώνες των διαφορετικών ειδών ατόμων σε ένα μοντέλο ΜΔ [153].

Τα σταθερά ή οριακά άτομα χρησιμεύουν για να δημιουργείται μια οριακή επιφάνεια που δρα ως πάκτωση για το μοντέλο, προκειμένου να μην κινείται ελεύθερα όταν ασκηθεί σε αυτό εξωτερική δύναμη π.χ. από το ΚΕ, καθώς και για να διατηρείται η συμμετρία του πλέγματος. Αυτά τα άτομα βρίσκονται σε μεγάλη απόσταση από την περιοχή την οποία δρα το ΚΕ και άρα, ούτε συμμετέχουν στην κατεργασία ούτε επηρεάζονται από αυτή. Σε αυτά τα άτομα θεωρείται ότι δεν ασκούνται δυνάμεις και έτσι η θέση τους παραμένει σταθερή καθ'όλη τη διάρκεια της προσομοίωσης. Συνήθως αποτελούν 1-3 στρώσεις ατόμων στην εξωτερική επιφάνεια του ΤΕ.

Τα άτομα-θερμοστάτες αποτελούν μια ζώνη ατόμων η οποία σχετίζεται με τις οριακές συνθήκες θερμοκρασίας του μοντέλου. Καθώς οι προσομοιώσεις συνήθως διεξάγονται εν κενώ, δεν υπάρχει συναλλαγή θερμότητας μεταξύ του ΤΕ και του περιβάλλοντος, δηλαδή επικρατούν αδιαβατικές συνθήκες. Αυτή η θεώρηση μπορεί όμως να οδηγήσει σε μη ρεαλιστικές συνθήκες θερμοκρασίας στο ΤΕ ή τεχνητά δημιουργούμενη αύξηση του ποσού θερμότητας σε αυτό, που μπορεί να ρυθμιστεί χρησιμοποιώντας κατάλληλους αλγόριθμους και ένα στρώμα ατόμων των οποίων η θερμοκρασία μπορεί να αλλάξει μεταβάλλοντας την ταχύτητά τους κατάλληλα [119]. Τα άτομα αυτά ονομάζονται άτομα-θερμοστάτες και χρησιμοποιούνται σε διάφορα στάδια της κατεργασίας, προκειμένου να διεξάγονται ομαλά οι προσομοιώσεις. Εάν η θερμοκρασία υπερβεί την επιθυμητή σε αυτό το στρώμα, αλλάζουν τεχνητά οι ταχύτητες των ατόμων, ώστε να επανέλθει στην επιθυμητή τιμή και παράλληλα λόγω της αλληλεπίδρασης των ατόμων αυτών με τα υπόλοιπα άτομα του κομματιού επιτυγχάνεται η εξάλειψη τυχόν τεχνητών διακυμάνσεων στη θερμοκρασία του κομματιού. Υπάρχουν διάφορα είδη θερμοστατών που μπορούν να χρησιμοποιηθούν, όπως οι Anderson, Berendsen ή Nosé-Hoover [143, 154, 155]. Το στρώμα αυτών των ατόμων τοποθετείται πάνω από τα οριακά άτομα.

Τέλος, η ζώνη των Νευτώνιων ατόμων αντιστοιχεί στο μεγαλύτερο μέρος του δοκιμίου που κατεργάζεται και όπως υποδηλώνει η ονομασία, τα άτομα αυτής της ομάδας έχουν τη δυνατότητα να κινούνται ελεύθερα υπό την επίδραση των διατομικών δυνάμεων, σύμφωνα με το δεύτερο νόμο του Νεύτωνα, αποτελώντας το παραμορφώσιμο κομμάτι του δοκιμίου [146, 156, 157]. Τα άτομα αυτά τοποθετούνται πάνω από τα άτομα-θερμοστάτες.

Οι περιοδικές οριακές συνθήκες ορίζονται συνήθως στις πλαϊνές επιφάνειες του ΤΕ, προκειμένου να θεωρηθεί ότι έχει άπειρο μήκος σε αυτή τη διάσταση, όπως εάν ήταν ένα ΤΕ μεγάλων διαστάσεων [119]. Η λειτουργία των περιοδικών οριακών συνθηκών μπορεί να περιγραφεί ως εξής: εάν κάποιο άτομο λόγω παραμόρφωσης τείνει να εξέλθει από τη μία πλευρά, εισέρχεται ένα άλλο στην αντίστοιχη πλευρά σε συμμετρική θέση. Η χρήση των περιοδικών συνθηκών είναι απαραίτητη καθώς για λόγους υπολογιστικού κόστους, το μέγεθος του κομματιού στη διάσταση κάθετα στην κίνηση του εργαλείου είναι μικρότερο απ' ό,τι στην κατεύθυνση πρόωσης του εργαλείου και θα μπορούσαν να υπολογιστούν μη ρεαλιστικές δυνάμεις, εάν τα όρια του κομματιού είναι πολύ μικρότερα απ' ό,τι στην πράξη, λόγω του ότι η επίδραση της επαφής του κοπτικού με το κομμάτι δε προλαβαίνει να μηδενιστεί όπως σε ένα πρακτικά άπειρο σύνορο [158]. Επίσης, η χρήση οριακών ατόμων σε μικρή απόσταση από την περιοχή που διεξάγεται η κατεργασία οδηγεί σε εσφαλμένα αποτελέσματα, διότι δεν επιτρέπει την ομαλή ανάπτυξη των διαταραχών [120]. Ιδιαίτερη προσοχή χρειάζεται κατά τη χρήση των περιοδικών συνθηκών σε ΤΕ με διαφορετικά υλικά [159].

Οι οριακές συνθήκες που περιγράφηκαν εφαρμόζονται σε κάθε προσομοίωση στο δοκίμιο, ενώ η εφαρμογή τους στο ΚΕ θεωρείται απαραίτητη μόνο όταν αυτό είναι παραμορφώσιμο, προκειμένου να υπολογιστεί η συμπεριφορά του με την απαραίτητη ακρίβεια, όπως π.χ. στην περίπτωση της μελέτης της φθοράς του ΚΕ, η οποία είναι ιδιαίτερα αυξημένη στην περίπτωση των μικροκοπών. Γενικά όταν επιχειρείται κοπή υλικού που έχει συγκρίσιμη σκληρότητα με το ΚΕ, η φθορά είναι σημαντική. Τότε, οι οριακές συνθήκες εφαρμόζονται στο κοπτικό με τον ίδιο τρόπο που εφαρμόζονται και στο ΤΕ, δηλαδή διακρίνονται οι ίδιες τρεις ζώνες ατόμων. Αντί να εφαρμοστεί σταθερή ταχύτητα σε όλο το ΚΕ, σταθερή ταχύτητα επιβάλλεται μόνο στα οριακά άτομα.

### 3.2.2.6 Αρχικές συνθήκες

Ο ορισμός της αρχικής θέσης των ατόμων έχει ήδη περιγραφεί στο υποκεφάλαιο σχετικά με την κατασκευή της γεωμετρίας του ΤΕ και του ΚΕ, όμως ο ορισμός της αρχικής ταχύτητας των ατόμων του ΤΕ περιλαμβάνει μια συγκεκριμένη διαδικασία. Η αρχική ταχύτητα των ατόμων του δοκιμίου δεν είναι μηδενική, όπως συμβαίνει στις προσομοιώσεις των μακροσκοπικών κατεργασιών και στην πλειοψηφία των προσομοιώσεων όσον αφορά τα ακίνητα σώματα, αλλά είναι ορισμένη με κατάλληλο τρόπο ώστε να μοντελοποιεί την κίνηση των ατόμων λόγω θερμικών ταλαντώσεων γύρω από μία θέση ισορροπίας. Οι προσομοιώσεις κοπών σε νανο-κλίμακα διεξάγεται υπό μη μηδενική, πεπερασμένη θερμοκρασία, επομένως δεν είναι δυνατόν να αγνοηθούν οι αρχικές συνθήκες. Έτσι, η αρχική ταχύτητα των ατόμων ορίζεται τυχαία, υπακούοντας όμως στην στατιστική κατανομή Maxwell-Boltzmann, ανάλογα με τη θερμοκρασία του συστήματος. Η έκφραση της κατανομής Maxwell-Boltzmann διατυπώνεται ως εξής:

$$f(v) = \sqrt{\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^3} 4\pi v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \quad (3.22)$$

Όπου  $m$  είναι η μάζα του ατόμου,  $k$  η σταθερά του Boltzmann και  $T$  η θερμοκρασία.

Επειδή δεν είναι δυνατόν να καθοριστούν επακριβώς οι ταχύτητες των ατόμων, ώστε να υπακούουν στην κατανομή Maxwell-Boltzmann και ταυτόχρονα στις επιδράσεις των γειτονικών ατόμων καθώς αυτές οδηγούν τα άτομα διαρκώς σε ελαφρά διαφορετικές θέσεις γύρω από τη θέση ισορροπίας, ακολουθείται η διαδικασία της χαλάρωσης του μοντέλου για ένα επαρκές διάστημα, συνήθως της τάξης δεκάδων ps, προκειμένου να σταθεροποιηθεί η θερμοκρασία στην επιθυμητή τιμή. Όταν επιτευχθεί η ισορροπία, οι ταχύτητες υπακούουν στην κατανομή Maxwell-Boltzmann. Κατά τη διάρκεια της χαλάρωσης, η δυναμική ενέργεια μετατρέπεται σε κινητική και το αντίστροφο και λόγω της κατάστασης αυτής δεν είναι δόκιμο να υπολογιστεί κάποιο μέγεθος της κατεργασίας σε αυτή την περίοδο, οπότε η κατεργασία ξεκινάει με την κίνηση του ΚΕ μετά την ολοκλήρωση της χαλάρωσης.

### 3.2.3 Μετεπεξεργασία αποτελεσμάτων ΜΔ

Στην περίπτωση των προσομοιώσεων ΜΔ, όπως και σε όλες τις προσομοιώσεις, η μετεπεξεργασία είναι απαραίτητο βήμα προκειμένου να αναλυθούν τα αποτελέσματα και να εξαχθούν ιδιαίτερα χρήσιμες πληροφορίες. Συνήθη αποτελέσματα που επεξεργάζονται και μελετώνται είναι οι δυνάμεις της κατεργασίας, η θερμοκρασία, οι τάσεις, η δυναμική ενέργεια, διάφορα μεγέθη που δίνουν πληροφορίες για την παραμόρφωση του ΤΕ, καθώς και διάφορα χαρακτηριστικά του αποβλίττου. Στη συνέχεια θα εξηγηθούν συνοπτικά τα βασικότερα μεγέθη που μελετώνται στις προσομοιώσεις ΜΔ.

Από τα πιο βασικά μεγέθη που υπολογίζονται στις προσομοιώσεις νανοκοπών είναι οι δυνάμεις και η θερμοκρασία της κατεργασίας. Όπως έχει ήδη αναφερθεί, οι δυνάμεις σε κάθε άτομο υπολογίζονται ως το άθροισμα των συνεισφορών των δυνάμεων αλληλεπίδρασης από τα γειτονικά άτομα, με βάση την επιλεγμένη συνάρτηση δυναμικού. Οι δυνάμεις της κατεργασίας που προκύπτουν από την αλληλεπίδραση του ΚΕ με το ΤΕ υπολογίζονται με άθροιση των δυνάμεων που ασκήθηκαν από τα άτομα του ενός σώματος στο άλλο. Μέσω των δυνάμεων μπορεί να γίνει και εκτίμηση του συντελεστή τριβής με το συμβατικό ορισμό ως λόγο της κατακόρυφης προς την οριζόντια δύναμη.

Η θερμοκρασία κατά τις προσομοιώσεις ΜΔ υπολογίζεται μέσω της κινητικής ενέργειας του ατόμου:

$$\frac{1}{2} \sum_i m_i v_i^2 = \frac{3}{2} N k_b T \quad (3.23)$$

Βέβαια καθώς η θερμοκρασία είναι εντατικό μέγεθος, δεν έχει νόημα να υπολογιστεί για μεμονωμένα άτομα αλλά κυρίως υπολογίζονται μέσες θερμοκρασίες για μεγαλύτερα τμήματα υλικού ή για ολόκληρο το ΤΕ.

Οι τάσεις στις προσομοιώσεις νανοκοπών με τη μέθοδο ΜΔ υπολογίζονται κυρίως με βάση τις εξής σχέσεις:

$$\sigma = \frac{1}{V} \left( - \sum_i m_i v_i \otimes v_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} r_{ij} \otimes F_{ij} \right) \quad (3.24)$$

$$\sigma = \frac{1}{2V} \left( \sum_{i,j \neq i} \langle r_{ij} \rangle \otimes \langle F_{ij} \rangle \right) \quad (3.25)$$

Η έκφραση της σχέσης 3.24 ονομάζεται virial stress η οποία αποτελεί το άθροισμα της τάσης Cauchy (σχέση 3.25) και ενός όρου που λαμβάνει υπόψη την ταχύτητα των ατόμων [125]. Έχοντας υπολογίσει τις διάφορα στοιχεία του τανυστή των τάσεων, μπορούν να υπολογιστούν και άλλες χρήσιμες ποσότητες όπως η υδροστατική τάση, η τάση von Mises και η μέγιστη διατμητική τάση:

$$\sigma_{υδρ} = \frac{\sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz}}{3} \quad (3.26)$$

$$\sigma_{vm} = \sqrt{\frac{(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{zz} - \sigma_{xx})^2 + 6(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{yz}^2 + \sigma_{zy}^2)}{2}} \quad (3.27)$$

$$\sigma_{max} = \frac{\sigma_1 - \sigma_3}{2} \quad (3.28)$$

Πέραν των μεγεθών αυτών, μια σειρά από επιπλέον μεγέθη που μπορούν να υπολογιστούν προκειμένου να γίνει καλύτερη ανάλυση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων ΜΔ, ιδίως από την άποψη της παραμόρφωσης και της κατάστασης του υλικού κάτω από την επιφάνεια. Επίσης, μέσω αυτών των μεγεθών είναι δυνατόν να οπτικοποιηθούν οι ατέλειες του κρυσταλλικού πλέγματος, αφαιρώντας τους τέλειους κρυστάλλους [160].

Οι περισσότερες μέθοδοι χαρακτηρισμού της δομής για τα κρυσταλλικά υλικά βασίζονται στις θέσεις των γειτονικών ατόμων, έτσι άτομα που έχουν διαφορετικό αριθμό γειτόνων από αυτόν που θα έπρεπε εάν δεν είχε παραμορφωθεί το κρυσταλλικό πλέγμα, θεωρούνται ότι ανήκουν στο κομμάτι του υλικού που έχει υποστεί παραμόρφωση και ενδεχομένως στις περιοχές αυτές παρουσιάζονται διάφορα είδη ατελειών. Στη συνέχεια θα παρουσιαστούν οι πιο σημαντικές μέθοδοι.

Η πιο απλή μέθοδος εκτίμησης μεταβολών στη δομή του υλικού είναι ο υπολογισμός του αριθμού συνδιάταξης (coordination number), ο οποίος ορίζεται απλά ως ο αριθμός των γειτονικών ατόμων που βρίσκονται μέσα σε μια προκαθορισμένη απόσταση αποκοπής από ένα κεντρικό άτομο [160]. Σε δομές bcc αυτός ο αριθμός πρέπει να είναι 8, ενώ σε δομές fcc 12 και άτομα με διαφορετικό CN μπορεί να αποτελούν τμήμα διαταραχών ή άλλων ατελειών. Παρόλα αυτά έχει διαπιστωθεί ότι σε ορισμένες περιπτώσεις, όπως σε αυξημένες θερμοκρασίες η χρήση του αριθμού συνδιάταξης δεν είναι κατάλληλη γιατί δείχνει ότι η δομή είναι τροποποιημένη ακόμα και εάν το υλικό δεν έχει υποστεί παραμόρφωση.

Ένα σχετικό μέγεθος που χρησιμοποιείται σε αρκετές μελέτες είναι η παράμετρος κεντρικής συμμετρίας ή centrosymmetry parameter (CSP). Η παράμετρος αυτή χαρακτηρίζει τη συμμετρία της «γειτονιάς» κάθε ατόμου και ορίζεται ως εξής [160]:

$$CSP = \sum_{i=1}^{N/2} |R_i - R_{i+N/2}|^2 \quad (3.29)$$

Η μέθοδος αυτή όπως φαίνεται από τη σχέση 3.29 βασίζεται στον υπολογισμό των αποστάσεων των γειτονικών ατόμων σε σχέση με το κεντρικό, κάτι που γίνεται θεωρώντας ζεύγη συμμετρικών ατόμων. Στην περίπτωση των δομών fcc το N ισούται με 12, ενώ στην περίπτωση των δομών bcc ισούται με 8. Σε έναν τέλειο κρύσταλλο όπου υπάρχει συμμετρία γύρω από κάθε άτομο θα έπρεπε η τιμή του CSP να είναι 0 ή περίπου μηδέν, υπολογίζοντας και τις θερμικές ταλαντώσεις, ενώ εάν το άτομο έχει CSP σημαντικά μεγαλύτερο του μηδενός μπορεί αποτελεί μέρος μιας διαταραχής ή είναι άτομο της εξωτερικής επιφάνειας του TE [160, 161]. Για παράδειγμα, σε διάφορες μελέτες έχουν προταθεί για διάφορα υλικά κατηγοριοποιήσεις ατόμων με βάση συγκεκριμένες τιμές του CSP. Στην περίπτωση ατόμων χαλκού, στο ιδανικό πλέγμα ανήκουν άτομα με CSP μικρότερο του 3, σε μερικές διαταραχές ανήκουν τα άτομα με CSP μικρότερο του 5, σε σφάλματα επιστοιβάσης ανήκουν άτομα με CSP μικρότερο του 8, τα επιφανειακά άτομα έχουν CSP από 8 έως 21.5 και τα άτομα που ανήκουν σε επιφανειακές ατέλειες έχουν CSP μεγαλύτερο του 21.5 [162-164].

Η χρήση του CSP και η κατηγοριοποίηση των ατόμων βοηθούν στην οπτικοποίηση ατελειών του υλικού, όπως και στην περίπτωση του CN. Στα βασικά πλεονεκτήματα της μεθόδου CSP περιλαμβάνεται η ελάχιστη επίδραση των θερμικών παραμορφώσεων του κρυστάλλου στους υπολογισμούς. Παρόλα αυτά, οι θερμικές ταλαντώσεις επηρεάζουν σε κάποιο βαθμό τα αποτελέσματα, καθώς και οι ανομοιογενείς παραμορφώσεις και έτσι υπάρχουν προβλήματα στον εντοπισμό ορισμένων ατελειών. Τέλος, η μέθοδος αυτή ενδείκνυται για πλέγματα όπως fcc και bcc και όχι στα hcp [161].

Άλλη μια μέθοδος για το χαρακτηρισμό της δομής των υλικών είναι η μέθοδος ανάλυσης των κοινών γειτόνων (CNA, common neighbor analysis). Η μέθοδος αυτή όπως και η CSP εκτιμά τη δομή τοπικά γύρω από ένα άτομο, χρησιμοποιεί όμως πιο σύνθετη μεθοδολογία για να χαρακτηρίσει την ατομική δομή, ώστε να μπορεί να διαχωρίσει διαφορετικές δομές [160, 161]. Αντί να υπολογίσει κατευθείαν τα διανύσματα θέσης των γειτονικών ατόμων ως προς το κεντρικό, χρησιμοποιεί μεγέθη από την τοπολογία των δεσμών των γειτονικών ατόμων.

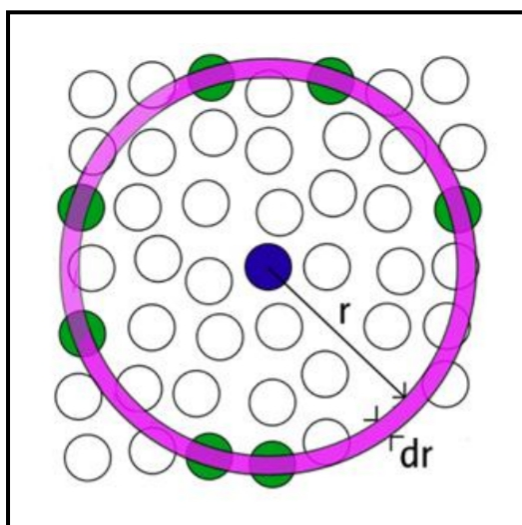
Για να προσδιοριστούν τα γειτονικά άτομα, τα οποία σχηματίζουν δεσμούς, θεωρείται μια συγκεκριμένη απόσταση αποκοπής η οποία στην περίπτωση των δομών fcc και bcc ισούται με  $0.854a$ , όπου  $a$  η ενδοατομική απόσταση και στην περίπτωση της δομής bcc ισούται με  $1.207a$ . Για να κατηγοριοποιηθεί ένα άτομο σε μια δομή υπολογίζονται τρία μεγέθη, ο αριθμός των κοινών γειτόνων μεταξύ κάθε κεντρικού ατόμου και των γειτονικών του, ο συνολικός αριθμός των δεσμών μεταξύ των κοινών γειτόνων και ο αριθμός των δεσμών στη μακρύτερη αλυσίδα δεσμών που ενώνουν κοινούς γείτονες. Αυτές οι τριάδες αριθμών συγκρίνονται τελικά με χαρακτηριστικές τριάδες που αντιπροσωπεύουν διαφορετικές δομές [161]. Έτσι, τα άτομα μπορεί να θεωρηθεί ότι ανήκουν σε δομή FCC, BCC, HCP, εικοσαεδρική ή άλλη, υπονοώντας άμορφη κατάσταση ή άγνωστη δομή.

Μια εικόνα των μεταβολών της δομής ενός υλικού παρέχεται και από την κατασκευή του διαγράμματος RDF (radial distribution function) ή ακτινοδιαγράμματος. Το διάγραμμα αυτό

κατασκευάζεται με βάση την εξής αρχή: εάν τα άτομα ήταν κατανεμημένα ομοιόμορφα στο χώρο, τότε η συνάρτηση κατανομής ακτίνων  $g(r)$  αντιπροσωπεύει την πιθανότητα να υπάρχει ένα άτομο σε ένα κέλυφος πλάτους  $dr$  σε απόσταση  $r$  από το κεντρικό άτομο, κάτι που απεικονίζεται στο σχήμα 3.6 [33, 117]. Ο αριθμός των ατόμων που βρίσκεται σε απόσταση μεταξύ  $r$  και  $r+dr$ , συμβολίζεται με  $dn(r)$  και υπολογίζεται ως εξής [33]:

$$dn(r) = \frac{N}{V} g(r) 4\pi r^2 dr \quad (3.30)$$

Όπου με  $N$  συμβολίζεται ο συνολικός αριθμός ατόμων και με  $V$  ο όγκος του μοντέλου. Τα κελύφη είναι πεπερασμένου αριθμού και στη συνέχεια παράγεται το ιστόγραμμα των πιθανοτήτων. Συνήθως τα άτομα που υπολογίζονται φτάνουν έως 4-5 Å. Στην περίπτωση του απαραμόρφωτου υλικού, το διάγραμμα είναι συγκεκριμένο για κάθε υλικό ενώ στην περίπτωση την οποία το δοκίμιο έχει υποστεί παραμόρφωση ή σχηματισμό άλλων φάσεων ή πιθανή διατάραξη της τάξης σε μεγάλες αποστάσεις (αμορφοποίηση), κτλ. το διάγραμμα μεταβάλλεται, καθώς αλλάζουν οι αποστάσεις των ατόμων και τα μήκη των δεσμών όσο προχωράει η κατεργασία. Επίσης, η αλλαγή του μήκους δεσμού μπορεί να συνδεθεί με αλλαγή της σκληρότητας, της δυσθραυστότητας ή της αγωγιμότητας ενός υλικού [165]. Εκτός από τα μήκη των δεσμών, συνήθως κατασκευάζεται και το αντίστοιχο διάγραμμα με τις γωνίες που σχηματίζουν μεταξύ τους οι δεσμοί.



**Σχήμα 3.8.** Υπολογισμός του αριθμού ατόμων σε κάθε στοιχειώδες κέλυφος [33].

Ένας γενικός αλγόριθμος που χρησιμοποιείται συχνά για τον εντοπισμό των διαταραχών στις προσομοιώσεις ΜΔ είναι ο DXA (Dislocation extraction algorithm). Με τη μέθοδο αυτή τα δίκτυα των διαταραχών μετατρέπονται σε συνεχείς γραμμές και προσδιορίζεται αυτόματα το διάνυσμα Burgers τους, ακόμα για περιοχές με μεγάλες παραμορφώσεις [160]. Αρχικά εντοπίζονται οι «πυρήνες» των διαταραχών, μέσω μίας από τις προηγούμενες μεθόδους π.χ. CNA. Στη συνέχεια, δημιουργείται ένα εικονικό πλέγμα και διαχωρίζονται τα άτομα που ανήκουν σε τέλειους κρυστάλλους από τα υπόλοιπα τα οποία αποτελούν μια δομή. Σε κάθε τμήμα αυτής της δομής υπολογίζεται το διάνυσμα Burgers, μέσω κατασκευής του αντίστοιχου κυκλώματος [160, 166]. Τέλος είναι δυνατόν να υπολογιστούν και οι

πυκνότητες διαταραχών στα διάφορα σημεία. Η μέθοδος αυτή πλέον έχει επεκταθεί και σε πολυκρυσταλλικά υλικά.

Άλλα μεγέθη, όπως αυτά που έχουν να κάνουν με τη μορφολογία της επιφάνειας συνήθως μελετώνται με απλή μέτρηση των γεωμετρικών χαρακτηριστικών. Η τραχύτητα της επιφάνειας, αν και είναι σημαντικό μέγεθος δεν είναι δόκιμο να υπολογίζεται με βάση τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων γιατί σε αυτό το επίπεδο ουσιαστικά δεν υφίσταται η έννοια της τραχύτητας διότι τα άτομα δεν είναι συμπαγή στην πράξη. Για μεγάλους μεγέθους δομές όμως θα ήταν πιο κατάλληλος ο υπολογισμός αφού βέβαια υποστεί χαλάρωση το σύστημα.

### **3.2.4 Σύνοψη χαρακτηριστικών και δυνατοτήτων της μεθόδου ΜΔ**

#### 3.2.4.1 Χαρακτηριστικά και δυνατότητες της ΜΔ

Έχοντας ολοκληρώσει την αναλυτική περιγραφή των χαρακτηριστικών της μεθόδου της Μοριακής Δυναμικής, κρίθηκε κατάλληλο να παρουσιαστεί μια σύντομη σύνοψη των προαναφερθέντων ώστε να είναι δυνατόν να γίνουν πιο εύκολα κατανοητές η χρησιμότητα και οι δυνατότητες της μεθόδου, ειδικά για την περίπτωση των νανοκατεργασιών αποβολής υλικού. Η μέθοδος της ΜΔ είναι μέθοδος που προσομοιώνει συστήματα που αποτελούν από διακριτά σώματα σε αντίθεση με τη μέθοδο ΠΣ και ορισμένες μη πλεγματικές μεθόδους που αναφέρονται σε συνεχή μέσα. Όπως θα φανεί στην επόμενη υποενότητα, αν και υπάρχουν σαφώς ουσιαστικές διαφορές μεταξύ του αλγορίθμου της ΜΔ και των ΠΣ καθώς και ορισμένα επιπλέον βήματα που δεν ακολουθούνται στις προσομοιώσεις συνεχούς μέσου με χρήση ΠΣ ή μη πλεγματικών μεθόδων, η διαδικασία που ακολουθείται δεν είναι εντελώς «ξένη» προς έναν έμπειρο χρήστη λογισμικού ΠΣ.

Η μέθοδος της ΜΔ είναι μια υπολογιστική μέθοδος προσομοίωσης συστημάτων της νανοκλίμακας. Τα μοντέλα ΜΔ δημιουργούνται με βασική δομική μονάδα το άτομο με φιλοσοφία bottom-up, σε αντίθεση με τα μοντέλα πεπερασμένων στοιχείων για μελέτες μακρο και μικροκλίμακας, δηλαδή το ΚΕ και το ΤΕ κατασκευάζονται από ένα σύνολο ατόμων με βάση την κρυσταλλική τους δομή. Η μέθοδος της ΜΔ θα μπορούσε να θεωρηθεί μη πλεγματική μέθοδος άλλα παρουσιάζει μεταξύ άλλων μια σημαντική διάφορα με τις περισσότερες μη πλεγματικές μεθόδους διότι δεν είναι μέθοδος συνεχούς μέσου. Περισσότερες ομοιότητες με μεθόδους προσομοιώσεις μακρο και μικροκλίμακας έχει με την μέθοδο Διακριτών Στοιχείων (DEM).

Επομένως στη μέθοδο ΜΔ δεν χρησιμοποιείται πλέγμα και επίσης δεν υφίσταται η έννοια της «πύκνωσης» του πλέγματος προκειμένου να αυξηθεί η ακρίβεια των προσομοιώσεων. Επίσης, δεν υφίσταται η έννοια του στοιχείου όπως στις πλεγματικές μεθόδους, όμως όπως συμβαίνει στις μη πλεγματικές μεθόδους στις οποίες ο κάθε κόμβος έχει επίδραση σε μια γειτονική περιοχή, η επίδραση κάθε ατόμου είναι ιδιαίτερα σημαντική στα γειτονικά του καθώς λαμβάνεται υπόψη για τον υπολογισμό των δυνάμεων σε αυτά ώστε να υπολογιστεί τελικά η τροχιά τους. Η επίδραση αυτή φθίνει σε μεγαλύτερες αποστάσεις, όπου πρακτικά η δύναμη λαμβάνει μη μηδενικές τιμές.



Το μέγεθος του μοντέλου είναι συνήθως της τάξης μερικών δεκάδων έως λίγες εκατοντάδες νανόμετρα κυρίως λόγω του υψηλού υπολογιστικού κόστους των προσομοιώσεων. Αυτό δε σημαίνει ότι είναι αδύνατο να προσομοιωθούν συστήματα μεγαλύτερων διαστάσεων, ιδίως σε μεγάλα υπολογιστικά συστήματα στα οποία έχουν αναπτυχθεί μοντέλα νανοκατεργασιών έως δεκάδων εκατομμυρίων ατόμων. Παρόλα αυτά είναι προτιμητέο από διάφορες απόψεις να χρησιμοποιούνται άλλου είδους μοντέλα για συστήματα της μικροκλίμακας, τα οποία όμως μπορούν να λάβουν δεδομένα από μοντέλα ΜΔ (πολυεπίπεδη προσομοίωση). Για να μπορεί να γίνει αντιληπτό το μέγεθος των μοντέλων που απαιτούνται εάν επιδιώκεται να προσομοιωθούν συστήματα μικροκλίμακας με τη μέθοδο της ΜΔ αξίζει να αναφερθεί ότι σε έναν κύβο από χαλκό ακμής 1 μm υπάρχουν δεκάδες δισεκατομμύρια άτομα.

Όσον αφορά τη γεωμετρία των μοντέλων, το ΚΕ λαμβάνει την επιθυμητή μορφή ανάλογα με την κατεργασία που μοντελοποιείται ενώ το ΤΕ είναι συνήθως σχήματος ορθογωνίου παραλληλεπίπεδου. Αυτό όμως δεν αποκλείει τη δυνατότητα χρήσης ΤΕ με οποιοδήποτε σχήμα, καθώς η μέθοδος ΜΔ όπως και οι περισσότερες υπολογιστικές μέθοδοι δεν θέτει κάποιο περιορισμό σε αυτό, αρκεί να μοντελοποιείται ορθά η δομή του υλικού.

Για τη μοντελοποίηση της συμπεριφοράς του υλικού του ΤΕ και του ΚΕ χρησιμοποιείται η συνάρτηση δυναμικού, όπως περιγράφηκε εκτενώς σε προηγούμενη υποενότητα. Η συμπεριφορά της συνάρτησης δυναμικού υπαγορεύεται από τη φυσική που διέπει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ ατόμων, καθώς υπάρχουν τόσο ελκυστικές όσο και απωθητικές δυνάμεις. Επίσης, όταν η απόσταση είναι μικρότερη της απόστασης ισορροπίας, οι δυνάμεις είναι απωθητικές και η δυναμική ενέργεια οδηγείται γρήγορα προς απειρισμό λόγω της απαγορευτικής αρχής του Pauli για τα τροχιακά των ατόμων, ενώ όταν η απόσταση είναι μεγαλύτερη της απόστασης ισορροπίας αρχικά οι δυνάμεις είναι ελκυστικές και στη συνέχεια τείνουν προς το μηδέν μετά από μια μεγάλη απόσταση, δηλαδή το μήκος αποκοπής.

Ενώ όπως θα γίνει εμφανές από τη βιβλιογραφική ανασκόπηση της επόμενης υποενότητας, συνήθως στις προσομοιώσεις νανοκατεργασιών με ΜΔ μοντελοποιούνται μονοκρυσταλλικά μέταλλα με δομή fcc όπως χαλκός, νικέλιο και αλουμίνιο και σπανιότερα υλικά με δομή bcc όπως ο σίδηρος, καθώς και ορισμένα κεραμικά υλικά π.χ. πυρίτιο, παρόλα αυτά η μέθοδος ΜΔ μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιοδήποτε υλικό. Πιο συγκεκριμένα, είναι δυνατόν να μοντελοποιηθούν όλα τα είδη των υλικών όπως μέταλλα, κεραμικά ή πολυμερη, τόσο κρυσταλλικά (μονοκρυσταλλικά και πολυκρυσταλλικά με διάφορους κρυσταλλογραφικούς προσανατολισμούς) όσο και άμορφα, κράματα και χημικές ενώσεις αρκεί να υπάρχει κατάλληλη συνάρτηση δυναμικού και οι συντελεστές της συνάρτησης δυναμικού για το συγκεκριμένο υλικό να είναι διαθέσιμοι από κάποια αξιόπιστη πηγή.

Η συνάρτηση δυναμικού έχει ιδιαίτερα σημαντικό ρόλο, καθώς μπορεί να μοντελοποιήσει τη συμπεριφορά του υλικού με μεγάλη ακρίβεια καθώς οι συντελεστές της προσδιορίζονται είτε από προσομοιώσεις κβαντικής μηχανικής είτε από πειραματικά δεδομένα. Οι συναρτήσεις δυναμικού περιέχουν κατάλληλους όρους ώστε να μοντελοποιούνται ιδιαιτερότητες του υλικού όπως π.χ. για τα μέταλλα η συνεισφορά των ελεύθερων ηλεκτρονίων ή για αμέταλλα η συμπεριφορά του ομοιοπολικού δεσμού.

Η συνάρτηση δυναμικού μοντελοποιεί ταυτόχρονα, τόσο τη θερμομηχανική, όσο και τριβολογική συμπεριφορά του υλικού. Επομένως, δε χρειάζεται ορισμός των μηχανικών ιδιοτήτων του υλικού, του συντελεστή κράτυνσης, της εξάρτησης από τη θερμοκρασία ή το ρυθμό παραμόρφωσης, ορισμός κριτηρίου για τη διαρροή και τη θραύση ή για τον αποχωρισμό του υλικού π.χ. μέσω απαλοιφής στοιχείων. Επίσης δε χρειάζεται να οριστούν οι θερμικές ιδιότητες του υλικού, η θερμοκρασία τήξης, βρασμού ή εξάχνωσης ή κάποιο μοντέλο τριβής και το μοντέλο μπορεί να συμπεριφερθεί κατάλληλα υπό οποιεσδήποτε συνθήκες π.χ. μεγάλες παραμορφώσεις ή υψηλές θερμοκρασίες. Στην περίπτωση των μεγάλων παραμορφώσεων ή θερμοκρασιών όταν το υλικό αποχωρίζεται αυτό γίνεται με φυσικό τρόπο, διότι τα άτομα μετακινούνται σε αποστάσεις στις οποίες οι δεσμοί οδηγούνται σε «θραύση» γιατί πλέον δεν ασκούνται πρακτικά δυνάμεις μεταξύ των ατόμων αυτών.

Επομένως γίνεται εμφανές ότι μέσω της χρήσης της συνάρτησης δυναμικού ένα μεγάλο πλεονέκτημα της μεθόδου ΜΔ είναι ότι μπορεί να προβλέψει αρκετά φαινόμενα που πηγάζουν στη νανοκλίμακα χωρίς να χρειάζεται ειδικά μοντέλα αρκεί να επιλεγούν κατάλληλα οι συναρτήσεις δυναμικού και να υπάρχουν διαθέσιμες οι τιμές των συντελεστών για τα επιθυμητά υλικά από αξιόπιστη πηγή.

Εκτός του ότι δε χρησιμοποιείται ξεχωριστό μοντέλο για την θραύση ή την τήξη όπως προαναφέρθηκε, είναι δυνατόν να μοντελοποιηθούν άμεσα τα φαινόμενα κλίμακας, τριβολογικά φαινόμενα λόγω επαφής σωμάτων, η μετάβαση από συνθήκες ψαθυρής σε όλκιμη κοπή, η φύση της πλαστικής παραμόρφωσης, η εργοσκλήρυνση, ο σχηματισμός ρωγμών σε υλικά, οι θερμικές ταλαντώσεις των ατόμων, η δημιουργία και κίνηση διαταραχών, η ύπαρξη άλλων ειδών ατελειών κτλ.

Με τη μέθοδο της ΜΔ μοντελοποιούνται δυναμικά, χρονικά μεταβαλλόμενα φαινόμενα. Η εξίσωση που προβλέπει την τροχιά των ατόμων στη μέθοδο της ΜΔ είναι ο δεύτερος νόμος του Νεύτωνα. Οι δυνάμεις που ασκούνται σε κάθε άτομο από τα γειτονικά του υπολογίζονται με έναν αποδοτικό αλγόριθμο και αθροίζονται. Για την αριθμητική ολοκλήρωση χρησιμοποιείται μια παραλλαγή του σχήματος velocity Verlet, η μέθοδος Leapfrog. Οι οριακές συνθήκες του προβλήματος σχετίζονται με την αποφυγή κίνησης του TE, την εξάλειψη τεχνητά δημιουργούμενης θερμότητας και την προσέγγιση της συμπεριφοράς ενός μεγαλύτερου σώματος ενώ οι αρχικές συνθήκες αφορούν τις αρχικές θέσεις και ταχύτητες του KE και του TE. Ειδικά για τις ταχύτητες των ατόμων του TE, ο ορισμός τους γίνεται μέσω της κατανομής Maxwell-Boltzmann ώστε να λαμβάνεται υπόψη η θερμική ταλάντωση των ατόμων. Έτσι, παρότι η επίλυση των εξισώσεων είναι αιτιοκρατική χωρίς να επιλύεται άμεσα η εξίσωση του Schrödinger, παρόλα αυτά υπάρχουν τα απαραίτητα στοχαστικά στοιχεία σύμφωνα με τους νόμους της φυσικής. Τέλος, αξίζει να σημειωθεί η σημασία της επιλογής κατάλληλου χρονικού βήματος για την αριθμητική ολοκλήρωση, το οποίο συνήθως κυμαίνεται από 0.1-1 fs. Λόγω του μικρού χρονικού βήματος και του σχετικά αυξημένου υπολογιστικού κόστους συνήθως το χρονικό διάστημα της κατεργασίας που μοντελοποιείται κυμαίνεται έως μερικές εκατοντάδες ps.

### 3.2.4.2 Σύντομη περιγραφή βημάτων προσομοίωσης ΜΔ

Προκειμένου να γίνει κατανοητή η εφαρμογή της μεθόδου ΜΔ σε πρακτικές εφαρμογές, στην παρούσα υποενότητα γίνεται μια σύντομη περιγραφή της διαδικασίας πραγματοποίησης μιας προσομοίωσης ΜΔ. Συνήθως στο λογισμικό επίλυσης τα διάφορα απαραίτητα βήματα για την κατασκευή του μοντέλου και την επίλυσή του ορίζονται με την μορφή εντολών σε ένα αρχείο εισόδου το οποίο μπορεί να επικαλείται διάφορα άλλα αρχεία που περιέχουν π.χ. τη γεωμετρία του συστήματος, τη συνάρτηση δυναμικού κτλ. Στους περισσότερους κώδικες επίλυσης, οι οποίοι είναι κώδικες ανοικτού λογισμικού το περιβάλλον δεν είναι παραθυρικό και προκειμένου να δημιουργηθεί η γεωμετρία ή να οπτικοποιηθούν και να αναλυθούν τα αποτελέσματα χρησιμοποιούνται εξωτερικοί κώδικες.

Αρχικά ορίζονται διάφορες βασικές λεπτομέρειες της προσομοίωσης όπως οι οριακές συνθήκες στο simulation box που περιβάλλει το μοντέλο, οι μονάδες μέτρησης, το είδος (ή τα είδη) της κρυσταλλικής δομής των σωμάτων του μοντέλου π.χ. fcc, η ατομική σταθερά κάθε κρυσταλλικής δομής και η ατομική μάζα κάθε στοιχείου. Στη συνέχεια ορίζεται το μοντέλο με τρόπο ανάλογο με αυτό που ορίζεται η γεωμετρία ενός μοντέλου πεπερασμένων στοιχείων αλλά ακολουθώντας τη λογική της μεθόδου ΜΔ. Επομένως, ορίζεται το ολικό μέγεθος του μοντέλου και στη συνέχεια οι επιμέρους περιοχές που το αποτελούν. Για τον ορισμό αυτό τα μεγέθη μπορούν να εκφραστούν είτε σε κάποια μονάδα μέτρησης μήκους π.χ. Ångstrom είτε ως ακέραιο πολλαπλάσιο της πλεγματικής σταθεράς της κάθε κρυσταλλικής δομής. Σε αυτή τη φάση ορίζονται ουσιαστικά οι τρεις συνήθεις ζώνες που δημιουργούνται στο TE με την ζώνη των νευτώνιων ατόμων να περικλείεται από δύο πλευρές από τη ζώνη των ατόμων-θερμοστατών που ρυθμίζουν τη θερμοκρασία μέσω αλλαγής της ταχύτητάς τους και από τη ζώνη των οριακών ατόμων που δρουν όπως η πάκτωση. Επίσης με κατάλληλο τρόπο δημιουργείται και το KE. Εναλλακτικά μπορεί να κατασκευαστεί η γεωμετρία με εξωτερικό λογισμικό και να εισαχθεί από αρχείο κατάλληλης μορφής.

Έπειτα ορίζονται οι συναρτήσεις δυναμικού που θα χρησιμοποιηθούν και οι παράμετροί τους για το κάθε υλικό, όπως περιγράφηκαν σε προηγούμενη υποενότητα. Μετά ορίζεται η αρχική ταχύτητα σύμφωνα με την κατανομή Maxwell-Boltzmann για την επιθυμητή θερμοκρασία και ορίζεται η χρονική περίοδος που αντιστοιχεί στην αρχική βελτιστοποίηση της δομής και στην περίοδο χαλάρωσης του συστήματος ώστε να επιτευχθεί ομαλά η αρχική επιθυμητή θερμοκρασία στο TE. Αξίζει να σημειωθεί ότι η διαδικασία αυτή περιλαμβάνει περισσότερα στάδια ανάλογα με το είδος του υλικού που μοντελοποιείται. Κατά τη διάρκεια των αρχικών σταδίων εκτελείται κανονικά η προσομοίωση όμως το KE παραμένει ακίνητο ενώ οι κινήσεις των ατόμων διέπονται από την αριθμητική επίλυση του 2ου νόμου του Νεύτωνα με χρήση του σχήματος Leapfrog με το επιθυμητό χρονικό βήμα. Εφόσον επιτευχθούν οι επιθυμητές αρχικές συνθήκες είναι δυνατόν να ξεκινήσει η καθεαυτό προσομοίωση με έναρξη κίνησης του KE σύμφωνα με την προκαθορισμένη τροχιά η οποία ορίζεται μέσω εξίσωσης. Προκειμένου να επιταχυνθεί η επίλυση είναι δυνατή η χρήση παράλληλης επεξεργασίας ή επεξεργασίας σε κάρτες γραφικών.

Τέλος εξάγονται σε αρχεία κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης διάφορα μεγέθη σχετικά με το μοντέλο. Μέσω των συνήθων προγραμμάτων είναι δυνατόν να εξάγονται μεγέθη όπως οι δυνάμεις, η θερμοκρασία, οι τάσεις, η δυναμική ενέργεια αλλά και οποιοδήποτε μέγεθος μπορεί να παραχθεί μέσω κατάλληλων πράξεων π.χ. τάσεις von Mises και μεγέθη σχετικά με την μεταβολή της δομής του TE όπως περιγράφονται πιο αναλυτικά στην υποενότητα 3.2.3. Επομένως, μετά τα στάδια της προεπεξεργασίας και της επίλυσης ακολουθεί η μετεπεξεργασία μέσω οπτικοποίησης και ανάλυσης των αποθηκευμένων αποτελεσμάτων σε εξωτερικό κώδικα.

Κλείνοντας την παρούσα υποενότητα αξίζει να σχολιαστεί το υπολογιστικό κόστος των προσομοιώσεων ΜΔ. Στις υποενότητες της θεωρητικής περιγραφής της μεθόδου ΜΔ όπως και σε επόμενες ενότητες της παρούσας διατριβής γίνεται λόγος για το υπολογιστικό κόστος της μεθόδου ΜΔ. Γι'αυτό το λόγο κρίνεται σκόπιμο να γίνει μια σύντομη αναφορά στους παράγοντες που συνδέονται με το υπολογιστικό κόστος των προσομοιώσεων ΜΔ. Όπως έχει προαναφερθεί, στις προσομοιώσεις με χρήση της μεθόδου ΜΔ το κομμάτι του αλγορίθμου που συμβάλλει καθοριστικά στην αύξηση των υπολογιστικών απαιτήσεων είναι ο υπολογισμός των δυνάμεων μεταξύ των ατόμων. Καθώς ο υπολογισμός γίνεται μέσω εύρεσης των γειτονικών ατόμων και άθροισης των συνεισφορών τους, ο αλγόριθμος εύρεσης των γειτονικών ατόμων πρέπει να είναι αρκετά αποδοτικός για να μην γίνονται επιπλέον υπολογισμοί δυνάμεων με σχεδόν μηδενικές τιμές.

Ένας άλλος σημαντικός παράγοντας είναι η ταχύτητα κοπής στην προσομοίωση καθώς για «μικρές» ταχύτητες, κοντά στα 1-10 m/s η διάρκεια της προσομοίωσης είναι αρκετά αυξημένη. Έτσι, παλιότερα χρησιμοποιούνταν αυξημένες ταχύτητες κοπής για να επιταχυνθούν οι προσομοιώσεις χωρίς να λαμβάνεται υπόψη ότι η κατάσταση του TE είναι αρκετά διαφορετική σε μεγάλες ταχύτητες. Επομένως, καλό είναι να επιλέγονται ταχύτητες που δεν επηρεάζουν το αποτέλεσμα της προσομοίωσης και είναι όσο το δυνατόν πιο κοντά στις ταχύτητες της κατεργασίας που μοντελοποιείται.

Ένας ακόμα κρίσιμος παράγοντας σχετικά με το υπολογιστικό κόστος της προσομοίωσης είναι το χρονικό βήμα, καθώς επηρεάζει ιδιαίτερα το χρόνο επίλυσης αλλά ταυτόχρονα και την ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Η επιλογή του γίνεται σε σχέση με την συχνότητα της ταλάντωσης των ατόμων αλλά και την επίτευξη ευστάθειας μέσω διατήρησης της ενέργειας του συστήματος. Επομένως, στην περίπτωση των νανοκατεργασιών συνήθως επιλέγονται τιμές στο εύρος 0.1-1 fs ή το πολύ 10 fs, με αποτέλεσμα να απαιτούνται συνήθως μερικές εκατοντάδες χιλιάδες βήματα για την ολοκλήρωση της προσομοίωσης. Τέλος αξίζει να αναφερθεί ότι οι πιο ευρέως χρησιμοποιούμενοι υπολογιστικοί κώδικες εκμεταλλεύονται αποδοτικά τις δυνατότητες παράλληλης επεξεργασίας ή χρήσης καρτών γραφικών επιταχύνοντας ιδιαίτερα την προσομοίωση.

### **3.3 Εφαρμογές της μεθόδου ΜΔ σε προσομοιώσεις νανοκατεργασιών**

#### **3.3.1 Εισαγωγή**

Στο παρόν κεφάλαιο θα παρουσιαστούν συνοπτικά ορισμένες εφαρμογές της ΜΔ, με ιδιαίτερη έμφαση στις νανοκατεργασίες. Γενικά, η μέθοδος ΜΔ έχει εφαρμοστεί κυρίως σε

νανο-κατεργασίες που προέρχονται από συμβατικές κατεργασίες αποβολής υλικού, όπως η τόννευση με διαμάντι (SPDT), η νανο-λείανση, νανο-στίλβωση και το νανο-φρεζάρισμα, λιγότερο σε μη-συμβατικές κατεργασίες, όπως κατεργασία με laser ή με δέσμη σωματιδίων και ακόμα λιγότερο σε κατεργασίες διαμόρφωσης σε επίπεδο νανοκλίμακας. Η περιγραφή αυτών των εφαρμογών της μεθόδου ΜΔ στις νανο-κατεργασίες έχει ενδιαφέρον, καθώς η μοντελοποίηση κάθε κατεργασίας παρουσιάζει ορισμένες ιδιαιτερότητες, που δεν είναι δυνατόν να παρουσιαστούν στο γενικό κεφάλαιο που αναφέρεται στη μέθοδο ΜΔ. Επίσης, η παρουσίαση αυτή έχει ενδιαφέρον, προκειμένου να αναδειχθούν οι δυνατότητες αλλά και οι περιορισμοί της μεθόδου ΜΔ στην εφαρμογή της στη μελέτη των κατεργασιών σε νανοκλίμακα.

### **3.3.2 Προσομοιώσεις με γενικό μοντέλο νανοκοπής**

Η πρώτη κατηγορία κατεργασιών περιλαμβάνει κατεργασίες που μπορούν να απλοποιηθούν σε μοντέλα που προσομοιάζουν την ορθογωνική κοπή της μακροκλίμακας, δηλαδή μοντέλα 2.5 Δ, τα οποία είναι μεν 3Δ αλλά ουσιαστικά δεν το ΚΕ δεν δρα με κάποιο τρόπο στην τρίτη διεύθυνση. Η διαφοροποίηση αυτών των μελετών, σε σχέση με τις μελέτες των επόμενων κατηγοριών που θα αναφερθούν στη συνέχεια σχετίζεται με το ότι ένα σημαντικό ποσοστό αυτών παρουσιάζουν κοινά χαρακτηριστικά, όπως η ευθύγραμμη πορεία του ΚΕ και ότι σε αυτές το ΚΕ είναι παρόμοιο με αυτό που χρησιμοποιείται στις μακροσκοπικές προσομοιώσεις της ορθογωνικής κοπής. Σε αυτή την κατηγορία επίσης περιλαμβάνονται μελέτες που αναφέρονται στην τόννευση ενός σημείου με διαμάντι (SPDT).

Καθώς η μοντελοποίηση των νανοκατεργασιών ήταν ιδιαίτερα χρονοβόρα με βάση τις υπολογιστικές δυνατότητες των αρχών της δεκαετίας του 1990, στην αρχή χρησιμοποιήθηκαν απλοποιημένες γεωμετρικές ΚΕ με τη μορφή σφήνας ή ορθογωνίου υπό κλίση και ΤΕ μικρού μεγέθους με λίγες χιλιάδες άτομα το πολύ [167-169]. Αυτή την εποχή τέθηκαν όμως οι βάσεις για τις επόμενες δεκαετίες στις οποίες όπως θα φανεί στη συνέχεια, μοντελοποιήθηκαν διάφορα είδη υλικών, γεωμετρικές και υλικά ΚΕ, κατεργασίες με πιο σύνθετη κινηματική, κτλ.

Τα υλικά που μοντελοποιούνται στις προσομοιώσεις αυτές, εκτός από τα συνήθη μονοκρυσταλλικά μεταλλικά ή κεραμικά υλικά π.χ. χαλκός, νικέλιο, σίδηρος, αλουμίνιο και πυρίτιο, είναι διάφορα κράματα [170, 171] ή ημιαγωγοί [172, 173], υλικά από αποτελούνται από στρώσεις 2 διαφορετικών υλικών [174, 175], υλικά με διαφορετικούς κρυσταλλογραφικούς προσανατολισμούς [176], πολυκρυσταλλικά υλικά [177-180] και ύαλοι [181-184]. Σπανιότερα, σε ορισμένα μοντέλα έχει γίνει μοντελοποίηση της νανοκοπής, όχι σε συνθήκες κενού όπως συνηθίζεται, αλλά σε περιβάλλον υγρού ή αερίου. Τόσο στην περίπτωση υγρού όσο και αερίου, το ρευστό συνήθως βρίσκεται σε έναν όγκο που περιβάλλει εξολοκλήρου το ΚΕ και το ΤΕ [185-187].

Στην πλειοψηφία των μελετών που έχουν ως θέμα τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του ΚΕ, μελετάται η επίδραση της γωνίας αποβλίττου, αλλά και της ακτίνας καμπυλότητας της κοπτικής ακμής στο μηχανισμό αποβολής υλικού [125, 188-190]. Εκτός από αυτές τις μελέτες, έχουν διερευνηθεί και άλλα χαρακτηριστικά των ΚΕ όπως η επίδραση κάποιας

ειδικής διαμόρφωσης π.χ. κάποιο μοτίβο που δημιουργήθηκε με χρήση laser ή νανο-αυλάκια στην απόδοση του εργαλείου [162, 191, 192]. Υπάρχουν επίσης και ορισμένες μελέτες με χρήση δύο ΚΕ [193-195]. Το υλικό του ΚΕ είναι συνήθως διαμάντι αλλά τα τελευταία κυρίως χρόνια παρουσιάστηκαν κάποιες μελέτες στις οποίες το υλικό ήταν CBN ή καρβίδιο του πυριτίου [196-198]. Ενώ όπως προαναφέρθηκε η πορεία του ΚΕ είναι ευθύγραμμη με σταθερή ταχύτητα στη συντριπτική πλειοψηφία των περιπτώσεων, υπάρχουν και ελάχιστες περιπτώσεις όπου μοντελοποιήθηκε ένα διαφορετικό είδος κίνησης. Για παράδειγμα, οι Kang et al. [199] μοντελοποίησαν κίνηση του κοπτικού εργαλείου σε τροχιά που περιλάμβανε τόσο ευθύγραμμα κομμάτια όσο και τόξα κύκλου. Οι Liu et al. [200] μοντελοποίησαν μια ελλειπτική κίνηση του ΚΕ με ένα μοντέλο μεταβλητού βάρους. Οι Komanduri et al. [201] χρησιμοποίησαν ένα μοντέλο που προσομοιάζει τη λοξή κοπή, ενώ οι Li et al. [202] μοντελοποίησαν την τόννευση με ρεαλιστικό τρόπο ως κοπή ενός κυλινδρικού κομματιού.

Η φθορά του κοπτικού εργαλείου, όπως προαναφέρθηκε στις υποενότητες περί μικρο και νανο-κατεργασιών, είναι ένα ιδιαίτερα σημαντικό θέμα και αποτελεί πεδίο μελέτης από τα πρώτα χρόνια που άρχισαν να μοντελοποιούνται οι νανοκατεργασίες. Αν και αρχικά η μοντελοποίηση πραγματοποιούνταν έμμεσα, ορίζοντας ένα συντελεστή που τροποποιούσε τη συνάρτηση δυναμικού, ώστε να λαμβάνει υπόψη ότι το κοπτικό είχε μειωμένη αντοχή και απόδοση, στη συνέχεια έγινε δυνατή η άμεση μοντελοποίηση της φθοράς. Η μοντελοποίηση της φθοράς, όπως συμβαίνει και σε προσομοιώσεις μακροκλίμακας πραγματοποιείται αναιρώντας τη θεώρηση ότι το ΚΕ είναι απαραμόρφωτο, λόγω της αρκετά μεγαλύτερης σκληρότητάς του σε σχέση με τη σκληρότητα του ΤΕ. Προκειμένου να μοντελοποιηθεί η φθορά του ΚΕ, η οποία στην περίπτωση κοπής ιδιαίτερα σκληρών υλικών όπως τα κεραμικά είναι εμφανής, τα άτομα του ΚΕ χωρίζονται σε τρεις κατηγορίες, τα οριακά άτομα, τα άτομα-θερμοστάτες και τα νευτώνια άτομα. Το ΚΕ κινείται με την προκαθορισμένη ταχύτητα αλλά είναι πλέον δυνατόν να παραμορφωθεί και να υπάρξει αφαίρεση υλικού από αυτό. Επίσης, είναι ανάγκη να οριστεί η κατάλληλη συνάρτηση δυναμικού για το υλικό του ΚΕ, η οποία στην περίπτωση του διαμαντιού είναι συνήθως η συνάρτηση Tersoff. Αν και οι περισσότεροι ερευνητές που δε μελετούν τη φθορά αποφεύγουν τη χρήση του παραμορφώσιμου κοπτικού εργαλείου για λόγους υπολογιστικού κόστους, ορισμένοι το χρησιμοποιούν και σε μελέτες που δεν έχουν κύριο θέμα τη φθορά του ΚΕ.

Με το γενικό μοντέλο νανοκοπής επιδιώκεται κυρίως η μελέτη της πλαστικής παραμόρφωσης του δοκιμίου υπό συνθήκες παραπλήσιες των διαφόρων κατεργασιών κοπής (κάτι που είναι και το σημαντικό πλεονέκτημα που προσφέρει η μέθοδος σε σχέση με άλλες), ο εντοπισμός των ατελειών που προκύπτουν και της επίδρασης των συνθηκών κατεργασίας στην ακεραιότητα του τεμαχίου σε διάφορα βάθη κάτω από την επιφάνεια (π.χ. παραμένουσες τάσεις, δημιουργία ρωγμών). Αυτά τα μοντέλα είναι κατάλληλα, εκτός από τη μελέτη της φθοράς και για τη μελέτη των φαινομένων κλίμακας, τα οποία έχουν παρουσιαστεί εκτενώς στο υποκεφάλαιο που αφορά τις μικροκατεργασίες, όπως η επίδραση της ακτίνας καμπυλότητας της κοπτικής ακμής, το ελάχιστο πάχος αποβλίπτου, η μετάβαση από συνθήκες ψαθυρής κοπής σε όλκιμη κοπή κ.α. Στις μελέτες αυτές είναι δυνατό να εντοπιστούν το πεδίο φθοράς (flank wear) [203, 204], οι αιτίες της γρήγορης φθοράς των αδαμάντινων ΚΕ κατά την κοπή σιδηρούχων κραμάτων ή άλλων σκληρών

υλικών [205-207], την επίδραση ατελειών του ΚΕ στη φθορά του [208] ή τη φθορά λόγω προσκόλλησης ατόμων του ΤΕ στο ΚΕ [209].

Καθώς όσο εξελίσσεται η τεχνολογία, αυξάνονται σημαντικά οι υπολογιστικές δυνατότητες έχουν διεξαχθεί ορισμένες μελέτες με μεγάλο αριθμό ατόμων στις οποίες, σε αντίθεση με τα μοντέλα που προσομοιάζουν την ορθογωνική κοπή, το ΚΕ μοντελοποιείται ως η άκρη της κοπτικής ακμής με την καμπυλότητά της και στις οποίες το κομμάτι είναι προδιαμορφωμένο, ώστε να προσομοιώνεται η περίπτωση που έχει ήδη κατεργαστεί ένα τμήμα του και στο επόμενο πάσο η επιφάνεια επαφής είναι ακριβώς όσο η πειραματική. Με αυτά τα μοντέλα έχει αποδειχθεί ότι εξάγονται πιο ακριβή συμπεράσματα σε σχέση με τους μηχανισμούς αποβολής υλικού κατά τις νανοκατεργασίες κοπής [210-212].

Μία άλλη σημαντική κατηγορία μοντέλων που αναπτύχθηκαν τα τελευταία χρόνια είναι μοντέλα που προσομοιώνουν νανοκοπές υποβοηθούμενες από laser ή ταλαντώσεις. Πιο συγκεκριμένα, στις μελέτες σχετικά με την νανοκοπή με υποβοήθηση από δέσμη laser, χρησιμοποιείται το καθιερωμένο μοντέλο για μια γκαουσιανή κινούμενη συνεχή πηγή laser με διαμέτρους μικρότερες του πλάτους των υποστρωμάτων. Η πηγή κινείται με ίδια ταχύτητα με αυτή του κοπτικού και προηγείται κατά ένα μικρό διάστημα. Με χρήση αυτού του μοντέλου έχει μελετηθεί η επίδραση παραμέτρων όπως η ταχύτητα, η ένταση και η διαμετρος του laser [213] αλλά και η επίδρασή του στη φθορά του κοπτικού εργαλείου [214].

Στις μελέτες με θέμα τις ταλαντώσεις, όπως συμβαίνει και στην πράξη, στις πειραματικές εργασίες που πραγματοποιήθηκαν σε AFM και παρατέθηκαν σε προηγούμενη υποενότητα, το ΚΕ κινείται μεν προς μία κατεύθυνση αλλά στην κίνηση αυτή υπερτίθεται είτε μια κατακόρυφη παλινδρομική κίνηση είτε μια ελλειπτική κίνηση ώστε να μην έρχεται διαρκώς σε επαφή με το ΤΕ. Έτσι μπορεί να επιτευχθεί μείωση των δυνάμεων και ευνοϊκότερη εντατική κατάσταση στο ΤΕ [215-218].

Άλλες, λιγότερο γνωστές τεχνικές υποβοήθησης των νανοκατεργασιών είναι η stress-assisted, ion-assisted και surface defect machining [219, 220]. Η πρώτη μέθοδος έχει σκοπό να επηρεάσει την κατανομή των παραμενουσών τάσεων στο υλικό, μέσω της άσκησης τάσεων πριν την κατεργασία, ώστε να αυξάνεται και η απόδοσή της [219, 220]. Η δεύτερη μέθοδος αποτελεί μια επιφανειακή κατεργασία τροποποίησης και σχετίζεται με την εκτόξευση ιόντων σε υποστρώματα κρυσταλλικών υλικών, μέσω μιας στοχευμένης δέσμης ιόντων υψηλής ενέργειας, ώστε να τροποποιηθούν οι μηχανικές ιδιότητες του υλικού όπως η σκληρότητα ή το μέτρο ελαστικότητας και τελικά να ελαχιστοποιηθεί η πιθανότητα σχηματισμού ρωγμών, ενώ παράλληλα να μειωθεί η φθορά του εργαλείου και να βελτιωθεί η ποιότητα της επιφάνειας [221, 222]. Η μέθοδος surface defect machining περιλαμβάνει τη δημιουργία εγχοπών διαφόρων γεωμετρικών σχημάτων στην επιφάνεια του ΤΕ, ώστε να διευκολύνει την κατεργασία κοπής και να οδηγήσει σε αυξημένη αποδοτικότητα και ευκολότερη κατεργασία σκληρών υλικών [223, 224].

Τέλος σε ορισμένες μελέτες διερευνήθηκε η επίδραση της προθέρμανσης του υποστρώματος πριν την κατεργασία (hot machining), ιδιαίτερα στην περίπτωση των κεραμικών υλικών, προκειμένου να διεξάγεται πιο αποτελεσματικά η κατεργασία σε ευνοϊκές συνθήκες με σημαντικά μειωμένες τάσεις [225].

Πέραν από τις παραμέτρους που σχετίζονται καθαρά με την κατεργασία της νανο-κοπής, έχουν πραγματοποιηθεί ορισμένες μελέτες με θέμα την επίδραση των αριθμητικών παραμέτρων της κατεργασίας ή των χρησιμοποιούμενων μοντέλων π.χ. συνάρτηση δυναμικού στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων. Ειδικότερα, το θέμα της επιλογής της κατάλληλης συνάρτησης δυναμικού έχει απασχολήσει ορισμένους ερευνητές, ιδιαίτερα τις προηγούμενες δεκαετίες, όπου λόγω του μικρότερου υπολογιστικού κόστους ήταν προτιμητέα η χρήση απλούστερων συναρτήσεων δυναμικού, όπως η συνάρτηση Morse. Όπως έχει προαναφερθεί στην προηγούμενη ενότητα, η χρήση της κατάλληλης συνάρτησης δυναμικού δεν υπαγορεύεται μόνο από την ορθότητα των αποτελεσμάτων, ώστε να ελέγχεται αν οδηγεί σε διαφορετικά αποτελέσματα όσον αφορά τις δυνάμεις, τη μορφή του αποβλίττου αλλά και άλλα φαινόμενα όπως τη μετάβαση από συνθήκες ψαθυρής σε όλκιμη κοπή [226-228]. Επίσης, αν και δεν συνηθίζεται η πραγματοποίηση μελέτης ανεξαρτησίας των αποτελεσμάτων από το μέγεθος του μοντέλου, έχει παρατηρηθεί ότι το μέγεθος του μοντέλου όπως και οι οριακές συνθήκες (πάκτωσης ή περιοδικές) και το επίπεδο στο οποίο εφαρμόζονται παίζουν σε κάποιο βαθμό ρόλο στα αποτελέσματα, όπως στις δυνάμεις και τη μορφή του αποβλίττου [227, 229, 230].

### **3.3.3 Προσομοίωση κατεργασιών σε AFM/νανο-εγχάραξης**

Ένα μέρος των μελετών που αναφέρονται σε γενικές περιπτώσεις νανοκοπής παρουσιάζονται ως μελέτες που αφορούν τη νανο-εγχάραξη, το οποίο όπως προαναφέρθηκε σε προηγούμενη υποενότητα πραγματοποιείται συνήθως σε AFM. Παρόλα αυτά δε μπορεί να θεωρηθεί ότι όλες αυτές οι μελέτες αντιπροσωπεύουν την κατεργασία του AFM, καθώς δεν αποδίδουν με ιδιαίτερο ρεαλισμό τις συνθήκες της κατεργασίας. Ενώ βέβαια είναι πρακτικά αδύνατο να προσομοιωθούν οι ταχύτητες ενός συμβατικού AFM, ορισμένοι ερευνητές χρησιμοποιούν μια αναπαράσταση της ακίδας του AFM με πιο ρεαλιστικό τρόπο στα μοντέλα τους και μελετούν θέματα παρόμοια με αυτά των προσομοιώσεων νανοκοπής, όπως τις αναπτυσσόμενες δυνάμεις, θερμοκρασίες, τάσεις και το μηχανισμό παραμόρφωσης και αποβολής υλικού από το υπόστρωμα [231-235]. Η κατεργασία αυτή έχει προσομοιωθεί και σε άλλες συνθήκες εκτός από το κενό, όπως με την ακίδα μερικώς ή ολικώς βυθισμένη σε νερό [236, 237].

Εκτός από τις περιπτώσεις που ονομάστηκαν γενικές περιπτώσεις νανοκατεργασιών κοπής καθώς και τις περιπτώσεις προσομοιώσεων της νανο-εγχάραξης που παρουσιάστηκαν στις προηγούμενες υποενότητες, προκειμένου για να αναδειχθούν τα ιδιαίτερα στοιχεία των μοντέλων τα οποία διαφέρουν από αυτά που παρουσιάστηκαν στην γενική περιγραφή της μεθόδου ΜΔ, είναι ενδιαφέρον να παρουσιαστούν συνοπτικά τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά μοντέλων για νανο-κατεργασίες που μελετώνται σπανιότερα. Οι περιπτώσεις αυτές αφορούν κατεργασίες σχετικές με την αποπεράτωση επιφανειών αλλά και κατεργασίες εκχόνδρισης, που εμφανίζουν ενδιαφέρον, ιδίως οι περιπτώσεις των μη συμβατικών κατεργασιών.

### **3.3.4 Προσομοιώσεις νανο-φρεζαρίσματος**

Σχετικά με το νανο-φρεζάρισμα, ελάχιστες εργασίες έχουν πραγματοποιηθεί με τη μέθοδο ΜΔ. Οι μελέτες αυτές αναφέρονται σε προσομοιώσεις φρεζαρίσματος με κονδύλι (end-



milling) στη νανοκλίμακα, συνήθως για τη δημιουργία αυλακιών σε ένα υπόστρωμα. Η περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος είναι γενικά σπάνια, διότι είναι η μόνη διακοπτόμενη νανοκατεργασία που έχει προσομοιωθεί, αλλά όπως αναφέρθηκε στην υποενότητα 3.1 έχουν πραγματοποιηθεί παρόμοιες κατεργασίες με ακίδα που εκτελεί κυκλική κίνηση ορισμένες φορές σε AFM.

Μια ιδιαιτερότητα που μπορεί να παρατηρηθεί στις προσομοιώσεις νανο-φρεζαρίσματος, σχετίζεται με τις υψηλές ταχύτητες περιστροφής του ΚΕ. Όπως έχει ήδη παρατηρηθεί και σε άλλες κατηγορίες νανο-κατεργασιών, στις οποίες η ταχύτητα είναι αρκετές φορές μεγαλύτερη από τις συνήθεις πειραματικές, ακόμα και από αυτές που χρησιμοποιούνται στις μικροκατεργασίες, στο νανο-φρεζάρισμα, εάν η ταχύτητα κοπής εκφραστεί στις συνηθισμένες μονάδες (rpm) είναι ιδιαίτερα υψηλότερη και από τις υψηλότερες ταχύτητες κοπής που χρησιμοποιούνται (εκατοντάδες χιλιάδες rpm). Ένας λόγος που υπαγορεύει τη χρήση των υψηλών ταχυτήτων είναι, διότι για να έχει νόημα η πραγματοποίηση της κατεργασίας του νανο-φρεζαρίσματος ως μια διακοπτόμενη κατεργασία κοπής, πρέπει να είναι δυνατόν να πραγματοποιηθούν αρκετές περιστροφές του εργαλείου στο μήκος κοπής που συνήθως χρησιμοποιείται (μερικές δεκάδες nm).

Προκειμένου να προσομοιωθεί η δράση ενός ΚΕ με πολλαπλές κοπτικές ακμές, στις περισσότερες μελέτες το ΚΕ παρουσιάζεται ως ένα λεπτού πάχους ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο το οποίο περιστρέφεται γύρω από τον κατακόρυφο άξονα συμμετρίας του. Με χρήση αυτού του απλού μοντέλου, μπορεί να προσομοιωθεί, τόσο το μετωπικό όσο και το περιφερικό φρεζάρισμα, με μια απλή περιστροφή του σχήματος κατά  $90^\circ$ , ώστε ο άξονας να είναι παράλληλος προς την επιφάνεια του ΤΕ [238, 239]. Σε δύο περιπτώσεις το εργαλείο είχε μορφή κόλουρου κώνου και περιστρεφόταν γύρω από τον κατακόρυφο άξονα συμμετρίας του, εκτελώντας φρεζάρισμα αυλακιού ή διάτρηση [240, 241]. Το υλικό του ΚΕ σε όλες τις περιπτώσεις είναι μονοκρυσταλλικό διαμάντι [242].

Στις προσομοιώσεις αυτές, εκτός από την κίνηση του κοπτικού προσδιορίζεται άμεσα και η περιστροφή του, με αποτέλεσμα η τελική κίνηση να αποτελεί μια τροχοειδή καμπύλη [243]. Έτσι στις αντίστοιχες υπολογιστικές μελέτες, έχουν διερευνηθεί αρκετές φορές οι συνθήκες της κατεργασίας, προκειμένου να επιτευχθεί το καλύτερο δυνατό αποτέλεσμα. Στην πλειοψηφία των μελετών, το ενδιαφέρον εστιάζεται κυρίως στη μορφή και τη διαστατική ακρίβεια των παραγόμενων αυλακιών για την βελτίωση, της οποίας έχει προσδιοριστεί το εύρος των κατάλληλων συνθηκών όπως ταχύτητα κοπής, πρόωσης και κρίσιμο βάθος κοπής [242, 244], ενώ μελετώνται επίσης η δημιουργία γρεζιού, η επίδραση της αρχικής θερμοκρασίας του ΤΕ, οι δυνάμεις και οι παραμένουσες τάσεις σε περιπτώσεις με ένα ή περισσότερα αυλάκια [240, 244, 245]. Οι μελέτες αυτές έδειξαν ότι το νανο-φρεζάρισμα οδηγεί σε καλύτερη ποιότητα επιφανείας σε σχέση με την απλή κοπή π.χ. νανο-εγχάραξη [246], ενώ το περιφερικό φρεζάρισμα οδηγεί σε μεγαλύτερες δυνάμεις αλλά καλύτερη επιφάνεια σε σχέση με το μετωπικό [238].

### **3.3.5 Προσομοιώσεις νανο-λείανσης**

Τα πρώτα μοντέλα νανο-λείανσης αναπτύχθηκαν ήδη από τα τέλη της δεκαετίας του 1980, με έμφαση στη λείανση κεραμικών και ιδιαίτερα οι Rentsch et al. [247-249] επέκτειναν

αυτά τα μοντέλα σε μεγαλύτερα μεγέθη, με χρήση δύο κόκκων και διαφορετικής γεωμετρίας κόκκου. Στη συνέχεια, όπως και στην περίπτωση των μοντέλων της υποενότητας 3.3.2, μετά τη δεκαετία 2000-2010 υπήρξε μια άνοδος στον αριθμό των μελετών και την πολυπλοκότητα των μοντέλων, αναφορικά με διάφορα χαρακτηριστικά τους τα οποία περιγράφονται συνοπτικά στη συνέχεια. Αξίζει να αναφερθεί ότι τα μοντέλα αυτά παρουσιάζουν ορισμένα κοινά χαρακτηριστικά με τα μοντέλα ΠΣ για τη λείανση που κάνουν χρήση ενός κόκκου, αλλά γενικά μέχρι σήμερα δεν έχουν τον ίδιο βαθμό πολυπλοκότητας.

Εξαιρώντας τις μελέτες οι οποίες δεν παρουσιάζουν κάποιο ενδιαφέρον χαρακτηριστικό όσον αφορά το μοντέλο που χρησιμοποιείται, αλλά αφορούν αποκλειστικά την επίδραση παραγόντων της κατεργασίας όπως η ταχύτητα κοπής [250, 251] ή το βάθος κοπής [251-253] έχουν αναπτυχθεί μοντέλα με ιδιαιτερότητες όσον αφορά τη μορφή του ΤΕ και του λειαντικού κόκκου, την τροχιά που διαγράφει ο λειαντικός κόκκος, το υλικό του ΤΕ και του λειαντικού κόκκου, το είδος της νανο-λείανσης καθώς και υπολογιστικές παραμέτρους.

Ενώ η γεωμετρία του ΤΕ συνήθως αποτελείται από ένα απλό ορθογώνιο παραλληλόγραμμο, υπάρχουν διάφορες μελέτες στις οποίες χρησιμοποιούνται ιδιαίτερες γεωμετρικές επιφάνειες, ώστε να λαμβάνεται υπόψη και το γεγονός ότι η επιφάνεια στην πράξη δεν είναι ιδανικά επίπεδη, αλλά για διάφορους λόγους όπως ο τρόπος παραγωγής του υποστρώματος ή προηγούμενη κατεργασία του, μπορεί να εμφανίζει δομές με περιοδική ή ακανόνιστη μορφή. Έτσι, δημιουργήθηκαν μοντέλα για επιφάνειες με δομή «σκαλοπατιών» τύπου TLK (Terrace-Ledge-Kink) που μπορεί να εμφανιστεί σε κρυσταλλικά υποστρώματα ημιαγωγών [254], επιφάνεια με τραχύτητα είτε με ακανόνιστη κυματοειδή μορφή [255], είτε ημιτονοειδή μορφή [256], συγκεκριμένη γεωμετρία [155, 256, 257] ή ακόμα κατασκευασμένη με γεωμετρία fractal [258]. Επίσης, μοντελοποιήθηκαν ασυνεχείς επιφάνειες οι οποίες προσομοιώνουν την ύπαρξη πόρων στην επιφάνεια [259, 260] ή επιφάνειες με προεξοχές λόγω τραχύτητας (asperities) [261]. Όμως, εκτός από τη μοντελοποίηση της λείανσης σε μη επίπεδες επιφάνειες, έχουν μελετηθεί περιπτώσεις στις οποίες το εσωτερικό του ΤΕ περιλαμβάνει κενά (vacancies) [262, 263], νανοπόρους ή σκληρά σωματίδια, τα οποία διαφοροποιούν το αποτέλεσμα της κατεργασίας σε κάποιο βαθμό και πρέπει να λαμβάνονται υπόψη για τον προσδιορισμό των κατάλληλων συνθηκών κατεργασίας.

Ενώ συνήθως χρησιμοποιείται μια απλή μορφή λειαντικού κόκκου, όπως σφαιρική/ ημισφαιρική ή κυβοειδής [264], έχουν χρησιμοποιηθεί και άλλες διαφορετικές γεωμετρίες, όπως πιο πολύπλοκες πολυεδρικές, πυραμίδα, κόκκος με ειδικό σχήμα (όπως κόκκοι σχήματος V [265]). Μόνο μία φορά έχει επιχειρηθεί άμεση σύγκριση μεταξύ διαφόρων πολυεδρικών μορφών όπως κυβική, κυβο-οκταεδρική και οκταεδρική [266]. Ένα άλλο σχήμα που έχει χρησιμοποιηθεί σε ορισμένες περιπτώσεις είναι η πυραμίδα, είτε με τριγωνική είτε με τετράγωνη βάση [267-269].

Επίσης, σπάνια μελετώνται περιπτώσεις χρήσης περισσότερων του ενός λειαντικών κόκκων. Δύο χαρακτηριστικές μελέτες είναι αυτές των Chen et al. [270], που χρησιμοποίησαν τρεις κόκκους με σχήμα πυραμίδας και των Li et al. [255], που χρησιμοποίησαν δύο κόκκους σφαιρικής γεωμετρίας. Το μέγεθος του λειαντικού κόκκου έχει μελετηθεί από τους Wang et

al. [271]. Επιπλέον, ιδιαίτερα σημαντικές μπορούν να θεωρηθούν μελέτες στις οποίες έχουν χρησιμοποιηθεί πολλαπλοί κυβοειδείς κόκκοι με τυχαίους προσανατολισμούς [261]. Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι σε παλιότερες μελέτες η προσομοίωση της λείανσης έχει επιχειρηθεί μέσω απλού ορθογωνικού εργαλείου με αρνητική γωνία αποβλίττου [272].

Παρότι στις γενικές περιπτώσεις προσομοιώσεων νανο-λείανσης η πορεία του λειαντικού κόκκου είναι ευθύγραμμη με σταθερή ταχύτητα, υπάρχουν ορισμένες μελέτες στις οποίες η κινηματική του ΚΕ είναι διαφορετική, συνήθως περιλαμβάνοντας περιστροφική κίνηση του ΚΕ ή κίνησή του σε τροχιά που περιλαμβάνει τόσο γραμμικά τμήματα όσο και τόξα/τμήματα κύκλου. Εκτός από τη διαφορετική τροχιά του ΚΕ, έχουν πραγματοποιηθεί μελέτες στις οποίες η κατεργασία διεξάγεται σε έναν αριθμό πάσων, αντί ένα μόνο πάσο όπως συνηθίζεται.

Για παράδειγμα, στη μελέτη των Zhou et al. [273] η πορεία του λειαντικού κόκκου περιλάμβανε αρχικά σταδιακή βύθιση στο ΤΕ με ευθύγραμμη τροχιά υπό κλίση και στη συνέχεια οριζόντια ευθύγραμμη τροχιά. Οι Fang et al. [274] χρησιμοποίησαν ένα μοντέλο, στο οποίο ο λειαντικός κόκκος μετακινούνταν, όχι μόνο σε ευθύγραμμη τροχιά αλλά σε τροχιά που περιλάμβανε και τόξα κύκλου με διαφορετικές ακτίνες. Επίσης, στην εργασία των Li et al. [275] μελετήθηκε η επίδραση μιας τροχιάς με δύο ευθύγραμμα τμήματα υπό γωνία.

Οι Guo et al. [276] μελέτησαν την λείανση με άνω του ενός πάσα, σε παράλληλες τροχιές για να υπολογίσουν τις παραμένουσες τάσεις σε κάθε πέρασμα, ενώ οι Liu et al. [277] μελέτησαν τη νανο-λείανση με κατακόρυφα πάσα, υπολογίζοντας το πάχος του στρώματος του υλικού που επηρεάζεται από την κατεργασία. Οι Liang et al. [278] χρησιμοποίησαν ένα εργαλείο με μορφή περιστρεφόμενου δίσκου για να μελετήσουν τους μηχανισμούς παραμόρφωσης κατά τη νανο-λείανση, διερευνώντας την επίδραση της ταχύτητας περιστροφής, της φοράς περιστροφής του δίσκου και της αρχικής θερμοκρασίας του ΤΕ. Ενδιαφέρον παρουσιάζουν και δύο περιπτώσεις [279, 280] στις οποίες μοντελοποιείται η επίδραση της δυσκαμψίας του λειαντικού τροχού στην κίνηση του λειαντικού κόκκου με χρήση συστήματος ελατηρίων.

Τέλος, μια ξεχωριστή κατηγορία μελετών σχετικά με την κίνηση του ΚΕ αποτελούν οι μελέτες σε σχέση με την υψηλής ταχύτητας λείανση. Οι Li et al. [281,282] διέκριναν τρεις κατηγορίες νανο-λείανσης σε σχέση με την ταχύτητα, τη γενική κατηγορία ( $v < 45$  m/s), τη λείανση υψηλών ταχυτήτων (45-150 m/s) και τη λείανση λίαν υψηλών ταχυτήτων ( $v > 150$  m/s) και διαπίστωσαν ότι με χαμηλότερες ταχύτητες, οι δυνάμεις, οι θερμοκρασίες και ο αριθμός των ατόμων που ανήκουν σε άμορφα τμήματα του ΤΕ μειώνονται, αλλά με μεγαλύτερες ταχύτητες αυξάνεται η ποιότητα επιφανείας και η επίδραση της κατεργασίας επηρεάζει το υλικό σε μικρότερο βάθος από την επιφάνεια. Σε άλλες μελέτες [283, 284], επιβεβαιώθηκαν οι τάσεις που παρατήρησαν οι Li et al. και εντοπίστηκε η επίδραση της ταχύτητας στην μετάβαση από ψαθυρή σε όλκιμη κοπή κατά τη νανο-λείανση υλικών όπως το πυρίτιο.

Στην πλειοψηφία των περιπτώσεων νανο-λείανσης που έχουν μελετηθεί όπως προαναφέρθηκε, τα μοντέλα προσομοιάζουν την περιφερειακή λείανση, αλλά λόγω του ότι θεωρείται ότι οι κόκκοι ανήκουν σε τροχό μεγάλης διαμέτρου, η τροχιά του κόκκου

απλοποιείται σε ευθύγραμμη. Παρόλα αυτά υπάρχουν ελάχιστες περιπτώσεις στις οποίες μελετάται κάποιο άλλο είδος λείανσης, όπως η μετωπική λείανση ή κάποια παρεμφερής κατεργασία. Για παράδειγμα, οι Khatri et al. [285] μελέτησαν τη κατεργασία μαγνητορευολογικής αποπεράτωσης, με χρήση μοντέλου ενός κόκκου από οξειδίο του δημητρίου και υποστρώματος από διαμάντι και οι Eder et al. [261, 286-289] ασχολήθηκαν εκτενώς με τη μετωπική λείανση και τη νανο-στίλβωση. Η παρουσίαση του μοντέλου των ερευνητών αυτών θα γίνει στην υποενότητα της νανο-στίλβωσης διότι εμφανίζει μεγαλύτερες ομοιότητες με αυτή την κατεργασία. Σπανιότερα, έχουν μελετηθεί μοντέλα σχετικά με νανο-λείανση υποβοηθούμενη από ταλαντώσεις [290] ή laser [213].

Ενώ συνήθως το υλικό του ΚΕ είναι μονοκρυσταλλικό διαμάντι, λόγω της υψηλής σκληρότητάς του, αλλά και λόγω του ότι αποτελεί ένα από τα πιο συνηθισμένα υλικά ΚΕ που συναντώνται στις μικρο και νανοκατεργασίες, σε ελάχιστες εργασίες, κυρίως τα τελευταία χρόνια, χρησιμοποιήθηκαν εναλλακτικά υλικά, χωρίς όμως να πραγματοποιηθεί σύγκριση της απόδοσής του σε σχέση με αυτή του διαμαντιού. Για παράδειγμα, οι Li et al. [291] και Wang et al. [292] χρησιμοποίησαν ένα λειαντικό κόκκο από καρβίδιο του πυριτίου για την κοπή χάλυβα και διαμαντιού αντίστοιχα, ενώ στην εργασία των Eder et al. [289] χρησιμοποιήθηκαν λειαντικοί κόκκοι από αλουμίνα.

Σχετικά με το υλικό του ΤΕ, συνήθως το υλικό είναι μονοκρυσταλλικό όπως χαλκός, νικέλιο, αλουμίνιο, πυρίτιο ή ενώσεις του πυριτίου. Στις παλιότερες μελέτες, η πλειοψηφία των προσομοιώσεων αφορούσε μόνο αυτά τα υλικά, όπως και στην περίπτωση άλλων νανοκατεργασιών. Παρόλα αυτά, τα τελευταία χρόνια έχουν μελετηθεί αρκετές πιο σύνθετες περιπτώσεις. Για παράδειγμα, σε ορισμένες μελέτες τα τελευταία χρόνια, το υλικό είναι το νιτρίδιο του γαλλίου, για το οποίο επιδιώκεται η καλύτερη κατανόηση της κατεργασιμότητάς του μέσω λείανσης [293-295], καθώς και το νιτρίδιο του πυριτίου [296]. Η κοπή μονοκρυσταλλικών υλικών, με διαφορετικό προσανατολισμό κάθε φορά, έχει απασχολήσει ορισμένους συγγραφείς, σε συνδυασμό με την κοπή σε διαφορετική διεύθυνση από την ευθεία [281, 297, 298]. Εκτός από τη μελέτη των καθαρά μονοκρυσταλλικών υλικών ή χημικών ενώσεων, έχει μελετηθεί και η νανο-λείανση κραμάτων όπως γ-TiAl [299], χρωμιούχου χάλυβα [300] ή κοινού ανθρακούχου χάλυβα [289, 291]. Επίσης, έχει μελετηθεί η λείανση υποστρωμάτων κατασκευασμένων από δύο διαφορετικά υλικά (bilayers) όπως Ni/Cu [301, 302], Al/Si [303], Cu/Si [304], Cu/SiO<sub>2</sub> [305]. Τέλος, μια άλλη κατηγορία αφορά τις μελέτες που έχουν γίνει σε πολυκρυσταλλικά υλικά με τυχαίο προσανατολισμό κόκκων διαστάσεων λίγων νανομέτρων, στις οποίες εντοπίστηκε η επίδραση των ορίων των κόκκων και των υπο-κόκκων στο εσωτερικό τους στην παραμόρφωση του υλικού [269, 280, 306, 307].

Εκτός από τις προαναφερθείσες παραμέτρους, έχουν μελετηθεί ορισμένες φορές και διάφορες υπολογιστικές παράμετροι όπως η παράλληλη επεξεργασία [308] ή χρήση καρτών γραφικών για την επιτάχυνση των προσομοιώσεων [309].

### **3.3.6 Προσομοίωση νανοκατεργασιών με χρήση laser**

Οι εργασίες σχετικά με τις νανοκατεργασίες αποβολής υλικού με χρήση δέσμης laser είναι ιδιαίτερα συνηθισμένες, σε σχέση με τις υπόλοιπες μη-συμβατικές κατεργασίες και έχουν

μελετηθεί τόσο από τη θεωρητική σκοπιά της φυσικής, όσο και από πιο εφαρμοσμένη οπτική. Συνήθως στα μοντέλα αυτά το TE είναι 3D, αλλά το ύψος του είναι σημαντικά μεγαλύτερο από τις άλλες δύο διαστάσεις, ώστε να μπορεί να προσεγγίζει τις διαστάσεις ενός εξαιρετικά λεπτού φιλμ. Στις άλλες δύο διαστάσεις εφαρμόζονται περιοδικές συνθήκες, ώστε να προσομοιώνεται ένα TE μεγάλου μήκους και στη βάση του TE εφαρμόζονται συνθήκες μη ανάκλασης. Οι παλμοί που χρησιμοποιούνται είναι διάρκειας  $f_s$  ή  $p_s$  και οι προσομοιώσεις διαρκούν αρκετό χρόνο σε σχέση με τη διάρκεια του παλμού, προκειμένου να παρατηρηθούν οι μεταβολές της μικροδομής του TE οι οποίες ολοκληρώνονται προοδευτικά.

Σημαντικά μεγέθη που μελετώνται είναι το όριο της ισχύος του laser, προκειμένου να συμβεί εξάχνωση του υλικού, σε σχέση με τις οπτικές και θερμικές ιδιότητες του υλικού, η επίδραση πολλαπλών παλμών, ο σχηματισμός πόρων και συσσωματωμάτων κ.α. [310-313]. Μια ενδιαφέρουσα κατηγορία μοντέλων, που δεν έχει μελετηθεί ακόμα σε βάθος είναι οι νανοκατεργασίες με laser με υποβοήθηση από δέσμη ρευστού [314] ή σε περιβάλλον ρευστού [315-317]. Σε αυτές τις περιπτώσεις, μελετήθηκαν οι μηχανισμοί αποβολής υλικού και διαπιστώθηκε ότι η χρήση περιβάλλοντος ρευστού οδηγεί σε μείωση της θερμότητας στο TE, μειωμένη θερμικά επηρεασμένη ζώνη, μείωση υλικού που επαναποτίθεται, αύξηση της ποιότητας επιφανείας και μικρότερη αλλοίωση της μικροδομής.

### **3.3.7 Προσομοίωση νανοκατεργασιών με σωματίδια**

Μια ενδιαφέρουσα κατηγορία προσομοιώσεων μη συμβατικών νανοκατεργασιών αποβολής υλικού αφορά τις κατεργασίες που πραγματοποιούνται με πρόσκρουση σωματιδίων αποτελούμενων από μερικές δεκάδες άτομα στην επιφάνεια του TE. Η πλειοψηφία των μοντέλων που αναφέρονται σε αφαίρεση υλικού μέσω δέσμης σωματιδίων, σχετίζονται με μια ιδιαίτερη κατεργασία που ονομάζεται νανοκατεργασία μέσω πρόσκρουσης μεμονωμένων σωματιδίων, υποβοηθούμενη από ταλαντώσεις (Vibration-Assisted Nano-Impact machining with Loose Abrasives, VANILA). Η κατεργασία αυτή προτάθηκε από τους James και Sunadaram, οι οποίοι έχουν εκπονήσει σχεδόν όλες τις μελέτες που την αφορούν και είναι δυνατό να πραγματοποιηθεί σε μικροσκόπιο AFM [318]. Από την εποχή που αναπτύχθηκε η κατεργασία αυτή, έχουν πραγματοποιηθεί μελέτες σχετικές με τις παραμέτρους της, όπως την ταχύτητα, τη γωνία πρόσκρουσης και το μέγεθος των σωματιδίων [319, 320], τη φθορά της ακίδας που χρησιμοποιείται για την εναπόθεση των σωματιδίων [321], τους μηχανισμούς αποβολής υλικού [322], την επίδραση της ύπαρξης περιβάλλοντος νερού στην περιοχή μεταξύ ακίδας και επιφάνειας του TE [323].

Εκτός από την κατεργασία VANILA, στη σχετική βιβλιογραφία υπάρχουν ορισμένες μελέτες σχετικές με την κατεργασία με πρόσκρουση σωματιδίων, όπως γενικές μελέτες [324-326], κατεργασία cold spray [327], ακόμα και με υδροκοπή με χρήση λειαντικών μέσων [328].

### **3.3.8 Προσομοίωση νανοκατεργασιών διαμόρφωσης**

Όπως γίνεται αντιληπτό, ενώ έχει πραγματοποιηθεί πληθώρα μελετών σχετικών με συμβατικές και μη συμβατικές κατεργασίες αποβολής υλικού, στη νανοκλίμακα πολύ λίγες

υπολογιστικές μελέτες αφορούν κατεργασίες διαμόρφωσης συμπαγούς υλικού. Την τελευταία δεκαετία πραγματοποιήθηκαν ορισμένες μελέτες αναφορικά με αυτές τις κατεργασίες και πιο συγκεκριμένα μελέτες που σχετίζονται με τη νανο-διέλαση, νανο-έλαση, νανο-λιθογραφία [329-332], νανο-τύπωση [333], νανο-τύπωση [334] και χύτευση μέσω έγχυσης [335].

Οι μελέτες σχετικά με τη νανο-διέλαση αφορούν την κατασκευή συρμάτων διαμέτρου νανομέτρων (nanowires), κάτι που έχει πρακτική εφαρμογή σε διάφορα μικροσκοπικά συστήματα λόγω των εξαιρετικών μηχανικών, ηλεκτρικών και οπτικών ιδιοτήτων των νανο-συρμάτων [336]. Συνήθως, η κατασκευή των νανο-συρμάτων προκύπτει μέσω νανολιθογραφίας ή νανοσυγκολλήσεων [336, 337], αλλά τα τελευταία χρόνια ορισμένοι ερευνητές διερεύνησαν την ικανότητα παραγωγής νανοσυρμάτων μέσω νανοδιέλασης. Ένα από τα προβλήματα που διαπιστώνουν οι ερευνητές είναι η σχετικά μεγάλη τριβή που αναπτύσσεται μεταξύ της μήτρας και του υλικού που πρέπει να αντιμετωπιστεί μέσω κατάλληλου τρόπου λίπανσης, προκειμένου να είναι εφικτή η κατεργασία [338, 339]. Επιπλέον, έχει διερευνηθεί η επίδραση της ταχύτητας διέλασης και της θερμοκρασίας διέλασης κατά την κατασκευή νανο-συρμάτων.

Όσον αφορά τη νανο-έλαση, η χρήση των μοντέλων είναι ιδιαίτερα σημαντική, καθώς μπορούν να προβλέψουν άμεσα τις μεταβολές της μικροδομής κατά την κατεργασία και να εξηγήσουν τους μηχανισμούς παραμόρφωσης, σε σχέση με τη θερμοκρασία της κατεργασίας και τις ιδιότητες του υποστρώματος. Πιο συγκεκριμένα, έχουν διεξαχθεί μελέτες σχετικές με τους μηχανισμούς παραμόρφωσης κατά τη κρυογενική και ψυχρή έλαση σιδήρου, καθώς και την επίδραση των ιδιοτήτων και του κρυσταλλογραφικού προσανατολισμού του υλικού κατά την έλαση μονοκρυσταλλικών υλικών με δομή fcc [340-341].

Επίσης, οι Reddy και Pal [342] μελέτησαν τη μεταβολή της μικροδομής κατά τη νανο-έλαση πολυκρυσταλλικού βολφραμίου, υπό διάφορες θερμοκρασίες και παρατήρησαν ότι η αυξημένη θερμοκρασία οδηγεί σε μείωση της πυκνότητας διαταραχών, μειώνονται οι ζώνες διάτμησης, λαμβάνει χώρα δυναμική ανακρυστάλλωση και η επιφάνεια του TE είναι λιγότερο λεία. Σε μια αντίστοιχη μελέτη για πολυκρυσταλλικό νικέλιο [343] διαπιστώθηκε ότι σε χαμηλές θερμοκρασίες υπάρχει τοπική συσσώρευση εφελκυστικών παραμενουσών τάσεων στα όρια των κόκκων και ο προσανατολισμός των κόκκων αλλάζει μετά το δεύτερο πάσο έλασης, ενώ σε υψηλότερες θερμοκρασίες οι τάσεις είναι μικρότερες και μόνο σε μεγάλους λόγους μείωσης του πάχους παράγονται εφελκυστικές παραμενουσες τάσεις.

### **3.3.9 Προσομοίωση νανοστίλβωσης**

Η κατεργασία της στίλβωσης μπορεί να θεωρηθεί ξεχωριστή κατηγορία από τη νανο-λείανση, λόγω της ιδιαίτερης κινηματικής που υιοθετείται στα μοντέλα (σαν μετωπική λείανση). Η στίλβωση μελετήθηκε ιδιαίτερα από την ομάδα των Eder et al. Τα μοντέλα που χρησιμοποιούν περιλαμβάνουν πολλαπλούς λειαντικούς κόκκους, οι οποίοι έχουν τυχαίους προσανατολισμούς και η επιφάνεια είναι τραχιά, καθώς πάνω της υπάρχουν προεξοχές. Σε αυτές τις μελέτες η κίνηση των τροχών είναι περιστροφική γύρω από έναν άξονα συμμετρίας όπως στην πραγματική στίλβωση [261, 286].

Μια άλλη σημαντική κατηγορία μοντέλων στίλβωσης παρουσιάζει ένα κοινό βασικό χαρακτηριστικό που τα διαχωρίζει από τα άλλα μοντέλα και είναι η περιστροφική ταχύτητα του κόκκου γύρω από τον άξονα συμμετρίας του, πέραν της οριζόντιας ταχύτητας [344-346]. Σε μία μελέτη έχει μοντελοποιηθεί και λιπαντικό φιλμ από γραφένιο [347] ή στρώμα άμορφου διαμαντιού [348]. Ενώ στα περισσότερα μοντέλα, ο περιστρεφόμενος κόκκος έχει σφαιρική γεωμετρία, υπάρχει μία μελέτη στην οποία η γεωμετρία του λειαντικού κόκκου είναι κυβική [349].

Προκειμένου να πραγματοποιηθούν πιο ρεαλιστικές προσομοιώσεις, έχουν χρησιμοποιηθεί μοντέλα στα οποία συμπεριλαμβάνεται η διάταξη (rad) στην οποία είναι προσαρμοσμένοι οι κόκκοι και η οποία πιέζει το λειαντικό κόκκο προς την επιφάνεια του υποστρώματος [350], καθώς και μοντέλα με μη επίπεδη επιφάνεια [351] ή στρώμα νερού [352]. Ορισμένα πιο εξειδικευμένα μοντέλα περιλαμβάνουν τη μοντελοποίηση πολλαπλών κόκκων [353, 354], καθώς και τη μοντελοποίηση κόκκων με ιδιαίτερη γεωμετρία, όπως αυτή που έχει προκύψει μετά από κατεργασία με laser [355].

### **3.3.10 Προσομοίωση νανοκατεργασιών μηχανοχημικής στίλβωσης**

Μια άλλη κατηγορία μη συμβατικών κατεργασιών, η οποία συνδυάζει μηχανική επαφή, αλλά και χημική δράση για την αποβολή υλικού είναι η μηχανοχημική στίλβωση (chemical mechanical polishing, CMP). Αυτό το είδος κατεργασίας παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον για τη μοντελοποίηση, καθώς περιλαμβάνει εκτός των ιδιαίτερων χαρακτηριστικών της μηχανικής στίλβωσης που περιγράφηκε προηγουμένως, ορισμένα στοιχεία που σχετίζονται με τη μοντελοποίηση αλληλεπιδράσεων διαφορετικών στοιχείων μέσω χημικών αντιδράσεων, κάτι που δεν συναντάται κατά τη μοντελοποίηση άλλων ειδών νανοκατεργασιών μέχρι σήμερα. Στις περισσότερες εργασίες, η επίδραση των αντιδράσεων υλοποιείται μέσω της χρήσης της συνάρτησης δυναμικού ReaxFF.

Παρότι οι πρώτες μελέτες για τη μηχανοχημική στίλβωση πραγματοποιήθηκαν πριν από 15 χρόνια περίπου, μέχρι πρόσφατα σχετικά λίγες εργασίες είχαν πραγματοποιηθεί με θέμα τη νανοκατεργασία αυτή, ιδιαίτερα με μοντελοποίηση των αντιδράσεων που λαμβάνουν χώρα σε αυτή. Στις παλιότερες εργασίες δεν πραγματοποιούνταν μοντελοποίηση των αντιδράσεων [356, 357] και δινόταν έμφαση στην αλληλεπίδραση του λειαντικού κόκκου με την επιφάνεια του TE [358], η οποία μπορεί να περιλαμβάνει ατέλειες όπως προεξοχές (asperities) με συγκεκριμένες γεωμετρίες [359-362]. Επίσης, έχει μοντελοποιηθεί επιφάνεια με τυχαίου μεγέθους και θέσης προεξοχές [363].

Προκειμένου να ληφθούν πιο ρεαλιστικά αποτελέσματα, ορισμένοι ερευνητές έχουν χρησιμοποιήσει μοντέλα με πολλαπλούς κόκκους, ώστε να διερευνηθεί ο μηχανισμός αποβολής υλικού σε αυτή τη σύνθετη περίπτωση [364].

Ένα είδος μοντέλων CMP συμπεριλαμβάνει στη μοντελοποίηση, εκτός από τους λειαντικούς κόκκους και το rad στο οποίο βρίσκονται οι λειαντικοί κόκκοι, όπως και στις προσομοιώσεις στίλβωσης με μηχανική μόνο δράση. Σε αυτή την περίπτωση, το rad μοντελοποιείται ως ένα μπλοκ ατόμων με απαραμόρφωτο περίβλημα, στο οποίο ασκείται ένα κατανεμημένο φορτίο και αυτό έρχεται σε επαφή με τους λειαντικούς κόκκους [365] είτε περιλαμβάνει και τους λειαντικούς κόκκους, οι οποίοι είναι ενσωματωμένοι σε αυτό [366]. Επίσης έχει

μελετηθεί η χρήση λειαντικών κόκκων σε ημίρρευση ουσία (slurry), η οποία μπορεί να περιλαμβάνει καθαρό νερό,  $H_2O_2$ , γλυκίνη, KOH, ρίζες υδροξυλίου ή μίγμα αυτών [367-372]. Σε αυτές τις μελέτες, διερευνάται κυρίως η επίδραση των συνθηκών κατεργασίας στην βελτίωση της ποιότητας της επιφάνειας του υποστρώματος, μέσω ανάλυσης των μηχανισμών αποβολής υλικού, λόγω των αντιδράσεων των ουσιών που βρίσκονται στην ημίρρευση ουσία και του υλικού του υποστρώματος. Επιπλέον, έχει μελετηθεί και η κατασκευή λειαντικών κόκκων από διάφορες χημικές ενώσεις για να χρησιμοποιηθούν στην ημίρρευση ουσία [373]. Τέλος, η μοντελοποίηση της κατεργασίας όταν πραγματοποιείται σε περιβάλλον υγρού έχει απασχολήσει ορισμένους συγγραφείς [374]. Στην περίπτωση αυτή, ο λειαντικός κόκκος είναι μερικώς βυθισμένος στο υγρό και δεν υπάρχει ημίρρευση ουσία.

### **3.3.11 Προσομοίωση νανο-ηλεκτροδιαμόρφωσης**

Η κατεργασία της νανο-ηλεκτροδιαμόρφωσης (nano-EDM) στη μικροκλίμακα, παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, διότι είναι κατάλληλη για την κοπή δυσκατέργαστων υλικών και τη δημιουργία σύνθετων χαρακτηριστικών σε δοκίμια, με μεγαλύτερη αποδοτικότητα από ότι οι συμβατικές κατεργασίες. Στην περίπτωση του nano-EDM, όπως και οι περισσότερες μελέτες σε μακροσκοπική κλίμακα, βασίζονται κυρίως σε ένα θερμικό μοντέλο και εστιάζουν στην επίδραση ενός παλμού. Με αυτό τον τρόπο, η κατεργασία έχει συγκεκριμένη χωρική και χρονική κλίμακα. Τις περισσότερες φορές δεν είναι αναγκαία η μοντελοποίηση του ηλεκτροδίου ή του διηλεκτρικού υγρού. Υπάρχουν όμως μελέτες, στις οποίες λαμβάνεται υπόψη τόσο το ηλεκτρόδιο [375-377], όσο και η επίδραση του διηλεκτρικού υγρού στο μηχανισμό αποβολής υλικού [378, 379].

Αρχικά τα μοντέλα που παρουσιάστηκαν ήταν διδιάστατα, ώστε να είναι δυνατό να προσομοιωθούν TE μεγαλύτερων διαστάσεων, αλλά στη συνέχεια τα μοντέλα ήταν τριδιάστατα, με χρήση θερμικής πηγής συγκεκριμένης ισχύος, ώστε να προσομοιώνεται η ενέργεια που αποδίδεται στο TE [380-382] και μέσω αυτών έγινε εφικτή η μελέτη διαφόρων φαινομένων, όπως οι παραμένουσες τάσεις κατά τη nano-EDM [383], η επίδραση γειτονικών κρατήρων [384] ή η κατεργασία ενός πολυκρυσταλλικού υλικού [385]. Τέλος, έχουν παρουσιαστεί και μοντέλα πολυεπίπεδα, με χρήση της εξίσωσης δύο θερμοκρασιών που έχει χρησιμοποιηθεί και στην περίπτωση των κατεργασιών με laser [386-388].



## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

### Προσομοιώσεις νανοκατεργασιών με γενικό μοντέλο νανοκοπής

#### 4.1 Εισαγωγή

Η πρώτη κατηγορία προσομοιώσεων που πραγματοποιήθηκαν ήταν οι προσομοιώσεις με ένα γενικό μοντέλο νανοκοπής. Όπως έχει αναφερθεί σε προηγούμενη υποενότητα, με τον όρο αυτό χαρακτηρίζεται στην παρούσα εργασία το μοντέλο που χρησιμοποιεί ως ΚΕ ένα απλό εργαλείο με μορφή σφήνας με οριζόντια ευθύγραμμη πορεία και ΤΕ ορθογωνικής μορφής.

Οι προσομοιώσεις αυτές είναι απαραίτητες, αφενός προκειμένου να γίνουν οι απαραίτητες παρατηρήσεις σχετικά με την συμπεριφορά των υλικών κατά τη νανοκοπή, ώστε όταν εφαρμοστεί η μέθοδος αυτή σε πιο σύνθετες περιπτώσεις κατεργασιών να μπορεί να εξηγηθούν οι τάσεις που εμφανίζονται στις δυνάμεις, τη θερμοκρασία, την παραμόρφωση του ΤΕ κ.α., αφετέρου για να μελετηθούν ορισμένα ενδιαφέροντα θέματα ξεκάθαρα χωρίς να υπάρχει η επίδραση από ειδικούς παράγοντες που σχετίζονται με την κάθε κατεργασία και μπορεί να αναιρούν ή να μεγεθύνουν κάποιο φαινόμενο, κάτι που είναι πιο πιθανό να συμβεί σε πιο σύνθετες μοντελοποιήσεις νανοκατεργασιών. Στην κάθε υποενότητα που ακολουθεί παρουσιάζονται ξεχωριστές κατηγορίες προσομοιώσεων με το γενικό μοντέλο της νανοκοπής που αφορούν την επίδραση διαφόρων παραμέτρων στην κατεργασία.

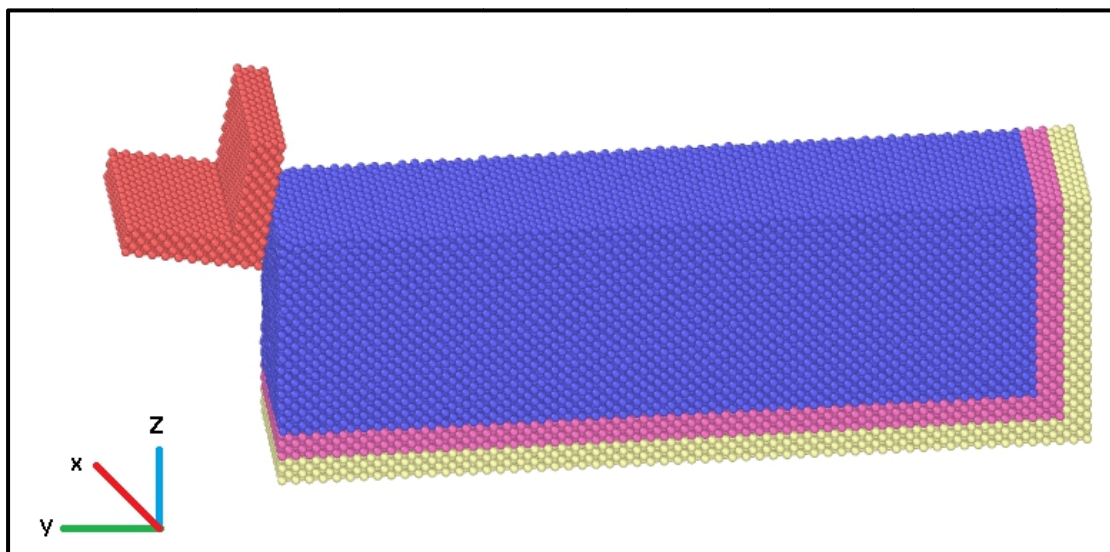
#### 4.2 Διερεύνηση της επίδρασης του βάθους κοπής και του πλάτους του ΤΕ κατά τη νανοκοπή

Μία από τις βασικές παραμέτρους στις κατεργασίες αποβολής υλικού είναι το βάθος κοπής. Αυτή η παράμετρος είναι σημαντική, καθώς προκειμένου να κατασκευαστεί η απαιτούμενη τελική γεωμετρία ενός αντικειμένου μέσω κατεργασιών αποβολής υλικού, είναι απαραίτητο να αποφασιστεί το βάθος κοπής για να υπολογιστεί ο αριθμός των πάσων που θα χρειαστούν. Η χρήση μικρών βαθών κοπής οδηγεί σε μικρότερο ρυθμό αποβολής υλικού και εάν αυτά είναι ιδιαίτερα μικρά βάθη, όπως έχει εξηγηθεί στη θεωρία, είναι δυνατόν να οδηγήσουν σε συνθήκες ολίσθησης ή άρωσης και όχι στη δημιουργία αποβλίπτου. Από την άλλη, η χρήση μεγάλων βαθών κοπής μπορεί να οδηγήσει σε αυξημένη φθορά και να εισάγει ανεπιθύμητες παραμορφώσεις και τάσεις στο ΤΕ. Έτσι, η πρώτη σειρά προσομοιώσεων με το γενικό μοντέλο νανοκοπής αφορά μια διερεύνηση σχετική με την επίδραση του βάθους κοπής. Η επίδραση εξετάζεται για τρία διαφορετικά ΤΕ που έχουν διαφορετικό πλάτος, ώστε να είναι πιο γενικά τα συμπεράσματα της ανάλυσης.

Παρότι το γενικό μοντέλο νανοκοπής είναι 3D, το εργαλείο δε κινείται στην τρίτη διάσταση και η μορφή του δεν οδηγεί σε μετατόπιση των ατόμων σε αυτή την κατεύθυνση, με αποτέλεσμα το μοντέλο να χαρακτηρίζεται καλύτερα ως 2.5D. Προκειμένου να υπάρχει περιθώριο να αναπτυχθούν τα τασικά πεδία και η παραμόρφωση στον όγκο του, όπως

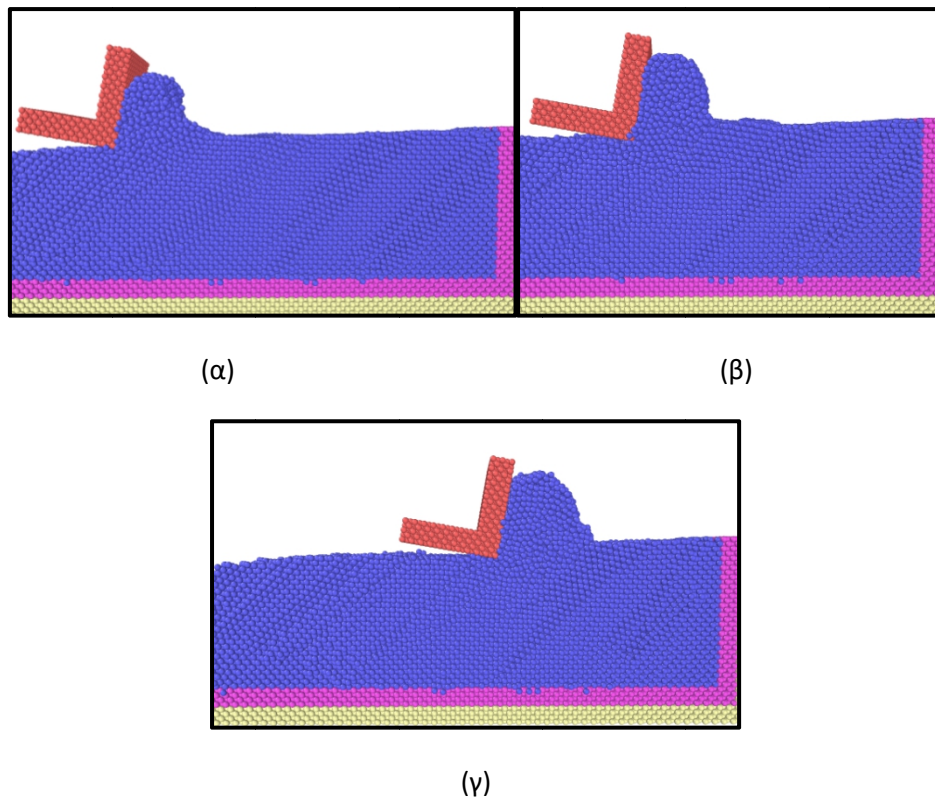
φαίνεται από το σχήμα 4.1, το ύψος του TE επιλέγεται να είναι πάνω από 5 φορές μεγαλύτερο από το μεγαλύτερο βάθος κοπής.

Οι τιμές του πλάτους και του βάθους κοπής που επιλέγονται σε αυτό το κεφάλαιο, για διευκόλυνση εκφράζονται σε σχέση με την πλεγματική σταθερά του υλικού (που συμβολίζεται με  $\alpha$ ), το οποίο στο παρόν κεφάλαιο είναι μονοκρυσταλλικός χαλκός, άρα  $\alpha = 3.615 \text{ \AA}$ . Στην παρούσα υποενότητα το βάθος λαμβάνει τις τιμές  $1\alpha$ ,  $2\alpha$  και  $3\alpha$  ενώ το πλάτος λαμβάνει τις τιμές  $8\alpha$ ,  $12\alpha$ ,  $16\alpha$ . Το γενικό μοντέλο νανοκοπής, που παρουσιάζεται στο σχήμα 4.1, αποτελείται από ένα KE μονοκρυσταλλικού διαμαντιού με μορφή σφήνας, το οποίο έχει γωνία αποβλίττου  $-10^\circ$  και ένα TE από μονοκρυσταλλικό χαλκό με διαστάσεις  $60 \times 20 \times 8 \alpha$ . Με μπλε χρώμα στο σχήμα 4.1 σημειώνονται τα οριακά άτομα, με ροζ τα άτομα θερμοστάτες και με μπλε τα νευτώνια άτομα, ενώ στο επίπεδο yz εφαρμόζονται περιοδικές οριακές συνθήκες. Η κίνηση του κοπτικού εργαλείου πραγματοποιείται στον άξονα -y με σταθερή ταχύτητα κοπής, ίση με  $200 \text{ m/s}$ . Το κοπτικό εργαλείο σε κάθε περίπτωση έχει τις ίδιες διαστάσεις στους άξονες y και z και πλάτος ίσο με το πλάτος του TE. Συνάρτηση δυναμικού για την αλληλεπίδραση των ατόμων του TE είναι η EAM και για την αλληλεπίδραση KE και TE η συνάρτηση Morse. Το KE θεωρείται απαραμόρφωτο, καθώς η σκληρότητά του είναι πολύ μεγαλύτερη του υλικού του TE, έτσι δε χρησιμοποιείται κάποιο δυναμικό για τη μοντελοποίησή του. Η αρχική θερμοκρασία σε όλες τις περιπτώσεις είναι  $293 \text{ K}$  και το χρονικό βήμα  $1 \text{ fs}$ . Το λογισμικό που χρησιμοποιείται σε όλες τις περιπτώσεις είναι ο κώδικας LAMMPS.



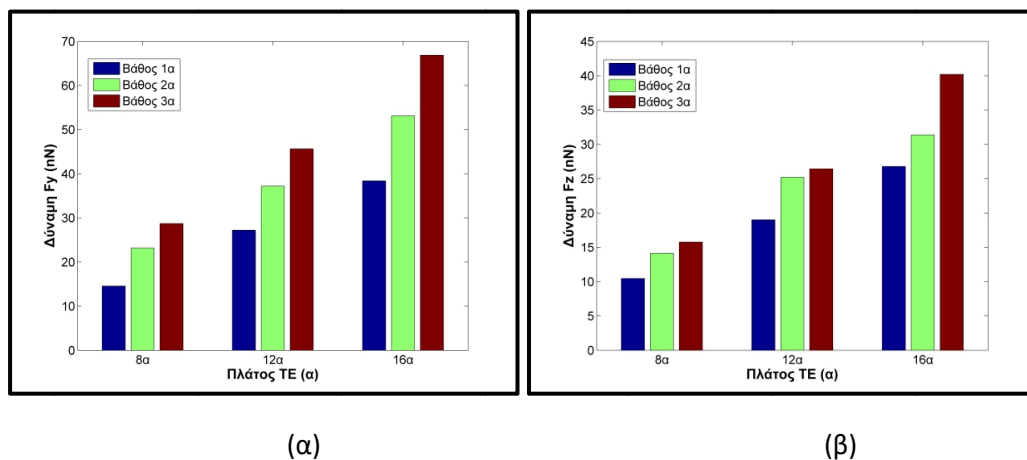
**Σχήμα 4.1.** Γενικό μοντέλο νανοκοπής.

Μετά την ολοκλήρωση των προσομοιώσεων, έγινε ανάλυση των αποτελεσμάτων προκειμένου να υπολογιστούν διάφορα μεγέθη όπως οι δυνάμεις και η θερμοκρασία της κατεργασίας. Όσον αφορά τις δυνάμεις της κατεργασίας, θα γίνει ανάλυση των συνιστωσών κατά τη διεύθυνση της κίνησης του KE (οριζόντια) και στην κατακόρυφη διεύθυνση καθώς, όπως προαναφέρθηκε, στην τρίτη διεύθυνση δεν υπάρχει κίνηση και αναμένονται σχεδόν μηδενικές δυνάμεις σε όλες τις περιπτώσεις. Στη συνέχεια, στο σχήμα 4.2, παρουσιάζονται χαρακτηριστικά στιγμιότυπα από την προσομοίωση με βάθος  $2\alpha$  και πλάτος  $12\alpha$  σε τρεις διαφορετικές χρονικές στιγμές.



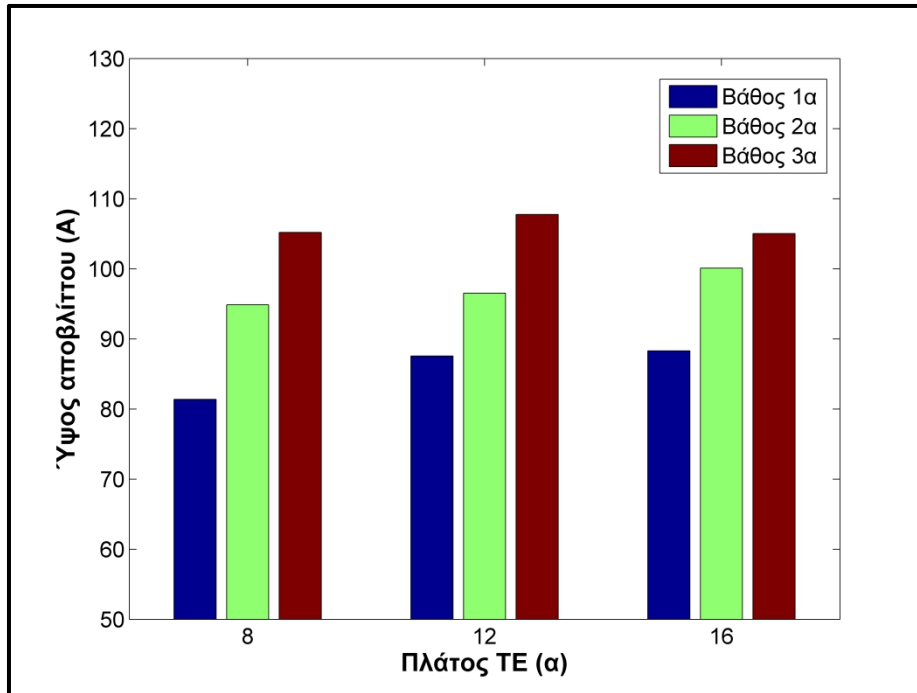
**Σχήμα 4.2.** (α)-(γ) Στιγμιότυπα κατά την προσομοίωση ναυκοπής χαλκού σε τρεις χρονικές στιγμές.

Οι τιμές των δυνάμεων κοπής στους άξονες  $y$  και  $z$  παρουσιάζονται στο σχήμα 4.3 για όλες τις περιπτώσεις. Όπως αναμένεται, λόγω του μεγαλύτερου βάθους, η επιφάνεια επαφής του ΚΕ με το ΤΕ αυξάνεται, οδηγώντας σε αφαίρεση μεγαλύτερης ποσότητας υλικού από το ΤΕ. Με αυτό τον τρόπο, η συνολική δύναμη επαφής αυξάνεται, όπως συμβαίνει προφανώς και στις κοπές σε μεγαλύτερη κλίμακα. Επομένως δικαιολογείται η τάση αύξησης των δυνάμεων και στις δύο συνιστώσες. Παρομοίως, και στην περίπτωση αύξησης του πλάτους του μοντέλου, λόγω της αυξημένης επιφάνειας επαφής παρατηρείται μια ξεκάθαρη τάση αύξησης των δυνάμεων, ιδίως της οριζόντιας συνιστώσας  $F_y$ .



**Σχήμα 4.3.** Διακύμανση της δύναμης κοπής με το βάθος κοπής: (α) οριζόντια συνιστώσα, (β) κάθετη συνιστώσα.

Εκτός από τη διακύμανση της δύναμης κοπής είναι ενδιαφέρον να γίνουν παρατηρήσεις σχετικά με τον όγκο του αποβλίττου που δημιουργείται σε κάθε περίπτωση. Οι παρατηρήσεις αυτές θα γίνουν και σε άλλες υποενότητες, όπου υπάρχουν αξιοσημείωτες διαφορές ανάλογα με τις τιμές των παραμέτρων που χρησιμοποιήθηκαν. Στο σχήμα 4.4 απεικονίζεται η διακύμανση του μέγιστου ύψους του αποβλίττου για περιπτώσεις με διαφορετικά βάθη κοπής και πλάτη TE.



**Σχήμα 4.4.** Διακύμανση του μέγιστου ύψους του αποβλίττου ανάλογα με το βάθος κοπής και το πλάτος του TE.

Από τα αποτελέσματα του σχήματος 4.4 γίνεται εμφανές ότι η αύξηση του βάθους κοπής όπως αναμένεται οδηγεί σε μεγαλύτερο ύψος του αποβλίττου όταν οι υπόλοιπες συνθήκες είναι σταθερές. Για παράδειγμα στην υποενότητα 4.4 θα φανεί ότι η μεταβολή της γωνίας αποβλίττου οδηγεί σε περαιτέρω διαφοροποίηση στη μορφή του αποβλίττου με αποτέλεσμα να μην είναι πάντα μονότονη η μεταβολή του. Όπως αναμένεται, ο όγκος του αποβλίττου μεγαλώνει ως ένα βαθμό με το μεγαλύτερο πλάτος, παρότι οι άλλες συνθήκες είναι ίδιες διότι λόγω της μεγαλύτερης ποσότητας υλικού που αφαιρείται, στο ποσοστό υλικού που παρασύρεται προς τα πάνω καθώς μεγαλώνει ο όγκος του αποβλίττου συμπεριλαμβάνονται κάποια παραπάνω άτομα. Στην περίπτωση με το μεγαλύτερο πλάτος όμως η αύξηση είναι μικρότερη και μάλιστα στο μεγαλύτερο βάθος το μέγιστο ύψος αποβλίττου είναι μικρότερο από αυτό των TE με μικρότερο πλάτος διότι το απόβλιττο είναι μεγάλου όγκου και το υλικό αρχίζει να συσσωρεύεται περισσότερο και προς την κατεύθυνση της πρόωσης παρά προς την κατακόρυφη κατεύθυνση.

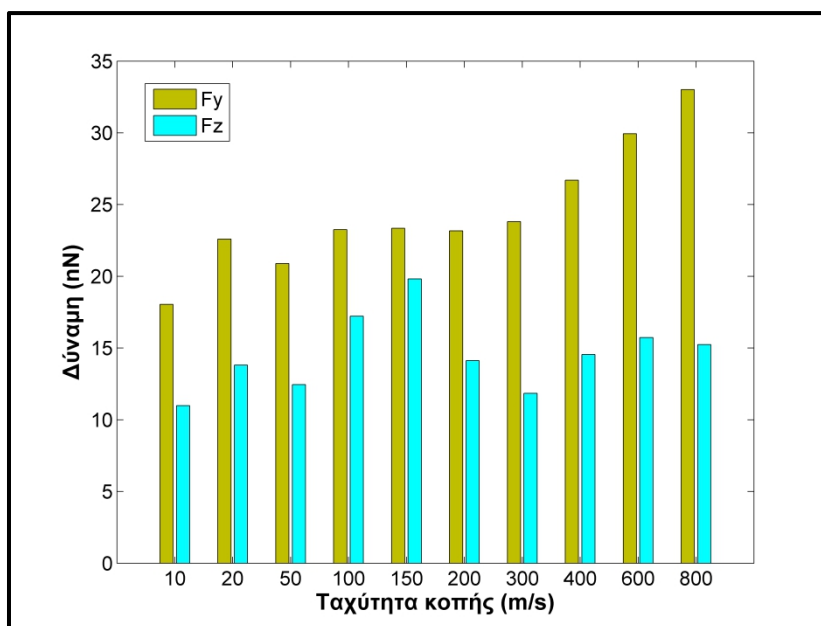
Οι παρατηρήσεις σχετικά με τα αποτελέσματα της νανοκοπής για διάφορες τιμές βάθους κοπής ή πλάτους είναι παρόμοια με αυτά που έχουν παρατηρηθεί στη σχετική βιβλιογραφία. Οι Tian et al. [389] πραγματοποίησαν προσομοιώσεις με βάθη κοπής από 0.5-3 nm. Παρατηρήθηκε μια σημαντική αύξηση των ατόμων που μετατοπίζονται από την

αρχική επιφάνεια και αυτών που απομακρύνονται ως απόβλιπτο, όπως και το μέγεθος των άμορφων ζωνών και ο αριθμός των διαταραχών. Στη μελέτη των Shi et al. [178] παρατηρήθηκε ότι η αύξηση των δυνάμεων και του μεγέθους του αποβλίπτου κατά την αύξηση του βάθους κοπής δεν είναι αναλογική και μπορεί να είναι μεγαλύτερη μεταξύ μικρότερων τιμών βάθους κοπής. Οι Liang et al. [390] εντόπισαν αύξηση των ατελειών με την αύξηση του βάθους κοπής και γενικά σημαντικές αλλαγές στην παραμόρφωση της κρυσταλλικής δομής, όπως φάνηκε και από τη μελέτη της RDF σε κάθε περίπτωση, κάτι που παρατήρησαν και οι Pei et al. [120]. Οι Zhang et al. [391] υπολόγισαν αύξηση του μεγέθους των ζωνών παραμόρφωσης με αυξημένο βάθος κοπής καθώς και αύξηση διαταραχών. Οι Promyoo et al. [392] διαπίστωσαν μεταβολές στο πάχος και το μήκος του αποβλίπτου καθώς και αύξηση του αριθμού των διαταραχών, οι οποίες διεισδύουν βαθύτερα στο υλικό για μεγαλύτερα βάθη κοπής. Παρότι οι δυνάμεις αυξάνονται αναμενόμενα, ο λόγος τους παρέμεινε ουσιαστικά σταθερός για βάθη από 0.7-2.1 nm. Αντίθετα, οι Romero et al. [393] παρατήρησαν αλλαγές του συντελεστή τριβής μελετώντας βάθη κοπής από 2-11 nm.

#### **4.3 Διερεύνηση της επίδρασης της ταχύτητας κοπής κατά τη νανοκοπή**

Ο δεύτερος παράγοντας που μελετήθηκε όσον αφορά την επίδρασή του στο αποτέλεσμα της κοπής σε νανοκλίμακα ήταν η ταχύτητα του κοπτικού εργαλείου. Όπως έχει προαναφερθεί στη θεωρία, η ταχύτητα κοπής είναι ένας ιδιαίτερος παράγοντας στις προσομοιώσεις, καθώς οι τιμές της είναι ιδιαίτερα μεγάλες σε σχέση με τις τιμές της ταχύτητας κοπής στις κατεργασίες της μακρο και μικροκλίμακας, μια επιλογή που γίνεται προκειμένου να ολοκληρώνονται οι προσομοιώσεις σε εύλογο χρονικό διάστημα. Επειδή έχουν διατυπωθεί διάφορες απόψεις για την επίδραση της ταχύτητας στις προσομοιώσεις νανοκοπών, θεωρήθηκε ενδιαφέρον να διερευνηθεί και η επίδραση αυτού του παράγοντα. Προκειμένου να υπάρξει μια πιο ξεκάθαρη εικόνα, επιλέχθηκε να μελετηθεί η επίδραση του παράγοντα για ένα μεγάλο εύρος τιμών που καλύπτει την πλειοψηφία των χρησιμοποιούμενων τιμών ταχύτητας κοπής, από 10 m/s έως 800 m/s. Επισημαίνεται ότι συνήθως στις περισσότερες προσομοιώσεις η ταχύτητα επιλέγεται στο εύρος 50-200 m/s ενώ σπάνια μελετώνται ταχύτητες μικρότερες από 50 m/s, λόγω του αυξημένου υπολογιστικού κόστους.

Στην υποενότητα αυτή, στην ανάλυση των αποτελεσμάτων θα παρουσιαστούν πρώτα τα αποτελέσματα σε σχέση με τις δυνάμεις κατά την κατεργασία. Συνήθως στις κοπές σε μεγαλύτερη κλίμακα, η επίδραση της ταχύτητας κοπής στις δυνάμεις είναι μικρότερη σε σχέση με την επίδραση των άλλων παραμέτρων και συνδέεται συνήθως με ελαφριά μείωση των δυνάμεων για μεγαλύτερες τιμές ταχύτητας κοπής λόγω αύξησης της θερμοκρασίας τοπικά. Στο σχήμα 4.5 παρουσιάζονται οι τιμές των συνιστωσών της δύναμης κοπής στους άξονες y και z σε κάθε περίπτωση.

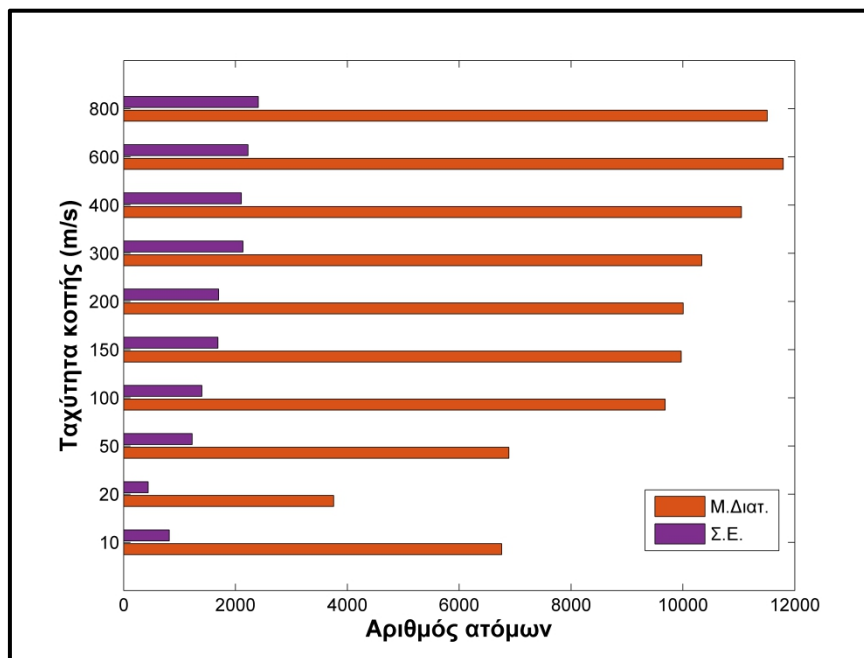


**Σχήμα 4.5.** Διακύμανση της δύναμης κοπής με την ταχύτητα κοπής.

Από τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στο διάγραμμα αυτό φαίνεται ότι η σχέση δύναμης-ταχύτητας κοπής δεν είναι μονότονη αλλά εμφανίζονται ορισμένες διαφορετικές περιοχές στο διάγραμμα. Αρχικά, από την περιοχή των χαμηλών ταχυτήτων έως τα 50 m/s υπάρχει μια ελαφριά αύξηση των τιμών της δύναμης, τόσο στον άξονα  $y$  όσο και στον άξονα  $z$ . Στη συνέχεια, ουσιαστικά η δύναμη  $y$  σταθεροποιείται μεταξύ των 100-300 m/s και μετά παρατηρείται μια αισθητή αύξηση έως τα 800 m/s. Η δύναμη  $Fz$  έχει συνεχώς μικρότερο μέτρο και αυξάνεται έως τα 150 m/s, αλλά στη συνέχεια μειώνεται και κινείται κοντά σε μια σταθερή τιμή. Στο πρώτο κομμάτι πριν τα 50 m/s η δύναμη αυξάνεται καθώς ο ρυθμός παραμόρφωσης γίνεται μεγαλύτερος όπως και η αντίσταση του υλικού. Στα 50 m/s φαίνεται ότι η συμπεριφορά αυτή αλλάζει καθώς πλέον όσο αυξάνεται η ταχύτητα έως τα 150 m/s αλλάζει μόνο η δύναμη  $Fz$  πιο πολύ ενώ μετά από μία μεταβατική περιοχή, άνω των 300 m/s η δύναμη  $Fy$  που ασκείται στην κατεύθυνση της κίνησης αυξάνει σημαντικά λόγω αδρανειακών φαινομένων καθώς πλέον δεν πρόκειται για κατεργασία αλλά για συνθήκες που προσομοιάζουν σε κρούση.

Όσον αφορά την πλαστική παραμόρφωση στο TE η ανάλυση της δομής φανερώνει κάποια συγκεκριμένα χαρακτηριστικά καθώς αλλάζει η ταχύτητα του ΚΕ. Τα αποτελέσματα της ανάλυσης του CSP, που είχε περιγραφεί στο κεφάλαιο 3, παρουσιάζονται στο σχήμα 4.6. Συγκεκριμένα, παρατηρείται ότι ο αριθμός των ατόμων που ανήκουν σε μερικές διαταραχές ή σφάλματα επιστοιβάσης αυξάνεται ιδιαίτερα μετά τα 50 m/s, υποδηλώνοντας αυξημένη δραστηριότητα στο TE που σχετίζεται με πλαστική παραμόρφωση, παραμένει σταθερός περίπου μέχρι τα 300 m/s και ύστερα αυξάνεται ξανά. Σε ένα βαθμό η γενική τάση της αύξησης της αταξίας στη δομή του TE με αυξανόμενη ταχύτητα οφείλεται στο ότι η σφοδρότητα της επαφής ολοένα αυξάνεται και η κατεργασία ολοκληρώνεται σε συντομότερο χρονικό διάστημα ώστε να μην υπάρχει αρκετός χρόνος για να αναδιαταχθούν τα άτομα, η αρχική κρυσταλλική δομή αλλοιώνεται σε μεγαλύτερο βαθμό. Η συμπεριφορά που παρατηρήθηκε στο σχήμα 4.6, που είναι σε μεγάλο βαθμό παρόμοια με τη συμπεριφορά που παρατηρήθηκε σχετικά με τις δυνάμεις και υποδηλώνει ότι η

σχέση της ταχύτητας με τις δυνάμεις δεν είναι αυστηρά μονότονη ή σταθερή. Ανάλογα με το εύρος στο οποίο κυμαίνεται η ταχύτητα, π.χ. χαμηλή, υψηλή ή εξαιρετικά υψηλή μπορεί για παραπλήσιες τιμές να εμφανιστεί παρόμοια συμπεριφορά, αλλά μετά από μία οριακή τιμή αλλάζει σημαντικά αυτή η συμπεριφορά.



**Σχήμα 4.6.** Διακύμανση του αριθμού ατόμων σε μερικές διαταραχές και σφάλματα επιστοίβασης ανάλογα με την ταχύτητα κοπής.

Έτσι, τελικά μπορεί να εξαχθεί το αποτέλεσμα ότι δεν είναι δόκιμο να χρησιμοποιείται αυθαίρετη τιμή ταχύτητας με σκοπό να εξαχθούν συμπεράσματα για την επίδραση άλλων παραγόντων της ναυοκοπής, π.χ. ώστε οι προσομοιώσεις να έχουν μικρότερο υπολογιστικό κόστος διότι για προσομοιώσεις με τιμές άνω των 100 m/s, δε μπορεί να θεωρηθεί ότι εξάγονται παρόμοια αποτελέσματα με αυτά των περιπτώσεων που η ταχύτητα είναι μικρότερη. Όμως, σε περίπτωση που η προσομοίωση αφορά μέτριου μεγέθους ταχύτητες τα αποτελέσματα δείχνουν ότι η χρήση παραπλήσιων ταχυτήτων δεν επηρεάζει ιδιαίτερα τις δυνάμεις ή τη δομή του υλικού από τα 100 έως τα 300 m/s. Στη συνέχεια όμως για μεγαλύτερες ταχύτητες, η τιμή της ταχύτητας επηρεάζει ολοένα και περισσότερο τη δομή του υλικού και οδηγεί σε σημαντικά διαφορετική συμπεριφορά ακόμα και όταν οι υπόλοιπες συνθήκες όπως το βάθος κοπής και τα χαρακτηριστικά του ΚΕ είναι ίδιες. Τα αποτελέσματα που παρατηρήθηκαν επιβεβαιώνονται από διάφορες προηγούμενες μελέτες που έχουν διεξαχθεί στη βιβλιογραφία με γενικό μοντέλο ναυοκοπής.

Στη συνέχεια παρατίθενται αναλυτικά τα συμπεράσματα αντίστοιχων μελετών. Για παράδειγμα, οι Zhang et al. [391] παρατήρησαν την αύξηση του μήκους του αποβλίττου και του μεγέθους των ζωνών παραμόρφωσης με αύξηση της ταχύτητας κοπής σταδιακά από 100 m/s σε 300 m/s. Οι Romero et al. [393] μελέτησαν περιπτώσεις στο εύρος από 5-1000 m/s με ΚΕ που είχε γωνία αποβλίττου +45°. Ενώ οι δυνάμεις για ταχύτητες κάτω των 100 m/s παρέμειναν σχεδόν σταθερές, παρατηρήθηκε μια διαρκής αύξησή τους για ταχύτητες άνω των 100 m/s, ένα φαινόμενο που αποδόθηκε στο ότι σε μικρές ταχύτητες η αντίσταση

του υλικού εξαρτάται από την αντίσταση σε διάτμηση ενώ στις μεγάλες ταχύτητες επηρεάζεται από την αδράνεια όπως στις περιπτώσεις των κρούσεων, κάτι που απέδειξαν χρησιμοποιώντας μια αναλυτική σχέση για την δύναμη λόγω διάτμησης. Επίσης, υπολογίστηκε ότι η αύξηση της ταχύτητας οδηγεί σε ξεκάθαρη αύξηση της θερμοκρασίας ενώ για το συντελεστή τριβής παρατηρήθηκε ότι αυξάνεται μέχρι τα 100 m/s και μετά μειώνεται σταδιακά λόγω της αυξημένης θερμοκρασίας.

Οι Guo et al. [394] διεξάγοντας προσομοιώσεις με εύρος ταχυτήτων 150-400 m/s παρατήρησαν την αύξηση της θερμοκρασίας με την αύξηση της ταχύτητας και εξήγησαν αυτό το φαινόμενο λόγω του μικρότερου χρόνου που είναι διαθέσιμος για την αναδιάταξη των διαταραχών και των ατόμων που βρίσκονται στη ζώνη διάτμησης, κάτι που οδηγεί σε τοπική σκλήρυνση του υλικού, αυξάνοντας την τριβή. Συνεπώς όταν η αποθηκευμένη ενέργεια λόγω τριβής και παραμόρφωσης απελευθερωθεί από το ατομικό πλέγμα η δύναμη και η παραγόμενη θερμότητα αυξάνονται. Οι Romero et al. [395] προσπαθώντας να αποδείξουν την επίδραση της ταχύτητας στις προσομοιώσεις με γενικό μοντέλο νανοκοπής και τα αποτελέσματα της χρήσης αυθαίρετα μεγάλων ταχυτήτων. Σε χαμηλές ταχύτητες το απόβλιττο δυσκολεύεται να ολισθήσει στην επιφάνεια του κοπτικού λόγω της υψηλής τιμής του συντελεστή τριβής σε αντίθεση με τις υψηλές ταχύτητες και έχει μικρότερο μήκος και μεγαλύτερο πλάτος. Κατά τη νανοκοπή με χαμηλές ταχύτητες, ο χρόνος που διαρκεί η κατεργασία επιτρέπει την επαναφορά του υλικού του αποβλίττου σε κρυσταλλική δομή. Όπως και σε προηγούμενη μελέτη, οι δυνάμεις κοπής παρατηρήθηκε ότι αυξήθηκαν ιδιαίτερα μετά τα 100 m/s και ειδικότερα πάνω από τα 300 m/s. Παρότι επισημάνθηκε ότι η μεταφορά θερμότητας στις προσομοιώσεις MD δε λαμβάνει υπόψη την επίδραση των ηλεκτρονίων, η θερμοκρασία του αποβλίττου που υπολογίζεται άλλαξε αισθητά για ταχύτητες άνω των 50-100 m/s.

Οι Su et al. [396] έδωσαν έμφαση στη μελέτη των μεταβολών της δομής του TE κατά την κατεργασία υπό υψηλές ταχύτητες κοπής. Παρατήρησαν και αυτοί τη μείωση του συντελεστή τριβής με την αύξηση της ταχύτητας αποδίδοντάς τη στην τοπική αύξηση της θερμοκρασίας του αποβλίττου. Η κατεργασία σε υπερβολικά μεγάλες ταχύτητες, πάνω από 1000 m/s είχε μεγάλες διαφορές από την κατεργασία σε μέτριες ταχύτητες. Επίσης, για τιμές ταχύτητας στο εύρος 18.075-1807.5 m/s παρατηρήθηκε σημαντική μείωση του λόγου των κυψελίδων με δομή HCP και των «άγνωστων» δομών, ιδιαίτερα μετά τα 54.225 m/s κάτι που υποδηλώνει την άμεση επίδραση της ταχύτητας κοπής σε αλλαγές της μικροδομής του υλικού. Οι Ye et al. [143] παρατήρησαν την αύξηση της παραμόρφωσης της μικροδομής, τη μείωση της ποιότητας της επιφάνειας και την αύξηση του μεγέθους του αποβλίττου σε υψηλές ταχύτητες (180 m/s, σε σύγκριση με 1.8 και 18 m/s).

Οι Chen et al. [397, 398] κατά την κοπή GaAs παρατήρησαν μια σημαντική αύξηση των άμορφων περιοχών μετά τα 200 m/s αποδίδοντάς τη στη συμπίεση του υλικού λόγω των μεγάλων ρυθμών παραμόρφωσης καθώς η παραμόρφωση βασίζεται πλέον στην αλλαγή φάσης και την αμορφοποίηση παρά την κίνηση των διαταραχών καθώς λόγω της γρήγορης ταχύτητας δεν υπάρχει χρόνος για τη δημιουργία και διάδοσή τους καθώς και για την επακόλουθη απελευθέρωση της ενέργειας παραμόρφωσης που είναι αποθηκευμένη. Επίσης λόγω αυτού του φαινομένου σε υψηλές ταχύτητες παρατηρείται άμεσα η αλλαγή του τρόπου κοπής από όλκιμη σε ψαθυρή κοπή με σχηματισμό ρωγμών. Οι Wang et al.



[399] συνέδεσαν τις αυξημένες τιμές ταχύτητας και με την ευστάθεια της κατεργασίας καθώς για η αύξηση της ταχύτητας παρατηρήθηκε ότι οδηγεί σε μεγαλύτερες διακυμάνσεις των δυνάμεων λόγω της έντονης επίδρασης που έχει η ταχύτητα στις μεταβολές της δομής του υλικού. Παρόλα αυτά η επίδραση είναι διαφορετική σε κρυσταλλικά και άμορφα υλικά.

Οι Dong et al. [400] διαπίστωσαν ανεπαίσθητη διαφορά στις δυνάμεις κοπής μεταξύ 100 και 200 m/s αλλά σημαντική άνοδο για μεγαλύτερες ταχύτητες ως ένδειξη της αυξημένης αντίστασης του υλικού καθώς τα άτομα συμπιέζονται σε μικρό χρονικό διάστημα, αυξάνοντας την ενέργεια παραμόρφωσης. Οι Eder et al. [401] παρατήρησαν επίσης σημαντικές μεταβολές στη δομή του TE για ταχύτητες άνω των 100 m/s. Οι Lin et al. [402] διεξήγαν προσομοιώσεις με μοντέλο ΜΔ/ΠΣ προκειμένου να μελετήσουν την ανάπτυξη των παραμενουσών τάσεων κατά τη νανοκοπή υπό διάφορες ταχύτητες του ΚΕ. Παρότι διαπίστωσαν ότι η ταχύτητα επιδρά στο μέγεθος του αποβλίττου, οι δυνάμεις κοπής ήταν παρόμοιες σε όλο το εύρος ταχυτήτων από 20-200 m/s και επίσης δεν παρατηρήθηκαν σημαντικές διαφορές στις τάσεις και παραμορφώσεις. Ορισμένες παλιότερες μελέτες όπως των Fang και Huang [403] είχαν καταλήξει σε παρόμοιο συμπέρασμα. Παρόλα αυτά στις μελέτες αυτές τα μοντέλα ήταν περιορισμένου μεγέθους με αποτέλεσμα να μην είναι δυνατόν να εξαχθούν ασφαλή συμπεράσματα.

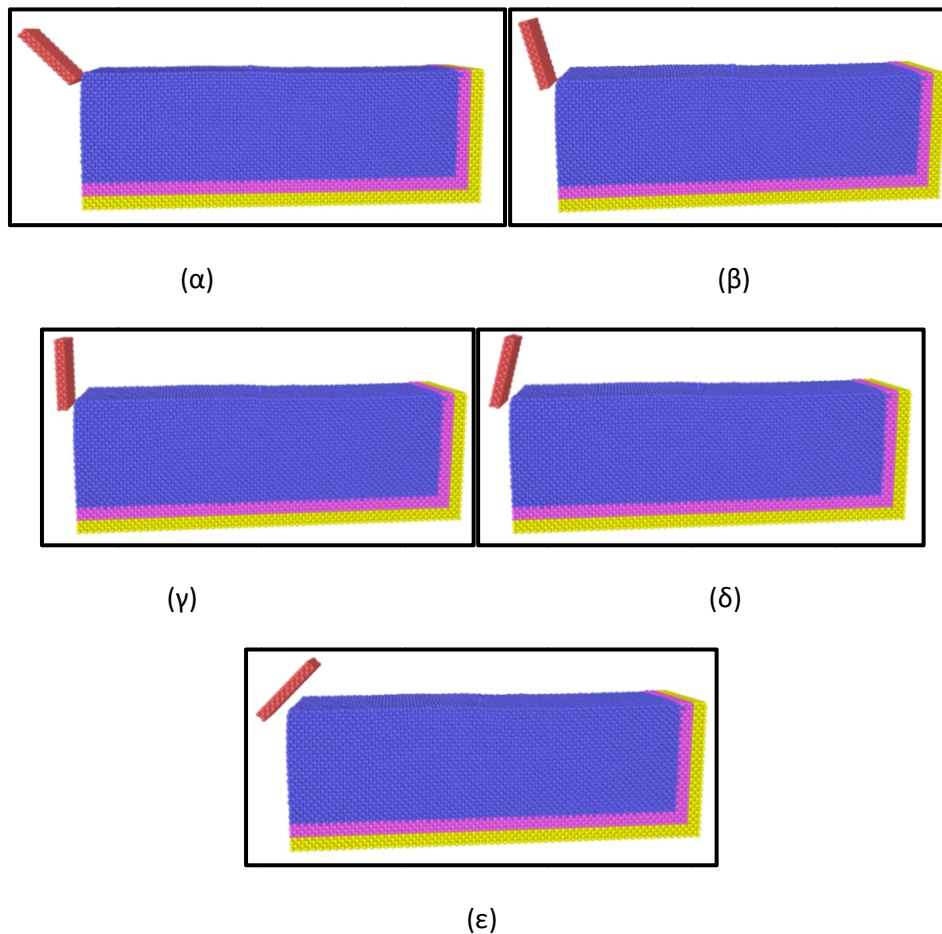
Οι Pei et al. [120] χρησιμοποιώντας ένα μοντέλο μεγάλης κλίμακας και εξετάζοντας ταχύτητες κοπής στο εύρος 50-500 m/s διαπίστωσαν ότι σε μεγάλες ταχύτητες αυξάνεται ο αριθμός των ατελειών στο TE και η συσσώρευση διαταραχών οδηγεί σε αύξηση των δυνάμεων καθώς το υλικό τοπικά σκληραίνει. Έτσι απαιτείται μεγαλύτερη δύναμη για την αποβολή υλικού. Οι Pen et al. [404] χρησιμοποίησαν ένα 2Δ μοντέλο πολλαπλών κλιμάκων με 5 διαφορετικές ταχύτητες κοπής στο εύρος 20-800 m/s. Οι δυνάμεις παρουσίασαν μια ελαφρά μείωση μέχρι τα 200 m/s η οποία αποδόθηκε στην επίδραση της ελαστικής επαναφοράς που απελευθερώνει ένα ποσό ενέργειας και ύστερα άνοδο έως τα 400 m/s, η οποία για μεγαλύτερες ταχύτητες έγινε ραγδαία λόγω της μετάβασης από την πλαστική συμπεριφορά των κρυστάλλων στην αμορφοποίηση, με δημιουργία αρκετών ατελειών και διαταραχών.

#### **4.4 Διερεύνηση της επίδρασης της γωνίας αποβλίττου στη νανοκοπή**

Ένας άλλος σημαντικός παράγοντας με εμφανή επίδραση στις κατεργασίες αποβολής υλικού είναι η χρήση εργαλείων με διαφορετική γεωμετρία, διότι οδηγεί σε διαφορετικές συνθήκες φόρτισης και παραμόρφωσης του τεμαχίου, διαφορετική γεωμετρία αποβλίττου, απαιτήσεις ισχύος, κτλ. Έτσι, κρίθηκε αναγκαίο να πραγματοποιηθούν προσομοιώσεις με το γενικό μοντέλο νανοκοπής με ΚΕ με διαφορετική γωνία αποβλίττου. Προκειμένου να εξαχθούν ασφαλή συμπεράσματα διεξήχθησαν προσομοιώσεις σε ένα μεγάλο εύρος τιμών γωνίας αποβλίττου, τόσο θετικών όσο και αρνητικών από  $-45^\circ$  έως  $+45^\circ$  που όπως θα φανεί από τη βιβλιογραφική ανασκόπηση που θα ακολουθήσει δε χρησιμοποιείται συχνά σε συγκριτικές μελέτες καθώς συνήθως η έμφαση δίνεται μόνο σε συγκεκριμένες γωνίες ή μόνο σε ένα περιορισμένο εύρος γωνιών. Αξίζει να σημειωθεί επίσης ότι για τις αρνητικές γωνίες αποβλίττου έχει επισημανθεί στη βιβλιογραφία, ότι οδηγούν σε αύξηση των δυνάμεων και ιδίως της κάθετης συνιστώσας της δύναμης, καθώς και σε αύξηση του λόγου των δυνάμεων κοντά ή άνω της μονάδας για ιδιαίτερα αρνητικές γωνίες αποβλίττου, κάτι

που έχει παρατηρηθεί και στη λείανση όπου η γωνία αποβλίττου των λειαντικών κόκκων θεωρείται αρνητική. Αλλά και στην περίπτωση των γενικών προσομοιώσεων νανοκοπής, η επίδραση της γωνίας αποβλίττου είναι σημαντική καθώς το πρόσρημό της έχει άμεσο αντίκτυπο στην παραμόρφωση του TE.

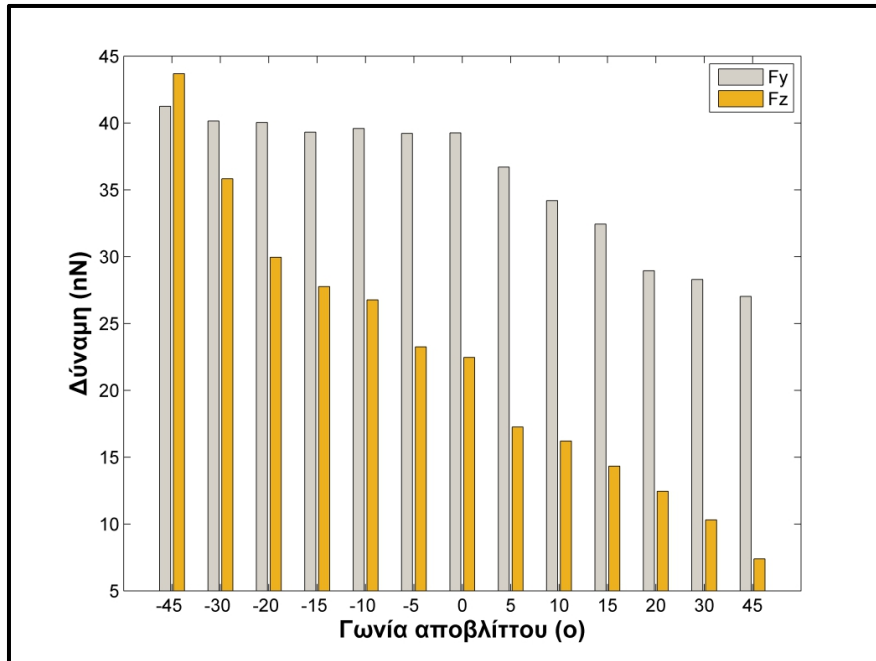
Στις προσομοιώσεις της παρούσας υποενότητας το κοπτικό εργαλείο περιστρέφεται κατά την κατάλληλη γωνία προκειμένου να επιτευχθεί η συγκεκριμένη τιμή γωνίας αποβλίττου. Το βάθος είναι σταθερό και ίσο με 2α και η ταχύτητα 200 m/s. Σε όλες τις προσομοιώσεις, το TE έχει πλάτος 16α και το εργαλείο 8α και κινείται σε ευθύγραμμη τροχιά στο μέσον του πλάτους του TE. Στο σχήμα 4.7 παρουσιάζονται ενδεικτικά ορισμένα από τα μοντέλα που χρησιμοποιήθηκαν.



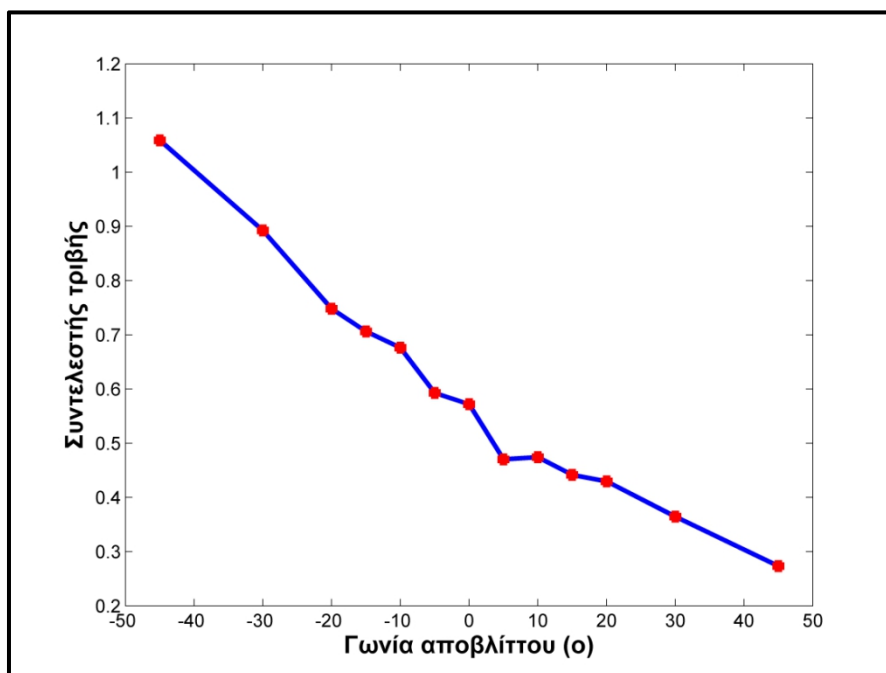
**Σχήμα 4.7.** Μοντέλα γενικής νανοκοπής με εργαλείο που έχει γωνία αποβλίττου (α)  $+45^\circ$ , (β),  $+15^\circ$ , (γ)  $0^\circ$ , (δ)  $-15^\circ$ , (ε)  $-45^\circ$ .

Αρχικά, θα σχολιασθούν οι τιμές των συνιστωσών της δύναμης για το εύρος τιμών γωνίας αποβλίττου που επιλέχθηκε. Όπως παρατηρείται από το σχήμα 4.8 και οι δύο καμπύλες έχουν την αναμενόμενη μορφή, δηλαδή οι τιμές των δυνάμεων αυξάνονται, καθώς η γωνία αποκτά μικρότερες τιμές και στη συνέχεια αυξανόμενες αρνητικές τιμές. Βέβαια, για κάθε συνιστώσα της δύναμης, η αύξηση είναι διαφορετική. Η δύναμη  $F_y$  που βρίσκεται στην οριζόντια διεύθυνση είναι αρχικά πολύ μεγαλύτερη της  $F_z$  για μεγάλες θετικές γωνίες αποβλίττου. Το μέτρο της αυξάνει σταδιακά έως τις  $+20^\circ$  και για μικρότερες γωνίες έως τις  $0^\circ$  η τιμή της αυξάνει με μεγαλύτερο ρυθμό. Ύστερα η τιμή της κινείται γύρω από μια

σταθερή τιμή και τελικά αυξάνει λίγο μετά τις  $-20^\circ$  έως τις  $-45^\circ$ . Η  $F_z$  όμως παρουσιάζει αξιοσημείωτη συμπεριφορά καθώς ενώ αρχικά έχει πολύ μικρό μέτρο, αυτό σταδιακά αυξάνει και μετά τις  $+5^\circ$  σημειώνεται μια απότομη αύξηση όπως και μετά τις  $-20^\circ$  έως τις  $-45^\circ$  ενώ στα ενδιάμεσα διαστήματα η αύξηση είναι πιο ήπια. Συνολικά όμως το μέτρο της δύναμης σχεδόν πενταπλασιάζεται και μάλιστα ανάμεσα στις  $-30^\circ$  και  $-45^\circ$  ξεπερνάει αυτό της  $F_y$ .



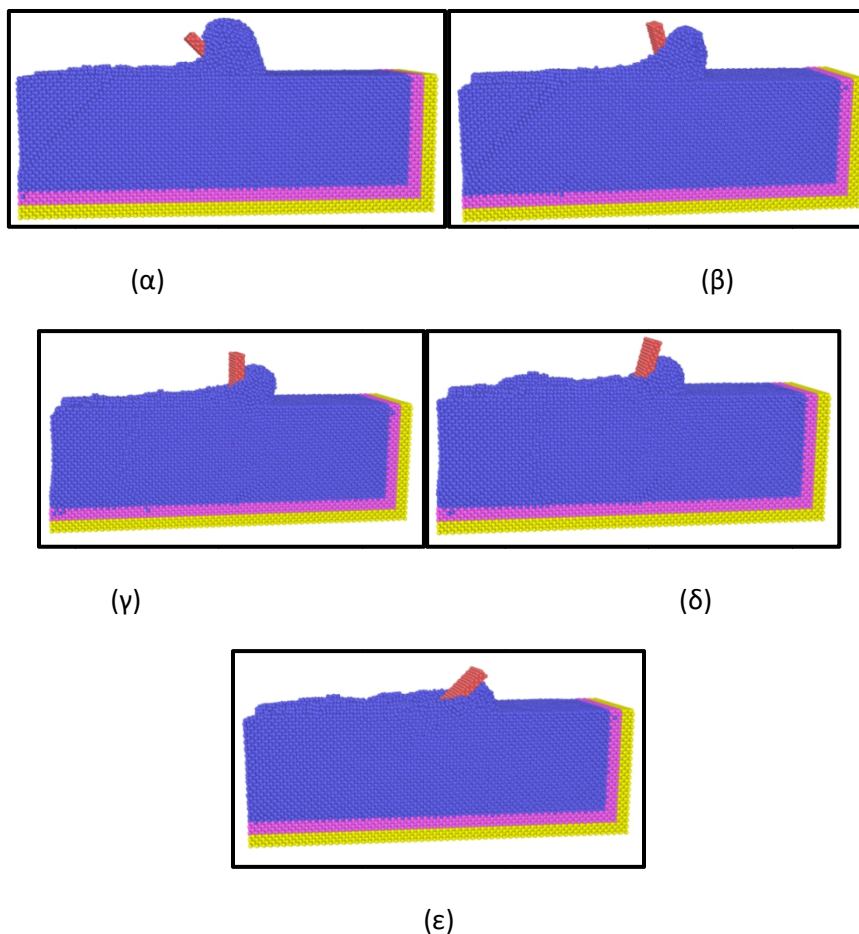
**Σχήμα 4.8.** Διακύμανση οριζόντιας και κάθετης συνιστώσας της δύναμης κοπής σε συνάρτηση με τη γωνία αποβλίττου του ΚΕ.



**Σχήμα 4.9.** Διακύμανση της τιμής του συντελεστή τριβής σε συνάρτηση με τη γωνία αποβλίττου του ΚΕ.

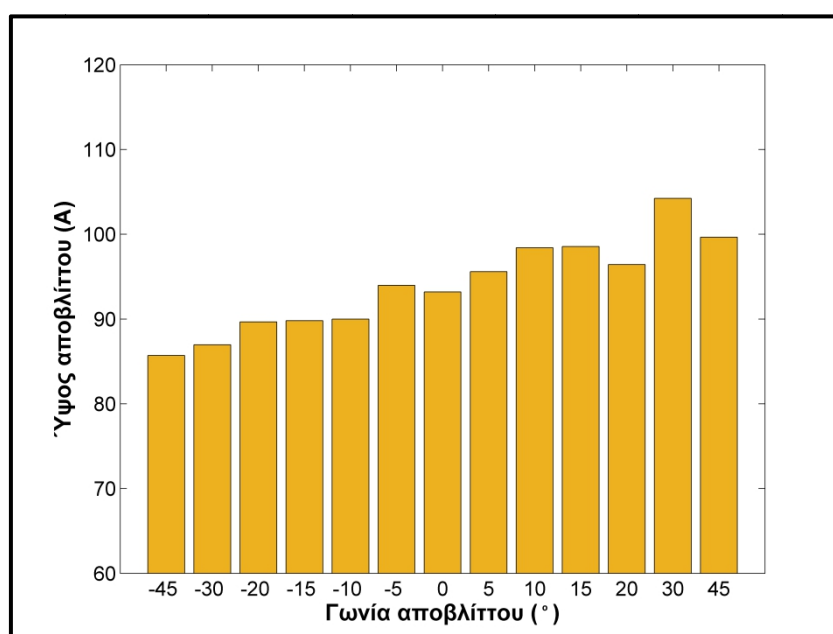
Όπως φαίνεται ξεκάθαρα στο διάγραμμα 4.9, διαπιστώνεται η συνεχόμενη αύξηση των τιμών του λόγου των δύο συνιστωσών της δύναμης, δηλαδή του συντελεστή τριβής, ο οποίος προσεγγίζει τιμές κοντά στη μονάδα όσο η γωνία αποβλίττου πλησιάζει τις  $-45^\circ$  όπου έχει ήδη ξεπεράσει τη μονάδα. Η αύξηση αυτή είναι ιδιαίτερα σημαντική καθώς η τιμή του συντελεστή τριβής αυξάνεται σχεδόν τέσσερις φορές σε σχέση με την αρχική τιμή. Αξιοσημείωτο είναι ένα μικρό διάστημα κοντά στην περιοχή που γίνεται η μετάβαση από τις θετικές στις αρνητικές γωνίες, καθώς ο ρυθμός αύξησης του συντελεστή τριβής παρουσιάζει πρόσκαιρη αλλαγή.

Τέλος, αξίζει να επισημανθούν οι σημαντικές αλλαγές που προκύπτουν στην κατεργασία καθώς αλλάζει η γωνία αποβλίττου του ΚΕ. Στο σχήμα 4.10 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από την κατεργασία νανοκοπής με γωνίες  $-45^\circ, -15^\circ, 0^\circ, +15^\circ$  και  $+45^\circ$ . Από τις εικόνες αυτές διαπιστώνεται ότι, όταν το ΚΕ έχει θετική γωνία αποβλίττου το απόβλιττο που σχηματίζεται έχει μεγαλύτερο ύψος και είναι σχεδόν κατακόρυφο ενώ το ύψος του μειώνεται σταδιακά με αλλαγή της κλίσης του καθώς η γωνία αποβλίττου μικραίνει. Μετά τις  $0^\circ$  λόγω της κλίσης του το ΚΕ συμπίεζει σε ολόενα και μεγαλύτερο βαθμό το υλικό μπροστά του με αποτέλεσμα το ύψος του απόβλιττου να μειώνεται ραγδαία και στις  $-45^\circ$  να αποβάλλεται μεν υλικό αλλά χωρίς να έχει τη μορφή απόβλιττου προσεγγίζοντας τις συνθήκες άρωσης παρά κοπής.



**Σχήμα 4.10.** Στιγμιότυπα από τη νανοκοπή με εργαλεία διαφορετικής γωνία αποβλίττου: (α)  $+45^\circ$ , (β)  $+15^\circ$ , (γ)  $0^\circ$ , (δ)  $-15^\circ$ , (ε)  $-45^\circ$ .

Εκτός από το σχήμα 4.10 όπου είναι δυνατόν να παρατηρηθεί ποιοτικά η μεταβολή της μορφής του αποβλίττου, στο σχήμα 4.11 παρουσιάζεται η διακύμανση του ύψους του αποβλίττου σε κάθε περίπτωση. Από τα ποσοτικά αυτά δεδομένα επιβεβαιώνονται οι οπτικές παρατηρήσεις στις εικόνες του σχήματος 4.10 και διαπιστώνεται η ραγδαία μείωση του ύψους του αποβλίττου για μικρότερες γωνίες αποβλίττου καθώς όταν η γωνία μειώνεται κάτω από τις  $-5^\circ$  πλέον συμπιέζει έντονα το απόβλιττο που αρχίζει να δημιουργείται με αποτέλεσμα όσο η γωνία πλησιάζει τις  $-45^\circ$ , όπως φαίνεται στο σχήμα 4.10ε, η δημιουργία αποβλίττου είναι οριακή και πλέον οι συνθήκες τείνουν να προσεγγίσουν τις συνθήκες άρωσης. Αντίθετα, όσο αυξάνεται η γωνία αποβλίττου αυξάνεται ο όγκος του αποβλίττου και σε γωνίες άνω των  $+30^\circ$ , λόγω της αύξησης του όγκου του αποβλίττου και λόγω του ότι η γωνία που σχηματίζει με την επιφάνεια του ΤΕ είναι μεγαλύτερη, είναι σχεδόν κατακόρυφο και συσσωρεύεται υλικό και προς την κατεύθυνση πρόωσης, όπως φαίνεται στο σχήμα 4.10α οδηγώντας σε μικρότερο ύψος.



**Σχήμα 4.11.** Διακύμανση του μέγιστου ύψους αποβλίττου σε σχέση με τη γωνία αποβλίττου.

Διάφορες μελέτες σχετικές με την επίδραση της γωνίας αποβλίττου στη γενική περίπτωση νανοκοπής έχουν πραγματοποιηθεί με παρόμοια συμπεράσματα, όπως αυτά που παρουσιάστηκαν στην υποενότητα αυτή. Οι Lai et al. [188] πραγματοποίησαν μια εκτενή μελέτη, χρησιμοποιώντας μοντέλα στα οποία η γωνία αποβλίττου κυμαινόταν από  $-40^\circ$  έως  $-80^\circ$ . Παρατήρησαν ότι η δημιουργία αποβλίττου ήταν εφικτή έως τις  $-60^\circ$  καθώς, για μεγαλύτερες γωνίες υπάρχει πλαστική παραμόρφωση χωρίς δημιουργία αποβλίττου. Οι Dai et al. [189] παρατήρησαν ότι οι δυνάμεις κοπής μειώνονται σημαντικά καθώς η γωνία αποβλίττου μεταβάλλεται από μεγάλες αρνητικές τιμές σε μεγάλες θετικές τιμές και η θερμοκρασία μειώθηκε από τη περίπτωση με τη γωνία αποβλίττου  $-45^\circ$  μέχρι την περίπτωση των  $+30^\circ$ . Σε μια άλλη εργασία της ίδιας ομάδας [405] υπογραμμίστηκε ότι οι θετικές γωνίες αποβλίττου οδηγούν σε ευνοϊκότερη κατάσταση στη δομή του κατεργαζόμενου υλικού. Ενώ όσο αυξάνεται η αρνητική γωνία αποβλίττου μειώνεται

σταδιακά το μέγεθος του αποβλίττου, η θετική γωνία αποβλίττου δεν επηρεάζει ιδιαίτερα το μέγεθός του. Οι Pei et al. [406] διαπίστωσαν ότι στην περίπτωση της γωνίας αποβλίττου  $-45^\circ$  όπου επικρατεί έντονη συμπίεση του υλικού παρατηρείται μεγαλύτερη ελαστική επαναφορά, τραχύτερη επιφάνεια, μικρότερο απόβλιττο και περισσότερες ατέλειες. Επίσης η επίδραση της γωνίας αποβλίττου στις δυνάμεις είναι εμφανής και τόσο η κάθετη όσο και η εφαπτομενική συνιστώσα της δύναμης μειώνονται καθώς η γωνία γίνεται πιο θετική. Ταυτόχρονα ο λόγος  $F_y/F_x$  που αντιπροσωπεύει το συμβατικό συντελεστή τριβής συνεχώς μειώνεται με αφετηρία τις  $-45^\circ$ .

Σε παρόμοια αποτελέσματα κατέληξαν και οι Zhao et al. [407] οι οποίοι μελέτησαν περιπτώσεις με γωνίες αποβλίττου από  $-40^\circ$  έως  $+40^\circ$ . Στην μελέτη των Xie και Fang [408] υπολογίστηκε ότι η δημιουργία αποβλίττου ήταν εφικτή έως τις  $-65^\circ$ . Σε μεγαλύτερες γωνίες οι ατέλειες αυξάνονται και οι δυνάμεις αυξάνονται κατακόρυφα. Πιο συγκεκριμένα, αυτοί οι ερευνητές διέκριναν τέσσερις διαφορετικές περιπτώσεις ανάλογα με την τιμή της γωνίας αποβλίττου. Η πρώτη περίπτωση σχετίζεται με γωνίες αποβλίττου στο εύρος  $-28^\circ$  έως  $+5^\circ$  και σε αυτή την περίπτωση η οριζόντια συνιστώσα είναι ακόμα μεγαλύτερη της κατακόρυφης ενώ και οι δύο έχουν σχετικά μικρές τιμές. Για πιο αρνητικές γωνίες έως τις  $-38^\circ$  οι δύο συνιστώσες είναι περίπου ισοδύναμες και το μέτρο τους έχει αυξηθεί λίγο. Στην τρίτη περίπτωση, έως τις  $-65^\circ$  η κατακόρυφη συνιστώσα υπερβαίνει πλέον την οριζόντια αν και αυτή παίζει ακόμα ρόλο στην κατεργασία. Στην τελευταία περίπτωση, έως τις  $-85^\circ$ , την οποία δε μελετούν συχνά στη σχετική βιβλιογραφία, η κατακόρυφη συνιστώσα είναι η κυρίαρχη δύναμη της κατεργασίας, και το μέτρο της είναι πλέον σημαντικά μεγαλύτερο. Οι Alhafez και Urbassek [409] παρατήρησαν επίσης την αύξηση των δυνάμεων όσο η γωνία αποβλίττου γίνεται πιο αρνητική και ειδικότερα την αύξηση της κατακόρυφης συνιστώσας σε σχέση με την οριζόντια έως τις  $-45^\circ$ , μια περίπτωση στην οποία δε δημιουργήθηκε απόβλιττο. Οι Xu et al. [118] μελέτησαν την πλευρική ροή του αποβλίττου κατά τη νανοκοπή με ένα μοντέλο μεγάλων διαστάσεων και διαπίστωσαν ότι όσο η γωνία αποβλίττου γίνεται πιο αρνητική, αυξάνεται ο αριθμός των ατόμων που κινούνται προς τις πλευρικές επιφάνειες του ΚΕ.

#### 4.5 Ανακεφαλαίωση 4ου κεφαλαίου

Κλείνοντας το παρόν κεφάλαιο κρίνεται σκόπιμο να συνοψιστούν τα θέματα που μελετήθηκαν σε αυτό και τα βασικότερα ευρήματα των μελετών. Το κεφάλαιο αυτό είχε ως θέμα την μελέτη των νανοκοπών με χρήση ενός γενικού μοντέλου νανοκοπής, το οποίο περιλάμβανε ένα ΚΕ με μορφή σφήνας και ένα ΤΕ με ορθογωνική μορφή ενώ η πορεία του ΚΕ ήταν ευθύγραμμη. Αρχικά, προκειμένου να γίνουν οι πρώτες βασικές διαπιστώσεις σχετικά με τα αποτελέσματα του μοντέλου, διερευνήθηκε η επίδραση του βάθους κοπής και του πλάτους του μοντέλου στις δυνάμεις της κατεργασίας και το ύψος του αποβλίττου. Όπως αναμενόταν, διαπιστώθηκε ότι η αύξηση του βάθους κοπής, καθώς και η κοπή ΤΕ μεγαλύτερου πλάτους οδηγούν σε αύξηση των δυνάμεων λόγω αύξησης του εμβαδού της επιφάνειας επαφής ΚΕ-ΤΕ. Παράλληλα, ενώ το ύψος του αποβλίττου αυξάνεται, όπως και ο όγκος του, καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται, η αύξηση του πλάτους, ιδίως για μεγαλύτερα βάθη οδηγεί μόνο σε αύξηση του όγκου του αποβλίττου, το οποίο συσσωρεύεται μπροστά από το ΚΕ, ενώ το ύψος του παραμένει ουσιαστικά σταθερό για το ίδιο βάθος κοπής.

Στη συνέχεια μελετήθηκε μια θεμελιώδης παράμετρος των νανοκοπών, η ταχύτητα κοπής η οποία εδώ και αρκετά χρόνια έχει δημιουργήσει στους ερευνητές διχογνωμία ως προς την επίδρασή της στη νανοκοπή. Καθώς παλιότερα ήταν αδύνατο λόγω μειωμένης υπολογιστικής ισχύος να χρησιμοποιούνται ταχύτητες κοπής κοντά σε αυτές που συνηθίζονται σε πειράματα, έστω και αυτών που χρησιμοποιούνται σε κατεργασίες λίαν υψηλών ταχυτήτων ορισμένοι ερευνητές υποστήριζαν ότι τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων σε μεγάλες ταχύτητες δεν διαφέρουν ουσιαστικά από αυτά που προκύπτουν σε μικρότερες, άρα ήταν ασφαλές να εξαχθούν συμπεράσματα μέσω αυτών των προσομοιώσεων. Στη συνέχεια όμως αρκετοί ερευνητές εντόπισαν σημαντικές διαφορές στα αποτελέσματα, ιδίως για ταχύτητες κοπής άνω των 50-100 m/s. Επομένως στο παρόν κεφάλαιο μελετήθηκαν περιπτώσεις νανοκοπής σε ένα ιδιαίτερα μεγάλο εύρος ταχυτήτων κοπής, από 10 έως 800 m/s προκειμένου να παρατηρηθούν τυχόν διαφορές στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι υπάρχουν εμφανείς διαφορές στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων των νανοκοπών για διαφορετικές τιμές της ταχύτητας κοπής και μάλιστα οι διαφορές αρχίζουν να είναι εμφανείς για ταχύτητες άνω των 100 m/s ενώ η νανοκοπή άνω των 300 m/s παρουσιάζει πλέον χαρακτηριστικά κρούσης διότι επηρεάζεται ιδιαίτερα από αδρανειακά φαινόμενα κάτι που αντικατοπτρίζεται στην σημαντική αύξηση των δυνάμεων και της παραμόρφωσης.

Τέλος, διερευνήθηκε η επίδραση της γωνίας αποβλίττου του ΚΕ κατά την νανοκοπή. Η παράμετρος αυτή είναι επίσης σημαντικό να διερευνηθεί προκειμένου να διαπιστωθεί εάν ισχύουν οι τάσεις που παρατηρούνται στις μακροσκοπικές κοπές και να μελετηθεί η διακύμανση του συντελεστή τριβής που προβλέπεται να λάβει τιμές άνω της μονάδας για μεγάλες αρνητικές γωνίες αποβλίττου. Οι αρνητικές γωνίες αποβλίττου έχουν ενδιαφέρον γιατί προσομοιώνουν τις συνθήκες που επικρατούν στην κατεργασία της λείανσης. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι υπάρχει ξεκάθαρη συσχέτιση μεταξύ των δυνάμεων και της γωνίας αποβλίττου καθώς και οι δύο δυνάμεις αυξάνονται όσο η γωνία μειώνεται, ιδιαίτερα η κάθετη συνιστώσα. Επομένως αυξάνεται σημαντικά και ο συντελεστής τριβής, ο οποίος έχει τιμή μεγαλύτερη της μονάδας για γωνίες μικρότερες των  $-40^\circ$ . Τέλος, παρατηρείται έντονη μείωση του ύψους του αποβλίττου καθώς μικραίνει η γωνία λόγω της αυξημένης συμπίεσής του αλλά μέχρι τις  $-45^\circ$  είναι δυνατή η δημιουργία του.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

### Προσομοιώσεις νανο-λείανσης

#### 5.1 Εισαγωγή

Αφού μελετήθηκαν ορισμένες από τις βασικότερες παραμέτρους των νανο-κατεργασιών αποβολής υλικού με χρήση του γενικού μοντέλου νανοκοπής στο προηγούμενο κεφάλαιο με σκοπό να διαπιστωθούν τα χαρακτηριστικά της νανοκοπής σε μια ειδική περίπτωση, στη συνέχεια θα μελετηθεί μια πιο σύνθετη περίπτωση, αυτή της νανο-λείανσης. Στο κεφάλαιο 2, τονίστηκε ιδιαίτερα η χρησιμότητα της λείανσης στη μικροκλίμακα, τα βασικά χαρακτηριστικά της και οι προκλήσεις που αντιμετωπίζουν οι ερευνητές και η βιομηχανία. Παρόλα αυτά, η λείανση ειδικά σε εφαρμογές που απαιτείται εξαιρετικά υψηλή ποιότητα επιφανείας, προσεγγίζει το επίπεδο της νανοκλίμακας, όπου όπως έχει προαναφερθεί, τα φαινόμενα που παρατηρούνται διαφοροποιούνται από αυτά της μακροκλίμακας, διότι η διακριτή φύση της ύλης αρχίζει να έχει ολοένα και σημαντικότερο ρόλο. Γι' αυτό το σκοπό, στο παρόν κεφάλαιο γίνεται εκτενής μελέτη της κατεργασίας της νανο-λείανσης.

Η νανο-λείανση, όπως παρουσιάστηκε στην υποενότητα 3.3, είναι μία από τις πρώτες κατεργασίες που μελετήθηκε μέσω της μεθόδου ΜΔ, λόγω της σημασίας της τόσο για μεταλλικά όσο και για μη μεταλλικά υλικά. Ωστόσο, στη συνέχεια η πλειοψηφία των μελετών πραγματοποιήθηκε με γενικά μοντέλα νανοκοπής και με ελάχιστες εξαιρέσεις τα μοντέλα της νανο-λείανσης δεν παρουσιάζουν κάποια πιο ρεαλιστικά χαρακτηριστικά, ενώ αντίθετα, στα μοντέλα της στίλβωσης που ανήκει στην ίδια κατηγορία κατεργασιών, συντελέστηκε σημαντική πρόοδος με τη χρήση μοντέλων που περιγράφουν πιο ρεαλιστικά τις συνθήκες επαφής των κόκκων με το ΤΕ, της περιστροφικής κίνησης που προσομοιάζει τη μετωπική λείανση ή την άμεση μοντελοποίηση των συνθηκών της μηχανο-χημικής στίλβωσης.

Επομένως, στο κεφάλαιο αυτό θα παρουσιαστούν μοντέλα νανο-λείανσης με έμφαση στη ρεαλιστική κίνηση του λειαντικού κόκκου, χρήση πολλαπλών λειαντικών κόκκων και θα πραγματοποιηθεί μελέτη διάφορων χαρακτηριστικών της κατεργασίας αλλά και των διαφόρων παραγόντων που επηρεάζουν την κατεργασία με σκοπό να βελτιωθεί το επίπεδο κατανόησης των φαινομένων που διέπουν αυτή την κατεργασία. Η χρήση αυτού του μοντέλου είναι επιβεβλημένη, διότι σε περιπτώσεις που η διάμετρος του λειαντικού τροχού είναι της τάξης των λίγων μικρομέτρων, με ιδιαίτερα λεπτούς κόκκους, δε μπορούν να είναι αποδεκτή η απλοποίηση της τροχιάς σε ευθεία λόγω της μεγάλης διαμέτρου του υλικού και της μικρής διαδρομής στο ΤΕ όπως γίνεται σε μακροσκοπικές μελέτες. Επίσης, όπως έχει επισημανθεί και στο κεφάλαιο 2 σχετικά με τη μικρο-λείανση, λόγω του ότι το πάχος αποβλίττου είναι μεταβλητό κατά την κατεργασία από μηδέν έως μια μέγιστη τιμή ή το αντίστροφο, όπως και στο φρεζάρισμα, και λόγω του ότι κατά την κοπή εάν το ΠΑΑ είναι μικρότερο από το κρίσιμο εμφανίζονται φαινόμενα άρωσης ή συνθήκες απλής επαφής (rubbing), το παρόν μοντέλο πλεονεκτεί έναντι των υπάρχοντων διότι λαμβάνει υπόψη όλα τα προαναφερθέντα στάδια επαφής κόκκου-ΤΕ. Επιπλέον στοιχεία τα οποία μελετώνται στο



παρόν κεφάλαιο, τα οποία δεν έχουν μελετηθεί εκτενώς ή καθόλου μέχρι σήμερα είναι το σχήμα του ΚΕ, η αρχική θερμοκρασία του ΤΕ, καθώς και η επίδραση που έχει η επιλογή των οριακών συνθηκών στα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

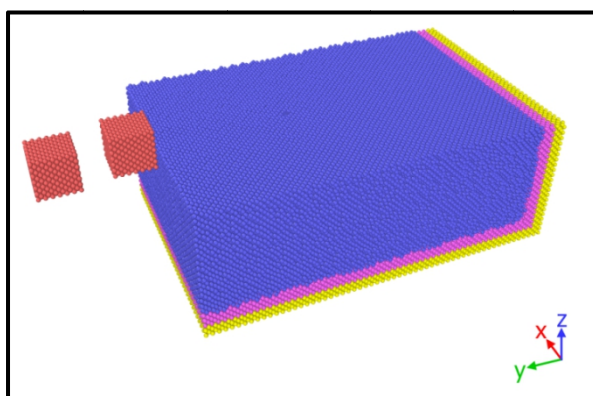
## 5.2 Επίδραση βάθους κοπής και μεγέθους κόκκου

Αρχικά όπως και στο προηγούμενο κεφάλαιο επιδιώκεται να μελετηθούν οι πιο απλές παράμετροι της κατεργασίας, προτού μελετηθούν πιο σύνθετα θέματα ώστε να εξακριβωθούν οι δυνατότητες του μοντέλου και να γίνουν ορισμένες θεμελιώδεις επιλογές για αυτό, όπως το μέγεθός του, οι κατάλληλες οριακές συνθήκες, η γεωμετρία και το μέγεθος του κόκκου κ.α. Επομένως αρχικά θα μελετηθεί η επίδραση του βάθους κοπής και του μεγέθους του λειαντικού κόκκου. Το αρχικό μοντέλο περιλαμβάνει δύο λειαντικούς κόκκους σε μία μονή σειρά κόκκων οι οποίοι έχουν διαφορετικό βάθος προεξοχής (protrusion depth) κατά 1α, προκειμένου να είναι δυνατόν να αφαιρεθεί υλικό και από το δεύτερο κόκκο. Οι δύο κόκκοι ακολουθούν τη ρεαλιστική πορεία, με βάση τις παρακάτω σχέσεις:

$$y(t) = R\cos(\omega t) + v_f t \quad (5.1)$$

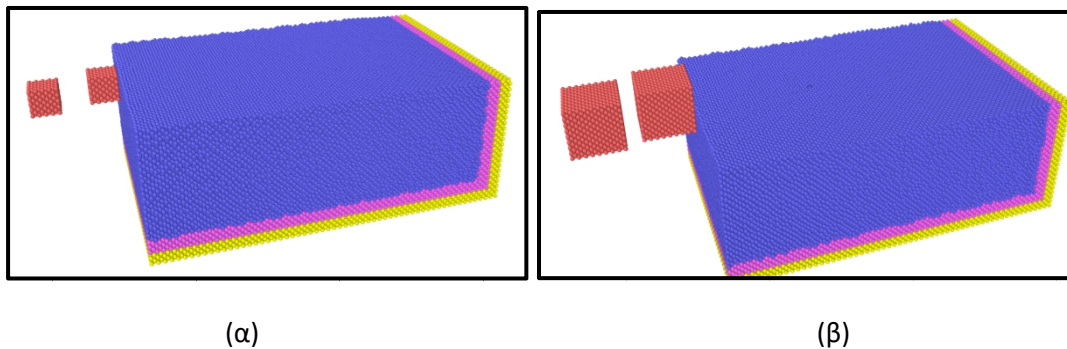
$$z(t) = R\sin(\omega t) \quad (5.2)$$

καθώς ο κάθε κόκκος έχει μεταφορική ταχύτητα  $v_f$  λόγω της πρόωσης του ΤΕ, το οποίο στο μοντέλο είναι ακίνητο και κινείται σχετικά με αυτό ο κόκκος, και περιστροφική ταχύτητα λόγω της περιστροφής του τροχού διαμέτρου  $2R$  με γωνιακή ταχύτητα  $\omega$ . Στις προσομοιώσεις της παρούσας υποενότητας, η ταχύτητα πρόωσης είναι 100 m/s και η γραμμική ταχύτητα λόγω της περιστροφής 108 m/s. Το μοντέλο που χρησιμοποιείται στην παρούσα υποενότητα παρουσιάζεται στο σχήμα 5.1. Το μέγεθος του μοντέλου είναι 60x22x38α, όπως και στις περισσότερες υποενότητες αυτού του κεφαλαίου, εκτός της υποενότητας 5.4, και χρησιμοποιούνται παρόμοιες οριακές συνθήκες όπως στο γενικό μοντέλο νανοκοπής που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη υποενότητα. Εάν δεν αναφερθεί κάτι άλλο, το υλικό του ΤΕ είναι πάντα μονοκρυσταλλικός χαλκός, ενώ το υλικό του κόκκου μονοκρυσταλλικό διαμάντι. Οι λειαντικοί κόκκοι σε όλες τις περιπτώσεις θεωρούνται απαραμόρφωτοι. Λόγω του ότι η κίνηση λαμβάνει χώρα στον άξονα  $y$  και τον άξονα  $z$ , είναι προφανές ότι η επίδραση στον άξονα  $x$  είναι ελάχιστη και γι' αυτό το λόγο δε λαμβάνεται υπόψη στην ανάλυση των δυνάμεων, που διεξάγεται σε κάθε υποενότητα.



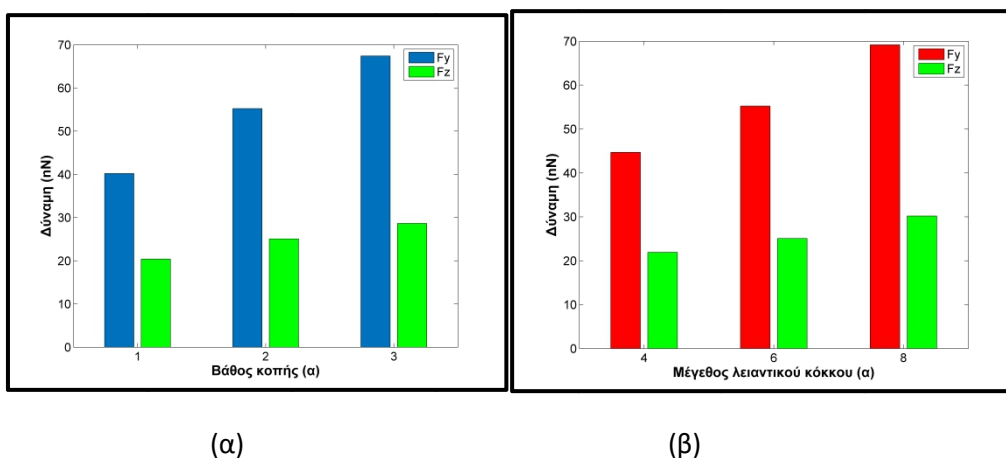
**Σχήμα 5.1.** Μοντέλο νανο-λείανσης με δύο λειαντικούς κόκκους σε μία σειρά.

Το βάθος κοπής είναι σημαντικός παράγοντας της κατεργασίας της νανο-λείανσης και παρότι τα αποτελέσματα όσον αφορά τα βασικά μεγέθη της κατεργασίας είναι γενικά αναμενόμενα, υπάρχει ενδιαφέρον όσον αφορά την επίδραση που έχει το βάθος στη μεταβολή της δομής του υλικού, ώστε να επιλέγεται η κατάλληλη τιμή του και εάν χρειάζεται κατεργασία σε μεγαλύτερο βάθος αυτή να γίνεται σε περισσότερα πάσα. Το μέγεθος του κόκκου επίσης είναι σημαντικό, διότι υπάρχει η δυνατότητα χρήσης κόκκων με μικρότερη ή μεγαλύτερη κοκκομετρία, αλλά και στον ίδιο τροχό το μέγεθος κάθε κόκκου κυμαίνεται με βάση μια κατανομή σε ένα εύρος διαμέτρων ακόμα και όταν δεν υπάρχει φθορά. Επομένως, στην παρούσα υποενοότητα χρησιμοποιούνται τρία διαφορετικά βάθη κοπής ίσα με 1α, 2α και 3α για λειαντικό κόκκο κυβικού σχήματος πλευράς 6α και άλλα δύο μεγέθη κόκκου για το ίδιο βάθος κοπής ίσο με 2α, τα οποία απεικονίζονται στο σχήμα 5.2.



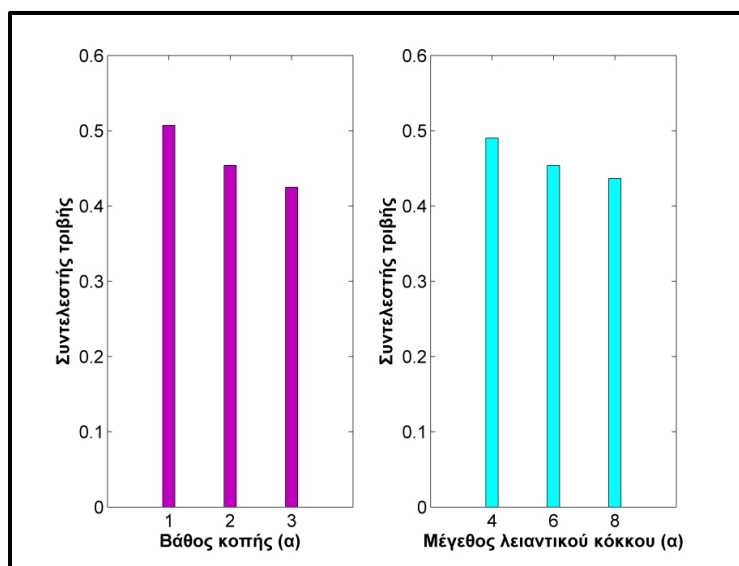
**Σχήμα 5.2.** Μοντέλα νανο-λείανσης με κόκκους κυβικής γεωμετρίας διαφορετικών μεγεθών, με πλευρά (α) 4α και (β) 8α.

Όσον αφορά τις δυνάμεις κατεργασίας κατά τη νανο-λείανση με διαφορετικά βάθη, όπως φαίνεται από το σχήμα 5.3, αυξάνονται σχεδόν αναλογικά με το βάθος, κυρίως η  $F_y$  ενώ για την κατακόρυφη δύναμη  $F_z$  η αύξηση είναι λιγότερο σημαντική. Στην περίπτωση των τριών διαφορετικών μεγεθών κόκκου με το ίδιο βάθος κοπής, η αύξηση είναι πάλι μεγαλύτερη για την  $F_y$ , η οποία όπως είναι αναμενόμενο επηρεάζεται ξεκάθαρα από την αύξηση του μεγέθους του κόκκου, που υποδηλώνει την αύξηση του πλάτους του αυλακιού που δημιουργείται, ενώ για την  $F_z$  αν και αυξάνεται, οι διαφορές είναι σχετικά μικρότερες.

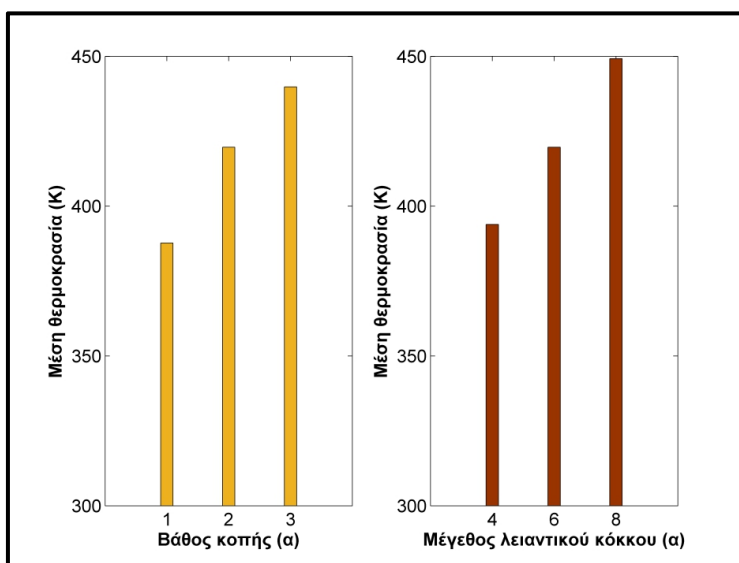


**Σχήμα 5.3.** Διακύμανση των τιμών των δυνάμεων  $F_y$  και  $F_z$  για περιπτώσεις: (α) με διαφορετικά βάθη κοπής και (β) διαφορετικά μεγέθη κόκκων.

Στο σχήμα 5.4 παρουσιάζεται η μεταβολή του λόγου  $F_z/F_y$  που αντιστοιχεί στο συμβατικό συντελεστή τριβής, όπως αναφέρθηκε και στο προηγούμενο κεφάλαιο. Σε όλες τις περιπτώσεις η δύναμη  $F_z$  ήταν αρκετά μικρότερη από την  $F_y$ , άρα επομένως και οι τιμές του συντελεστή τριβής είναι σε κάθε περίπτωση μικρότερες της μονάδας. Η αύξηση του βάθους καθώς και η αύξηση του μεγέθους του κόκκου έχουν παρόμοια αποτελέσματα στο συντελεστή τριβής, καθώς η τιμή του μειώνεται και στις δύο περιπτώσεις. Οι τάσεις αυτές μπορούν να συσχετιστούν με την μεταβολή της θερμοκρασίας στον όγκο των νευτώνιων ατόμων, όπως απεικονίζεται στο σχήμα 5.5, όπου φαίνεται μια ξεκάθαρη αύξηση της τιμής της θερμοκρασίας, είτε όταν αυξάνεται το βάθος κοπής είτε όταν αυξάνεται το μέγεθος του κόκκου, λόγω της αυξημένης ενέργειας που παράγεται μέσω της εντονότερης επαφής μεταξύ κόκκων και ΤΕ.

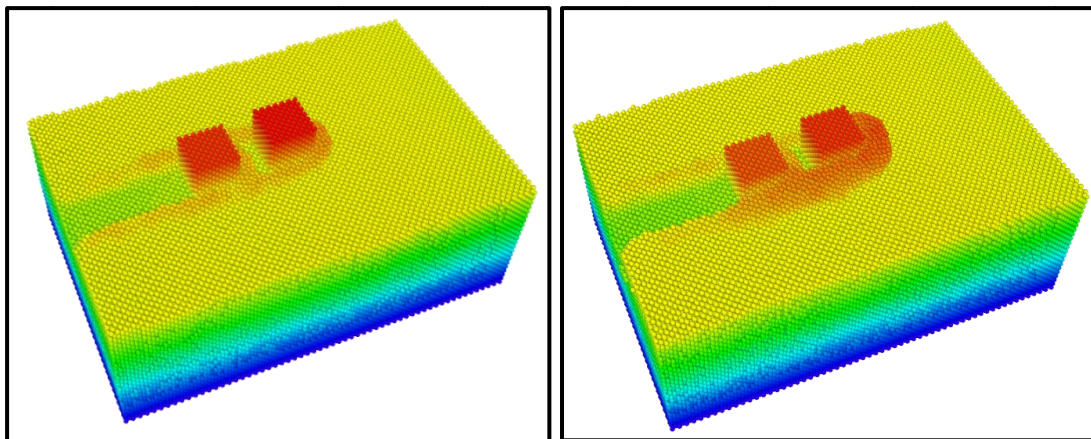


**Σχήμα 5.4.** Διακύμανση του συντελεστή τριβής σε σχέση με το βάθος κοπής και το μέγεθος του λειαντικού κόκκου.



**Σχήμα 5.5.** Διακύμανση μέσης θερμοκρασίας σε σχέση με το βάθος κοπής και το μέγεθος του λειαντικού κόκκου.

Στο σχήμα 5.6 απεικονίζονται ορισμένες χαρακτηριστικές εικόνες από την κοπή σε διαφορετικά βάθη και με διαφορετικά μεγέθη κόκκων. Γίνεται αρχικά εμφανές το ότι στην περίπτωση της νανο-λείανσης, όπως θα παρατηρηθεί αργότερα και στο νανο-φρεζάρισμα, εκτός του υλικού που σχηματίζει το απόβλιττο, το οποίο εναποτίθεται μπροστά από τους λειαντικούς κόκκους, υπάρχει και μια ποσότητα υλικού η οποία εναποτίθεται πάνω από τα πλαϊνά τοιχώματα του αυλακιού που δημιουργείται υπό τη μορφή γρεζιού (burr). Ο σχηματισμός γρεζιού έχει επισημανθεί ιδιαίτερα στο κεφάλαιο 2 ότι είναι ένα σημαντικό θέμα και στις μικροκοπές, διότι η διάστασή του σε σχέση με τις δομές που δημιουργούνται είναι σχετικά μεγαλύτερη από αυτή που λαμβάνει στις κατεργασίες μακροκλίμακας και επομένως είναι πιο δύσκολο να εξαλειφθεί. Γι' αυτό το λόγο, είναι απαραίτητο οι συνθήκες κατεργασίας να είναι τέτοιες ώστε να μειωθεί αποτελεσματικά η ανάπτυξη του γρεζιού. Από τις ενδεικτικές εικόνες του σχήματος 5.6, γίνεται εμφανές ότι όσο αυξάνεται το βάθος κοπής παράλληλα με την αύξηση του μεγέθους του αποβλίττου γίνεται ολοένα και πιο μεγάλη η ποσότητα υλικού που εναποτίθεται στην πάνω επιφάνεια των τοιχωμάτων του ΤΕ ως γρέζι. Επομένως, από την άποψη της ποιότητας επιφανείας του ΤΕ, είναι σημαντικό να επισημανθεί ότι η επιλογή κατάλληλου βάθους κοπής, σε συνάρτηση βέβαια με την απαιτούμενη παραγωγικότητα, έχει ιδιαίτερη σημασία για τη νανο-λείανση.

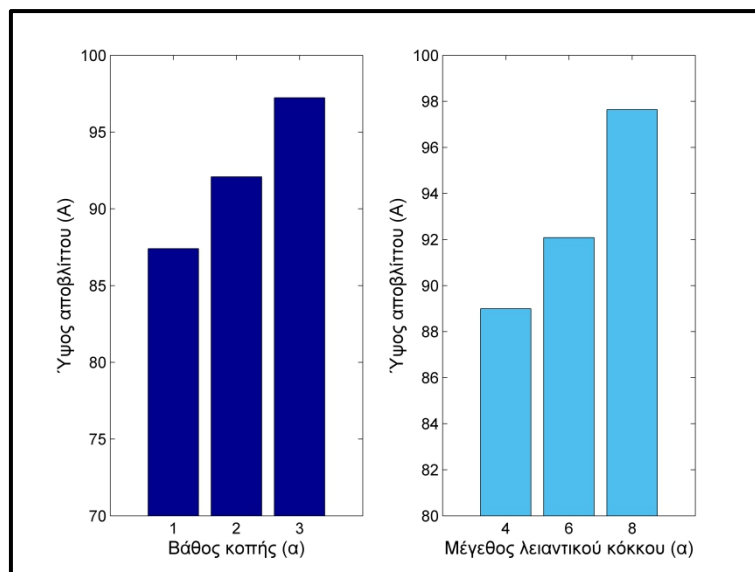


(α)

(β)

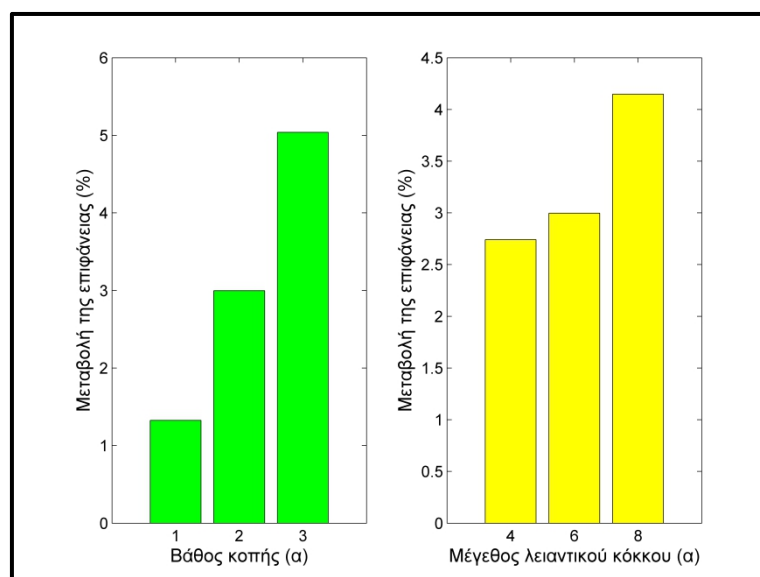
**Σχήμα 5.6.** Στιγμιότυπα της προσομοίωσης νανο-λείανσης με βάθος κοπής (α) 1α και (β) 2α.

Προκειμένου να γίνει πιο άμεσα σύγκριση σχετικά με την αύξηση του μεγέθους του υλικού που αποβάλλεται μεταξύ των περιπτώσεων με διαφορετικά βάθη κοπής ή διαφορετικό μέγεθος κόκκου, στο σχήμα 5.7 παρουσιάζονται οι τιμές του μέγιστου ύψους του υλικού που αποβάλλεται. Όπως φαίνεται στο σχήμα 5.7, το μέγιστο ύψος αυξάνεται σταδιακά τόσο με την αύξηση του βάθους κοπής όσο και με την αύξηση του μεγέθους του αποβλίττου και η επίδραση και των δύο μεταβλητών είναι παρόμοια.



**Σχήμα 5.7.** Μέγιστο ύψος αποβλήτου σε σχέση με το βάθος κοπής και το μέγεθος του λειαντικού κόκκου.

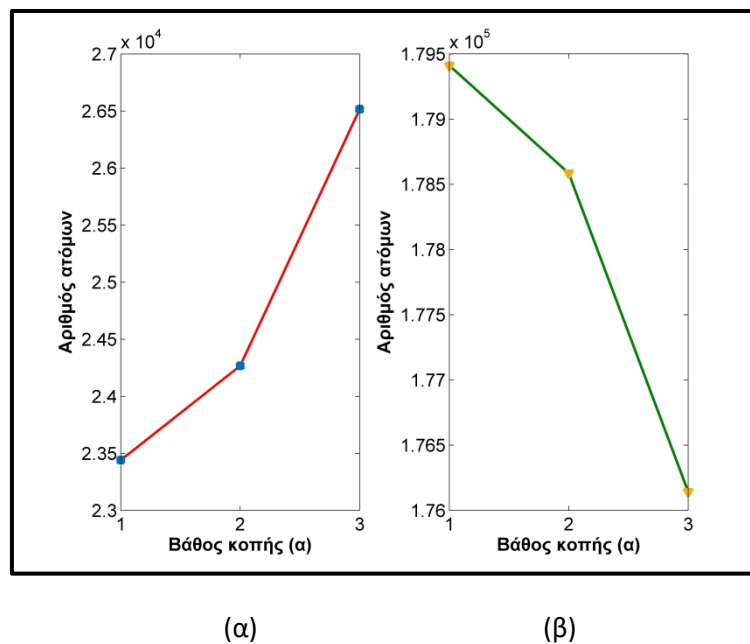
Ένα άλλο μέγεθος που μπορεί να επιβεβαιώσει περαιτέρω τις μεταβολές στην επιφάνεια του TE ανάλογα με τις διάφορες συνθήκες είναι ο υπολογισμός του εμβαδού της εξωτερικής επιφάνειας του TE. Όταν διεξαχθεί η κατεργασία, η αρχική επιφάνεια τροποποιείται διότι δημιουργείται το αυλάκι, το απόβλιττο και το γρέζι. Αυτές οι μεταβολές της επιφάνειας αντικατοπτρίζονται άμεσα στη μεταβολή του εμβαδού της το οποίο υπολογίζεται με ειδικό αλγόριθμο ο οποίος για μεγάλους αριθμούς ατόμων όπως αυτοί που χρησιμοποιούνται στα μοντέλα ΜΔ προσεγγίζει την μορφή της επιφάνειας που θα είχε το TE [410]. Στο σχήμα 5.8 απεικονίζεται σε κάθε περίπτωση η μεταβολή του εμβαδού της επιφάνειας μετά την κατεργασία.



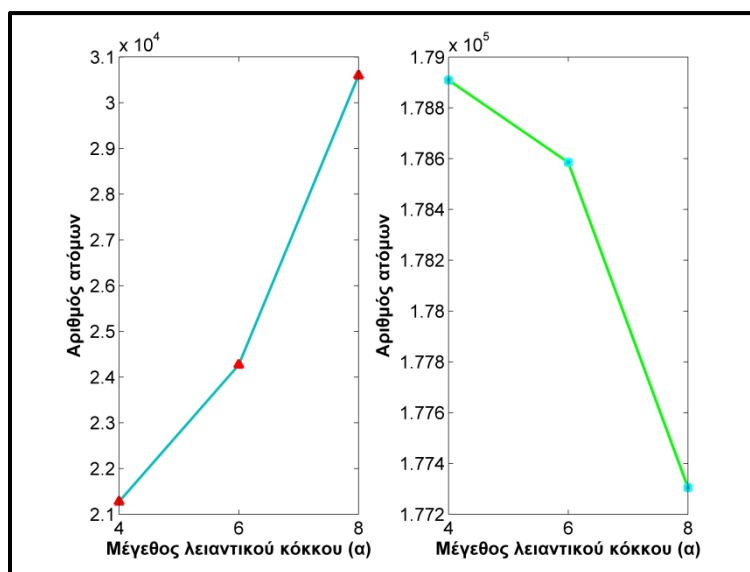
**Σχήμα 5.8.** Μεταβολή του εμβαδού της εξωτερικής επιφάνειας του TE ανάλογα με το βάθος κοπής και το μέγεθος του λειαντικού κόκκου.

Από το διάγραμμα αυτό παρατηρείται ότι, ενώ υπάρχουν οι αναμενόμενες τάσεις αύξησης του εμβαδού της επιφάνειας καθώς στην αρχικά επίπεδη επιφάνεια δημιουργείται το αυλάκι και δημιουργούνται επιπλέον περιοχές συσσώρευσης υλικού στο απόβλιττο και τα γρέζια, οι μεταβολές της επιφάνειας είναι πιο σημαντικές όταν αυξάνεται το βάθος κοπής παρά όταν αυξάνεται το μέγεθος του λειαντικού κόκκου.

Στη συνέχεια, θα αναλυθούν οι τιμές του CNA και του CSP, όπως έχουν περιγραφεί στο κεφάλαιο 3, σε κάθε περίπτωση για να προσδιοριστεί ο βαθμός επίδρασης του βάθους κοπής και του μεγέθους του κόκκου στη μεταβολή της δομής του υλικού του TE. Τα αποτελέσματα των σχημάτων 5.9 και 5.10 δείχνουν ότι η αύξηση του βάθους όπως και η αύξηση του μεγέθους του κόκκου, οδηγούν σε μεγαλύτερο αριθμό ατόμων που ανήκουν σε "άγνωστη" δομή, με ταυτόχρονη μείωση των ατόμων που ανήκουν στην αρχική δομή. Η αύξηση της πρώτης κατηγορίας ατόμων είναι εντονότερη με τη μεταβολή του μεγέθους του κόκκου όπως ήταν και η αύξηση των περισσότερων μεγεθών που προαναφέρθηκαν. Επίσης, η ανάλυση των τιμών του CSP, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.11, δείχνει αύξηση των ατόμων που ανήκουν σε μερικές διαταραχές ή σφάλματα επιστοιβάσης όσο το βάθος κοπής ή το μέγεθος του λειαντικού κόκκου μεγαλώνουν, όμως οι μεγαλύτερες αυξήσεις παρατηρούνται στην περίπτωση της αύξησης του βάθους κοπής, παρά κατά την αύξηση του μεγέθους του λειαντικού κόκκου.



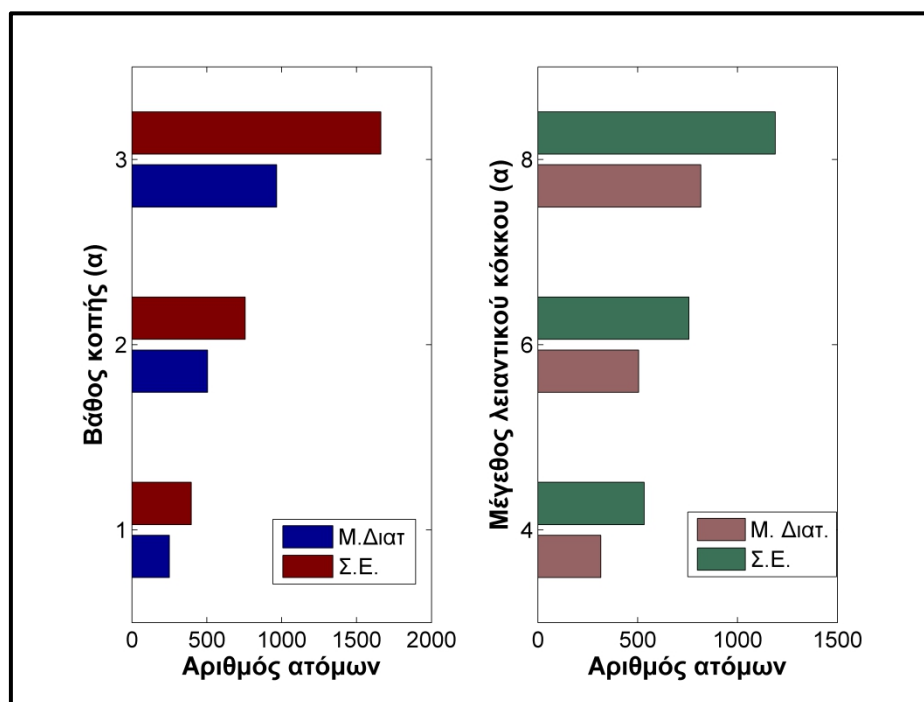
**Σχήμα 5.9.** Μεταβολή του αριθμού των ατόμων που ανήκουν σε (α) «άγνωστη δομή», (β) δομή FCC, σε συνάρτηση με το βάθος κοπής.



(α)

(β)

**Σχήμα 5.10.** Μεταβολή του αριθμού των ατόμων που ανήκουν σε (α) «άγνωστη δομή», (β) δομή FCC, σε συνάρτηση με το μέγεθος του λειαντικού κόκκου.



(α)

(β)

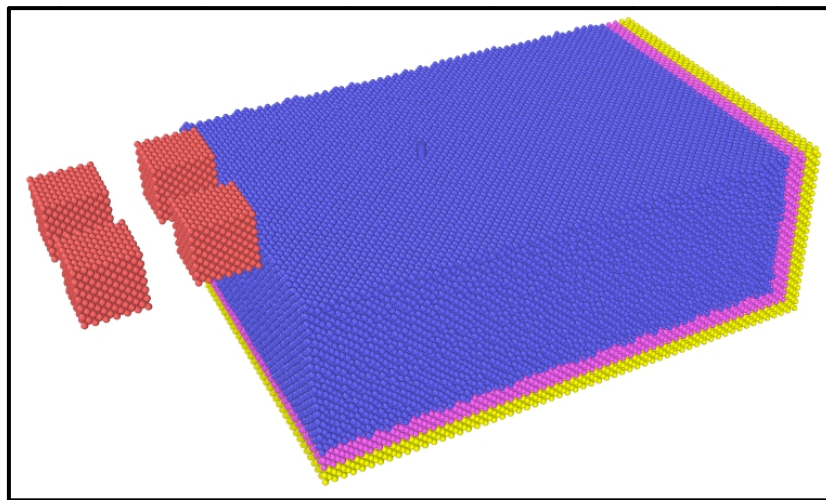
**Σχήμα 5.11.** Μεταβολή των ατόμων που ανήκουν σε μερικές διαταραχές και σφάλματα επιστοίβασης σε συνάρτηση: (α) με το βάθος κοπής, (β) με το μέγεθος του λειαντικού κόκκου.

Μετά την ανάλυση των αποτελεσμάτων, αποδείχτηκε γενικά όπως αναμενόταν ότι η χρήση μεγαλύτερων τιμών βάθους κοπής ή μεγαλύτερου μεγέθους κόκκων οδηγεί σε σημαντικά μεγαλύτερες δυνάμεις, θερμοκρασίες, μέγεθος αποβλίττου και γρεζιού καθώς και

μεγαλύτερες μεταβολές στην επιφάνεια και τη δομή του TE. Βέβαια μέσω της ανάλυσης έγινε δυνατή η ποσοτικοποίηση των διακυμάνσεων των μεγεθών αυτών ως προς το βάθος κοπής και το μέγεθος του κόκκου, κάτι που θα αποδειχθεί χρήσιμο για περαιτέρω μελέτες που θα ακολουθήσουν.

### 5.3 Επίδραση χρήσης περισσότερων λειαντικών κόκκων

Αφού έγιναν οι διερευνήσεις σχετικά με ορισμένα θεμελιώδη μεγέθη της κατεργασίας, προκειμένου να δημιουργηθεί ένα πιο ρεαλιστικό μοντέλο, θα γίνουν ορισμένες διερευνήσεις για την χρήση περισσότερων λειαντικών κόκκων στο μοντέλο. Όπως έχει γίνει εμφανές από τη θεωρία, δεν έχουν χρησιμοποιηθεί πάνω από δύο λειαντικοί κόκκοι σε άλλες μελέτες της νανο-λείανσης και μάλιστα η χρήση τους είναι ιδιαίτερα σπάνια. Όμως, στην πράξη, ακόμα και στην περίπτωση μικροσκοπικών λειαντικών τροχών, όπου το μήκος επαφής είναι ιδιαίτερα μικρό και άρα ο αριθμός των ενεργών κόκκων κάθε στιγμή είναι περιορισμένος, είναι σημαντικό στις προσομοιώσεις να λαμβάνονται υπόψη ορισμένα χαρακτηριστικά όπως το διαφορετικό βάθος προεξοχής ή η απόσταση μεταξύ των διαφορετικών σειρών κόκκων που θα εξεταστεί σε επόμενη υποενότητα, κ.α. ώστε να είναι πιο ρεαλιστικό το μοντέλο. Επομένως, στην παρούσα υποενότητα, πραγματοποιούνται προσομοιώσεις με 2 σειρές λειαντικών κόκκων σε τρία διαφορετικά βάθη κοπής και συγκρίνονται τα αποτελέσματα με αυτά των περιπτώσεων με μία σειρά λειαντικών κόκκων που παρουσιάστηκαν στην υποενότητα 5.2. Το μοντέλο με τις δύο σειρές λειαντικών κόκκων παρουσιάζεται στο σχήμα 5.12.

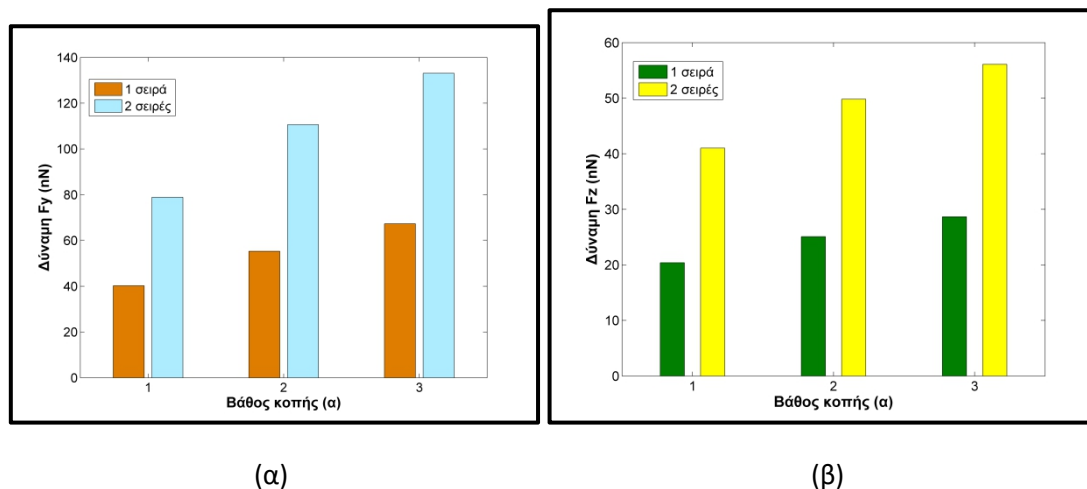


**Σχήμα 5.12.** Μοντέλο νανο-λείανσης, με χρήση δύο σειρών λειαντικών κόκκων με δύο κόκκους ανά σειρά.

Όσον αφορά τις δυνάμεις κατά τη νανο-λείανση, στο σχήμα 5.13 συγκρίνονται οι τιμές των δυνάμεων όταν χρησιμοποιείται μία σειρά λειαντικών κόκκων, κάτι που παρουσιάστηκε στην προηγούμενη ενότητα και οι τιμές των δυνάμεων όταν χρησιμοποιούνται δύο σειρές λειαντικών κόκκων, με ίδιο βάθος κοπής και απόσταση μεταξύ των δύο σειρών κόκκων ίση με  $6\alpha$ . Η σύγκριση των τιμών αυτών δείχνει ότι οι δυνάμεις είναι περίπου διπλάσιες στην περίπτωση αυτή, κάτι που είναι αναμενόμενο λόγω του διπλάσιου αριθμού κόκκων που χρησιμοποιούνται και η παρατήρηση αυτή ισχύει τόσο για τη δύναμη  $F_y$ , όσο και για τη

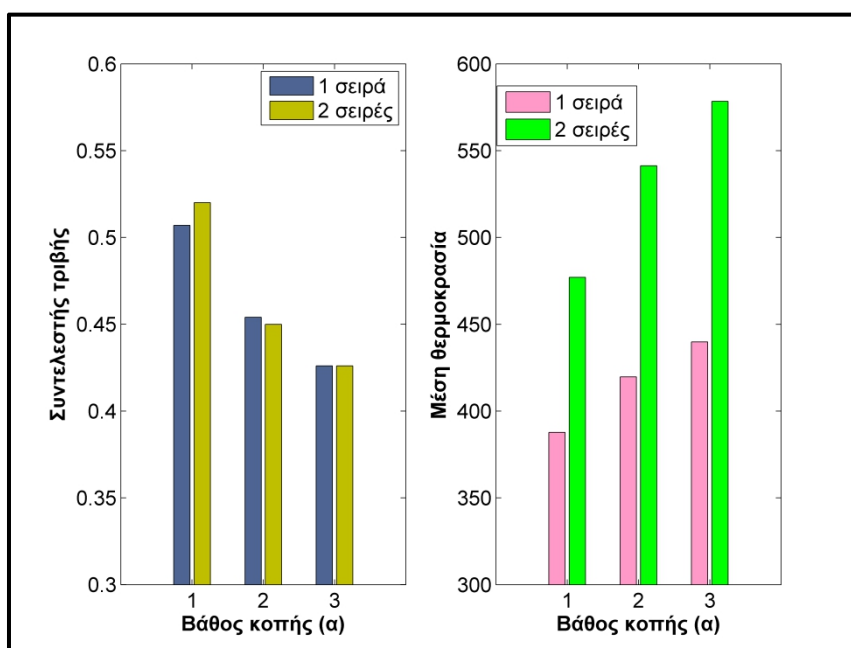


δύναμη Fz. Οι τάσεις που παρατηρήθηκαν στην προηγούμενη υποενότητα σχετικά με την αύξηση της δύναμης σε συνάρτηση με την αύξηση του βάθους κοπής είναι παρόμοιες.



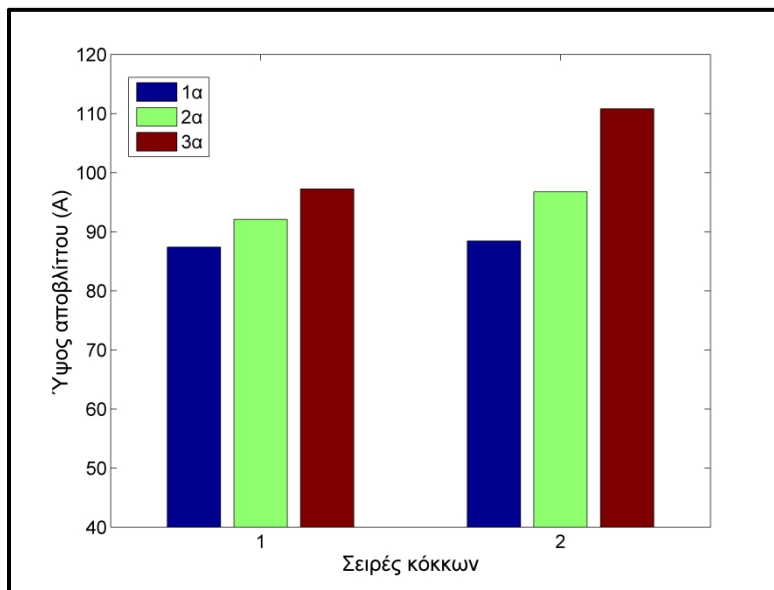
**Σχήμα 5.13.** Διακύμανση των δυνάμεων σε συνάρτηση με το βάθος κοπής για μοντέλα με μία και δύο σειρές λειαντικών κόκκων: (α) δύναμη Fy, (β) δύναμη Fz.

Μία ενδιαφέρουσα παρατήρηση σχετίζεται με τις τιμές του συντελεστή τριβής σε κάθε περίπτωση. Συγκρίνοντας τις τιμές μεταξύ των περιπτώσεων με μία και δύο σειρές κόκκων, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.14, οι διαφορές είναι πολύ μικρές και συγκεκριμένα για τα βάθη 2α και 3α εντοπίζονται στο τρίτο δεκαδικό ψηφίο, υποδεικνύοντας ότι όχι μόνο διατηρούνται οι ίδιες τάσεις μεταβολής των δυνάμεων στα δύο μοντέλα αλλά και ο λόγος των δυνάμεων είναι πρακτικά ίδιος υπό ίδιες συνθήκες. Επιπλέον, παρατηρείται σημαντική αύξηση της μέσης θερμοκρασίας των νευτώνιων ατόμων στις περιπτώσεις με δύο σειρές λειαντικών κόκκων, αλλά και παρόμοια τάση αύξησης.



**Σχήμα 5.14.** Διακύμανση: (α) του συντελεστή τριβής και (β) της μέσης θερμοκρασίας με το βάθος κοπής για μοντέλα με μία και δύο σειρές λειαντικών κόκκων.

Εκτός από την ανάλυση των δυνάμεων, του συντελεστή τριβής και της μέσης θερμοκρασίας, αξίζει να συγκριθούν και τυχόν διαφορές στον όγκο του υλικού που αποβάλλεται. Στο σχήμα 5.15 παρουσιάζεται το μέγιστο ύψος του αποβλίττου, σε σχέση με το βάθος κοπής για περιπτώσεις με μία ή δύο σειρές κόκκων. Στην περίπτωση των μικρότερων βαθών κοπής, το ύψος του αποβλίττου δε διαφέρει ιδιαίτερα, καθώς λόγω του μικρού όγκου του, το απόβλιττο που παράγεται από κάθε σειρά κόκκων στην περίπτωση των δύο σειρών λειαντικών κόκκων είναι ανεξάρτητο σε κάθε αυλάκι. Αντίθετα, στο μεγαλύτερο βάθος κοπής λόγω του αυξημένου όγκου του αποβλίττου σε κάθε αυλάκι, αυτά ενώνονται μεταξύ τους και γι' αυτό σε αυτή την περίπτωση το ύψος του αποβλίττου διαφέρει σημαντικά.



**Σχήμα 5.15.** Διακύμανση του μέγιστου ύψους του αποβλίττου ανάλογα με το βάθος κοπής και τον αριθμό των σειρών των λειαντικών κόκκων.

Τελικά αφού επιβεβαιώθηκε ότι το μοντέλο με χρήση δύο σειρών λειαντικών κόκκων παρουσιάζει τις ίδιες τάσεις με το μοντέλο στο οποίο γίνεται χρήση μίας σειράς λειαντικών κόκκων, θα γίνει η επιλογή να πραγματοποιηθούν οι μελέτες των επόμενων υποενοτήτων με χρήση του μεγαλύτερου μοντέλου, με τις δύο σειρές κόκκων εκτός ειδικών περιπτώσεων.

## 5.4 Επίδραση των οριακών συνθηκών

### 5.4.1 Εισαγωγή

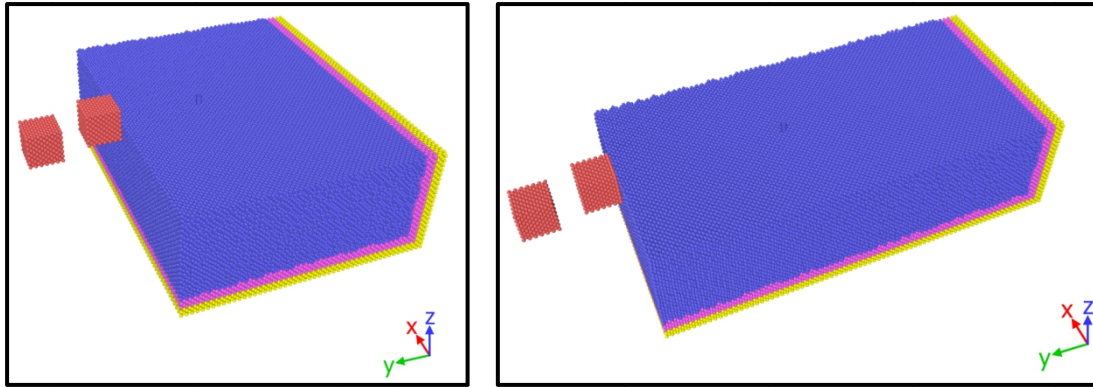
Παρότι γενικά όπως φαίνεται από την ανασκόπηση της σχετικής βιβλιογραφίας που παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 3, οι οριακές συνθήκες στα μοντέλα των διάφορων νανοκατεργασιών είναι σχεδόν πάντα ίδιες, θα είχε ενδιαφέρον να διαπιστωθεί στην πράξη η διαφορά στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που έχει η χρήση διαφορετικών οριακών συνθηκών σε συνδυασμό με διαφορετικές διαστάσεις του ΤΕ, ώστε να διαπιστωθεί και η επίδραση του μεγέθους του μοντέλου στα αποτελέσματα. Γι' αυτό το λόγο θα μελετηθεί μια σειρά διαφορετικών συνδυασμών οριακών συνθηκών και

διαφορετικών διαστάσεων του ΤΕ. Σε κάθε περίπτωση θα προσομοιώνεται η ίδια ακριβώς κατεργασία, αλλά θα αλλάζει ο τρόπος τοποθέτησης των οριακών συνθηκών, το είδος τους ή η αναλογία μεταξύ των διαστάσεων του ΤΕ. Στις προηγούμενες υποενότητες, όπως και στις επόμενες χρησιμοποιείται ένας από τους πιο συνηθισμένους τρόπους επιβολής οριακών συνθηκών, δηλαδή χρήση οριακών ατόμων (πάκτωσης) στην κάτω και την πίσω επιφάνεια του ΤΕ και χρήση περιοδικών συνθηκών στα πλαϊνά επίπεδα του ΤΕ. Με αυτό τον τρόπο αποφεύγεται η χρήση ενός ΤΕ με μεγάλο πλάτος και μειώνεται το υπολογιστικό κόστος. Σε αυτή την υποενότητα θα διαπιστωθεί σε κάποιο βαθμό η ορθότητα της χρήσης αυτών των οριακών συνθηκών. Οι συνθήκες του μοντέλου αναφοράς που θα συγκριθεί με τα υπόλοιπα είναι οι εξής: βάθος κοπής 2α, μέγεθος κόκκου 6α, ταχύτητα πρόωσης 200 m/s και για απλοποίηση χρησιμοποιείται μόνο μία σειρά κόκκων ενώ το μοντέλο έχει διαστάσεις 50x22x38 α. Προκειμένου να γίνουν οι συγκρίσεις το μήκος κοπής και η πορεία των κόκκων είναι ακριβώς ίδια σε όλες τις περιπτώσεις. Ένας σημαντικός παράγοντας που πρέπει να ληφθεί υπόψη στις συγκρίσεις είναι και το μέγεθος του κάθε μοντέλου καθώς συνδέεται άμεσα με τον υπολογιστικό φόρτο.

Οι περιπτώσεις που μελετήθηκαν μπορούν να χωριστούν σε συγκεκριμένες κατηγορίες σε σχέση με τις οριακές συνθήκες σταθερών ατόμων. Η πρώτη κατηγορία σχετίζεται με την περίπτωση αναφοράς αλλά περιλαμβάνει περιπτώσεις με ΤΕ μεγαλύτερου πλάτους ή μεγαλύτερου μήκους. Η δεύτερη κατηγορία περιλαμβάνει περιπτώσεις με επιβολή πάκτωσης στο επίπεδο yz ή και στο επίπεδο xz μέχρι ένα ύψος και σε αυτές τις περιπτώσεις δοκιμάζεται πάλι μεγαλύτερο μήκος ή πλάτος. Η τρίτη κατηγορία περιλαμβάνει περιπτώσεις με πάκτωση μόνο στην κατώτερη επιφάνεια του ΤΕ και μεγαλύτερο πλάτος ή μήκος. Για διευκόλυνση, οι περιπτώσεις κάθε κατηγορίας παρουσιάζονται σε ξεχωριστές υποενότητες.

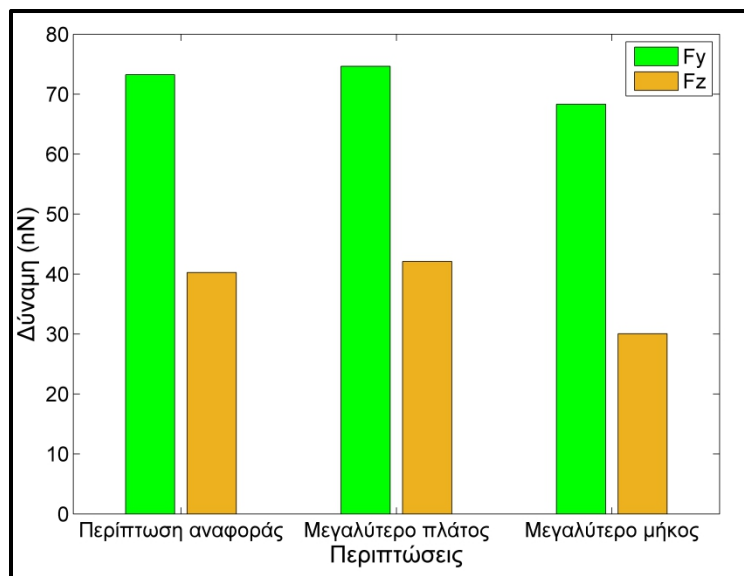
#### **5.4.2. Πρώτη κατηγορία μοντέλων**

Σε αυτή την κατηγορία τα μοντέλα έχουν τις ίδιες περιοχές οριακών συνθηκών, όπως αυτές που παρουσιάστηκαν στο σχήμα 5.1, οι οποίες χρησιμοποιούνται στη συντριπτική πλειοψηφία των μοντέλων που παρουσιάζονται στη σχετική βιβλιογραφία. Όμως, θα εξεταστούν οι εξής δύο επιμέρους περιπτώσεις: ΤΕ με μεγαλύτερο πλάτος (60α αντί για 38α) και ΤΕ με μεγαλύτερο μήκος (80α αντί για 50α). Με αυτό τον τρόπο θα διερευνηθεί κατά πόσο επηρεάζει το αποτέλεσμα η χρήση ΤΕ με μεγαλύτερες διαστάσεις. Στο σχήμα 5.16 παρουσιάζονται τα δύο προαναφερθέντα μοντέλα. Το μέγεθος των δύο μοντέλων είναι αυξημένο κατά 55-60% σε σχέση με την περίπτωση αναφοράς κάτι που αντανακλάται άμεσα και στον επιπλέον υπολογιστικό χρόνο που απαιτούν.



**Σχήμα 5.16.** Μοντέλα με (α) μεγαλύτερο πλάτος και (β) μεγαλύτερο μήκος από αυτό της περίπτωσης αναφοράς.

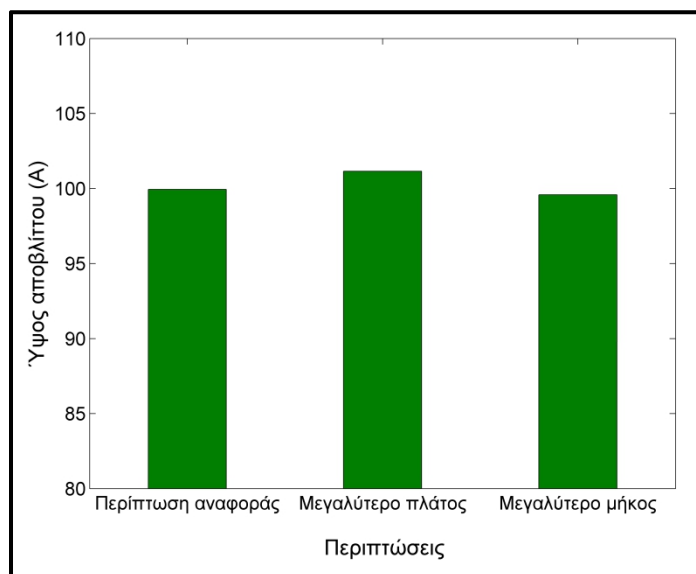
Από την ανάλυση των δυνάμεων της κατεργασίας, που απεικονίζεται στο σχήμα 5.17. Ενώ στην περίπτωση με το μεγαλύτερο πλάτος, η μεταβολή των τιμών των δυνάμεων ήταν σχετικά μικρή, η μεταβολή στην περίπτωση του μεγαλύτερου μήκους είναι πιο σημαντική, ιδίως στον άξονα z. Αυτή η παρατήρηση επιβεβαιώνει την ορθότητα της χρήσης των περιοδικών οριακών συνθηκών, διότι μπορεί να ληφθούν αποτελέσματα παρόμοια με αυτά που λαμβάνονται από μεγαλύτερα μοντέλα με μικρότερο κόστος. Όμως το μήκος του κομματιού φαίνεται ότι επηρεάζει ιδιαίτερα τις δυνάμεις, πιθανότητα διότι επιτρέπει ευκολότερα την εκδήλωση των φαινομένων που σχετίζονται με την πλαστική παραμόρφωση και έτσι η απαιτούμενη δύναμη μειώνεται σε σχέση με την περίπτωση αναφοράς που το μικρότερο μήκος TE ήταν περιοριστικό.



**Σχήμα 5.17.** Διακύμανση των δυνάμεων για μοντέλα με διαφορετικές διαστάσεις.

Εκτός από την ανάλυση των δυνάμεων, αξίζει να διερευνηθούν και τυχόν διαφορές στον όγκο του παραγόμενου αποβλίττου. Τα αποτελέσματα σχετικά με το μέγιστο ύψος αποβλίττου παρουσιάζονται στο σχήμα 5.18. Από αυτά τα αποτελέσματα η μόνη περίπτωση που παρουσιάζει ελαφρά διαφορετικό αποτέλεσμα είναι αυτή με το μεγαλύτερο πλάτος,

ενώ, από την άλλη, η χρήση TE μεγαλύτερου μήκους δε φαίνεται ότι αλλάζει τις διαστάσεις του αποβλίττου.



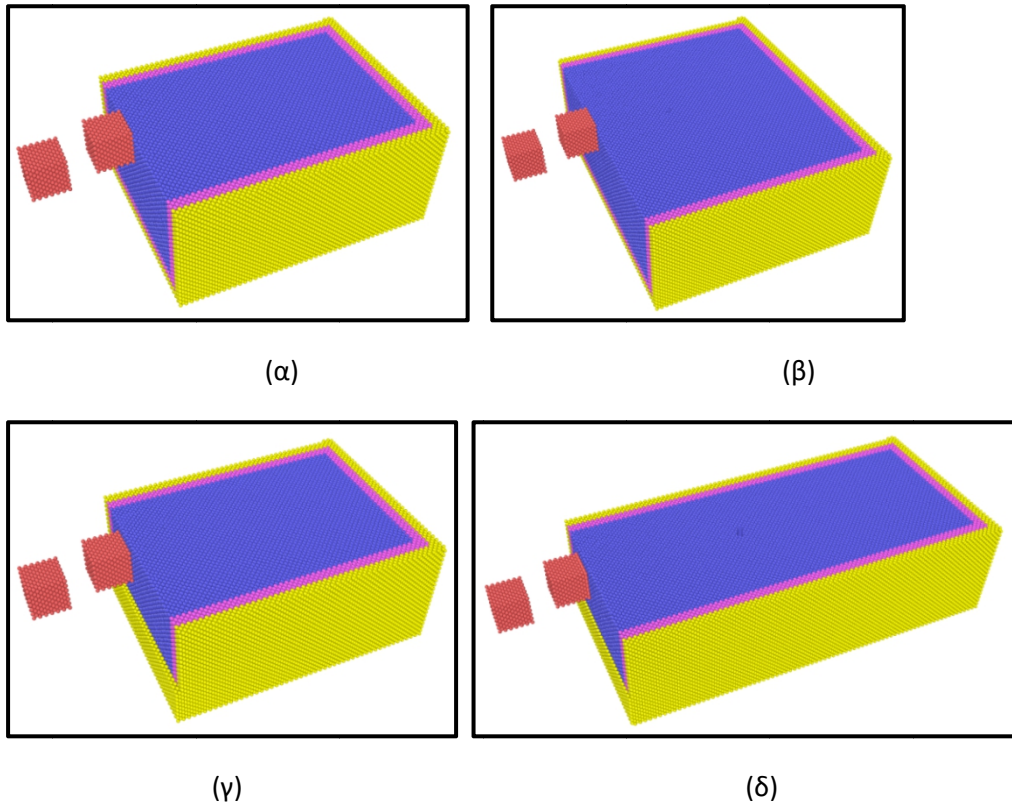
**Σχήμα 5.18.** Διακύμανση του ύψους του αποβλίττου για TE με διαφορετικές διαστάσεις.

#### 5.4.3. Δεύτερη κατηγορία μοντέλων

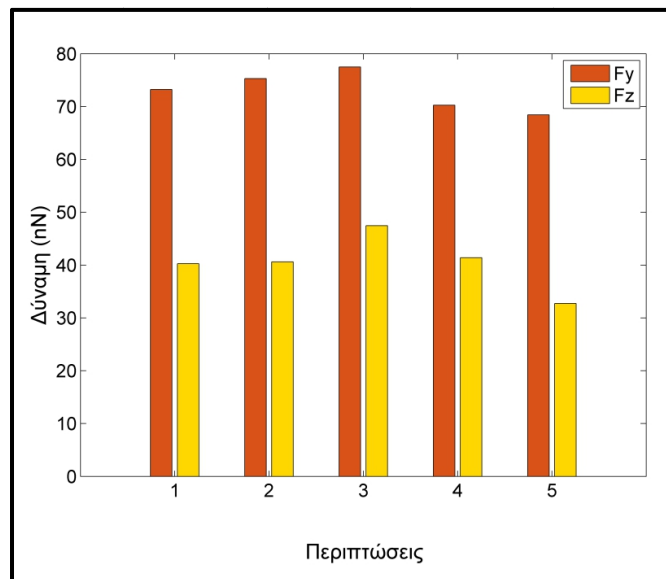
Σε αυτή την κατηγορία τα μοντέλα έχουν επιπλέον σειρές σταθερών ατόμων και στο επίπεδο yz. Με αυτό τον τρόπο το μοντέλο είναι αρκετά πιο «περιορισμένο» και στη σχετική βιβλιογραφία, όπως αναφέρθηκε στο κεφάλαιο 3, θεωρείται ότι εάν το πλάτος του TE είναι σχετικά μικρό χωρίς να υπάρχουν περιοδικές οριακές συνθήκες δεν υπάρχει η δυνατότητα να αναπτυχθούν οι διαταραχές και να δημιουργηθεί πλαστική παραμόρφωση με ρεαλιστικό τρόπο όπως στην πραγματικότητα. Οι περιπτώσεις που εξετάζονται είναι με TE ίδιων διαστάσεων με αυτό της περίπτωσης αναφοράς, με TE μεγαλύτερου πλάτους και TE μεγαλύτερου μήκους με επιπλέον επίπεδο με σταθερά άτομα έως ένα συγκεκριμένο ύψος στο μπροστινό επίπεδο xz και με ίδιες συνθήκες με της περίπτωσης αναφοράς και το επιπλέον επίπεδο σταθερών ατόμων. Οι τέσσερις αυτές περιπτώσεις παρουσιάζονται στο σχήμα 5.19.

Στο σχήμα 5.20 παρουσιάζονται οι τιμές των δυνάμεων σε κάθε περίπτωση. Με τον αριθμό 1 υποδηλώνεται η περίπτωση αναφοράς, με τον αριθμό 2 η περίπτωση του σχήματος 5.19α, με 3 η περίπτωση του σχήματος 5.19β, με 4 η περίπτωση του σχήματος 5.19γ και με 5 η περίπτωση του σχήματος 5.19δ. Από τα αποτελέσματα αυτά, γίνεται εμφανές ότι σε όλες τις περιπτώσεις υπάρχει μια διαφοροποίηση των δυνάμεων, ειδικά της  $F_z$ , σε σχέση με την περίπτωση αναφοράς όμως οι μεγαλύτερες διαφορές παρατηρούνται στην περίπτωση με το μεγαλύτερο πλάτος και στην περίπτωση με το μεγαλύτερο μήκος. Στην πρώτη περίπτωση, αποδεικνύεται η θεωρητική διαπίστωση που προαναφέρθηκε, ότι εάν δε χρησιμοποιηθούν περιοδικές οριακές συνθήκες, το πλάτος του TE παίζει σημαντικό ρόλο στο αποτέλεσμα της προσομοίωσης. Η δεύτερη περίπτωση οδηγεί σε παρόμοιο συμπέρασμα με αυτό της προηγούμενης υποενοότητας, ότι το μήκος του TE παίζει ρόλο στα

αποτελέσματα και μάλιστα η τάση που παρατηρείται είναι η ίδια, δηλαδή μείωση και των δύο συνιστωσών της δύναμης, με μεγαλύτερη μείωση στην  $F_z$ .

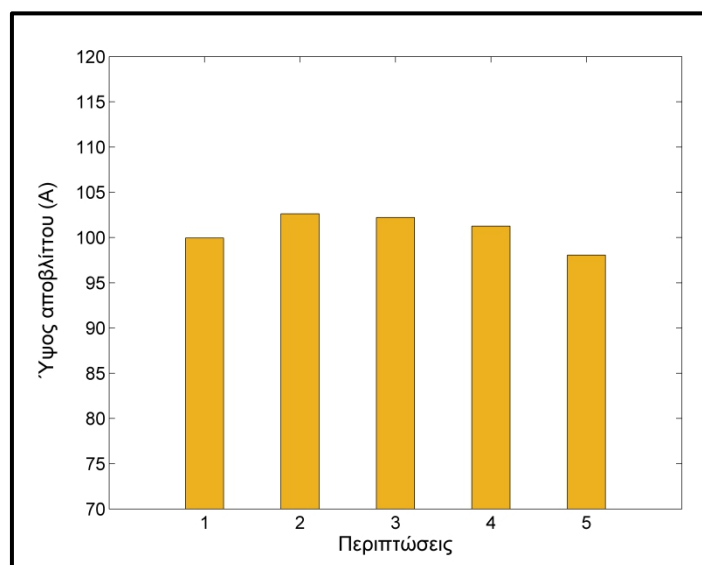


**Σχήμα 5.19.** Μοντέλα με επιπλέον σειρές σταθερών ατόμων και (α) ίδιες διαστάσεις με την περίπτωση αναφοράς, (β) μεγαλύτερο πλάτος, (γ) ίδιες διαστάσεις με την περίπτωση αναφοράς και επιπλέον σειρά σταθερών ατόμων στο επίπεδο xz, (δ) μεγαλύτερο μήκος και επιπλέον σειρά σταθερών ατόμων στο επίπεδο xz.



**Σχήμα 5.20.** Διακύμανση των δυνάμεων στις περιπτώσεις που χρησιμοποιούνται επιπλέον στρώσεις οριακών ατόμων.

Τα αποτελέσματα της ανάλυσης του μέγιστου ύψους του αποβλίττου παρουσιάζονται στο σχήμα 5.21. Το μέγεθος του αποβλίττου είναι γενικά μεγαλύτερο από αυτό της περίπτωσης αναφοράς εκτός από την τελευταία περίπτωση, με το μεγαλύτερο μήκος.

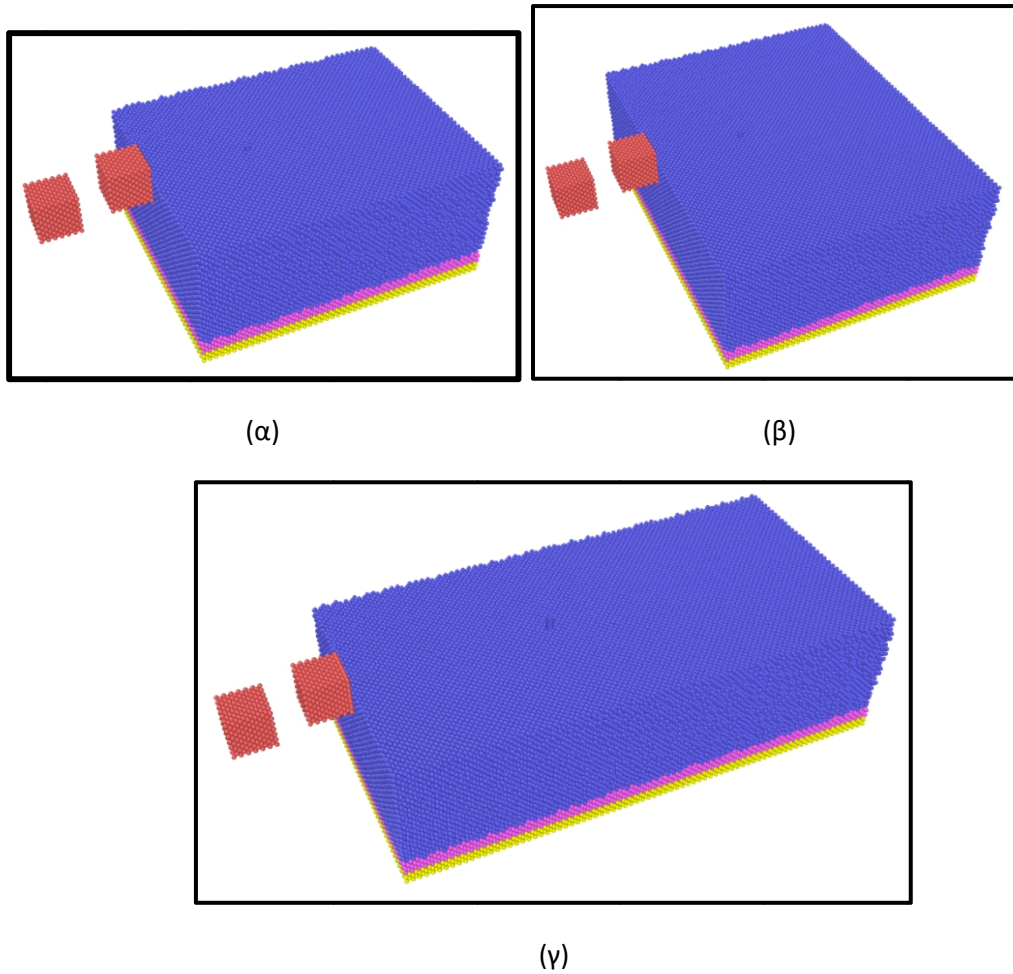


**Σχήμα 5.21.** Διακύμανση του μέγιστου ύψους αποβλίττου στις περιπτώσεις που χρησιμοποιούνται επιπλέον στρώσεις οριακών ατόμων.

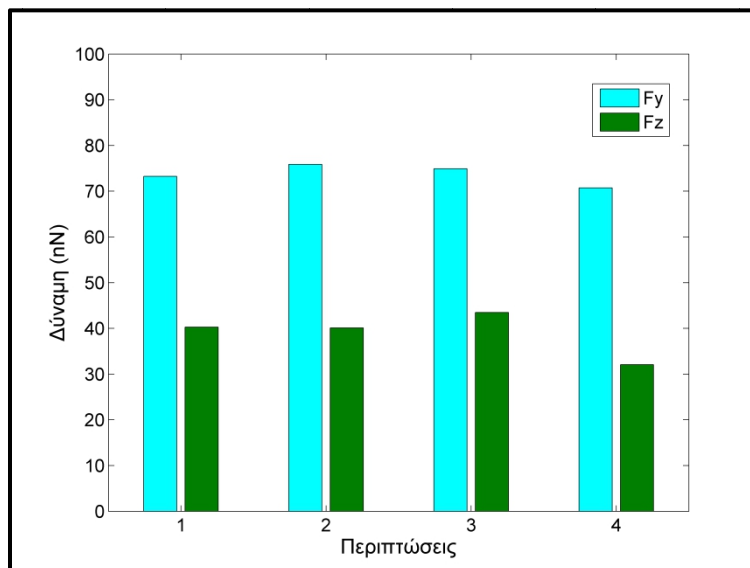
#### 5.4.4. Τρίτη κατηγορία μοντέλων

Σε αυτή την κατηγορία τα μοντέλα έχουν σταθερά άτομα μόνο στην κάτω επιφάνεια του TE, δηλαδή στο επίπεδο  $xy$ . Τα μοντέλα αυτά είναι λιγότερο περιορισμένα από τις υπόλοιπες περιπτώσεις. Οι περιπτώσεις που εξετάζονται είναι με ίδιες διαστάσεις με την αρχική περίπτωση, μεγαλύτερο πλάτος ή μεγαλύτερο μήκος. Οι τρεις αυτές περιπτώσεις παρουσιάζονται στο σχήμα 5.22.

Στο σχήμα 5.23 παρουσιάζονται οι τιμές των δυνάμεων στις τρεις περιπτώσεις στις οποίες δε χρησιμοποιείται στρώμα οριακών ατόμων στο επίπεδο  $xz$ . Με τον αριθμό 1 υποδηλώνεται η περίπτωση αναφοράς, με τον αριθμό 2 η περίπτωση του σχήματος 5.22α, με τον αριθμό 3 η περίπτωση του σχήματος 5.22β και με τον αριθμό 4 η περίπτωση του σχήματος 5.22γ. Για TE ίδιων διαστάσεων με αυτό της περίπτωσης αναφοράς, η δύναμη  $F_y$  είναι λίγο αυξημένη, ενώ για διπλάσιο πλάτος η δύναμη  $F_z$  έχει τη μεγαλύτερη διαφορά. Ωστόσο και στις δύο περιπτώσεις η διαφορά είναι σχετικά μικρή ώστε να επιβεβαιώνει ότι η χρήση περιοδικών συνθηκών στο επίπεδο  $yz$  οδηγεί σε παρόμοια αποτελέσματα με αυτά που λαμβάνονται με τη χρήση ενός TE μεγαλύτερου πλάτους. Όπως και στις δύο προηγούμενες υποενότητες, η σημαντικότερη διαφορά, κυρίως στον άξονα  $F_z$  εντοπίζεται στην περίπτωση με το μεγαλύτερο μήκος.



**Σχήμα 5.22.** Μοντέλα με σταθερά άτομα μόνο στο επίπεδο  $xy$  και (α) ίδιες διαστάσεις με την περίπτωση αναφοράς, (β) μεγαλύτερο πλάτος, (γ) μεγαλύτερο μήκος.

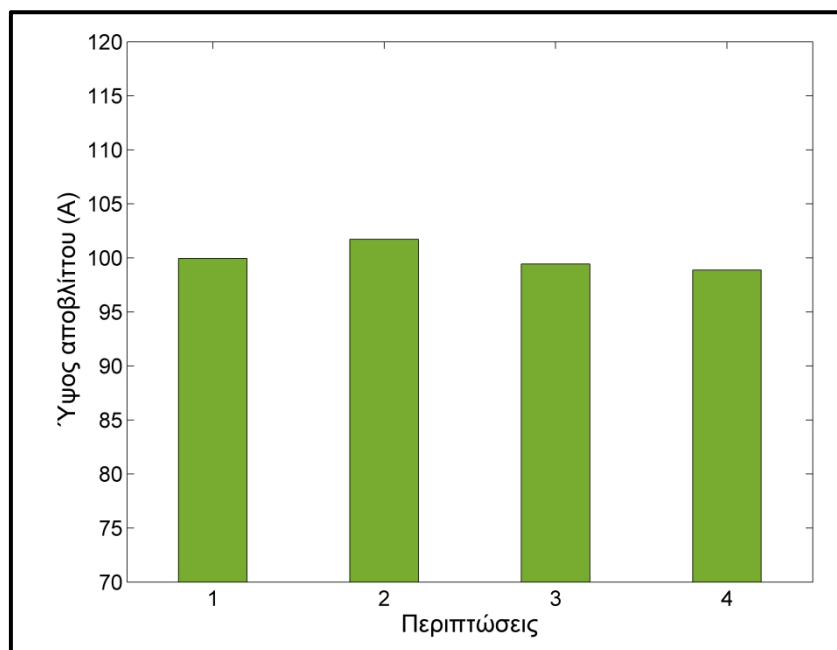


**Σχήμα 5.23.** Διακύμανση των δυνάμεων στις περιπτώσεις της τρίτης κατηγορίας.

Τα αποτελέσματα της ανάλυσης του μέγιστου ύψους του αποβλίττου παρουσιάζονται στο σχήμα 5.24. Το μέγεθος του αποβλίττου για ίδιες διαστάσεις με της περίπτωσης αναφοράς



είναι λίγο μεγαλύτερο, ενώ για το TE με το διπλάσιο πλάτος είναι παρόμοιο με αυτό της περίπτωσης αναφοράς και για το TE με το μεγαλύτερο μήκος είναι λίγο μικρότερο.



**Σχήμα 5.24.** Διακύμανση του ύψους του αποβλήτου στις διάφορες περιπτώσεις της τρίτης κατηγορίας.

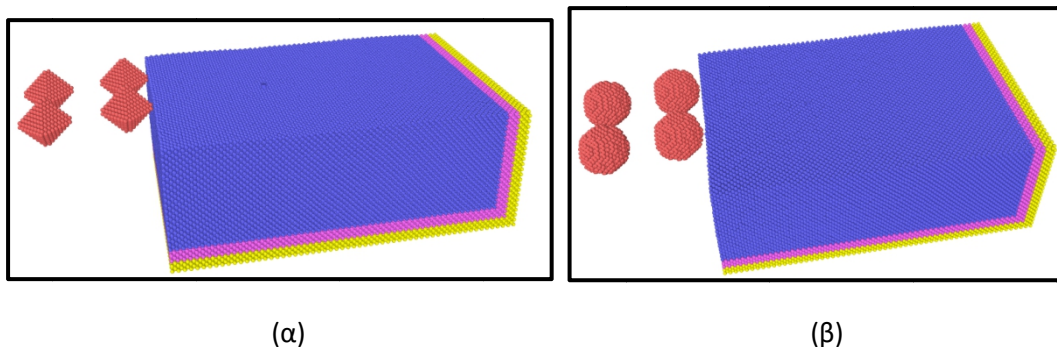
Τελικά, τα αποτελέσματα δείχνουν ότι υπάρχει επίδραση των οριακών συνθηκών στα αποτελέσματα ως ένα βαθμό. Η καταλληλότητα των οριακών συνθηκών που χρησιμοποιούνται στα περισσότερα μοντέλα αιτιολογείται με βάση τα αποτελέσματα. Όσον αφορά το απόβλητο, αν και παρατηρούνται ορισμένες διαφορές στον όγκο του, δεν είναι ιδιαίτερα σημαντικές σε σχέση τις διαφορές που παρατηρούνται σε σχέση με τις δυνάμεις. Πιο συγκεκριμένα, η χρήση περιοδικών οριακών συνθηκών οδηγεί σε αποτελέσματα παρόμοια με αυτά που λαμβάνονται από μοντέλα με μεγαλύτερου πλάτους για τις δυνάμεις. Η χρήση επιπλέον στρώσεων σταθερών ατόμων δεν οδηγεί σε ιδιαίτερα σημαντικές διαφορές, όπως και η χρήση λιγότερων στρώσεων σταθερών ατόμων, αλλά η βασική παράμετρος που επηρεάζει τα αποτελέσματα είναι το μήκος του μοντέλου που οδηγεί σε σημαντικά μικρότερες δυνάμεις. Η δύναμη  $F_y$  επηρεάζεται λιγότερο από τις οριακές συνθήκες σε σχέση με την  $F_z$  που επηρεάζεται πιο άμεσα. Επομένως η χρήση ενός μοντέλου με μεγαλύτερο μήκος από 50α είναι επιβεβλημένη, τουλάχιστον όταν χρησιμοποιούνται κόκκοι ίδιου μεγέθους και παρόμοιες τιμές μήκους κοπής. Γι' αυτό στις προσομοιώσεις των υπολοίπων υποενότητων το μήκος του TE είναι 60α με το ίδιο συνολικά μήκος κοπής.

### 5.5 Επίδραση διαφορετικού σχήματος κόκκων

Όπως έχει προαναφερθεί στο κεφάλαιο της μικρο-λείανσης και σε άλλες υποενότητες της θεωρίας, η γεωμετρία των κόκκων δεν είναι ιδανική, αλλά μπορεί να προσεγγιστεί με κάποια γενική μορφή πολυέδρου. Έτσι στις προσομοιώσεις τόσο με τη χρήση πεπερασμένων στοιχείων όσο και στις προσομοιώσεις με τη μέθοδο ΜΔ, χρησιμοποιούνται κάποιες απλοποιημένες γεωμετρίες με βάση παρατηρήσεις σε μικροσκόπιο που συνήθως

είναι απλά πολύεδρα όπως κύβοι, οκτάεδρα ή πυραμίδες [33, 411], αλλά επίσης χρησιμοποιείται ως μορφή και η σφαίρα. Κατά τη διάρκεια της κατεργασίας, λόγω της φθοράς, η πραγματική γεωμετρία απέχει αρκετά από το ιδανικό αυτό σχήμα οδηγώντας σε διαφοροποίηση τα μεγέθη της κατεργασίας, τόσο από πλευράς δυνάμεων, θερμοκρασιών, παραμενουσών τάσεων, κ.α., όσο και από πλευράς ποιότητας του ΤΕ. Γι' αυτό το λόγο είναι απαραίτητο να γίνει μια διερεύνηση, διατηρώντας ορισμένες συνθήκες ίδιες και χρησιμοποιώντας δύο επιπλέον γεωμετρίες εκτός της κυβικής που χρησιμοποιείται στην πλειοψηφία των προσομοιώσεων αυτού του κεφαλαίου. Τα σχήματα αυτά κατασκευάστηκαν με βάση έναν αρχικό όγκο υλικού και έχουν μορφή οκταέδρου, ως δύο πυραμίδες τετραγωνικής βάσης και σφαίρας. Τα σχήματα αυτά, διαθέτουν το μεν ίδιο μήκος της διαγωνίου βάσης και το δε ίδιου μήκους διάμετρο με την πλευρά του κυβικού λειαντικού κόκκου, προκειμένου να υπάρχει η δυνατότητα κάποιας σύγκρισης.

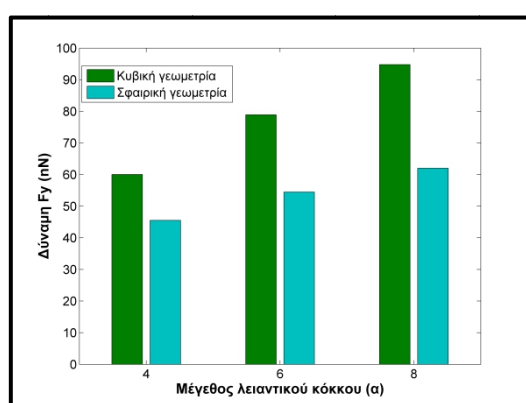
Η χρησιμότητα αυτών των προσομοιώσεων, έγκειται στο γεγονός ότι στην πράξη το σχήμα του λειαντικού κόκκου όπως προαναφέρθηκε δεν είναι ιδανικό ή λόγω της διακύμανσης των διαστάσεων του λόγω φθοράς και θραύσης μπορεί να αλλάξει ραγδαία κατά την κατεργασία. Επίσης, σε σχέση με τις πιθανές δομές, η γεωμετρία του οκταέδρου αντιπροσωπεύει μία ακραία περίπτωση που ο κόκκος έχει μία βασική διάσταση ίδια με ένα άλλο σχήμα όπως ο κύβος, αλλά ο όγκος του και η επιφάνεια επαφής με το ΚΕ έχουν αρκετά μικρή τιμή, ενώ η κυκλική γεωμετρία μπορεί να αντιπροσωπεύει τη γεωμετρία ενός κόκκου σε κάποιο στάδιο της φθοράς του, όταν έχει χαθεί η οξύτητα (sharpness) των κόψεων του και έχει εξομαλυνθεί. Η σύγκριση γίνεται για τρία διαφορετικά μεγέθη κόκκων (4α, 6α, 8α) και υπό δύο διαφορετικά βάθη κοπής (1α, 3α) προκειμένου να εξαχθούν όσο το δυνατόν πιο γενικά αποτελέσματα. Λόγω του ότι η οκταεδρική γεωμετρία διαθέτει το μικρότερο εμβαδόν επαφής με το ΤΕ και η γεωμετρία καταλήγει απότομα σε κορυφές, δε θα γίνουν συγκρίσεις με διάφορα μεγέθη κόκκου για το μικρότερο βάθος κοπής διότι δε διαπιστώθηκε σημαντική διαφορά στα αποτελέσματα. Στις υπόλοιπες περιπτώσεις όμως θα συγκριθούν και οι τρεις γεωμετρίες. Στο σχήμα 5.25 παρουσιάζονται οι δύο διαφορετικές γεωμετρίες εκτός της κυβικής που έχει ήδη παρουσιαστεί, στα τρία διαφορετικά μεγέθη που εξετάζονται.



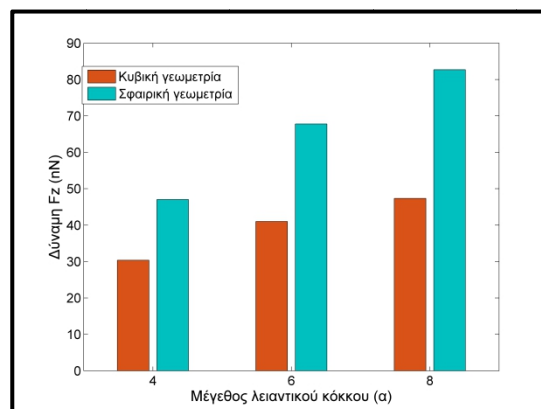
**Σχήμα 5.25.** Μοντέλα νανο-λείανσης με: (α) οκταεδρικούς και (β) σφαιρικούς κόκκους.

Όσον αφορά την ανάλυση των δυνάμεων, για το μικρότερο βάθος κοπής, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.26, σε κάθε περίπτωση η δύναμη στον άξονα  $y$  είναι ξεκάθαρα μεγαλύτερη για το κυβικό λειαντικό κόκκο, ενώ η δύναμη στον άξονα  $z$  είναι σαφώς μεγαλύτερη στην περίπτωση του σφαιρικού λειαντικού κόκκου. Παρότι όπως έχει παρατηρηθεί και σε

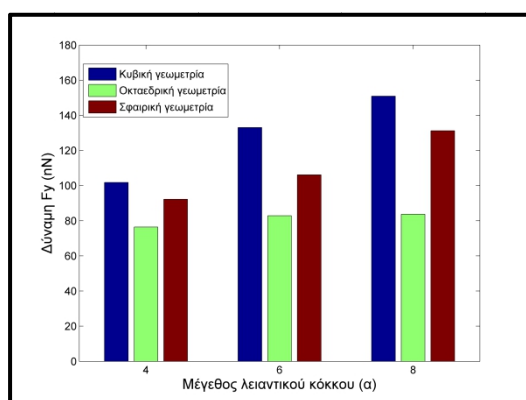
προηγούμενες υποενότητες, στην περίπτωση του κυβικού κόκκου η δύναμη  $\gamma$  είναι μεγαλύτερη στον άξονα  $y$ , για το σφαιρικό κόκκο φαίνεται ότι η δύναμη στον  $z$  άξονα είναι ελαφρά έως σημαντικά μεγαλύτερη και είναι πολύ πιο κοντά σε μέτρο στη δύναμη  $\gamma$  σε αντίθεση με την περίπτωση του κυβικού κόκκου που η δύναμη στον άξονα  $y$  είναι σχεδόν διπλάσια σε κάθε περίπτωση από τη δύναμη στον άξονα  $z$ . Καθώς παρόμοιες τάσεις παρατηρούνται ποιοτικά και στο μεγαλύτερο βάθος, προκύπτει ότι η χρήση του σφαιρικού λειαντικού κόκκου οδηγεί σε περίπου ίδιου μεγέθους συνισταμένη δύναμη σε σχέση με τον κυβικό κόκκο και όσο αυξάνεται το μέγεθος του κόκκου οι δυνάμεις των κυβικών και των σφαιρικών κόκκων συνολικά σχεδόν εξισορροποούνται. Στην περίπτωση του μεγαλύτερου βάθους κοπής, φαίνεται επίσης, η σημαντική διαφορά που έχουν οι δυνάμεις που προκύπτουν κατά τη λείανση με τον οκταεδρικό κόκκο, ο οποίος για ίδιες συνθήκες καθώς έχει πολύ μικρότερη επιφάνεια επαφής και αφαιρεί μικρότερη ποσότητα υλικού παρουσιάζει αισθητά μικρότερες δυνάμεις σε κάθε περίπτωση για όλα τα μεγέθη του λειαντικού κόκκου.



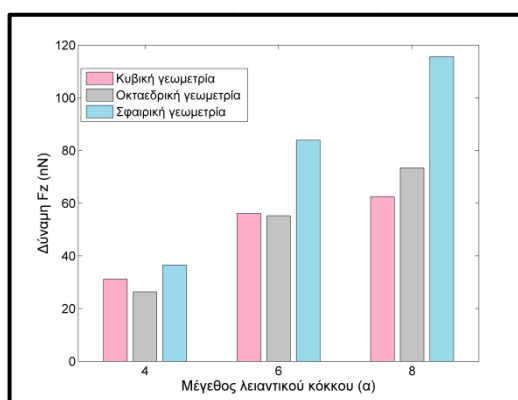
(α)



(β)



(γ)

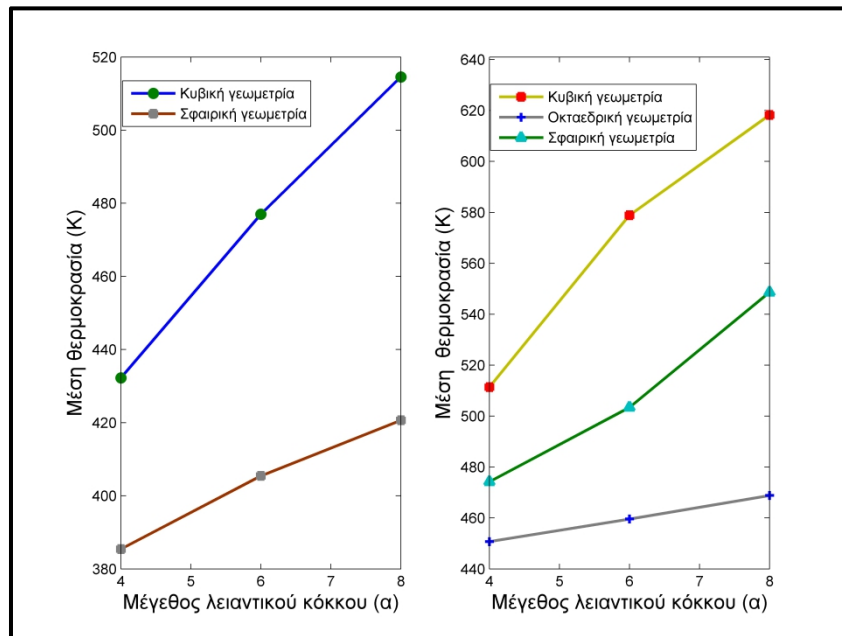


(δ)

**Σχήμα 5.26.** Διακύμανση των δυνάμεων κοπής σε σχέση με το σχήμα του λειαντικού κόκκου και το μέγεθός του: (α), (β) για βάθος κοπής 1α, (γ), (δ) για βάθος κοπής 3α.

Όσον αφορά τις μέσες θερμοκρασίες που αναπτύσσονται στο TE, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.27, σε κάθε περίπτωση οι θερμοκρασίες στο TE με χρήση των κυβικών λειαντικών κόκκων είναι μεγαλύτερες σε σχέση με την περίπτωση των σφαιρικών και οκταεδρικών κόκκων και

αυξάνουν με το βάθος κοπής και το μέγεθος του κόκκου όπως αναμένεται, λόγω της εντονότερης επαφής των κόκκων με το ΤΕ που οδηγεί σε αυξημένη πρόσδοση ενέργειας σε αυτό.

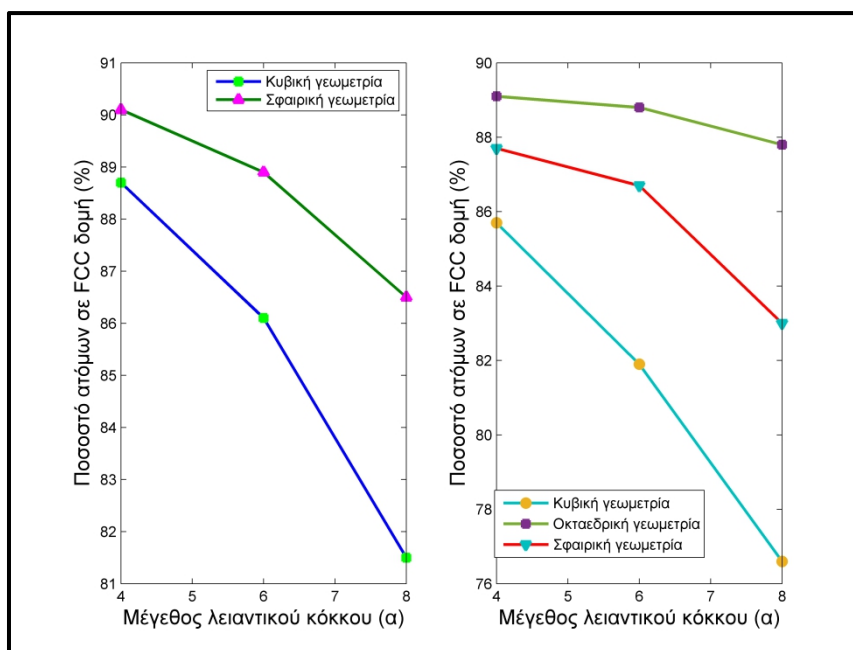


(α)

(β)

**Σχήμα 5.27.** Μεταβολή της θερμοκρασίας του ΤΕ ανάλογα με το σχήμα και το μέγεθος του λειαντικού κόκκου: (α) για βάθος κοπής 1α, (β) για βάθος κοπής 3α.

Τέλος, όσον αφορά τις μεταβολές στη δομή του ΤΕ, γίνεται εμφανές από τα αποτελέσματα του σχήματος 5.28 ότι η χρήση του κυβικού λειαντικού κόκκου οδηγεί σε κάθε περίπτωση σε μεγαλύτερες μεταβολές στη δομή του ΤΕ και για τον κυβικό λειαντικό κόκκο η αύξηση του βάθους είχε πιο σημαντική επίδραση στη δομή του ΤΕ, σε σχέση με την αύξηση του μεγέθους του, κάτι που ισχύει και για τον σφαιρικό λειαντικό κόκκο. Από τα αποτελέσματα της παρούσας υποενοότητας συμπεραίνεται ότι παρότι τουλάχιστον μεταξύ του κυβικού και του σφαιρικού κόκκου δεν παρατηρήθηκε μεγάλη διαφορά στο μέτρο της συνισταμένης δύναμης σε αρκετές περιπτώσεις, η επίδραση του σχήματος του κόκκου ήταν εμφανής στην περίπτωση των μεταβολών της δομής. Έτσι, παρότι ο ρυθμός αποβολής υλικού είναι παρόμοιος σε αυτές τις δύο περιπτώσεις, το ομαλότερο σχήμα του σφαιρικού κόκκου οδηγεί σε μικρότερη επιβάρυνση του υλικού του ΤΕ. Επιπλέον, όσον αφορά τον οκταεδρικό κόκκο, παρατηρείται ότι όντως αποτελεί μια ακραία περίπτωση, κατά την οποία επικρατούν σημαντικά διαφορετικές συνθήκες από την περίπτωση των άλλων ειδών κόκκων, οδηγώντας σε μικρότερη αποτελεσματικότητα σε σχέση με αυτές.



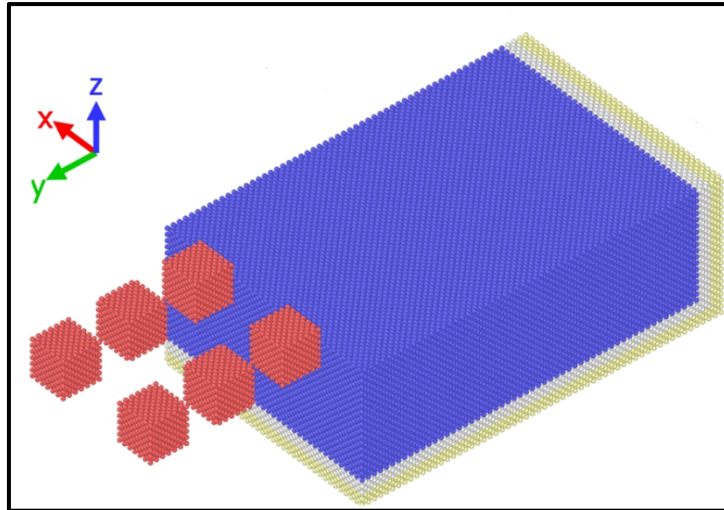
(α)

(β)

**Σχήμα 5.28.** Μεταβολή των ατόμων του TE που βρίσκονται στην αρχική δομή ανάλογα με το σχήμα και το μέγεθος του λειαντικού κόκκου.

## 5.6 Επίδραση της απόστασης μεταξύ των σειρών των κόκκων

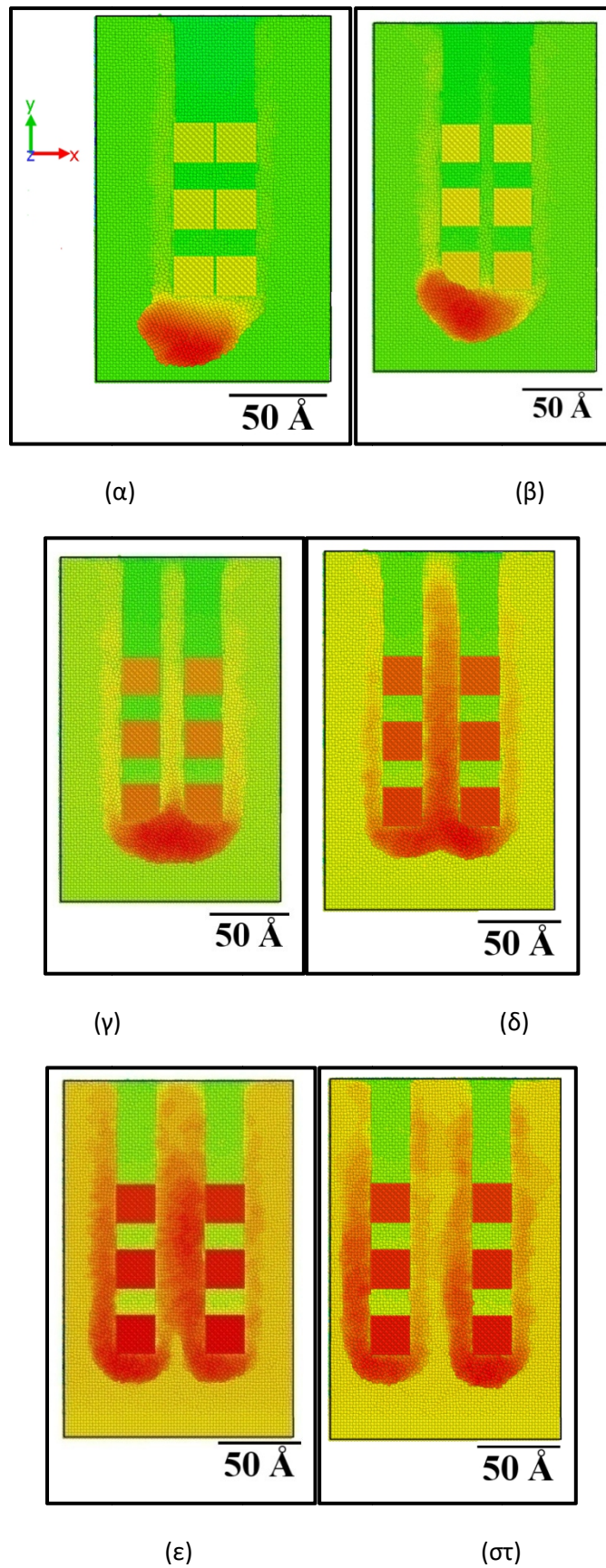
Όταν πραγματοποιήθηκαν οι προσομοιώσεις με δύο σειρές λειαντικών κόκκων και έγινε η σύγκριση με την περίπτωση χρήσης μίας σειράς λειαντικών κόκκων, υιοθετήθηκε μια συγκεκριμένη απόσταση μεταξύ των δύο σειρών λειαντικών κόκκων, χωρίς να σχολιασθεί η επιλογή της. Παρόλα αυτά, η απόσταση μεταξύ των δύο σειρών λειαντικών κόκκων αποτελεί σαφώς μια παράμετρο που μπορεί να επηρεάσει το αποτέλεσμα, κυρίως από την άποψη της ποιότητας επιφανείας. Το ίδιο συμβαίνει και στην πράξη στους λειαντικούς τροχούς καθώς ανάλογα με την πυκνότητά τους, οι αποστάσεις μεταξύ των κόκκων διαφέρουν κάτι που επηρεάζει σαφώς τα αποτελέσματα της κατεργασίας. Έτσι, στην παρούσα υποενοότητα θα μελετηθεί εκτενώς η επίδραση της απόστασης των κόκκων, λαμβάνοντας υπόψη τις αποστάσεις από 1α έως 11α. Σε όλες τις περιπτώσεις το βάθος κοπής είναι 3α, κάθε λειαντικός κόκκος που βρίσκεται σε άλλη γραμμή έχει βάθος προεξοχής 1α λιγότερο σε σχέση με τον προηγούμενο και η ταχύτητα πρόωσης είναι 100 m/s. Σε αυτή την υποενοότητα χρησιμοποιήθηκαν τρεις σειρές ατόμων προκειμένου να είναι όσο το δυνατόν πιο γενικό το αποτέλεσμα. Το μοντέλο της παρούσας υποενοότητας παρουσιάζεται στο σχήμα 5.29.



**Σχήμα 5.29.** Μοντέλο για την μελέτη της επίδρασης της απόστασης των δύο σειρών κόκκων.

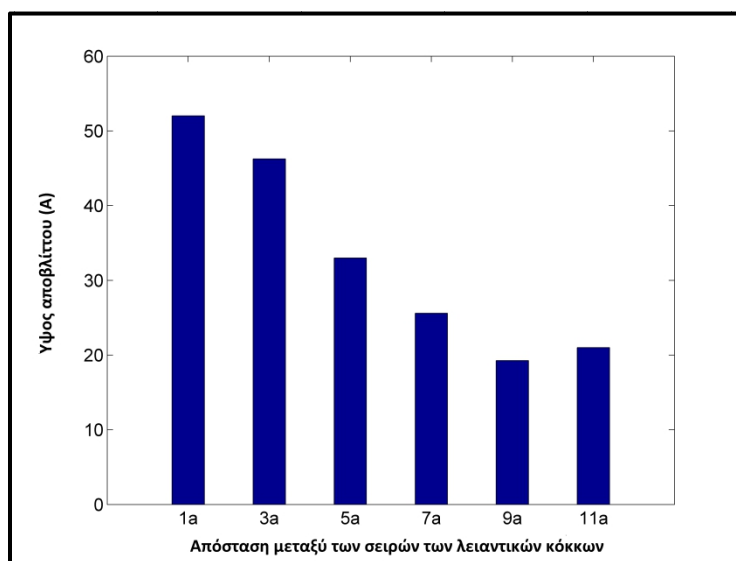
Αρχικά, θα αναλυθεί η διαφοροποίηση της τοπογραφίας της επιφάνειας του TE στις διάφορες περιπτώσεις που μελετήθηκαν. Στο σχήμα 5.30 απεικονίζεται σε κάτοψη το TE κατά το τελευταίο χρονικό βήμα για διάφορες περιπτώσεις. Από τις διαφορές εικόνες γίνεται εμφανές ότι υπάρχουν σημαντικές διαφορές όταν αλλάζει η απόσταση μεταξύ των δύο σειρών των λειαντικών κόκκων. Όταν η απόσταση είναι πολύ μικρή, τα άτομα της εξωτερικής επιφάνειας των κόκκων βρίσκονται σε αποστάσεις που μπορούν να ασκούν σημαντικές δυνάμεις σε άλλα άτομα, όπως αυτά που βρίσκονται ανάμεσα στις δύο σειρές κατά τη διαδρομή που διανύουν οι κόκκοι. Έτσι λόγω των ισχυρών επιδράσεων δεν είναι δυνατόν να μείνουν άτομα στο χώρο ενδιάμεσα των δύο σειρών λειαντικών κόκκων και σχηματίζεται ένα μοναδικό αυλάκι, με πλάτος την απόσταση μεταξύ των ακραίων εξωτερικών επιφανειών των κόκκων της ίδιας γραμμής καθώς και κοινό απόβλιττο. Παράλληλα μια μικρή ποσότητα ατόμων εναποτίθεται στα άκρα του αυλακιού ως γρέζι (burr).

Καθώς όμως η απόσταση μεγαλώνει, η συνδυασμένη επίδραση των διπλανών κόκκων μειώνεται, με αποτέλεσμα να παραμένει μια μικρή ποσότητα ατόμων στο κενό χώρο μεταξύ των δύο σειρών ατόμων, η οποία σταδιακά από την απόσταση 5α και άνω αυξάνεται και αρχίζει να αποτελεί ουσιαστικά το τοίχωμα μεταξύ δύο αυλακιών. Επομένως, δημιουργούνται δύο ξεχωριστά αυλάκια και το ύψος του ενδιάμεσου τοιχώματος γίνεται σιγά-σιγά ίσο με αυτό των πλαϊνών τοιχωμάτων των αυλακιών. Έως την απόσταση 7α όμως το απόβλιττο είναι κοινό και διαχωρίζεται ξεκάθαρα σε μεγαλύτερες αποστάσεις. Από την απόσταση 7α και πάνω επίσης υπάρχει υλικό που εναποτίθεται στο ενδιάμεσο τοίχωμα από το υλικό που αφαιρέθηκε από τα αυλάκια, όπως φαίνεται από το ότι το ύψος του ενδιάμεσου τοιχώματος είναι μεγαλύτερο από αυτό του TE που δεν έχει κατεργαστεί. Τέλος, για αποστάσεις από 11α και πάνω το υλικό που εναποτίθεται στην άνω επιφάνεια των πλευρικών τοιχωμάτων δεν είναι κοινό πια και για τα δύο αυλάκια.



**Σχήμα 5.30.** Κάτοψη του TE μετά την κατεργασία για αποστάσεις μεταξύ των δύο σειρών κόκκων ίσες με: (α)  $1a$ , (β)  $3a$ , (γ)  $5a$ , (δ)  $7a$ , (ε)  $9a$ , (στ)  $11a$ .

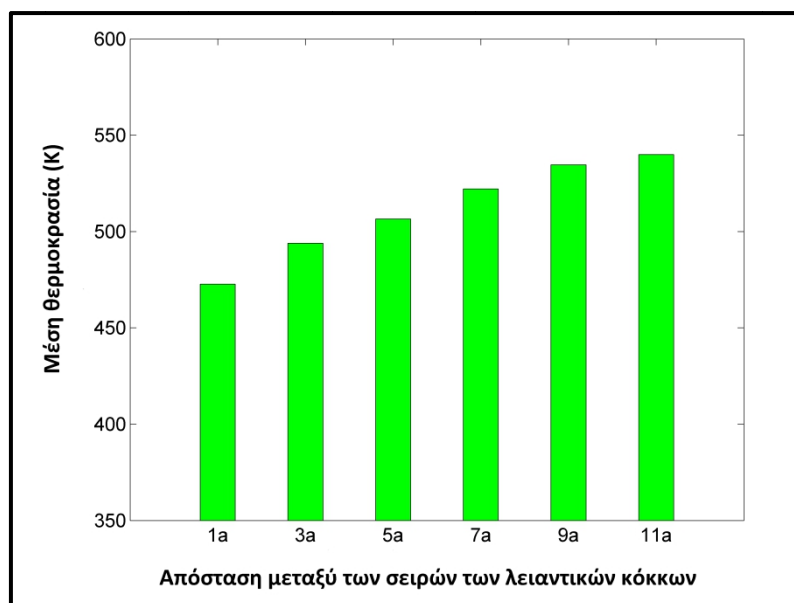
Προκειμένου να επιβεβαιωθούν οι παρατηρήσεις μέσω ποσοτικών συγκρίσεων, στο σχήμα 5.31 παρουσιάζονται οι τιμές του μέγιστου ύψους του αποβλίττου σε κάθε περίπτωση. Οι τιμές του ύψους του αποβλίττου επιβεβαιώνουν τις τάσεις που παρατηρήθηκαν, καθώς αρχικά το ύψος του αποβλίττου είναι μεγάλο επειδή συγκεντρώνει όλο σχεδόν το υλικό που αποβάλλεται καθώς δημιουργείται το αυλάκι και στη συνέχεια μειώνεται διαρκώς έως την τιμή 9α στην οποία έχουν ξεκινήσει να δημιουργούνται ξεχωριστά αυλάκια, αλλά όμως εναποτίθενται αρκετά άτομα στα πλαϊνά τοιχώματα ενώ στην περίπτωση με απόσταση 11α δημιουργούνται ξεχωριστά αυλάκια και το περισσότερο υλικό συσσωρεύεται στο απόβλιττο, με αποτέλεσμα να αυξάνεται ξανά το ύψος του αποβλίττου.



**Σχήμα 5.31.** Μεταβολή του μέγιστου ύψους αποβλίττου ανάλογα με την απόσταση μεταξύ των σειρών των λειαντικών κόκκων.

Τέλος, οι διαφορετικές συνθήκες στο TE ανάλογα με την απόσταση των σειρών των κόκκων μπορούν να συσχετιστούν και με διακυμάνσεις της μέσης θερμοκρασίας, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.32. Όσο το διάκενο αυξάνεται, η μέση θερμοκρασία αυξάνεται έως ένα όριο. Όπως έχει προαναφερθεί, η αύξηση της θερμοκρασίας σχετίζεται με αυξημένη ενέργεια που εισάγεται στο TE μέσω της αλληλεπίδρασής του με τους λειαντικούς κόκκους. Επομένως, μέχρι την περίπτωση με απόσταση 7α όπου ακόμα δεν έχουν σχηματιστεί ξεχωριστά απόβλιττα για τα δύο αυλάκια, η θερμοκρασία αυξάνει και μετά σταθεροποιείται καθώς και η επιφάνεια που επηρεάζεται είναι πλέον σταθερή.





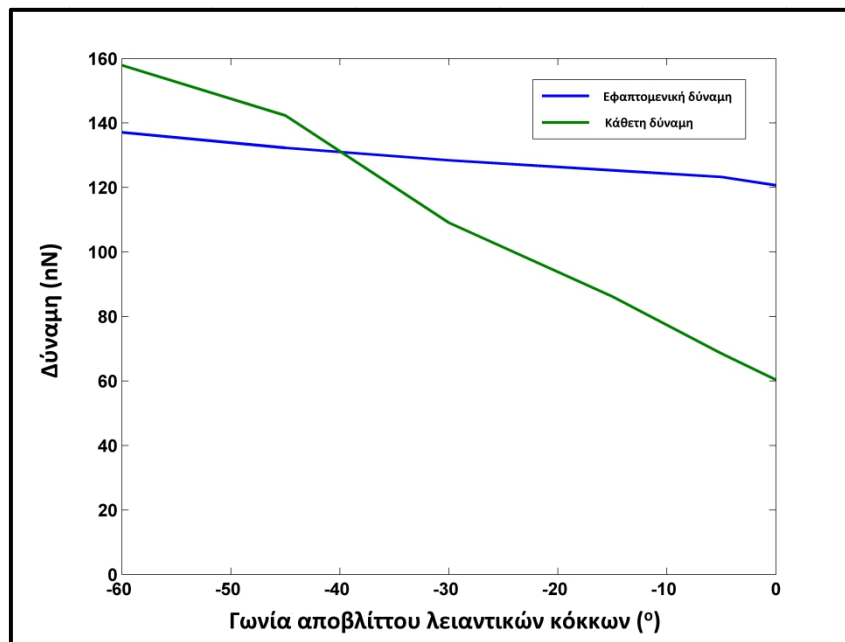
**Σχήμα 5.32.** Διακύμανση της μέσης θερμοκρασίας για διαφορετικές αποστάσεις μεταξύ των σειρών των κόκκων.

Οι παρατηρήσεις που έγιναν σχετικά με την απόσταση είναι χρήσιμες για την απόφαση της επιλογής μιας συγκεκριμένης στρατηγικής λείανσης στην εγκάρσια κατεύθυνση. Μέχρι στιγμής είχε διερευνηθεί η επίδραση του αριθμού των πάσων στην κατακόρυφη διεύθυνση αλλά γίνεται εμφανές ότι για την πλήρη κατεργασία του ΤΕ πρέπει να σχεδιαστεί κατάλληλα και η πορεία του τροχού στην εγκάρσια κατεύθυνση, καθώς η χρήση τροχών με μεγαλύτερη πυκνότητα κόκκων οδηγεί στη δημιουργία πιο ομοιόμορφης επιφάνειας, με λιγότερη εναπόθεση στα πλαϊνά τοιχώματα ενώ από ένα σημείο και μετά για μεγαλύτερες αποστάσεις μεταξύ των αποστάσεων των κόκκων, παραμένει στο χώρο μεταξύ τους υλικό που πρέπει να αποβληθεί σε επόμενο πάσο κατά την εγκάρσια διεύθυνση.

### 5.7 Επίδραση της γωνίας αποβλίττου των λειαντικών κόκκων

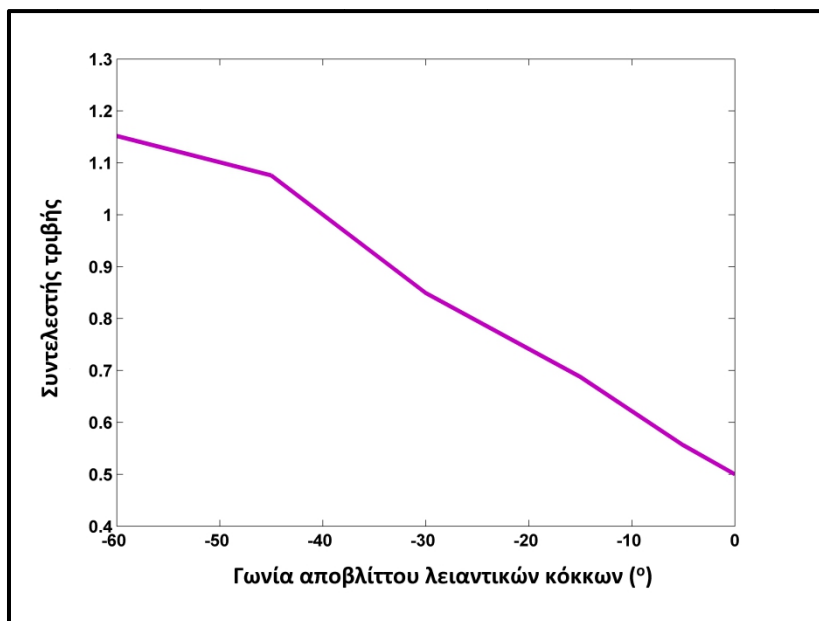
Έχει προαναφερθεί τόσο στη θεωρία, όσο και στο προηγούμενο κεφάλαιο, ότι οι λειαντικοί κόκκοι έχουν προσομοιαστεί από διάφορους ερευνητές ως μικροσκοπικά κοπτικά εργαλεία με αρνητική γωνία αποβλίττου. Στην πράξη, η γωνία αποβλίττου των λειαντικών κόκκων δε μπορεί να προσδιοριστεί άμεσα, αλλά γενικά είναι αποδεκτό από τα πειραματικά αποτελέσματα ότι αντιστοιχεί σε αρνητικές γωνίες. Στις υπόλοιπες υποενοότητες του παρόντος κεφαλαίου, για λόγους απλοποίησης χρησιμοποιήθηκαν κόκκοι με γωνία αποβλίττου  $0^\circ$ , διότι σε κάθε ενότητα δινόταν έμφαση σε ένα διαφορετικό χαρακτηριστικό του μοντέλου κάθε φορά. Στην παρούσα υποενοότητα όμως θα πραγματοποιηθεί μια εκτενής διερεύνηση της επίδρασης της γωνίας αποβλίττου του λειαντικού κόκκου με χρήση του μοντέλου με τις δύο σειρές κόκκων, με τρεις κόκκους η καθεμία. Η γωνία αποβλίττου του λειαντικού κόκκου κυμαίνεται από  $-5^\circ$  έως  $-60^\circ$ , ενώ το βάθος κοπής και η ταχύτητα πρόωσης έχουν ίδιες τιμές με αυτές στην υποενοότητα 5.6 και κάθε κόκκος έχει την ίδια γωνία αποβλίττου με τους άλλους. Η επιλογή του εύρους των γωνιών αποβλίττου είναι σε συμφωνία με τη βιβλιογραφία [169, 189, 272, 406, 412, 413], καθώς έχει παρατηρηθεί ότι το άνω όριο για τη δημιουργία αποβλίττου είναι σε ορισμένες περιπτώσεις οι  $-60^\circ$ .

Όσον αφορά τις δυνάμεις της κατεργασίας, όπως απεικονίζονται στο σχήμα 5.33 παρουσιάζουν την αναμενόμενη τάση που παρατηρήθηκε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, δηλαδή ξεκάθαρη αύξηση καθώς η γωνία αποβλίττου γίνεται ολοένα και μεγαλύτερη με αρνητικό πρόσημο. Παρόλα αυτά η κατακόρυφη δύναμη, όπως είχε παρατηρηθεί και στην υποενότητα 4.4, αυξάνεται εντονότερα και περίπου στις  $-40^\circ$  γίνεται μεγαλύτερη της οριζόντιας, με τη διαφορά τους να διευρύνεται ως τις  $-60^\circ$ . Συνολικά η κατακόρυφη δύναμη αυξάνεται 2.62 φορές, ενώ η οριζόντια μόλις 1.14, αποτέλεσμα που έχει παρατηρηθεί και σε άλλες εργασίες σχετικά με τη νανοκοπή. Έτσι, η νανο-λείανση με μεγαλύτερη αρνητική γωνία αποβλίττου, οδηγεί ξεκάθαρα σε μεγαλύτερες δυνάμεις και επομένως μεγαλύτερη καταναλισκόμενη ισχύ για ίδιες συνθήκες κατεργασίας.



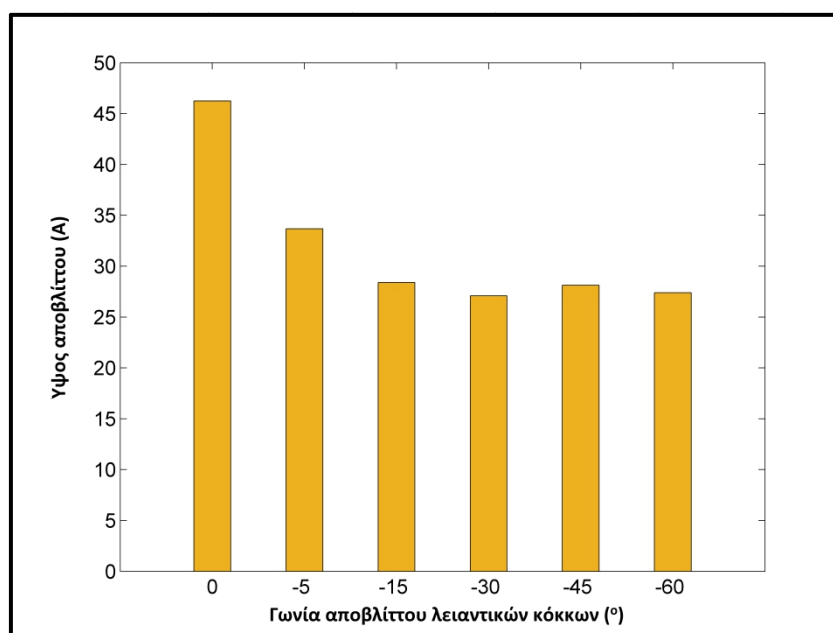
**Σχήμα 5.33.** Διακύμανση της εφαπτομενικής και κάθετης δύναμης με τη γωνία αποβλίττου του λειαντικού κόκκου.

Με βάση τις παρατηρήσεις σχετικά με τις τάσεις των δυνάμεων λείανσης, η διακύμανση των τιμών του συντελεστή τριβής όπως παρουσιάζεται στο σχήμα 5.34 είναι απολύτως αιτιολογημένη. Η τιμή του συντελεστή τριβής αυξάνεται διαρκώς με την αύξηση της γωνίας αποβλίττου και περίπου πάνω από τις  $-40^\circ$  ξεπερνάει τη μονάδα, ένα αποτέλεσμα που έχει παρατηρηθεί από διάφορους ερευνητές στη σχετική βιβλιογραφία [159, 272, 406, 414], καταλήγοντας στην τιμή 1.15 για γωνία  $-60^\circ$ . Στη βιβλιογραφία έχει αναφερθεί και τιμή άνω του 2, αλλά όχι για παρόμοια κατεργασία και η οριακή γωνία στην οποία ο συντελεστής τριβής υπερβαίνει τη μονάδα είναι μεταξύ  $-30^\circ$  και  $-45^\circ$  στις περισσότερες μελέτες [169, 406, 409, 414].



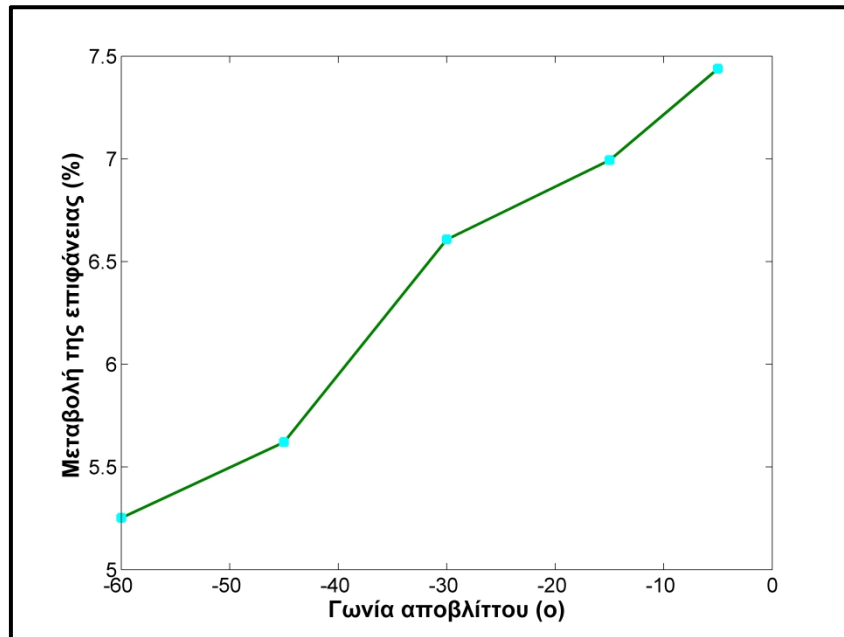
**Σχήμα 5.34.** Διακύμανση του συντελεστή τριβής με τη γωνία αποβλίττου των λειαντικών κόκκων.

Σχετικά με τη μορφή του αποβλίττου που αναπτύσσεται στις διάφορες περιπτώσεις νανο-λειάνσης, οι διαφορές αναμένεται να είναι σημαντικές, λόγω της αυξημένης συμπίεσης του αποβλίττου. Προκειμένου να υπάρχει μια ποσοτική σύγκριση, μετρήθηκε το ύψος του αποβλίττου σε κάθε περίπτωση και παρουσιάζεται στο σχήμα 5.35. Από τα αποτελέσματα του σχήματος 5.35 φαίνεται ξεκάθαρα ότι το μέγιστο ύψος του αποβλίττου μειώνεται συνεχώς έως τις  $-30^\circ$  και μετά μένει πρακτικά σταθερό. Αυτό συμβαίνει διότι οι συνθήκες όσο μεγαλώνει η γωνία γίνονται όλο και πιο δυσμενείς με ολοένα και μεγαλύτερη δύναμη να συμπιέζει το απόβλιττο και έτσι να του μειώνει τον όγκο.



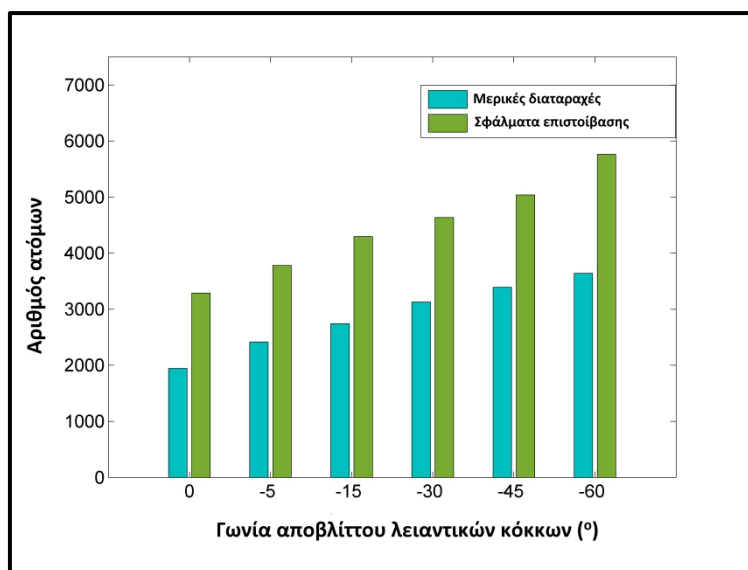
**Σχήμα 5.35.** Διακύμανση του μέγιστου ύψους αποβλίττου σε σχέση με τη γωνία αποβλίττου των λειαντικών κόκκων.

Επιπλέον, προκειμένου να γίνει καλύτερα εμφανής η μεταβολή που προκύπτει στην επιφάνεια του TE, μελετάται το εμβαδόν της επιφάνειας που προκύπτει μετά την κατεργασία. Στο σχήμα 5.36, παρουσιάζεται το ποσοστό μεταβολής του εμβαδού της επιφάνειας σε σχέση με τη γωνία αποβλίττου των λειαντικών κόκκων. Από το διάγραμμα αυτό φαίνεται ξεκάθαρα η μείωση του εμβαδού της εξωτερικής επιφάνειας του TE καθώς η γωνία αποβλίττου μειώνεται και αυξάνεται σημαντικά η συμπίεση του αποβλίττου οπότε αυτό αποκτά μικρότερο μέγεθος σύμφωνα με τα αποτελέσματα του σχήματος 5.36.



**Σχήμα 5.36.** Διακύμανση του εμβαδού της επιφάνειας σε σχέση με τη γωνία αποβλίττου.

Τέλος, θα εξεταστεί η μεταβολή της δομής του υλικού υπό διαφορετικές γωνίες αποβλίττου. Όπως φαίνεται στο σχήμα 5.37 από την ανάλυση του CSP, η αύξηση της γωνίας αποβλίττου του λειαντικού κόκκου οδηγεί σταδιακά στην αύξηση των ατόμων που ανήκουν σε σφάλματα επιστοιβάσεως ή μερικές διαταραχές, υποδεικνύοντας ότι σε αυξημένες γωνίες αποβλίττου ενισχύεται η πλαστική παραμόρφωση και εντείνονται οι μεταβολές της δομής του TE. Η κατάσταση αυτή σχετίζεται με την αύξηση της συμπίεσης του υλικού του TE που προκύπτει καθώς η γωνία αποβλίττου του λειαντικού κόκκου είναι μεγαλύτερη, διότι σε αυτές τις περιπτώσεις μειώνεται ο όγκος του υλικού που συγκεντρώνεται στο απόβλιττο, υλικό εγκλωβίζεται κάτω από τους κόκκους και οδηγεί σε μεγαλύτερες μεταβολές στη δομή του TE. Παρόμοια συμπεριφορά στις νανοκοπές παρατηρήθηκε από τους Dai et al. [189] και Lai et al. [188] οι οποίοι επίσης διαπίστωσαν αύξηση της παραμόρφωσης και των διαταραχών για μεγαλύτερη γωνία αποβλίττου.



**Σχήμα 5.37.** Μεταβολή των ατόμων που ανήκουν σε μερικές διαταραχές και σφάλματα επιστοίβασης για διάφορες γωνίες αποβλήτου των κόκκων.

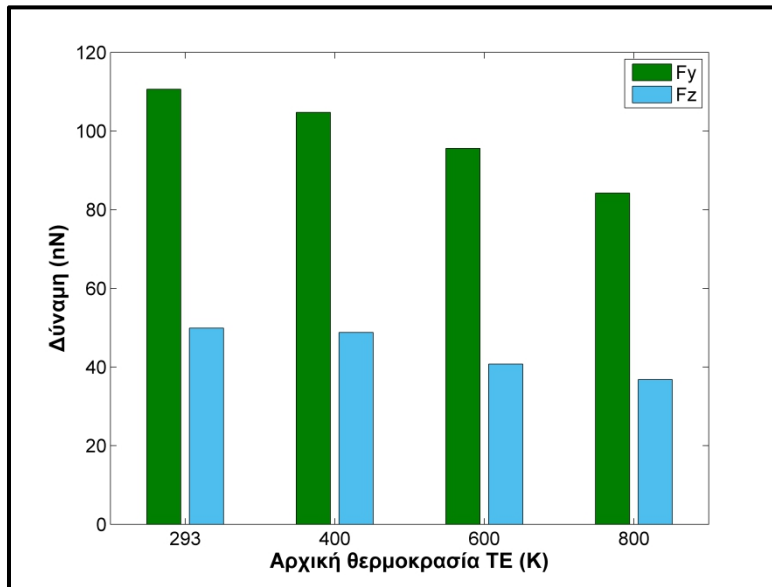
Επομένως, μετά την ανάλυση αναδείχθηκαν ξεκάθαρα τα χαρακτηριστικά της νανο-λείανσης με αρνητικές γωνίες αποβλήτου των κόκκων που οδηγούν σε σταδιακή μείωση του όγκου του αποβλήτου και ραγδαία αύξηση της κάθετης δύναμης, τα οποία είναι χρήσιμα για να κατανοηθεί ο μηχανισμός αποβολής υλικού και σε μεγαλύτερες κλίμακες.

### 5.8 Επίδραση της θερμοκρασίας προθέρμανσης του TE

Άλλος ένας παράγοντας που αξίζει να διερευνηθεί είναι η χρήση προθέρμανσης του TE πριν τη διεξαγωγή της κατεργασίας νανο-λείανσης. Όπως έχει αναφερθεί στη βιβλιογραφική ανασκόπηση του κεφαλαίου 3, έχουν πραγματοποιηθεί τα τελευταία χρόνια ορισμένες μελέτες σχετικές με την επίδραση που έχει η θερμοκρασία του TE, προκειμένου να βελτιωθούν οι συνθήκες κατεργασίας, ειδικά στα ψαθυρά υλικά στα οποία έχει παρατηρηθεί ότι ενισχύει την ολκιμότητά τους [225]. Επιπλέον, και στα μεταλλικά υλικά είναι σημαντική η επίδραση της θερμοκρασίας, διότι υπάρχει άμεση μεταβολή των μηχανικών ιδιοτήτων με τη θερμοκρασία και αναμένεται η μείωση της αντοχής του υλικού λόγω αυξημένης θερμοκρασίας να οδηγήσει σε πιο ευνοϊκές συνθήκες για την κοπή. Αξίζει να σημειωθεί ότι αυτό το αποτέλεσμα που είναι ιδιαίτερα σημαντικό για τα μονοκρυσταλλικά υλικά που παρουσιάζουν αυξημένη αντοχή. Επομένως, στην υποενότητα αυτή θα μελετηθεί η επίδραση τριών διαφορετικών θερμοκρασιών προθέρμανσης του TE και θα συγκριθεί με την περίπτωση που η κατεργασία διεξάγεται υπό συνθήκες περιβάλλοντος. Οι τρεις θερμοκρασίες είναι 400, 600 και 800 K, το βάθος κοπής είναι 2α, και η ταχύτητα 100 m/s, και χρησιμοποιείται το μοντέλο με τις δύο σειρές κόκκων με διάσταση 6α, όπως και στις περισσότερες υποενότητες.

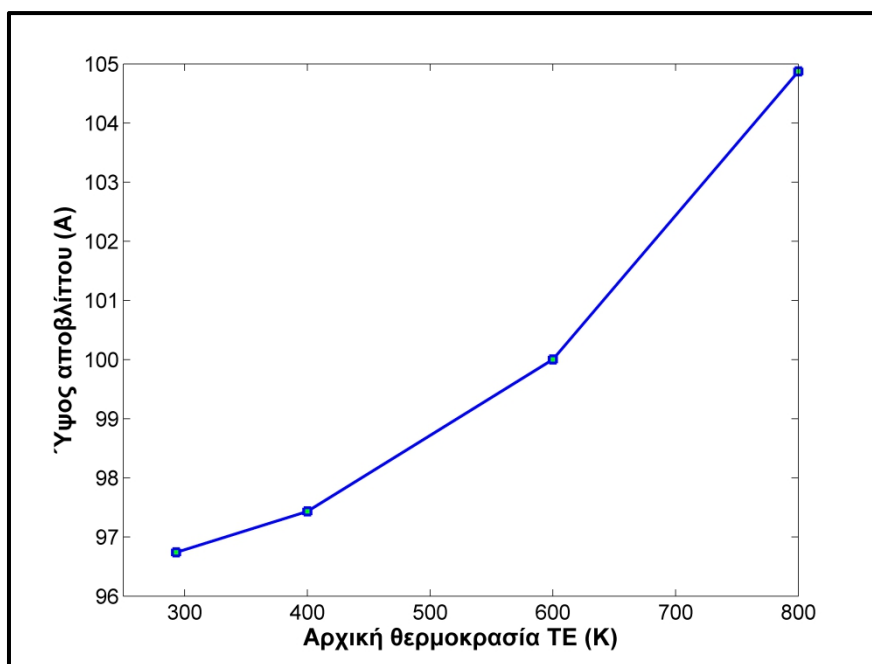
Αρχικά, στο σχήμα 5.38, παρουσιάζονται οι μέσες τιμές της δύναμης στους άξονες y και z σε σχέση με τη θερμοκρασία προθέρμανσης. Από τα αποτελέσματα αυτά φαίνεται ότι η θερμοκρασία προθέρμανσης έχει άμεση επίδραση στις δυνάμεις, οι οποίες όπως αναμενόταν μειώνονται σταδιακά. Αν και η μείωση δεν είναι ιδιαίτερα αισθητή στις

μικρότερες θερμοκρασίες προθέρμανσης η επίδραση είναι εμφανής και στις δύο συνιστώσες, με την  $F_z$  να επηρεάζεται λιγότερο από την  $F_y$ . Το ποσοστό μείωσης της δύναμης  $F_y$  είναι 5.29, 13.59 και 23.86% σε σχέση με την περίπτωση χωρίς προθέρμανση για τις τρεις διαφορετικές θερμοκρασίες, ενώ στις αντίστοιχες περιπτώσεις για την  $F_z$  τα ποσοστά μείωσης της δύναμης είναι 2.24%, 18.31% και 26.22%. Επομένως, φαίνεται ότι η προθέρμανση σε υψηλές θερμοκρασίες έχει σημαντική επίδραση και στις δύο συνιστώσες της δύναμης αλλά η επίδραση είναι πιο αναλογική για την  $F_y$  ενώ για την  $F_z$  είναι πιο εμφανής μετά τα 400 K.



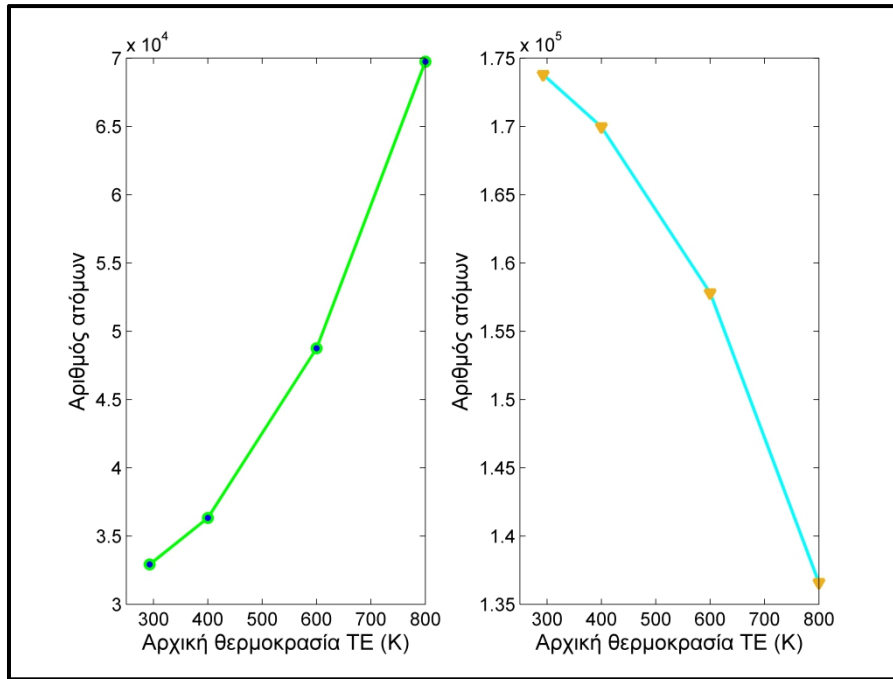
**Σχημα 5.38.** Διακύμανση των δυνάμεων σε περιπτώσεις με διαφορετική αρχική θερμοκρασία.

Στη συνέχεια, πραγματοποιείται σύγκριση του ύψους του αποβλίττου προκειμένου να διαπιστωθεί εάν επιδρά η θερμοκρασία προθέρμανσης σημαντικά στον όγκο του υλικού που αποβάλλεται. Στο σχήμα 5.39 απεικονίζεται το μέγιστο ύψος του αποβλίττου σε κάθε περίπτωση. Από τα αποτελέσματα αυτά γίνεται εμφανές ότι υπάρχει μια τάση αύξησης του ύψους του αποβλίττου καθώς αυξάνεται η θερμοκρασία προθέρμανσης, αλλά οι διαφορές στο ύψος του αποβλίττου είναι σχετικά μικρές έως τους 600 K και μετά αυξάνονται πιο σημαντικά.

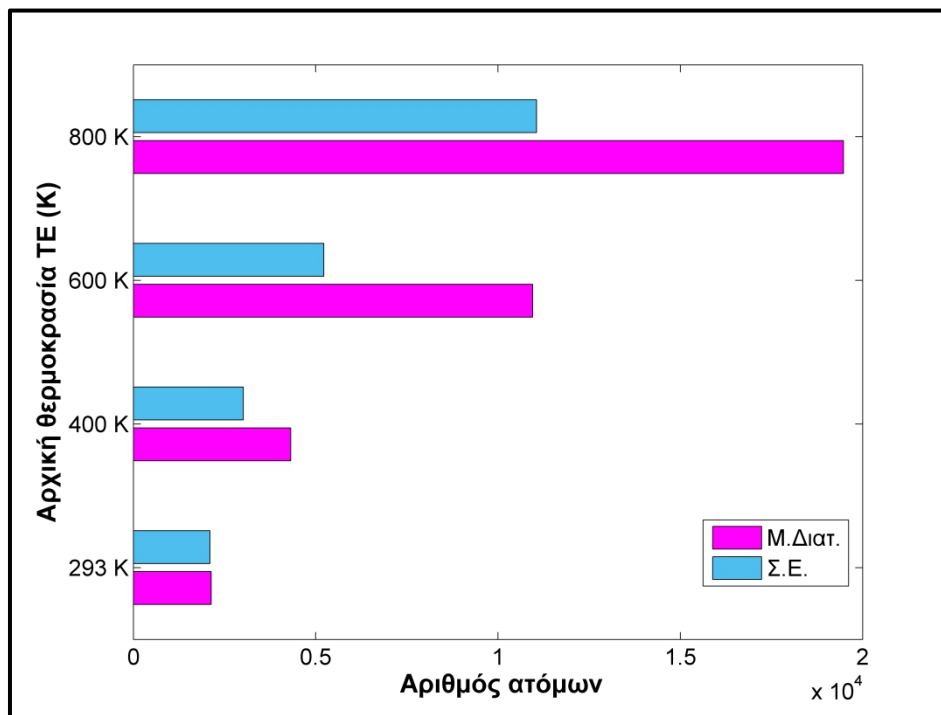


**Σχήμα 5.39.** Διακύμανση του μέγιστου ύψους αποβλίπτου σε περιπτώσεις με διαφορετική αρχική θερμοκρασία.

Τέλος, θα μελετηθεί η επίδραση της αρχικής θερμοκρασίας στην δομή του υλικού του TE με βάση τις τιμές του CNA και του CSP. Από τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στο σχήμα 5.40 διαπιστώνεται μια συνεχής αύξηση του αριθμού των ατόμων που ανήκουν σε «άγνωστη» δομή. Η αύξηση, σε αντίθεση με άλλες περιπτώσεις είναι αρκετά ραγδαία λόγω του ότι η αυξημένη αρχική θερμοκρασία οδηγεί σε αύξηση της αταξίας στο πλέγμα, με έντονες θερμικές ταλαντώσεις και διευκολύνει την παραμόρφωση του TE. Παρόμοια αποτελέσματα παρατηρούνται και από την ανάλυση του CSP. Από τα αποτελέσματα του σχήματος 5.41 γίνεται εμφανές ότι υπάρχει μια ραγδαία αύξηση στον αριθμό των ατόμων που βρίσκονται σε μερικές διαταραχές ή σφάλματα επιστοιβάσης για θερμοκρασίες προθέρμανσης άνω των 400 K. Αυτά τα αποτελέσματα επιβεβαιώνουν την σημαντική διευκόλυνση της πλαστικής παραμόρφωσης στο TE και αιτιολογούν τη μείωση των δυνάμεων που παρατηρείται τελικά γιατί η αντίσταση του υλικού στην κοπή γίνεται μικρότερη. Ουσιαστικά φαίνεται ότι για θερμοκρασίες ανώτερες των 400 K ο μηχανισμός του μαλακώματος του υλικού του TE (thermal softening) υπερισχύει του ανταγωνιστικού μηχανισμού εργοσκλήρυνσης και επηρεάζει αισθητά την συμπεριφορά του υλικού.



**Σχήμα 5.40.** Μεταβολή του αριθμού των ατόμων που ανήκουν σε (α) «άγνωστη δομή», (β) δομή FCC, σε συνάρτηση με την αρχική θερμοκρασία του TE.



**Σχήμα 5.41.** Μεταβολή των ατόμων που ανήκουν σε μερικές διαταραχές και σφάλματα επιστοιβασής σε συνάρτηση με την αρχική θερμοκρασία του TE.

Με βάση την ανάλυση των αποτελεσμάτων διαπιστώνεται τελικά ότι η προθέρμανση οδηγεί σε μείωση των δυνάμεων, μικρή διαφοροποίηση του αποβλίττου αλλά και σημαντική αύξηση της αταξίας στο TE. Αυτές οι παρατηρήσεις οδηγούν στο συμπέρασμα ότι αν και είναι αποτελεσματική η προθέρμανση του TE, δεν είναι ιδιαίτερα αποδοτική και



πιθανότατα ενδείκνυται περισσότερο κάποια άλλη μέθοδος, όπως η υποβοήθηση με χρήση δέσμης laser που έχει πιο «τοπικό» αποτέλεσμα, προκειμένου να διευκολύνεται η κατεργασία αλλά να μην επηρεάζονται περιοχές του TE που δεν κατεργάζονται. Επιπλέον, για να επιλεγεί η κατάλληλη μέθοδος πρέπει να γίνει αξιολόγηση του αποτελέσματος και σε σχέση με το ποσό της ενέργειας που προσδίδεται σε κάθε περίπτωση στο δοκίμιο.

Παρόμοια αποτελέσματα έχουν παρατηρηθεί και σε ορισμένες μελέτες που έχουν παρουσιαστεί στη σχετική βιβλιογραφία. Για παράδειγμα, έχει διαπιστωθεί ότι η αύξηση της θερμοκρασίας σε υλικά όπως το πυρίτιο και το αρσενίδιο του γαλλίου, οδηγεί σε μείωση των δυνάμεων και των τάσεων [415-417], αύξηση του συντελεστή τριβής και του ρυθμού αποβολής υλικού [416], αλλά από την άλλη οδηγεί σε μεταβολές της μικροδομής και αύξηση της παραμόρφωσης του TE [225, 416] καθώς και της ανισοτροπίας των δυνάμεων και της ειδικής ενέργειας κοπής [415]. Άλλο ένα ενδιαφέρον συμπέρασμα είναι ότι για το πυρίτιο και το αρσενίδιο του γαλλίου παρατηρήθηκε μια μείωση των δυνάμεων της κατεργασίας κατά περίπου 25% για θερμοκρασίες κοντά στο 80% της θερμοκρασίας τήξης, ενώ στην περίπτωση του μονοκρυσταλλικού χαλκού παρατηρήθηκε ότι μείωση των δυνάμεων λίγο κάτω από το 25% επιτυγχάνεται για θερμοκρασία προθέρμανσης ίση περίπου με το 60% της θερμοκρασίας τήξης.

### **5.9 Ανακεφαλαίωση 5ου κεφαλαίου**

Ολοκληρώνοντας τις διερευνήσεις που πραγματοποιήθηκαν στα πλαίσια του παρόντος κεφαλαίου, θεωρείται αναγκαίο να συνοψιστούν οι βασικότερες παρατηρήσεις και τα συμπεράσματα που εξήχθησαν στα πλαίσια αυτού του κεφαλαίου. Στο πέμπτο κεφάλαιο έγινε εκτενής μελέτη της κατεργασίας της νανο-λείανσης με χρήση μοντέλου ΜΔ με πολλαπλούς κόκκους και ρεαλιστική κίνηση του λειαντικού κόκκου. Στη σχετική βιβλιογραφία όπως αναπτύχθηκε στο κεφάλαιο 3, έχουν διεξαχθεί ελάχιστες μελέτες με περισσότερους του ενός κόκκους, ενώ η κίνηση είναι αποκλειστικά ευθύγραμμη όπως και στις περισσότερες περιπτώσεις γενικής νανοκοπής. Ωστόσο, καθώς στη λείανση το πάχος απαραμόρφωτου αποβλίττου είναι μεταβλητό, με αποτέλεσμα ανάλογα με το βάθος κοπής να υπάρχει η πιθανότητα εμφάνισης συνθηκών κοπής, άρωσης ή απλής επαφής σε διάφορα στάδια της επαφής κόκκου-TE όπως αναφέρθηκε στο δεύτερο κεφάλαιο, δεν είναι ακριβής η απλοποίηση της τροχιάς του κόκκου. Επομένως, με χρήση μοντέλου δύο λειαντικών κόκκων αρχικά πραγματοποιήθηκε διερεύνηση της επίδρασης του βάθους κοπής και του μεγέθους του κόκκου. Οι δυνάμεις αυξήθηκαν όπως αναμένεται για μεγαλύτερα βάθη κοπής ή μεγέθη κόκκων λόγω μεγαλύτερου εμβαδού της επιφάνειας επαφής, ιδίως η  $F_y$ , η οποία ήταν μεγαλύτερη σε μέτρο, με αποτέλεσμα ο συντελεστής τριβής να είναι μικρότερος της μονάδας και να μειώνεται με αύξηση του βάθους ή του μεγέθους κόκκου. Επιπλέον, η μέση θερμοκρασία του TE αυξάνεται ανάλογα υποδεικνύοντας την εντονότερη επαφή κόκκων-TE και τόσο το ύψος του αποβλίττου όσο και η μεταβολή της επιφάνειας του TE είναι μεγαλύτερες για μεγάλα βάθη και μεγέθη κόκκων. Τέλος, παρατηρήθηκε αισθητή μεταβολή στη δομή του TE όσο μεγαλώνει το βάθος κοπής και το μέγεθος κόκκου, ιδίως μεταξύ των μεγαλύτερων τιμών βάθους και μεγέθους κόκκου.

Στη συνέχεια αφού εξετάστηκε η χρήση επιπλέον σειράς λειαντικών κόκκων προκειμένου να είναι πιο ρεαλιστικό το μοντέλο, έγινε ανάλυση της επίδρασης διαφορετικών οριακών συνθηκών του μοντέλου. Διαπιστώθηκε ότι οι ΟΣ που χρησιμοποιούνται συνήθως δηλαδή περιοδικές συνθήκες στο επίπεδο yz όντως οδηγούν σε συμπεριφορά του μοντέλου ανάλογη με αυτή ενός μοντέλου μεγαλύτερου πλάτους ενώ η χρήση επιπλέον περιορισμών με οριακά άτομα δεν αλλάζει ιδιαίτερα τα αποτελέσματα σε αντίθεση με τη χρήση κομματιού με μεγαλύτερο μήκος. Αφού ολοκληρώθηκαν οι προκαταρκτικές διερευνήσεις σε σχέση με τα χαρακτηριστικά του μοντέλου, στη συνέχεια μελετήθηκαν επιπλέον θέματα σχετικά με τη νανο-λείανση όπως η επίδραση του σχήματος του λειαντικού κόκκου. Εκτός από το κυβικό σχήμα, έγιναν προσομοιώσεις με σφαιρικούς και οκταεδρικούς κόκκους για τους οποίους η διάμετρος ή η μεγαλύτερη διάσταση ήταν ίση με τη πλευρά του κυβικού κόκκου. Η σφαιρική γεωμετρία χρησιμοποιείται σε ορισμένες μελέτες και θα μπορούσε να αναπαραστήσει την κατάσταση όπου οι ακμές του κυβικού λειαντικού κόκκου έχουν αμβλυθεί ενώ η οκταεδρική γεωμετρία αποτελεί μια ακραία περίπτωση καθώς η επιφάνεια επαφής είναι ανάμεσα στις μικρότερες δυνατές για την ίδια διάμετρο με τον κυβικό κόκκο. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων έδειξαν ότι για μεγάλα βάθη ή μεγέθη κόκκων η συνισταμένη δύναμη στο μοντέλο με τον κυβικό και το σφαιρικό κόκκο έχουν ολόένα και πιο κοντινές τιμές παρότι στην πρώτη περίπτωση η οριζόντια συνιστώσα είναι αρκετά μεγαλύτερη της κάθετης και στην δεύτερη οι δύο συνιστώσες έχουν πιο κοντινές τιμές. Σε κάθε περίπτωση οι δυνάμεις του μοντέλου με την οκταεδρική γεωμετρία κόκκων είναι πολύ μικρότερες ενώ τόσο η μέση θερμοκρασία του TE όσο και οι μεταβολές που παρατηρούνται στη δομή του TE είναι εντονότερες σε κάθε περίπτωση για την κυβική γεωμετρία και ακολουθούν η σφαιρική και η οκταεδρική με εμφανείς διαφορές.

Η επόμενη σειρά προσομοιώσεων αφορούσε την επίδραση της απόστασης μεταξύ γειτονικών σειρών λειαντικών κόκκων, κυρίως στη μορφολογία της επιφάνειας του TE. Προκειμένου να είναι αρκετά γενική η ανάλυση, εξετάστηκε ένα μεγάλο εύρος αποστάσεων και διαπιστώθηκε ότι ανάλογα με την τιμή της απόστασης αλλάζει σημαντικά η μορφολογία και η ποιότητα της επιφάνειας. Πιο συγκεκριμένα, για μικρές αποστάσεις μεταξύ των σειρών των κόκκων, δημιουργείται ενιαίο αυλάκι και ενιαίο απόβλιττο, ενώ όσο η απόσταση μεγαλώνει δημιουργούνται δύο ξεχωριστά αυλάκια και τέλος δεν υπάρχει καμία επίδραση στο απόβλιττο που παράγεται από τις δύο σειρές κόκκων. Τα αποτελέσματα αυτά θεωρούνται σημαντικά προκειμένου να εκλέγεται η κατάλληλη στρατηγική λείανσης κατά την εγκάρσια κατεύθυνση. Επίσης, ένα άλλο σημαντικό θέμα κατά τη νανο-λείανση, η γωνία αποβλίττου του λειαντικού κόκκου μελετήθηκε αναλυτικά για ένα σημαντικό εύρος αρνητικών γωνιών αποβλίττου, από  $-5^\circ$  έως  $-60^\circ$ . Διαπιστώθηκε, όπως και στην περίπτωση της γενικής νανοκοπής του κεφαλαίου 4, ότι η μείωση της γωνίας αποβλίττου οδηγεί σε σημαντική αύξηση της δύναμης, ειδικά της κάθετης συνιστώσας, καθώς και αύξηση του συντελεστή τριβής σε τιμές άνω της μονάδας για γωνίες κοντά στις  $-45^\circ$ . Λόγω της αυξημένης συμπίεσης, το ύψος του αποβλίττου μειώνεται έως μια τιμή και μέχρι τις  $-60^\circ$  παρατηρήθηκε ότι ήταν δυνατό να σχηματιστεί, έστω και οριακά. Παρομοίως, η μεταβολή της επιφάνειας και της δομής του TE γίνεται ολόένα και πιο σημαντική με τη μείωση της γωνίας αποβλίττου.

Τέλος, μελετήθηκε μια ενδιαφέρουσα περίπτωση, αυτή της πραγματοποίησης της κατεργασίας υπό συνθήκες αυξημένης θερμοκρασίας, κάτι που δεν έχει μελετηθεί εκτενώς

ακόμα ιδιαίτερα για μεταλλικά μονοκρυσταλλικά υλικά. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων έδειξαν ότι η αύξηση της θερμοκρασίας προθέρμανσης, αν και οδηγεί σε μεγαλύτερη αταξία της δομής λόγω των έντονων θερμικών φαινομένων, είναι δυνατό να οδηγήσει σε εμφανή μείωση της δύναμης και να διευκολύνει σημαντικά την αποβολή υλικού από το ΤΕ.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

### Προσομοιώσεις νανο-φρεζαρίσματος

Το νανο-φρεζάρισμα αποτελεί μια λιγότερο συνηθισμένη νανοκατεργασία αποβολής υλικού. Όπως αναφέρθηκε σε προηγούμενο κεφάλαιο, είναι δυνατόν να πραγματοποιηθεί κατεργασία που να προσομοιάζει με το φρεζάρισμα σε επίπεδο νανοκλίμακας σε μικροσκόπιο AFM, η οποία μπορεί να ξεπεράσει ορισμένα προβλήματα που εμφανίζονται σε συμβατικές νανοκοπές. Πέραν της πειραματικής μελέτης της νανοκατεργασίας αυτής, την τελευταία δεκαετία έχουν πραγματοποιηθεί και ορισμένες προσομοιώσεις νανο-φρεζαρίσματος με εργαλείο που προσομοιάζει σε κονδύλι, διερευνώντας ορισμένες βασικές παραμέτρους της κατεργασίας κυρίως σε σχέση με τις δυνάμεις κοπής και την ποιότητα της επιφάνειας του TE. Οι μελέτες αυτές όμως, δεν καλύπτουν μεγάλο εύρος συνθηκών και δεν επαρκούν για την κατανόηση της κατεργασίας αυτής που διαφέρει σημαντικά από τη γενική νανοκοπή και τη νανολείανση λόγω της ιδιαίτερης κινηματικής της και ιδίως διότι αποτελεί μια διακοπτόμενη κατεργασία αποβολής υλικού.

Το επιπλέον χαρακτηριστικό που υπάρχει, σε σχέση με τις απλές προσομοιώσεις νανοκοπής είναι ότι γίνεται διάκριση μεταξύ της ταχύτητας κοπής και της ταχύτητας πρόωσης, διότι πλέον χρησιμοποιείται σε αυτές ρεαλιστικό 3D μοντέλο και όχι απλοποιημένο μοντέλο όπως αυτό της ορθογωνικής κοπής. Καθώς η κατεργασία αυτή παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, σε αυτό το κεφάλαιο θα παρουσιαστούν και θα μελετηθούν προσομοιώσεις νανο-φρεζαρίσματος υπό διάφορες συνθήκες, τόσο με χρήση εργαλείου που προσομοιάζει το κονδύλι, προκειμένου να διερευνηθούν σε μεγαλύτερο βάθος τα χαρακτηριστικά αυτής της κατεργασίας από διάφορες απόψεις, όσο και με χρήση εργαλείου που προσομοιάζει τη φρεζοκεφαλή, μια περίπτωση που δεν έχει μελετηθεί ακόμα στη βιβλιογραφία και αξίζει να πραγματοποιηθούν διάφορες μελέτες σε αυτή λόγω της πιθανής δυνατότητας πραγματοποίησής της.

#### 6.1 Προσομοιώσεις μετωπικού νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι

Το μετωπικό νανο-φρεζάρισμα με κονδύλι (nano-end-milling) είναι το μόνο είδος νανο-φρεζαρίσματος που έχει προσομοιωθεί μέχρι στιγμής στη βιβλιογραφία. Η συντριπτική πλειοψηφία των μελετών, όπως έχουν παρουσιαστεί στο κεφάλαιο 3, έχει πραγματοποιηθεί από μία ερευνητική ομάδα της οποίας βασικά μέλη είναι οι Cui, Zhang και Mgvaganam. Όπως έχει αναφερθεί στη θεωρία, οι προσομοιώσεις αυτές περιλάμβαναν κυρίως μετωπικό φρεζάρισμα με δύο ή τέσσερις κοπτικές ακμές υπό διάφορες συνθήκες κατεργασίας. Στις μελέτες αυτές είχε δοθεί κυρίως έμφαση στις δυνάμεις και την τοπογραφία του TE, χωρίς να μελετώνται ιδιαίτερα η θερμοκρασία κοπής και οι μεταβολές στη μικροδομή. Στην παρούσα υποενοότητα, θα μελετηθούν αναλυτικά περιπτώσεις υπό διαφορετικούς αριθμούς κοπτικών ακμών, διαφορετικά βάθη κοπής και διαφορετικές ταχύτητες κοπής.

Το ΚΕ μοντελοποιείται ως επίπεδα ατόμων με μικρό πάχος, όπως συμβαίνει και στη βιβλιογραφία και ο τρόπος μοντελοποίησης αυτός γενικεύτηκε έως και για 8 κοπτικές ακμές, όπως θα φανεί στη συνέχεια. Το κάθε άτομο του ΚΕ ακολουθεί, εκτός από τη μεταφορική ταχύτητα  $v_f$ , η οποία σε αυτό το κεφάλαιο είναι ίση με 200 m/s εκτός και αν αναφερθεί κάποια άλλη τιμή, και μια περιστροφική ταχύτητα η οποία ορίζεται σε σχέση με την απόστασή του από τον άξονα περιστροφής του ΚΕ (R). Άρα η ταχύτητα κάθε ατόμου του ΚΕ ορίζεται ως εξής:

$$v_x = -\omega R \sin(\omega t) \quad (6.1)$$

$$v_y = \omega R \cos(\omega t) - v_f \quad (6.2)$$

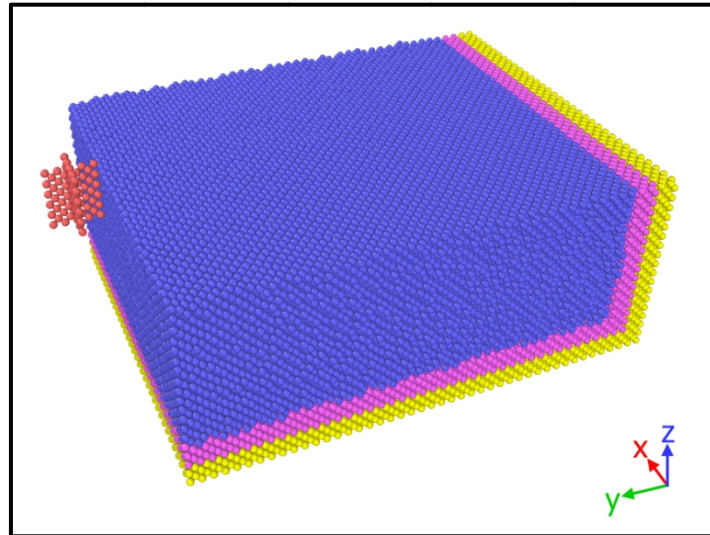
Το υλικό του ΤΕ αν δεν αναφερθεί κάτι διαφορετικό είναι μονοκρυσταλλικός χαλκός και το υλικό του ΚΕ είναι μονοκρυσταλλικό διαμάντι, όπως και στις περισσότερες προσομοιώσεις. Στο μοντέλο αυτό χρησιμοποιούνται οι ίδιες οριακές συνθήκες για το ΤΕ και ίδιες αριθμητικές παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν και στο κεφάλαιο των προσομοιώσεων της νανο-λείανσης.

### 6.1.1 Επίδραση της ταχύτητας περιστροφής

Η ταχύτητα περιστροφής του ΚΕ είναι ίσως η σημαντικότερη παράμετρος για τις κατεργασίες νανοκοπής, αλλά και για τις αντίστοιχες προσομοιώσεις. Η δυνατότητα περιστροφής του ΚΕ οδηγεί σε διακοπτόμενες συνθήκες κατεργασίας, καθώς η κοπτική ακμή δε βρίσκεται συνεχώς σε επαφή με το ΤΕ, κάτι που εξαρτάται και από τον αριθμό των κοπτικών ακμών. Βασική προϋπόθεση για να προσομοιάζει το μοντέλο την κατεργασία του νανο-φρεζαρίσματος είναι να γίνουν αρκετές περιστροφές του ΚΕ στο διάστημα που θα διανύσει. Αυτό συμβαίνει και στην πράξη στο μακροσκοπικό φρεζάρισμα διότι οι ταχύτητες πρόωσης βρίσκονται στην τάξη των δεκάδων έως το πολύ λίγων χιλιάδων mm/min ενώ οι ταχύτητες κοπής στην τάξη των δεκάδων έως εκατοντάδων m/min. Έτσι, η σχέση της γραμμικής ταχύτητας με την ταχύτητα πρόωσης είναι σημαντικό να διατηρείται σε συγκεκριμένα επίπεδα, δεδομένου ότι οι ταχύτητες πρόωσης που επιλέγονται στις προσομοιώσεις νανοκοπών είναι αρκετά μεγάλες, της τάξεως των εκατοντάδων m/s. Στην περίπτωση αυτή όπως θα φανεί στη συνέχεια, στην περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος με φρεζοκεφαλή προκύπτει μια σχετικά μεγάλη ταχύτητα περιστροφής η οποία είναι ικανή να οδηγήσει σε βίαιη εκτόξευση σωματιδίων του ΤΕ ή και αστάθεια της προσομοίωσης. Γι' αυτό το λόγο είναι απαραίτητο να προσδιοριστεί αρχικά μέσω των προσομοιώσεων ένα εύλογο εύρος ταχυτήτων περιστροφής που να ικανοποιεί όλες τις προαναφερθείσες προϋποθέσεις και στη συνέχεια να εντοπιστούν οι καταλληλότερες συνθήκες για κατεργασία με εργαλείο τύπου κονδυλιού στη νανοκλίμακα. Πρέπει να σημειωθεί ότι τόσο αυτή την υποενοότητα, όσο και στις υπόλοιπες, καθώς η διάμετρος του ΚΕ δεν αλλάζει, όταν γίνεται αναφορά σε ταχύτητα περιστροφής, οι παρατηρήσεις σχετικά με τη διακύμανσή της προφανώς ισχύουν και για την ταχύτητα κοπής και το αντίστροφο.

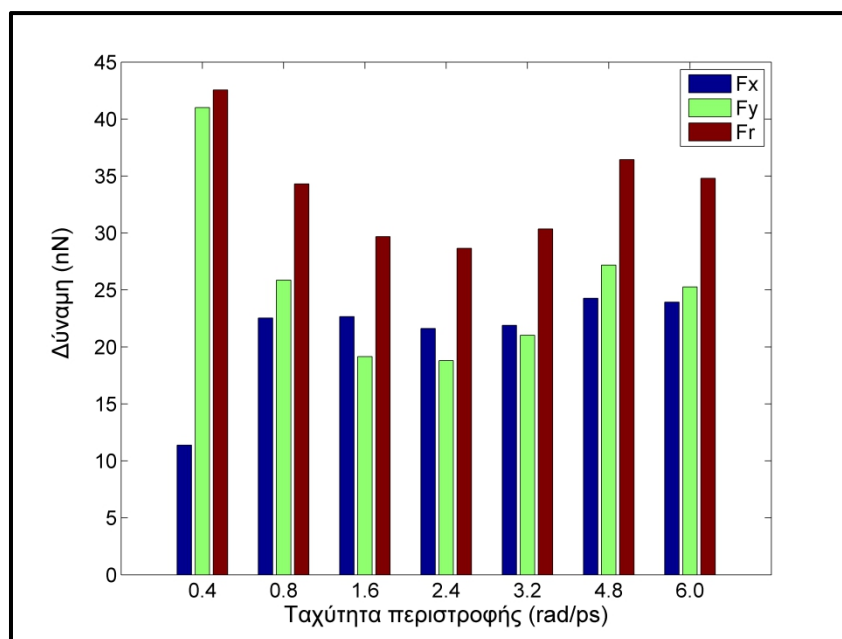
Προκειμένου να μελετηθεί σε βάθος η επίδραση της ταχύτητας κοπής που συνδέεται με την ταχύτητα περιστροφής του ΚΕ στο νανο-φρεζάρισμα, πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις σε ένα μεγάλο εύρος ταχυτήτων περιστροφής από 0.4 rad/ps έως 6.0 rad/ps. Στις προσομοιώσεις αυτές το βάθος ήταν σταθερό στα 2α, η πρόωση ήταν 200 m/s και

χρησιμοποιήθηκε κονδύλι με 4 κοπτικές ακμές και διάμετρο  $4\alpha_{KE}$  όπου  $\alpha_{KE} = 3.57 \text{ \AA}$ , άρα η διάμετρος ισούται με  $14.28 \text{ \AA}$ . Σε κάθε περίπτωση, δημιουργούνται αυλάκια στο μέσο του πλάτους του ΤΕ. Το μοντέλο παρουσιάζεται στο σχήμα 6.1. Οι διαστάσεις του μοντέλου είναι  $45 \times 34 \times 18 \text{ \AA}$  για όλες τις υποενότητες.



**Σχήμα 6.1.** Μοντέλο νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι.

Αρχικά θα συγκριθούν τα αποτελέσματα των συνιστωσών της δύναμης στους άξονες  $x$  και  $y$ . Ενδεικτικά στο σχήμα 6.2 παρουσιάζεται η διακύμανση των δυνάμεων αυτών. Αξίζει να αναφερθεί ότι στο νανο-φρεζάρισμα οι δυνάμεις, όπως αναμένεται λόγω της κινηματικής της κατεργασίας, παρουσιάζουν περιοδικότητα και το πρόσημό τους σχετίζεται με την στιγμιαία θέση κάθε κοπτικής ακμής. Στον άξονα  $x$  η δύναμη εμφανίζει το ίδιο πρόσημο σε όλη τη διάρκεια της κατεργασίας. Αυτό συμβαίνει λόγω της φοράς περιστροφής του ΚΕ και επειδή όπως και στο μακροσκοπικό φρεζάρισμα η αποβολή υλικού λαμβάνει χώρα μόνο όταν η κοπτική ακμή κινείται στην περιοχή που υπάρχει υλικό που δεν έχει ήδη κοπεί, με μέγιστο τόξο τις  $180^\circ$ , αν αναλυθεί το διάνυσμα της συνισταμένης δύναμης κάθε στιγμή η συνιστώσα στον  $x$  άξονα έχει φορά προς μια συγκεκριμένη διεύθυνση του άξονα  $x$ . Την ίδια στιγμή, το πρόσημο της συνιστώσας στον  $y$  άξονα αλλάζει κατά την περιστροφή του ΚΕ από αρνητικό σε θετικό. Τέλος, αξίζει να τονιστεί ότι η δύναμη για τον κατακόρυφο άξονα  $z$  δεν παρουσιάζεται σε καμία περίπτωση αυτού του κεφαλαίου, διότι δε συνεισφέρει στην αποβολή υλικού, δηλαδή δε παράγει έργο.



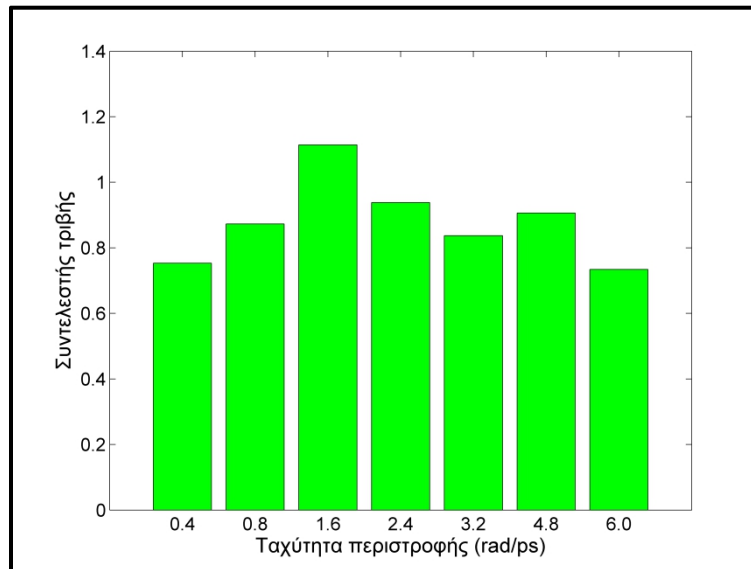
**Σχήμα 6.2.** Διακύμανση των δυνάμεων  $F_x$  και  $F_y$ , καθώς και της συνισταμένης δύναμης για διάφορες ταχύτητες κοπής.

Από το σχήμα 6.2, γίνεται αντιληπτό ότι όσον αφορά τη δύναμη  $F_y$  η οποία βρίσκεται στη διεύθυνση της πρόωσης, αρχικά λαμβάνει μεγάλη τιμή, η οποία σταδιακά μειώνεται, παραμένει σχεδόν σταθερή για ταχύτητες περιστροφής από 1.6 έως 3.2 rad/ps και τελικά αρχίζει να αυξάνεται ως ένα βαθμό για μεγαλύτερες ταχύτητες. Την ίδια στιγμή, η μέγιστη δύναμη  $F_x$  είναι αρχικά αρκετά χαμηλή και στη συνέχεια αυξάνεται σημαντικά και παραμένει πρακτικά σταθερή έως τα 3.2 rad/ps, όπου λαμβάνει μεγαλύτερες τιμές. Τέλος, η συνισταμένη δύναμη ακολουθεί σε μεγάλο βαθμό τις τάσεις της δύναμης  $F_y$  που είναι η μεγαλύτερη συνιστώσα.

Οι τάσεις που παρατηρούνται όσον αφορά τις δύο συνιστώσες της ταχύτητας σε σχέση με την ταχύτητα περιστροφής υποδηλώνουν ξεκάθαρα την ύπαρξη διάφορων περιοχών στο διάγραμμα της δύναμης, οι οποίες αντιστοιχούν σε διαφορετικές συνθήκες κατεργασίας. Αρχικά, η μεγάλη δύναμη στον άξονα  $y$  που είναι στην κατεύθυνση της πρόωσης αλλά και η μικρή δύναμη στον άξονα  $x$  υποδεικνύουν ότι λόγω της μικρής ταχύτητας περιστροφής το ΚΕ συμπεριφέρεται περισσότερο ως στερεό σώμα και όχι ως περιστρεφόμενο ΚΕ διότι όπως και στην περίπτωση των άλλων δύο ειδών κατεργασιών που μελετήθηκαν, η συνιστώσα της δύναμης στην κατεύθυνση της πρόωσης είναι ξεκάθαρα μεγάλη και η συνιστώσα στον άξονα  $x$  μικρή αλλά όχι μηδενική, διότι ακόμα και η σχετικά αργή περιστροφή του ΚΕ επηρεάζει το μέτρο της  $F_x$ . Τα χαρακτηριστικά μιας διακοπτόμενης κατεργασίας όπως το νανο-φρεζάρισμα αρχίζουν να εμφανίζονται σε μεγαλύτερες ταχύτητες περιστροφής, αρχίζοντας από τα 1.6 rad/ps, όπου πλέον η δύναμη  $F_x$  έχει σταθεροποιηθεί σε μεγαλύτερη τιμή από την αρχική και η δύναμη  $F_y$  αρχίζει να μειώνεται έως ότου σταθεροποιηθεί για ταχύτητα ίση με 3.2 rad/ps. Στη συνέχεια, εμφανίζεται ξανά διαφορετική τάση, με αύξηση και των δύο δυνάμεων μετά τα 3.2 rad/ps διότι πλέον η γραμμική ταχύτητα είναι αρκετά μεγάλη και όπως αναφέρθηκε στο κεφάλαιο 4, επικρατούν τα αδρανειακά φαινόμενα καθώς οι συνθήκες προσομοιάζουν στιγμιαία μια έντονη κρούση. Οι παρατηρήσεις αυτές

θα συνδυαστούν στη συνέχεια με παρατηρήσεις όσον αφορά τη διακύμανση άλλων μεγεθών, ώστε να διαπιστωθεί τελικά η ύπαρξη των διαφορετικών τάσεων σε σχέση με την ταχύτητα περιστροφής.

Εκτός από τις δυνάμεις, στη συνέχεια υπολογίστηκε και ο συντελεστής τριβής με το συμβατικό ορισμό ( $F_z/F_y$ ), λαμβάνοντας υπόψη τις μέγιστες τιμές των δυνάμεων. Από το σχήμα 6.3, φαίνεται ότι ο συντελεστής τριβής αυξάνεται μέχρι τα 1.6 rad/ps όπου, όπως προαναφέρθηκε θεωρείται το σημείο από το οποίο αρχίζει να εκδηλώνεται ξεκάθαρα ο διακοπτόμενος χαρακτήρας της κατεργασίας, ύστερα μειώνεται έως τα 3.2 rad/ps, αυξάνεται στην τελευταία περιοχή στην οποία εμφανίζονται φαινόμενα πιο έντονης κρούσης και στη συνέχεια παρατηρείται απότομη πτώση πιθανότατα λόγω ασταθών συνθηκών κατεργασίας στις εξαιρετικά υψηλές ταχύτητες περιστροφής.



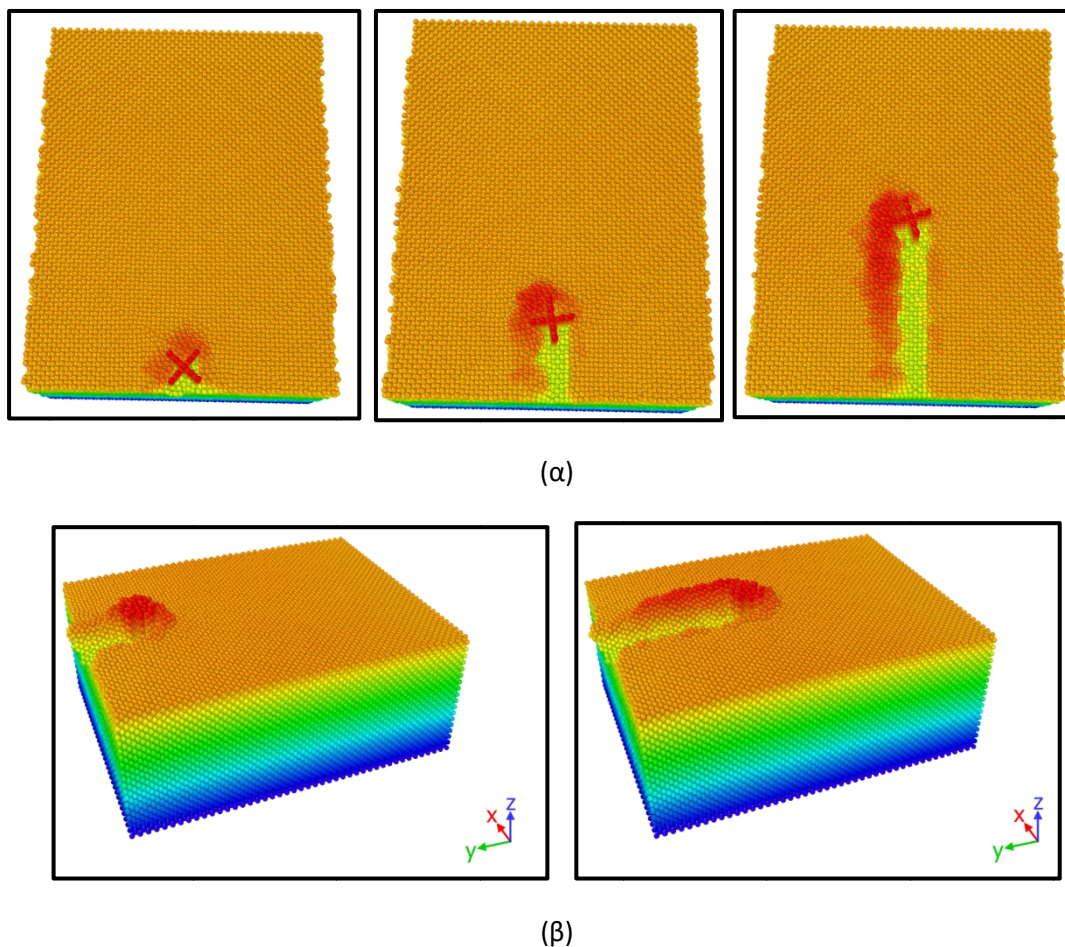
**Σχήμα 6.3.** Διακύμανση του συντελεστή τριβής σε σχέση με τις τιμές της ταχύτητας κοπής.

Πέραν της μελέτης της δύναμης και του συντελεστή τριβής, ιδιαίτερο ενδιαφέρον έχουν οι παρατηρήσεις σχετικά με την αποβολή υλικού και τη μεταβολή της μικροδομής του ΤΕ. Αρχικά, στο σχήμα 6.4 παρουσιάζονται διάφορες χαρακτηριστικές εικόνες από μια περίπτωση νανο-φρεζαρίσματος σε διάφορες χρονικές στιγμές. Ένα βασικό χαρακτηριστικό που έχουν οι κατεργασίες που περιλαμβάνουν περιστρεφόμενο ΚΕ, όπως το νανο-φρεζάρισμα είναι ότι σε ορισμένες περιπτώσεις, λόγω της φοράς περιστροφής, το απόβλιττο τείνει να συγκεντρώνεται προς την κατεύθυνση που του επιβάλλει το ΚΕ, δηλαδή όταν το ΚΕ περιστρέφεται ανθρωρολογικά όπως στην παρούσα περίπτωση, προς τα αριστερά (+X). Όπως φαίνεται στις εικόνες του σχήματος 6.4, η συμπεριφορά αυτή αρχίζει να γίνεται εμφανής από τα πρώτα στάδια της κατεργασίας.

Ένα άλλο χαρακτηριστικό που διαφοροποιεί το νανο-φρεζάρισμα από τη νανο-λείανση που παρουσιάστηκε στο προηγούμενο κεφάλαιο είναι ότι το υλικό που συγκεντρώνεται μπροστά από το ΚΕ είναι συγκρίσιμο έως εμφανώς λιγότερο σε σχέση με το υλικό που εναποτίθεται πάνω από τα πλευρικά τοιχώματα του αυλακιού που δημιουργείται και δημιουργεί μια δομή σαν το γρέζι (burr) των μακρο- και μικροκατεργασιών. Επομένως ένα ζητούμενο του νανο-φρεζαρίσματος θα πρέπει να είναι και η ελαχιστοποίηση του burr (top



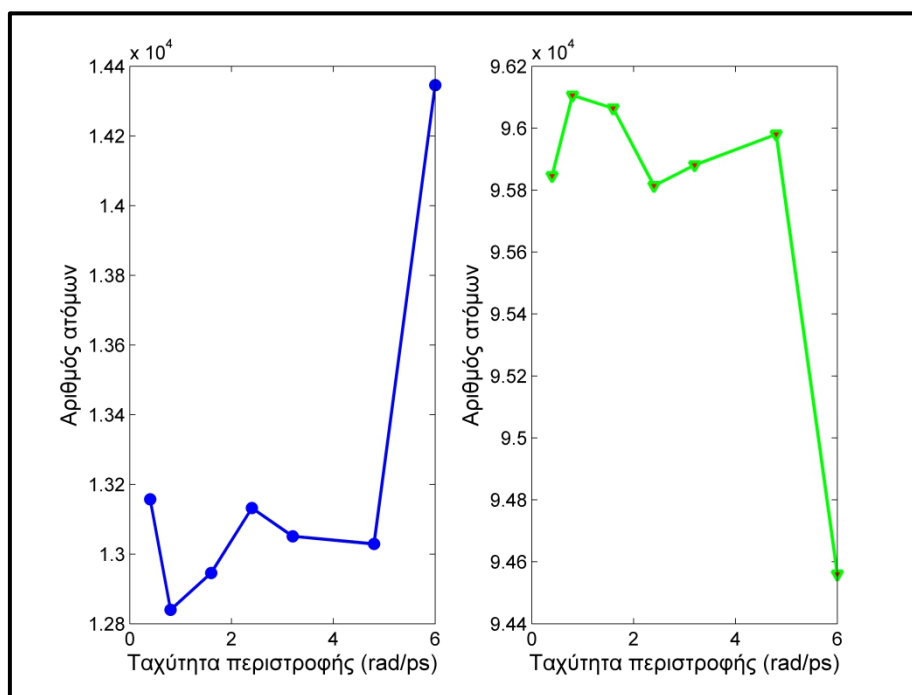
burr όπως παρουσιάστηκε στο κεφάλαιο 2). Ένα άλλο είδος burr που παρατηρήθηκε ήταν το entry side burr σε ελάχιστες περιπτώσεις, όπως σε αυτή με χρήση εργαλείου με οκτώ κοπτικές ακμές, η οποία απεικονίζεται στο σχήμα 6.4β. Στην περίπτωση αυτή δημιουργείται γρέζι στην πλευρά εισόδου του ΚΕ, στην αρχή του αριστερού τοιχώματος του αυλακιού, το οποίο προεξέχει εμφανώς από το ΚΕ, σε αντίθεση με τις περισσότερες περιπτώσεις όπως στο σχήμα 6.4α όπου δεν υπάρχει καθόλου αυτή η δομή.



**Σχήμα 6.4.** Σχηματισμός αποβλίττου και (α) top burr, (β) entry side burr κατά το νανοφρεζάρισμα με κονδύλι σε διάφορες χρονικές στιγμές.

Τέλος, αναλύονται οι μεταβολές στη μικροδομή του ΤΕ, με υπολογισμό του CNA και του CSP, όπως περιγράφηκαν στο κεφάλαιο 3. Τα αποτελέσματα του CNA παρουσιάζονται στο σχήμα 6.5. Από τα αποτελέσματα γίνεται αρχικά εμφανές ότι η κατεργασία του νανοφρεζαρίσματος υπό τις συγκεκριμένες συνθήκες οδηγεί σε αρκετά μικρή επιβάρυνση του υλικού του ΤΕ, καθώς μετά την κατεργασία το μεγαλύτερο ποσοστό του ΤΕ βρίσκεται σε κρυσταλλική μορφή (περίπου 88%) και εξαιρώντας τα άτομα της εξωτερικής επιφάνειας, οι μικρές μεταβολές που παρατηρούνται στον αριθμό των ατόμων που ανήκουν σε κυψελίδες fcc και των ατόμων με άγνωστη δομή οφείλονται κυρίως σε διακυμάνσεις του όγκου του αποβλίττου που παράγεται. Ο αριθμός των ατόμων σε «άγνωστη» δομή αυξομειώνεται ως τα 2.4 rad/ps, σταθεροποιείται έως τα 4.8 rad/ps και μετά αυξάνεται ραγδαία. Αυτές οι τάσεις συσχετίζονται με τις τάσεις που παρατηρήθηκαν προηγουμένως όσον αφορά τις δυνάμεις και το συντελεστή τριβής, καθώς για ορισμένες τιμές ταχύτητας περιστροφής η

κατεργασία διεξάγεται με ευνοϊκό τρόπο, με χαμηλές δυνάμεις και μικρή επιβάρυνση στη δομή του TE ενώ στις εξαιρετικά μεγάλες τιμές ταχύτητας περιστροφής, η επιβάρυνση αρχίζει να γίνεται πιο σημαντική.



(α)

(β)

**Σχήμα 6.5.** Μεταβολή της δομής του δοκιμίου: (α) άτομα σε «άγνωστη» δομή, (β) άτομα σε κυψελίδες FCC.

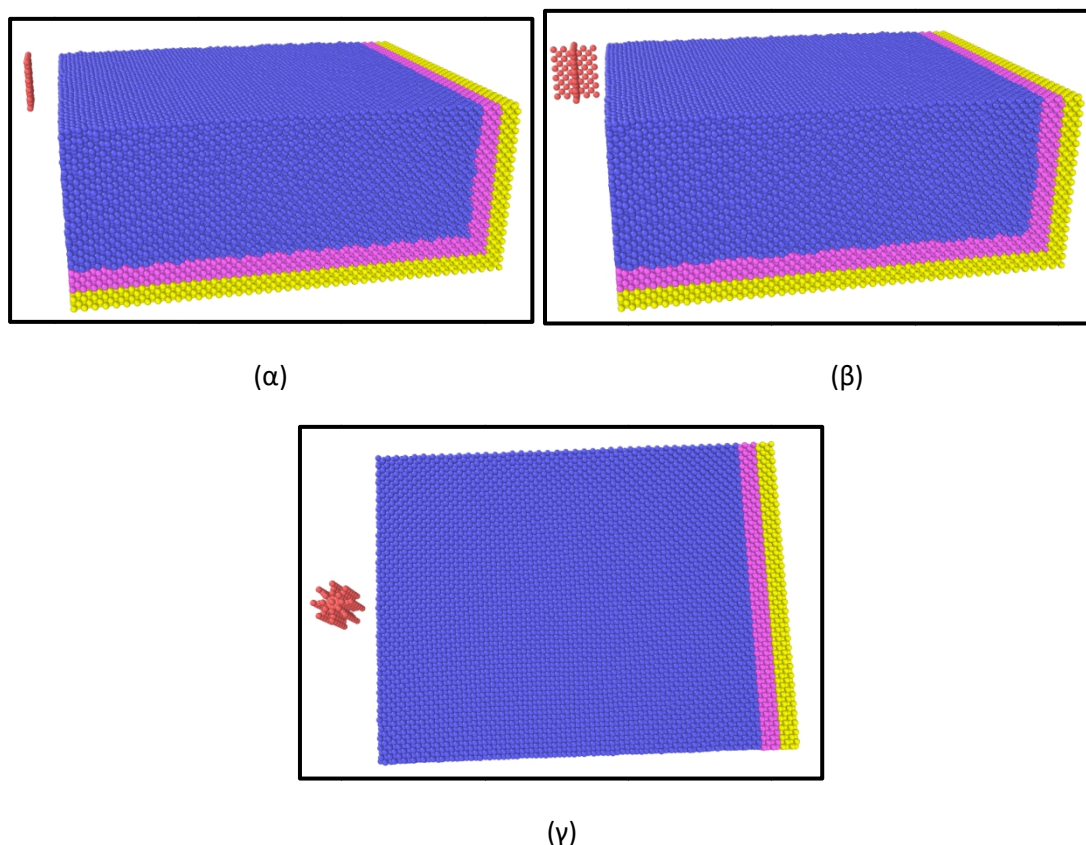
Σε σύγκριση με τη νανο-λείανση, η μεταβολή στη δομή του υλικού που παρατηρείται για παρόμοια βάθη κοπής, αν και δε μπορεί να γίνει άμεση σύγκριση μεταξύ των δύο κατεργασιών, είναι αρκετά μικρότερη, κάτι που αποδίδεται άμεσα στη διακοπτόμενη φύση της κατεργασίας. Παρότι χρησιμοποιούνται 4 κοπτικές ακμές με αποτέλεσμα κάθε στιγμή να βρίσκεται κάποια ακμή σε επαφή με το TE, η ενέργεια που προσδίδεται στο TE είναι συγκριτικά λιγότερη, λόγω της λιγότερο σφοδρής επαφής που δημιουργείται μεταξύ μεμονωμένων κοπτικών ακμών σε σχέση με την επαφή του κάθε κόκκου με το TE και επίσης τα άτομα του υλικού του TE σε ορισμένες περιπτώσεις διαθέτουν περισσότερο χρόνο για να αναδιαταχθούν. Όσο η ταχύτητα περιστροφής γίνεται μεγαλύτερη, δίνεται μικρότερος χρόνος στα άτομα να αναδιαταχθούν, κάτι που φαίνεται ότι γίνεται αρκετά εμφανές για ταχύτητες περιστροφής άνω των 4.8 rad/ps, όπου οι συνθήκες οδηγούν πλέον σε πιο ασταθή κατάσταση.

Αυτές οι παρατηρήσεις, σε συνάρτηση με όλες τις προηγούμενες μπορούν να οδηγήσουν στο συμπέρασμα ότι ενδείκνυται η χρήση ταχυτήτων περιστροφής στο εύρος 2.4-4.8 rad/ps όταν χρησιμοποιείται εργαλείο παρόμοιου τύπου, προκειμένου η κατεργασία να διεξάγεται ομαλά και να είναι αποδοτική, καθώς σε αυτό το εύρος ταχυτήτων επιτυγχάνεται και η διατήρηση των δυνάμεων σε μέτρια επίπεδα. Επειδή το ζητούμενο στις κατεργασίες είναι η υψηλή παραγωγικότητα υπό τις προαναφερθείσες συνθήκες, ενδείκνυται περισσότερο η επιλογή ταχύτητας περιστροφής κοντά στα 3.2 rad/ps. Τα συμπεράσματα που εξήχθησαν σε

αυτές τις περιπτώσεις έχουν σημασία διότι προέκυψαν για μια οριακή τιμή ταχύτητας πρόωσης (200 m/s) όπως αποδείχθηκε στο κεφάλαιο 4, διότι τα φαινόμενα που επικρατούν σε μεγαλύτερες ταχύτητες οδηγούν σε δυσμενές αποτέλεσμα της κατεργασίας. Είναι αναμενόμενο, εάν χρησιμοποιηθούν μικρότερες ταχύτητες πρόωσης, να αυξηθεί το κατάλληλο εύρος ταχυτήτων περιστροφής για το ίδιο εργαλείο, διότι ο διακοπτόμενος χαρακτήρας της κατεργασίας θα είναι εμφανής και σε μικρότερες ταχύτητες περιστροφής αφού με τη μικρότερη ταχύτητα πρόωσης θα αυξηθεί η διάρκεια της κατεργασίας και στο ίδιο χρονικό διάστημα θα εκτελεί περισσότερες περιστροφές το ΚΕ.

### 6.1.2 Επίδραση του αριθμού των κοπτικών ακμών

Αφού αναλύθηκε η επίδραση της ταχύτητας περιστροφής κατά το νανο-φρεζάρισμα με κονδύλι, στη συνέχεια θα μελετηθεί η επίδραση του αριθμού των κοπτικών ακμών του κονδυλιού. Σε αυτές τις προσομοιώσεις, η πρόωση διατηρείται σταθερή στα 200 m/s, όπως και το βάθος κοπής στα 2α, ενώ εκτός από τον αριθμό των κοπτικών ακμών που είναι 2,4 και 8 ακμές μεταβάλλεται και η ταχύτητα περιστροφής από 2.4 έως 4.8 rad/ps, προκειμένου να διερευνηθεί εάν η συμπεριφορά που παρουσιάζει το νανο-φρεζάρισμα με ένα συγκεκριμένο αριθμό οδόντων διαφοροποιείται ανάλογα με την περιστροφική ταχύτητα του ΚΕ. Στο σχήμα 6.6 παρουσιάζονται τα μοντέλα με τα τρία διαφορετικά ΚΕ.

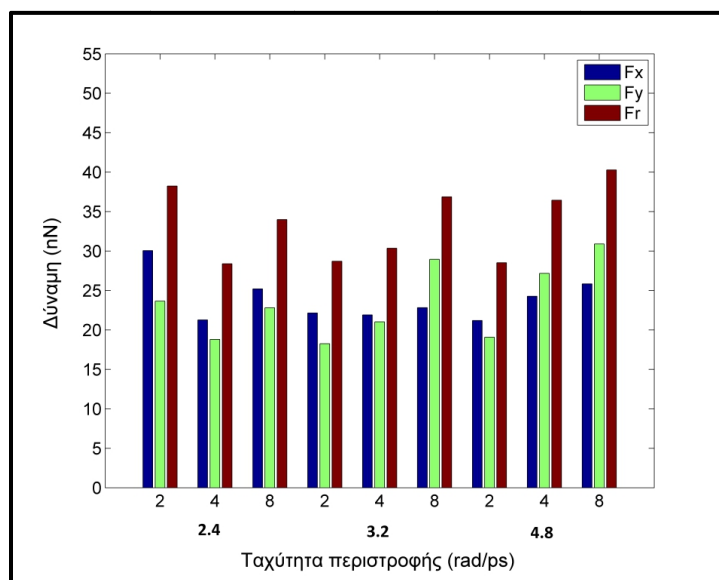


**Σχήμα 6.6.** Μοντέλα νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι που έχει: (α) 2 κοπτικές ακμές, (β) 4 κοπτικές ακμές, (γ) 8 κοπτικές ακμές.

Η αύξηση του αριθμού των κοπτικών ακμών οδηγεί σε εντονότερη επαφή του κοπτικού με το ΤΕ, καθώς ανά πάσα στιγμή βρίσκονται περισσότερες ακμές σε επαφή με το τμήμα του

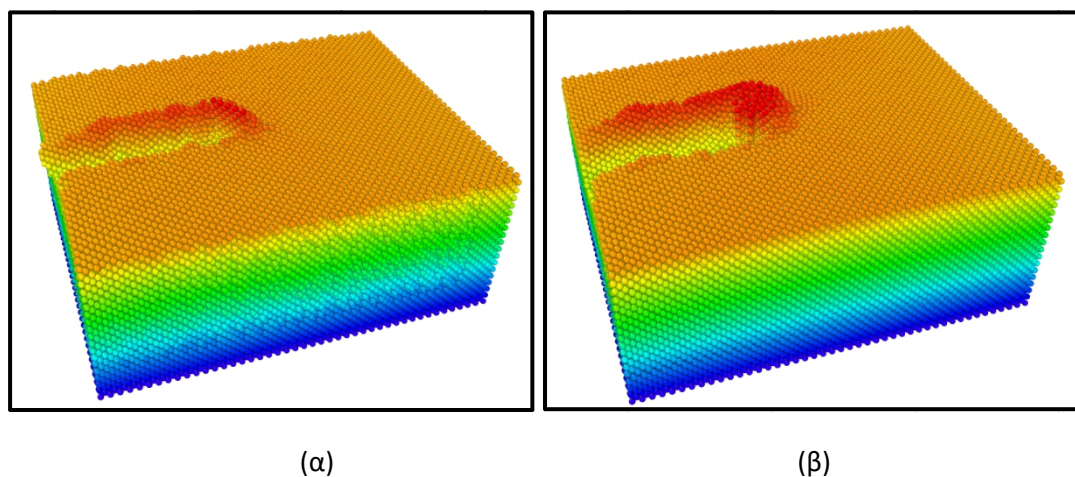
ΤΕ που δεν έχει κοπεί, και επομένως συμβάλλει και στην αύξηση του ρυθμού αποβολής υλικού. Στο σχήμα 6.7 απεικονίζονται οι μέγιστες τιμές των συνιστωσών της δύναμης σε κάθε περίπτωση, καθώς και η συνισταμένη δύναμη. Από τα αποτελέσματα αυτά παρατηρούνται αρχικά δύο διαφορετικές τάσεις σε σχέση με τη χρήση εργαλείου με περισσότερες κοπτικές ακμές υπό τις ίδιες συνθήκες ταχύτητας περιστροφής, πρόωσης και βάθους κοπής. Πιο συγκεκριμένα, στην περίπτωση της μικρότερης ταχύτητας περιστροφής, παρατηρείται μια μείωση των δυνάμεων μεταξύ των περιπτώσεων με δύο και τέσσερις κοπτικές ακμές ενώ στη συνέχεια αύξηση μεταξύ των περιπτώσεων με τέσσερις και οκτώ κοπτικές ακμές. Αντίθετα στις δύο υψηλότερες ταχύτητες περιστροφής, η αύξηση των δυνάμεων είναι ξεκάθαρη. Το φαινόμενο αυτό μπορεί να εξηγηθεί με παρόμοιο τρόπο με αυτόν που εξηγήθηκαν οι τάσεις μεταβολής των δυνάμεων υπό διαφορετικές ταχύτητες περιστροφής στα δύο πρώτα στάδια. Η χρήση εργαλείου με δύο κοπτικές ακμές υπό μια σχετικά μικρή ταχύτητα περιστροφής οδηγεί σε συνθήκες που ομοιάζουν λιγότερο με τη διακοπόμενη κοπή όπως έγινε εμφανές για ταχύτητες από 1.6 έως 4.8 rad/ps και τέσσερις κοπτικές ακμές με αποτέλεσμα η δύναμη να είναι ελαφρά μικρότερη στην περίπτωση με τις τέσσερις ακμές λόγω της διακοπόμενης φύσης της κατεργασίας και διότι οι ταυτόχρονες συνεισφορές από περισσότερες ακμές μειώνουν λίγο τη μέγιστη δύναμη, κυρίως για την  $F_y$  γιατί ορισμένες ακμές κινούνται προς τα θετικά και ορισμένες προς τα αρνητικά του άξονα  $y$ . Όταν όμως οι ακμές αυξηθούν σε οκτώ, οι συνθήκες που επικρατούσαν στην περίπτωση με τις τέσσερις κοπτικές εντείνονται περαιτέρω με αποτέλεσμα την αύξηση της δύναμης. Παρομοίως, για μεγαλύτερες ταχύτητες κοπής δεν εμφανίζεται αυτό το φαινόμενο διότι οι συνθήκες είναι παρόμοιες, οπότε κάθε αύξηση του αριθμού των ακμών οδηγεί άμεσα σε αύξηση της δύναμης.

Όσον αφορά τις διαφορετικές συνιστώσες της δύναμης, σε αυτές τις περιπτώσεις η  $F_y$  έχει μικρότερο μέτρο από την  $F_x$  εκτός από περιπτώσεις με άνω των 2 κοπτικών ακμών στις δύο μεγαλύτερες ταχύτητες αλλά η διακύμανση της συνισταμένης δύναμης γενικά ακολουθεί τη διακύμανση της  $F_y$ .



**Σχήμα 6.7.** Διακύμανση μέγιστων τιμών των συνιστωσών  $F_x$  και  $F_y$  και της συνισταμένης δύναμης ανάλογα με τον αριθμό κοπτικών ακμών και ταχύτητα περιστροφής.

Τέλος, στο σχήμα 6.8 παρουσιάζονται δύο χαρακτηριστικά στιγμιότυπα στα οποία έχει χρησιμοποιηθεί κονδύλι δύο κοπτικών ακμών και κονδύλι 8 κοπτικών ακμών, αντίστοιχα. Από τις εικόνες αυτές γίνεται εμφανής η διαφορά στον όγκο του υλικού που εναποτίθεται είτε πάνω στα πλαϊνά τοιχώματα του αυλακιού, κυρίως στα αριστερά του, λόγω της ανθρωλογιακής φοράς περιστροφής του ΚΕ, διότι με αύξηση του αριθμού των κοπτικών ακμών, με σταθερές τις υπόλοιπες συνθήκες αυξάνεται ο ρυθμός αποβολής υλικού. Παράλληλα, δεν παρατηρείται κάποια άλλη σημαντική αλλαγή στη μορφή του αποβλίττου ή του burr.

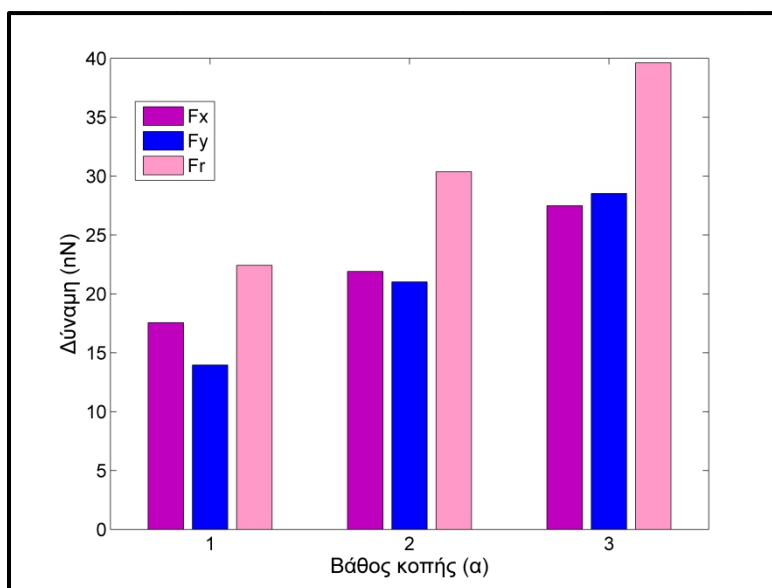


**Σχήμα 6.8.** Χαρακτηριστικά στιγμιότυπα νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι: (α) 2 κοπτικών ακμών, (β) 8 κοπτικών ακμών.

### 6.1.3 Επίδραση του βάθους κοπής

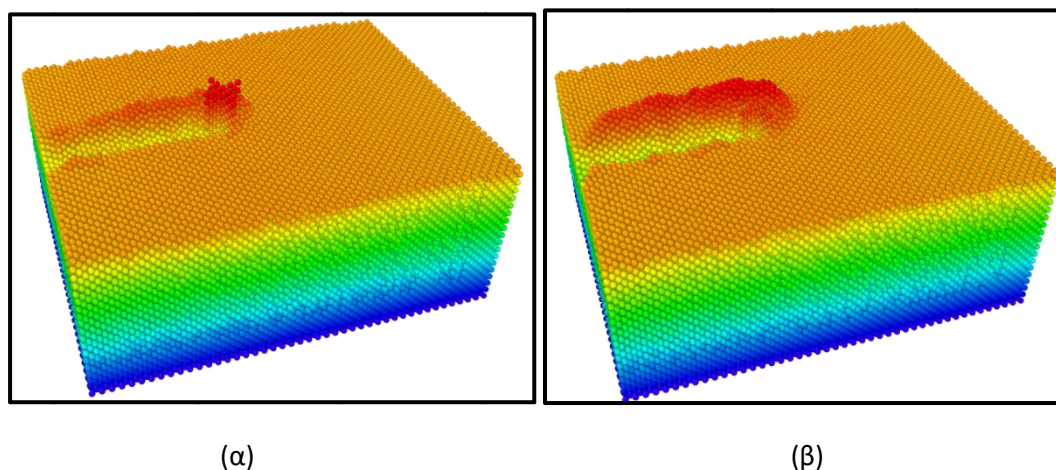
Το βάθος κοπής, όπως και στις προσομοιώσεις των προηγούμενων κεφαλαίων, αποτελεί ένα θεμελιώδες μέγεθος της νανοκατεργασίας, του οποίου η μεταβολή, αν και αναμένεται να δώσει συγκεκριμένα αποτελέσματα, είναι απαραίτητο να μελετηθεί προκειμένου να διαπιστωθεί η επιβάρυνση που δημιουργεί στο ΤΕ η χρήση διαφόρων τιμών βάθους κοπής ώστε να εξεταστεί η χρήση στρατηγικής κοπής με περισσότερα πάσα. Οι μελέτες αυτές διεξήχθησαν αφού μελετήθηκαν οι βασικότερες παράμετροι, όπως η ταχύτητα περιστροφής και ο αριθμός των κοπτικών ακμών, προκειμένου να υπάρχει ήδη μια σαφής εικόνα για την επίδραση αυτών των παραμέτρων πριν αναλυθεί η επίδραση του βάθους κοπής. Για τις προσομοιώσεις χρησιμοποιείται κονδύλι με 4 κοπτικές ακμές και ταχύτητα περιστροφής 3.2 rad/ps, ενώ οι υπόλοιπες παράμετροι εκτός του βάθους είναι ίδιες με την προηγούμενη υποενότητα.

Όπως αναμένεται, η αύξηση του βάθους κοπής οδηγεί σε επαφή της κοπτικής ακμής σε μεγαλύτερο μήκος με το ΤΕ, άρα ξεκάθαρα σε αύξηση των δυνάμεων. Αυτό επιβεβαιώνεται από τα αποτελέσματα του Σχήματος 6.9.



**Σχήμα 6.9.** Διακύμανση των δυνάμεων  $F_x$ ,  $F_y$  και  $F_r$  σε σχέση με το βάθος κοπής.

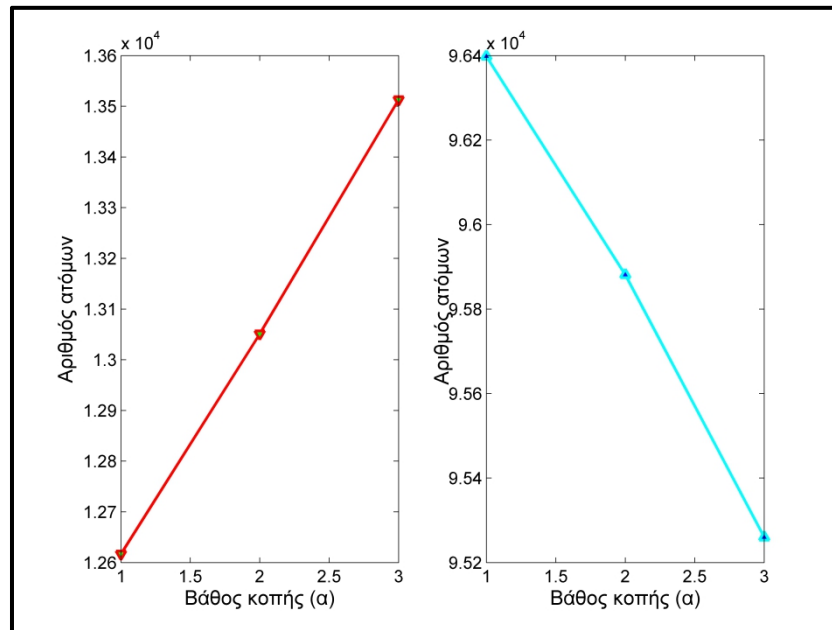
Τόσο οι τιμές της συνιστώσας  $F_x$ , όσο και της  $F_y$  αλλά και της συνισταμένης δύναμης, αυξάνονται με την αύξηση του βάθους κοπής. Η αύξηση αυτή είναι σχεδόν αναλογική και για τις δύο συνιστώσες, λόγω της σταδιακής αύξησης του μήκους επαφής ΚΕ-ΤΕ. Όσον αφορά το απόβλιττο και το γρέζι που σχηματίζεται, στο σχήμα 6.10 γίνεται μια σύγκριση μεταξύ της περίπτωσης με βάθος κοπής 1α και αυτής με βάθος κοπής 3α. Από τις εικόνες αυτές είναι εμφανής η αύξηση της ποσότητας του υλικού που αποβάλλεται από το ΤΕ στις δύο περιπτώσεις.



**Σχήμα 6.10.** Χαρακτηριστικά στιγμιότυπα νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι: (α) βάθος κοπής 1α, (β) βάθος κοπής 3α.

Τέλος, μελετώνται και οι μεταβολές στη μικροδομή κατά το νανο-φρεζάρισμα με διαφορετικά βάθη κοπής. Σύμφωνα με τα αποτελέσματα της ανάλυσης του CNA, που παρουσιάζονται στο σχήμα 6.11, σε αυτές τις περιπτώσεις η αύξηση του βάθους κοπής σχετίζεται άμεσα με εντονότερες μεταβολές της δομής του υλικού σε σχέση με τη μεταβολή της ταχύτητας κοπής. Επομένως, ο αριθμός των ατόμων σε απαραμόρφωτη δομή μικραίνει ξεκάθαρα με την αύξηση του βάθους κυρίως λόγω και της αύξησης του όγκου του

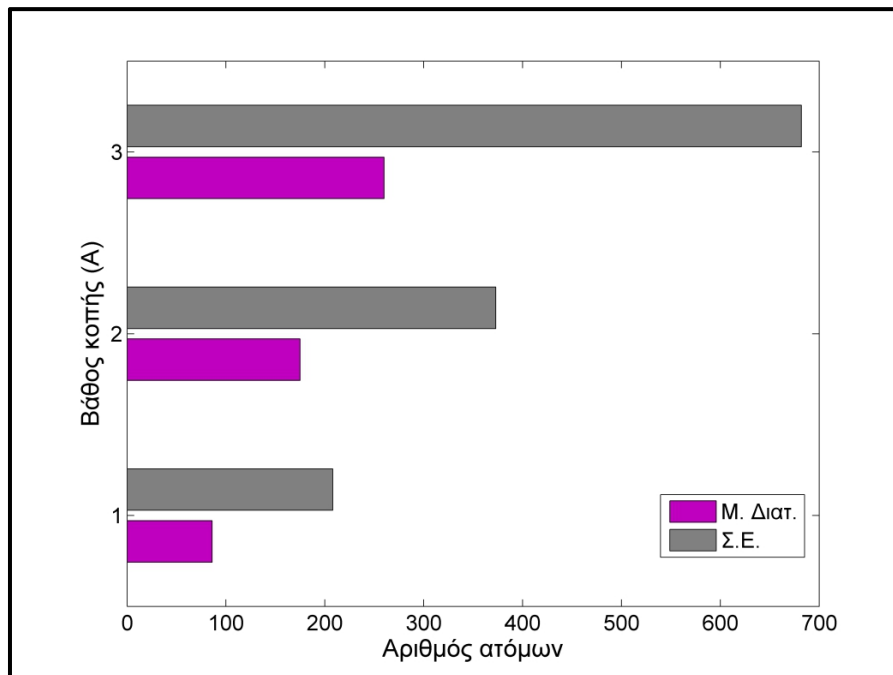
αποβλίττου. Παρόμοιο συμπέρασμα εξάγεται και κατά την ανάλυση του CSP που απεικονίζεται στο σχήμα 6.12, όπου διαπιστώνεται ραγδαία αύξηση των ατόμων που βρίσκονται σε μερικές διαταραχές ή σφάλματα επιστοιβάσης με την αύξηση του βάθους κοπής με αποτέλεσμα να επηρεάζεται σε μεγαλύτερο βαθμό η δομή του υλικού του ΤΕ, σε σχέση με τις περιπτώσεις με χαμηλά βάθη.



(α)

(β)

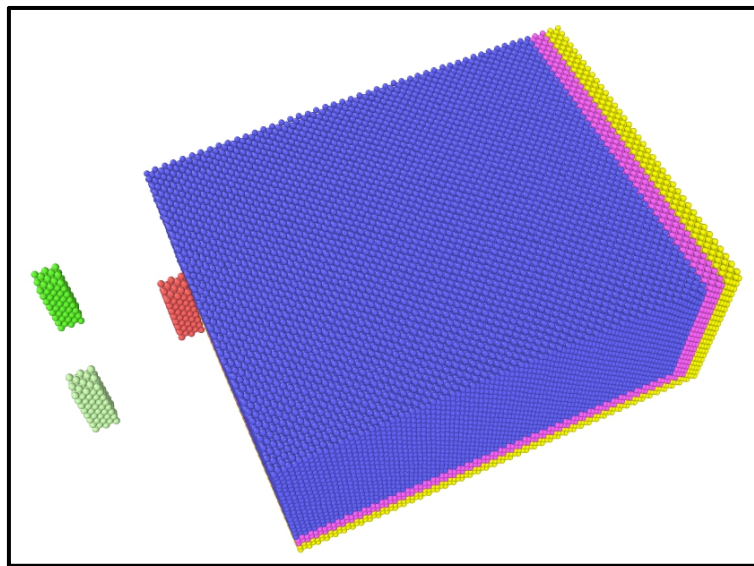
**Σχήμα 6.11.** Μεταβολή της δομής του δοκιμίου: (α) άτομα σε «άγνωστη» δομή, (β) άτομα σε κυψελίδες FCC.



**Σχήμα 6.12.** Μεταβολή της δομής του δοκιμίου: άτομα σε σφάλματα επιστοιβάσης και άτομα σε μερικές διαταραχές.

## 6.2 Προσομοιώσεις μετωπικού νανο-φρεζαρίσματος με φρεζοκεφαλή

Στην παρούσα υποενότητα παρουσιάζονται προσομοιώσεις μετωπικού νανο-φρεζαρίσματος με εργαλείο το οποίο προσομοιάζει τη φρεζοκεφαλή του μακροσκοπικού φρεζαρίσματος. Όπως έχει ήδη αναφερθεί, το μετωπικό νανο-φρεζαρίσμα με φρεζοκεφαλή δεν έχει προσομοιωθεί ακόμα στη βιβλιογραφία. Η περίπτωση αυτή είναι πιο σύνθετη από την περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι, καθώς όπως φαίνεται και στο σχήμα 6.13, οι κοπτικές ακμές/οδόντες μοντελοποιούνται μεν ως ξεχωριστά απαραμόρφωτα σώματα, όμως κινούνται με τέτοιο τρόπο, σαν να κινούνται γύρω από ένα εικονικό άξονα συμμετρίας της φρεζοκεφαλής, ο οποίος κινείται με σταθερή ταχύτητα πρόωσης. Οι εξισώσεις 6.1-6.2 ισχύουν και σε αυτή την περίπτωση αλλά ουσιαστικά η περιστροφή ορίζεται πλέον όχι σε σχέση με τον άξονα συμμετρίας κάθε κοπτήρα αλλά σε σχέση με τον άξονα περιστροφής της «εικονικής» φρεζοκεφαλής. Σε αυτές τις προσομοιώσεις, όπως και σε αυτές της προηγούμενης υποενότητας, θα μελετηθεί η επίδραση των συνθηκών της κατεργασίας και του ΚΕ στις δυνάμεις κοπής καθώς και στη μεταβολή της δομής του ΤΕ, προκειμένου να εξαχθούν χρήσιμα συμπεράσματα για την αποδοτικότητα της κατεργασίας, να προσδιοριστούν οι κατάλληλες συνθήκες που πρέπει να χρησιμοποιούνται και να συγκριθούν τα ιδιαίτερα χαρακτηριστικά της με αυτά του νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι.



**Σχήμα 6.13.** Μοντέλο νανο-φρεζαρίσματος με εργαλείο που προσομοιάζει τη φρεζοκεφαλή.

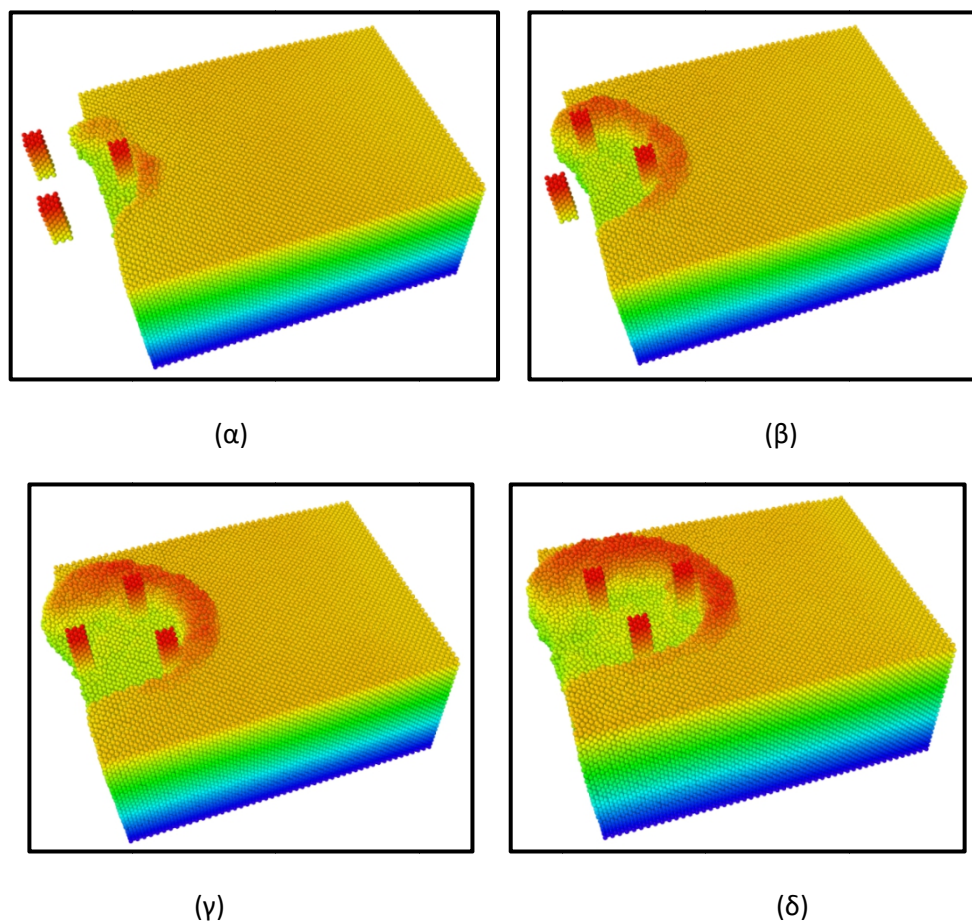
### 6.2.1 Επίδραση της ταχύτητας κοπής

Όπως και στην περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι, μια σημαντική παράμετρος που πρέπει να μελετηθεί είναι η ταχύτητα περιστροφής του ΚΕ. Σε αυτήν την υποενότητα, οι ταχύτητες επιλέχθηκε να είναι κυρίως μικρότερες από αυτές της αντίστοιχης υποενότητας των προσομοιώσεων με κονδύλι, καθώς η διάμετρος της εικονικής φρεζοκεφαλής είναι  $50 \text{ \AA}$ , επομένως για ίδιες τιμές περιστροφικής ταχύτητας είναι αρκετά μεγαλύτερη η γραμμική ταχύτητα. Επίσης, καθώς υπολογίστηκε ότι μεγάλες ταχύτητες περιστροφής οδηγούν σε αστάθεια, προκειμένου να διερευνηθεί εάν ισχύει αυτή η παρατήρηση και στην περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος με φρεζοκεφαλή, επιλέχθηκε ένα σημαντικό εύρος ταχυτήτων περιστροφής, από  $0.125$  έως  $2.5 \text{ rad/ps}$ . Για τον



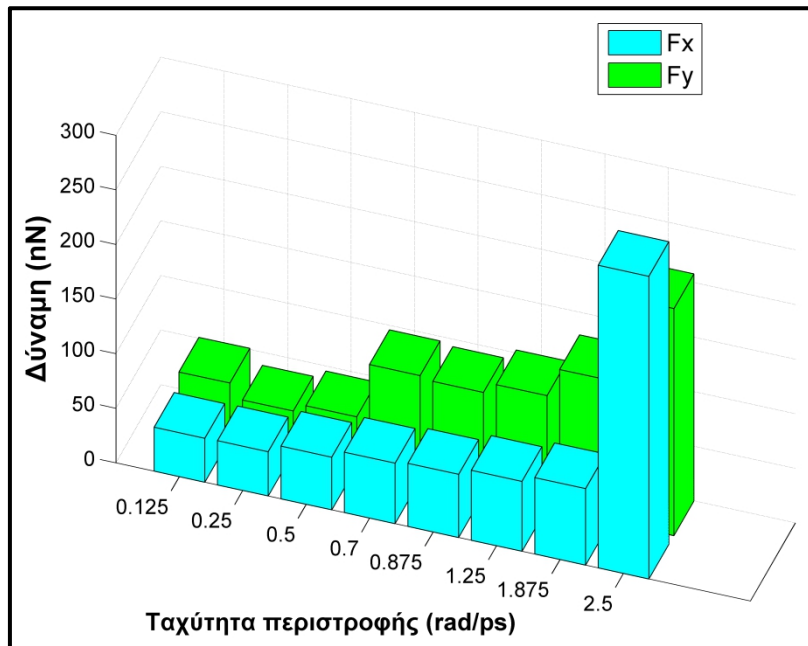
προσδιορισμό του κατάλληλου εύρους λήφθηκε ξανά υπόψη ότι πρέπει να υπάρχει ένα όριο στην ταχύτητα περιστροφής, διότι εάν είναι αρκετά αργή σε σχέση με την πρόωση, τότε το εργαλείο θα κινείται ως στερεό σώμα προς το TE, χωρίς να επηρεάζει ουσιαστικά η περιστροφή την κοπή, κάτι που θα παρατηρηθεί και στη συνέχεια. Επομένως, η επιλογή των ταχυτήτων περιστροφής ήταν τέτοια ώστε, όπως θα φανεί στη συνέχεια, να καλύπτει ικανοποιητικά το εύρος ταχυτήτων κοπής που παρουσιάζει ενδιαφέρον. Στις προσομοιώσεις αυτές η ταχύτητα πρόωσης είναι σταθερή στα 200 m/s, το βάθος κοπής 2α και χρησιμοποιούνται τρεις κοπτήρες. Το υλικό του TE είναι μονοκρυσταλλικός χαλκός και του ΚΕ μονοκρυσταλλικό διαμάντι, ενώ το μοντέλο είναι ίδιο με αυτό που παρουσιάστηκε στο σχήμα 6.13.

Στις προσομοιώσεις επιλέχθηκε να μην είναι το πλάτος της κοπής ίσο με το πλάτος του TE, προκειμένου να είναι δυνατόν να παρατηρηθεί η μετατόπιση του υλικού από την περιοχή που γίνεται η αποβολή υλικού προς στα πλαϊνά τοιχώματα του TE. Επομένως, θα δημιουργηθούν αυλάκια πλάτους όσο η διάμετρος του κοπτικού. Στο σχήμα 6.14 παρουσιάζονται στιγμιότυπα από διάφορα στάδια της κατεργασίας, ξεκινώντας με τις πρώτες στιγμές της επαφής ΚΕ-TE, έως τη στιγμή που το αυλάκι έχει αρχίσει να δημιουργείται. Όπως θα σχολιασθεί και στη συνέχεια, τα χαρακτηριστικά που παρατηρήθηκαν στο νανο-φρεζάρισμα με κονδύλι παρουσιάζονται και στο νανο-φρεζάρισμα με φρεζοκεφαλή αλλά λόγω της μεγαλύτερης διαμέτρου του ΚΕ, είναι πολύ πιο έντονα.



**Σχήμα 6.14.** (α)-(δ) Χαρακτηριστικά στιγμιότυπα νανο-φρεζαρίσματος με φρεζοκεφαλή.

Στο σχήμα 6.15 παρουσιάζονται οι μεταβολές των μέγιστων τιμών των δύο συνιστωσών της δύναμης, για διάφορες τιμές της ταχύτητας περιστροφής του ΚΕ.

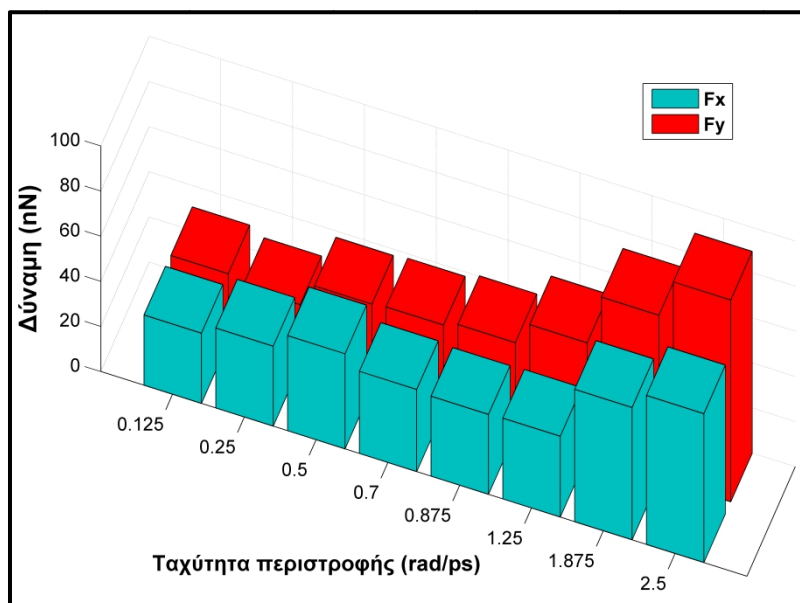


**Σχήμα 6.15.** Διακύμανση των δυνάμεων  $F_x$ ,  $F_y$  σε σχέση με την ταχύτητα περιστροφής.

Από τα αποτελέσματα του σχήματος 6.15 γίνεται εμφανές ότι, με εξαίρεση την περίπτωση της χαμηλότερης ταχύτητας περιστροφής, η δύναμη κατά  $x$  διαρκώς αυξάνεται κατά μέτρο, όπως και η δύναμη κατά  $y$ , με εξαίρεση τη χαμηλότερη ταχύτητα περιστροφής. Μάλιστα, για ταχύτητες περιστροφής άνω του 0.5 rad/ps, η αύξηση των τιμών της συνιστώσας  $F_y$  είναι ραγδαία, ενώ για ταχύτητες περιστροφής άνω του 1.25 rad/ps η αύξηση των τιμών και των δύο συνιστωσών της δύναμης είναι αρκετά μεγάλη. Πράγματι, στις υψηλές ταχύτητες περιστροφής εμφανίζονται έντονα φαινόμενα εκτόξευσης ατόμων από το ΤΕ λόγω της μεγάλης ταχύτητας των κοπτήρων, σε μεγαλύτερο βαθμό απ' ότι παρατηρήθηκαν στην περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι, υποδεικνύοντας ότι επικρατούν ασταθείς συνθήκες για την κατεργασία. Από την άλλη, στην περίπτωση των 0.125 rad/ps, η αυξημένη τιμή της συνιστώσας  $F_y$  προκύπτει, διότι η ταχύτητα περιστροφής σε σχέση με τη χρησιμοποιούμενη πρόωση είναι αργή, ώστε να μην προλαβαίνει το ΚΕ να εκτελέσει αρκετές περιστροφές κατά τη διάρκεια της κατεργασίας με αποτέλεσμα η συμπεριφορά του αρχίζει να πλησιάζει σε ένα βαθμό στη συμπεριφορά ενός στερεού σώματος χωρίς περιστροφή, όπως π.χ. κατά τη γενική περίπτωση νανοκοπής, παρά ως εργαλείο φρέζας. Γι' αυτό το λόγο η τάση των δυνάμεων σε αυτή την περίπτωση αποκλίνει από την τάση που ακολουθούν τα αποτελέσματα όλων των άλλων προσομοιώσεων. Επιπλέον, για ταχύτητες περιστροφής άνω του 0.5 rad/ps, η συνιστώσα  $F_y$  είναι σταθερά μεγαλύτερη της  $F_x$  έως την περίπτωση με ταχύτητα περιστροφής 2.5 rad/ps.

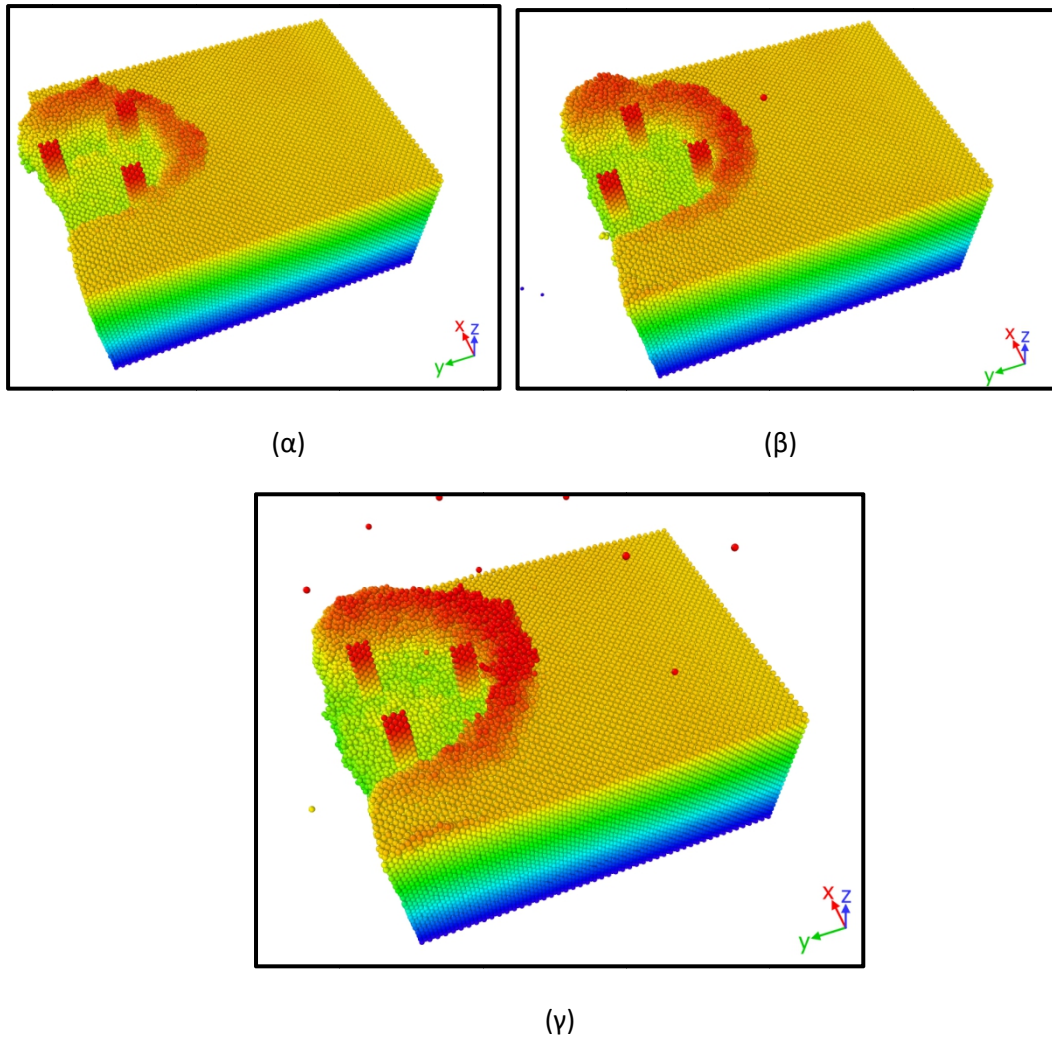
Λόγω των έντονων συνθηκών που επικρατούν κατά το νανο-φρεζάρισμα με φρεζοκεφαλή στις ιδιαίτερα υψηλές ταχύτητες, έγινε περαιτέρω μελέτη των δυνάμεων και προσδιορισμός της μέγιστης δύναμης, αφαιρώντας τιμές που ήταν ξεκάθαρα υψηλότερες από τις συνηθισμένες, αποτελώντας υπερακοντίσεις του διαγράμματος σε ελάχιστα σημεία,

τα οποία συνδέονται με τη βίαιη εκτόξευση σωματιδίων από το TE. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στο σχήμα 6.16.



**Σχήμα 6.16.** Διακύμανση των δυνάμεων  $F_x$ ,  $F_y$  σε σχέση με την ταχύτητα περιστροφής μετά από αφαίρεση ακραίων τιμών.

Από το σχήμα 6.16, συγκρίνοντάς το με τα αποτελέσματα του σχήματος 6.15, προκύπτει ότι για την περίπτωση με ταχύτητα περιστροφής 0.5 rad/ps τα αποτελέσματα είναι περίπου τα ίδια, ενώ κυρίως για τις μεγαλύτερες ταχύτητες περιστροφής οι διαφορές είναι πιο μεγάλες. Αυτή η παρατήρηση υποδηλώνει ότι στις μεγάλες ταχύτητες περιστροφής, παρότι γενικά διαπιστώνεται αύξηση της μέγιστης δύναμης κατά την κατεργασία, ιδίως για την  $F_y$ , επικρατούν ολοένα πιο ασταθείς συνθήκες, οδηγώντας συχνότερα σε βίαιη εκτόξευση σωματιδίων από το δοκίμιο, με αποτέλεσμα η δύναμη να αυξάνεται στιγμιαία σε εξαιρετικά μεγάλες τιμές. Επίσης, παρατηρείται ότι η δύναμη  $F_y$  αυξάνεται διαρκώς για ταχύτητες περιστροφής άνω των 0.125 rad/ps, όπως είχε παρατηρηθεί και στο σχήμα 6.15, ενώ η δύναμη  $F_x$  παρουσιάζει αρχικά αύξηση έως τα 0.5 rad/ps, όπου οριακά φαίνεται ότι η επίδραση της περιστροφής γίνεται σημαντική και στη συνέχεια παραμένει πρακτικά σταθερή μέχρι τα 1.875 rad/ps, όπου διαπιστώνεται ραγδαία αύξηση των τιμών της, μια συμπεριφορά που είχε παρατηρηθεί σε κάποιο βαθμό και στην περίπτωση νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι. Επομένως, όλες αυτές οι παρατηρήσεις οδηγούν στο συμπέρασμα ότι η ταχύτητα περιστροφής είναι κρίσιμος παράγοντας για το νανο-φρεζάρισμα, με αποτέλεσμα να είναι αναγκαία η επιλογή ταχυτήτων εντός συγκεκριμένων ορίων προκειμένου να επικρατούν συνθήκες αυξημένου ρυθμού αποβολής υλικού αλλά να μην οδηγεί η αυξημένη ταχύτητα περιστροφής την κατεργασία σε αστάθεια. Στο σχήμα 6.17 παρουσιάζονται ενδεικτικά στιγμιότυπα από νανο-φρεζάρισμα για τρεις χαρακτηριστικές τιμές ταχύτητας περιστροφής, δηλαδή 0.5, 0.875 και 2.5 rad/ps.

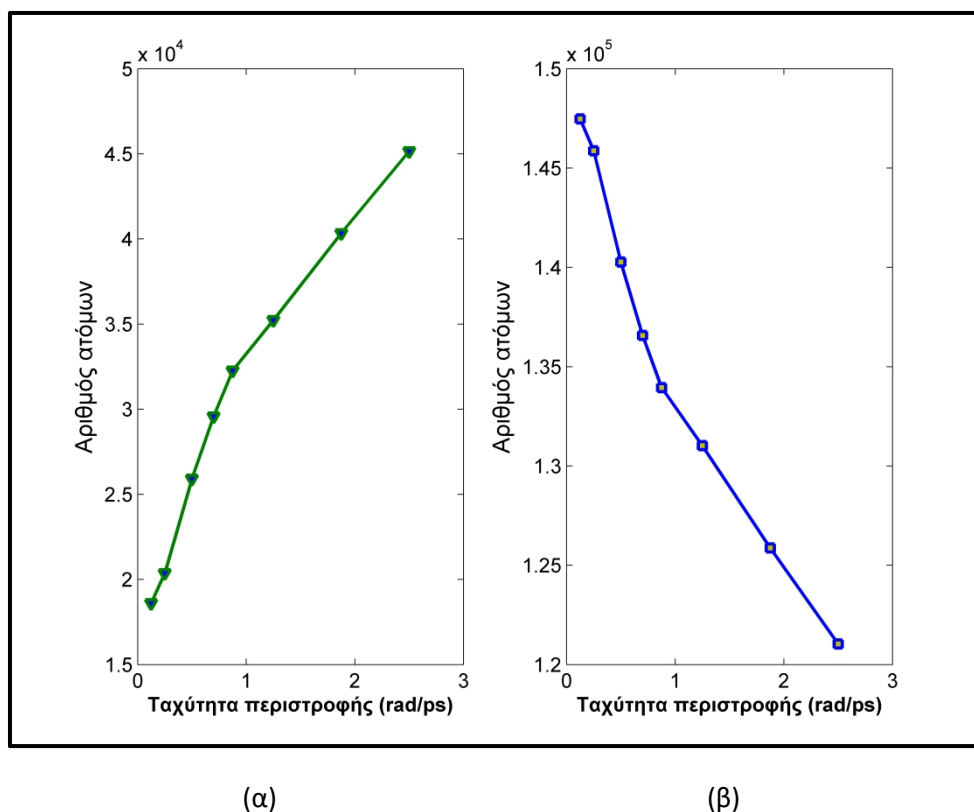


**Σχήμα 6.17.** Στιγμιότυπα νανο-φρεζαρίσματος για τιμή ταχύτητας περιστροφής ίσης με: (α) 0.5 rad/ps, (β) 0.875 rad/ps, (γ) 2.5 rad/ps.

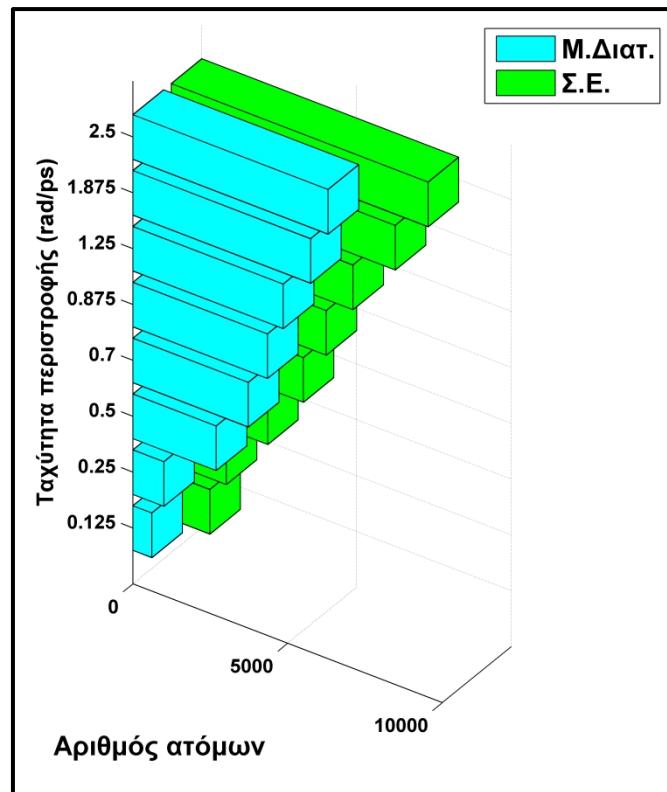
Στη μικρότερη ταχύτητα περιστροφής, παρατηρείται ο σχηματισμός του αυλακιού να πραγματοποιείται χωρίς κάποια αστάθεια, αν και ποιοτικά το μέγεθος του γρεζιού τόσο ως top burr όσο και ως entry side burr είναι πολύ μεγαλύτερο από την περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι. Όσο αυξάνεται η ταχύτητα περιστροφής, όπως έγινε έμμεσα αντιληπτό από την ανάλυση των δυνάμεων, αρχίζουν να εμφανίζονται αστάθειες, όπως μεμονωμένα άτομα που εκτοξεύονται, είτε μπροστά από το ΚΕ, είτε προς τα πίσω και στη μεγαλύτερη ταχύτητα το φαινόμενο γίνεται ακόμα πιο έντονο, με ταυτόχρονη αύξηση του μεγέθους του αποβλίττου και του top burr.

Όσον αφορά τις μεταβολές της δομής του ΤΕ, μελετήθηκαν σε κάθε περίπτωση οι τιμές του CNA και του CSP. Όπως φαίνεται στο σχήμα 6.18, η αύξηση της ταχύτητας περιστροφής οδηγεί σε συνεχή αύξηση του αριθμού των ατόμων που ανήκουν σε "άγνωστη δομή" δηλαδή αυξάνεται το μέγεθος των άμορφων περιοχών του ΤΕ. Η συμπεριφορά αυτή όπως στην περίπτωση της κατεργασίας με κονδύλι, οφείλεται στο γεγονός ότι σε υψηλές ταχύτητες, κάθε φορά που ο κοπτήρας ή η κοπτική ακμή έρχεται σε επαφή με το ΤΕ επικρατούν συνθήκες που προσομοιάζουν σε κρούση, ειδικά για τις μεγαλύτερες ταχύτητες. Έτσι, αυξάνεται η παραμόρφωση και η μεταβολή της δομής γίνεται εντονότερη.

Στην περίπτωση όμως της κοπής με φρεζοκεφαλή, αυτό το φαινόμενο είναι πολύ πιο εμφανές λόγω της μεγάλης διαμέτρου της. Η μορφή της καμπύλης των ατόμων σε «άγνωστη» δομή αλλάζει εμφανώς μετά τα 0.875 rad/ps, υποδηλώνοντας τη ραγδαία επιδείνωση των συνθηκών. Παρόμοια αποτελέσματα παρατηρούνται και στο σχήμα 6.19, καθώς φαίνεται ότι ο αριθμός των ατόμων σε μερικές διαταραχές ή σφάλματα επιστοίβασης αυξάνεται σημαντικά από την ταχύτητα των 0.5 rad/ps και άνω.



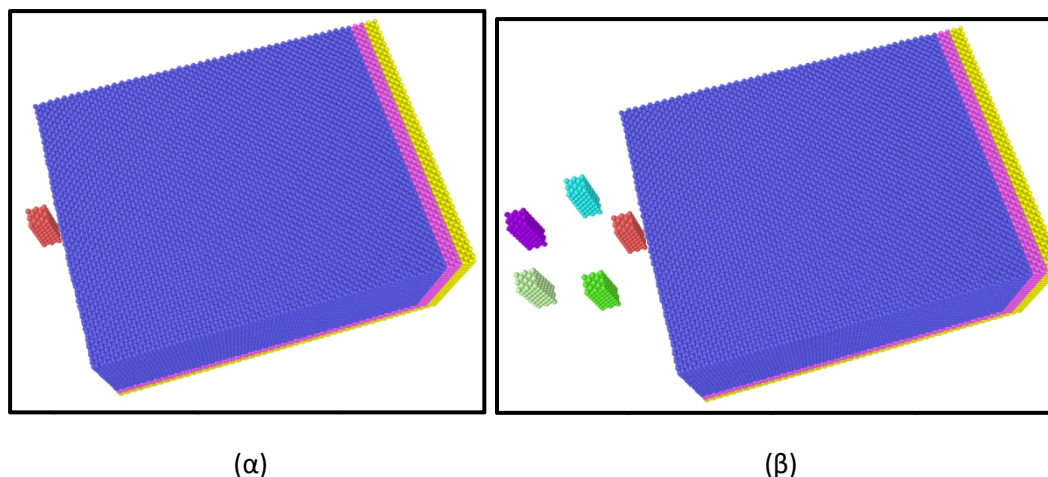
**Σχήμα 6.18.** Μεταβολή της δομής του δοκιμίου: (α) άτομα σε «άγνωστη» δομή, (β) άτομα σε κυψελίδες FCC.



**Σχήμα 6.19.** Μεταβολή της δομής του δοκιμίου: άτομα σε σφάλματα επιστοιβάσης και άτομα σε μερικές διαταραχές.

### 6.2.2 Επίδραση του βάθους και του αριθμού κοπτήρων

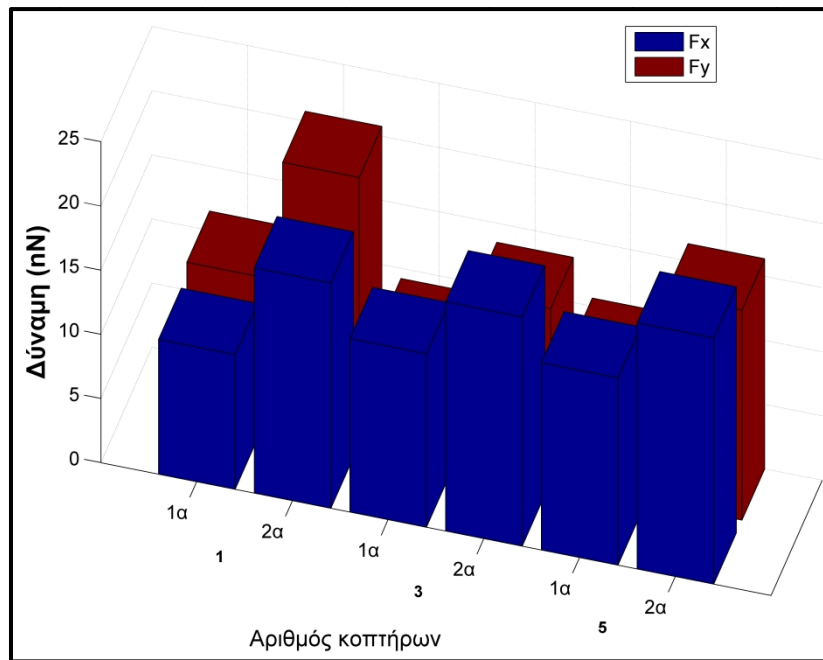
Η επόμενη κατηγορία προσομοιώσεων αφορά ένα άλλο σημαντικό παράγοντα για το νανο-φρεζάρισμα που μελετήθηκε και στην περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι και είναι ο αριθμός των κοπτήρων που χρησιμοποιούνται. Όπως έχει προαναφερθεί και στην περίπτωση του νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι, η χρήση διαφορετικού αριθμού κοπτήρων οδηγεί σε αύξηση του ρυθμού αποβολής υλικού και άρα της παραγωγικότητας της κατεργασίας, όταν οι υπόλοιπες συνθήκες είναι ίδιες. Για να διερευνηθεί πιο γενικά η απόδοση της κατεργασίας όταν χρησιμοποιείται διαφορετικός αριθμός κοπτήρων, οι προσομοιώσεις διεξάγονται και σε δύο διαφορετικά βάθη κοπής. Πιο συγκεκριμένα, επιλέχθηκε να χρησιμοποιηθεί ένας και πέντε κοπτήρες, εκτός από τους τρεις που χρησιμοποιούνται σε όλες τις άλλες περιπτώσεις ενώ οι τιμές βάθους κοπής είναι 1α και 2α. Σε αυτές τις περιπτώσεις, η ταχύτητα περιστροφής είναι σταθερή και ίση με 0.5 rad/ps ενώ η ταχύτητα πρόωσης είναι 200 m/s. Στο σχήμα 6.20 παρουσιάζονται τα μοντέλα με διαφορετικό αριθμό κοπτήρων για το μεγαλύτερο βάθος κοπής.



**Σχήμα 6.20.** Μοντέλα νανο-φρεζαρίσματος με φρεζοκεφαλή με διαφορετικό αριθμό κοπτήρων: (α) ένας κοπτήρας, (β) πέντε κοπτήρες.

Αρχικά μελετώνται οι δυνάμεις κατεργασίας για τις διάφορες περιπτώσεις. Προκειμένου να γίνει πιο ξεκάθαρη η σύγκριση και να μην επηρεαστεί από τυχόν μεμονωμένες αυξήσεις της δύναμης, λόγω του διαφορετικού βαθμού σφοδρότητας της επαφής όταν ο αριθμός των κοπτήρων αυξάνει, καθώς έχει αποδειχθεί από την προηγούμενη υποενοότητα ότι κατά την κατεργασία με φρεζοκεφαλή είναι πιθανόν να υπάρξουν αστάθειες, θα συγκριθούν ως πιο αντιπροσωπευτικές, οι τιμές της μέσης δύναμης στους άξονες  $x$  και  $y$ .

Από τα αποτελέσματα του σχήματος 6.21 φαίνεται, ότι σε όλες τις περιπτώσεις η χρήση περισσότερων κοπτήρων οδηγεί σε διαφοροποίηση των μέσων τιμών της δύναμης. Η χρήση μεγαλύτερου αριθμού κοπτήρων οδηγεί σε κάθε περίπτωση σε αύξηση της δύναμης στον άξονα  $x$ , έστω και μικρή, ενώ στην περίπτωση της δύναμης  $y$  παρατηρείται μια διαφορετική συμπεριφορά. Η  $F_y$  αρχικά μειώνεται όταν χρησιμοποιηθούν τρεις κοπτήρες και για τα δύο βάθη κοπής, ενώ αυξάνεται σε κάθε περίπτωση όταν χρησιμοποιούνται οι πέντε κοπτήρες. Παρόμοια τάση είχε παρατηρηθεί και στο κεφάλαιο νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι σε μικρές ταχύτητες περιστροφής όπου είχε φανεί ότι η χρήση ΚΕ με λιγότερες κοπτικές ακμές οδηγεί σε συμπεριφορά που προσομοιάζει λιγότερο τη διακοπτόμενη φύση της κατεργασίας, κάτι που άλλαξε για μεγαλύτερο αριθμό κοπτικών ακμών. Επίσης, η συμπεριφορά αυτή μπορεί να εξηγηθεί ως ένα βαθμό και λόγω της κινηματικής της κατεργασίας. Πιο συγκεκριμένα, όπως έχει αναφερθεί και άλλες φορές στο παρόν κεφάλαιο, η δύναμη  $F_x$  έχει καθόλη τη διάρκεια της κατεργασίας το ίδιο πρόσημο, που εξαρτάται από τη φορά περιστροφής του ΚΕ, ενώ η δύναμη  $F_y$  λαμβάνει θετικές τιμές καθώς το ΚΕ κινείται προς τα θετικά αλλά και αρνητικές καθώς, όταν διέρχονται οι κοπτήρες από τη μεσοκάθετο του αυλακιού όπου αλλάζει το πρόσημο της δύναμης. Επομένως στα ΚΕ με περισσότερους του ενός κοπτήρες υπάρχει η περίπτωση να συνεισφέρουν κάποιοι αρνητικά και κάποιοι θετικά στη δύναμη  $F_y$  με αποτέλεσμα να είναι μικρότερη για την περίπτωση με τους τρεις κοπτήρες αλλά όταν ο αριθμός κοπτήρων αυξάνεται περαιτέρω είναι δυνατόν η διαφορά μεταξύ θετικών και αρνητικών συνεισφορών να μεγαλώνει ώστε να αυξάνεται και πάλι το μέτρο της  $F_y$ .

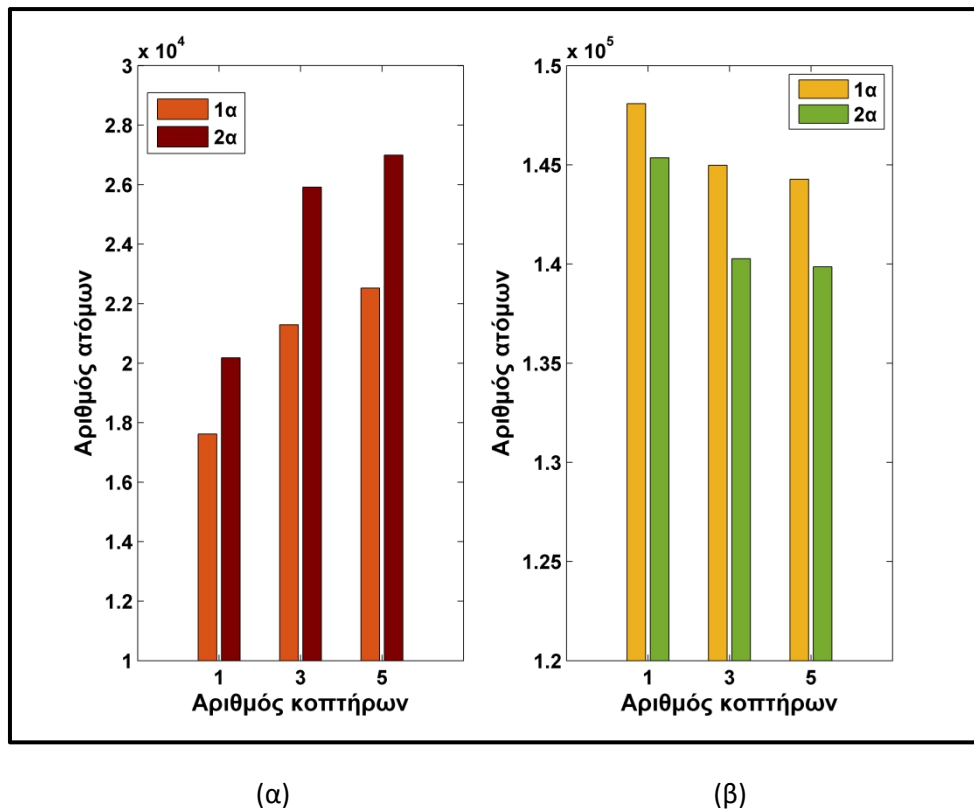


**Σχήμα 6.21.** Διακύμανση των δυνάμεων  $F_x$ ,  $F_y$  σε σχέση με τον αριθμό κοπτήρων και το βάθος κοπής.

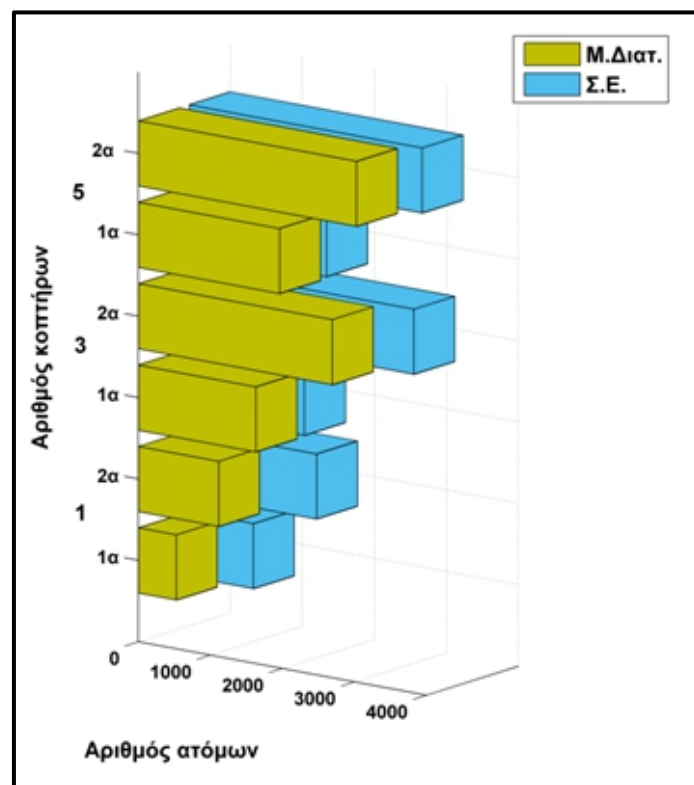
Όσον αφορά τις περιπτώσεις με διαφορετικό βάθος κοπής, η αύξηση της δύναμης είναι ξεκάθαρη σε κάθε περίπτωση, τόσο για τη δύναμη  $F_x$  όσο και για την  $F_y$ , λόγω του αυξημένου μήκους επαφής KE-TE.

Τέλος, γίνεται η σύγκριση των αποτελεσμάτων, όσον αφορά τη μεταβολή της δομής του TE με βάση τις τιμές του CNA και του CSP. Στην περίπτωση χρήσης εργαλείων με διαφορετικό αριθμό κοπτήρων, όπως φαίνεται στο σχήμα 6.22, ο αριθμός των ατόμων που ανήκουν σε "άγνωστη" δομή αυξάνεται σε κάθε περίπτωση, όσο αυξάνεται ο αριθμός των κοπτήρων, και στα δύο βάθη κοπής που χρησιμοποιήθηκαν. Η διαφορά είναι μεγαλύτερη και για τα δύο βάθη στις περιπτώσεις μεταξύ 1 και 3 κοπτήρων ενώ μεταξύ 3 και 5 η διαφορά είναι μικρότερη, επιβεβαιώνοντας τη σημαντική επίδραση που έχει η χρήση πολλαπλών κοπτήρων. Επιπλέον, το αποτέλεσμα αυτό σχετίζεται άμεσα με την αύξηση του ρυθμού αποβολής υλικού με την αύξηση των κοπτήρων διότι, πέραν της επίδρασης στη δομή του TE από τη δράση του KE, αυξάνεται σε ένα βαθμό και η ποσότητα υλικού που αποβάλλεται. Παράλληλα, στις περιπτώσεις με μεγαλύτερο βάθος, η αύξηση αυτών των ατόμων είναι πιο ξεκάθαρη, σε κάθε περίπτωση. Επομένως, τα αποτελέσματα δείχνουν ότι η κατεργασία με KE με λιγότερους κοπτήρες και μικρότερο βάθος κοπής οδηγεί σε μικρότερες μεταβολές της δομής του KE αλλά, καθώς απαιτείται επίσης η επίτευξη μεγαλύτερης αποδοτικότητας πρέπει να επιλέγεται ο κατάλληλος αριθμός κοπτήρων σε κάθε περίπτωση για να καλυφθούν και οι δύο στόχοι. Όσον αφορά τα αποτελέσματα του CSP που απεικονίζονται στο σχήμα 6.23, παρατηρείται ότι για τα ίδια βάθη κοπής, στις περιπτώσεις με περισσότερους κοπτήρες, περισσότερα άτομα ανήκουν σε μερικές διαταραχές ή σε σφάλματα επιστοίβασης, διαταράσσοντας την αρχική δομή του υλικού του TE, όπως σε κάθε περίπτωση όταν αυξάνεται το βάθος κοπής.





Σχήμα 6.22. Μεταβολή της δομής του δοκιμίου: (α) άτομα σε «άγνωστη» δομή, (β) άτομα σε κυψελίδες FCC.

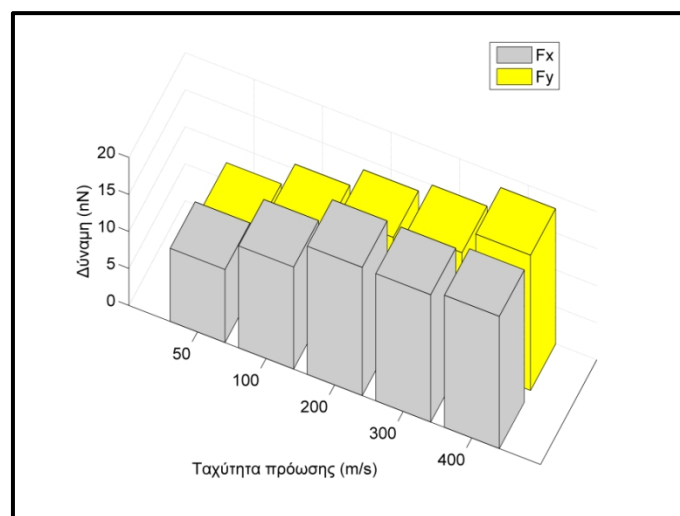


Σχήμα 6.23. Μεταβολή της δομής του δοκιμίου: άτομα σε σφάλματα επιστοιβάσεως και άτομα σε μερικές διαταραχές.

### 6.2.3 Επίδραση της ταχύτητας πρόωσης

Όπως έχει προαναφερθεί στην αρχή της ενότητας, οι τιμές της ταχύτητας πρόωσης σε συνάρτηση με την ταχύτητα περιστροφής και ειδικότερα την γραμμική ταχύτητα που προκύπτει επηρεάζουν σημαντικά την εξέλιξη της κατεργασίας, καθώς μεγαλύτερες ταχύτητες πρόωσης υπό σταθερή ταχύτητα περιστροφής οδηγούν σε μικρότερο συνολικό αριθμό περιστροφών μέχρι την ολοκλήρωση της κατεργασίας. Γενικά, μεγάλες τιμές της ταχύτητας πρόωσης σε σχέση με τις συνθήκες των προσομοιώσεων νανο-φρεζαρίσματος μπορεί να οδηγήσουν σε διαφορετικού είδους κατεργασία, καθώς εάν για συγκεκριμένο μήκος κοπής, λόγω της μεγάλης ταχύτητας πρόωσης δεν πραγματοποιείται μεγάλος αριθμός περιστροφών το ΚΕ συμπεριφέρεται σαν μη περιστρεφόμενο όπως στην τόνρευση. Ακόμα όμως και για μικρότερες τιμές από αυτή την ακραία περίπτωση, η οποία αποφεύχθηκε στις προσομοιώσεις που έγιναν, είναι ενδιαφέρον να διερευνηθεί κατά πόσο είναι σημαντική η πρόωση στο νανο-φρεζάρισμα με φρεζοκεφαλή σε σχέση με άλλες παραμέτρους που μελετήθηκαν στις προηγούμενες υποενότητες. Επομένως, αναμένοντας να αλλάξουν ως ένα βαθμό τα χαρακτηριστικά της κοπής, καθώς αυξάνεται η ταχύτητα πρόωσης με σταθερή την ταχύτητα περιστροφής του ΚΕ, εξετάστηκαν τέσσερις επιπλέον ταχύτητες πρόωσης, 2 μικρότερες και δύο μεγαλύτερες από αυτή που χρησιμοποιήθηκε στις προηγούμενες υποενότητες, δηλαδή 50, 100, 300 και 400 m/s. Οι περιπτώσεις αυτές συγκρίθηκαν και με την ταχύτητα των 200 m/s που χρησιμοποιήθηκε τις περισσότερες περιπτώσεις. Το βάθος κοπής είναι 2α σε όλες τις περιπτώσεις και η ταχύτητα περιστροφής 0.5 rad/ps, ενώ το εργαλείο έχει 3 κοπτήρες.

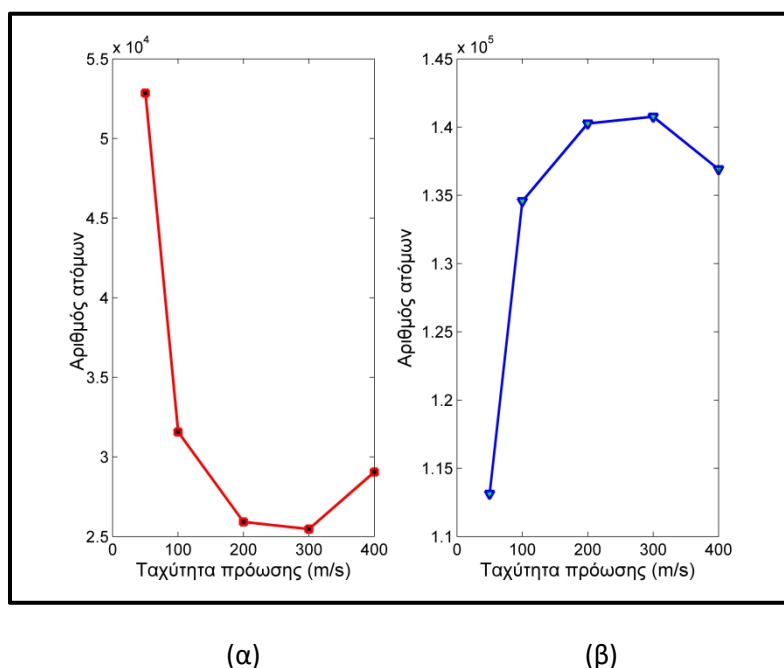
Από τα αποτελέσματα των δυνάμεων που απεικονίζονται στο σχήμα 6.24, αρχικά γίνεται εμφανές ότι η μέση δύναμη στον άξονα  $y$ , που είναι ο άξονας στον οποίο επιβάλλεται η ταχύτητα πρόωσης αυξάνει καθαρά με αυξανόμενη πρόωση όπως είναι αναμενόμενο, καθώς η επαφή ΚΕ-ΤΕ αυξάνεται. Παράλληλα για τη συνιστώσα  $x$  η μέση δύναμη αρχικά αυξάνεται αισθητά έως τα 200 m/s, έπειτα μένει σχεδόν αμετάβλητη και για τη μεγαλύτερη τιμή πρόωσης αυξάνει ελαφρά. Η τάση αυτή είναι αιτιολογημένη, καθώς η αύξηση της πρόωσης οδηγεί σε αύξηση της επιφάνειας επαφής κοπτήρα-ΤΕ και επομένως οδηγεί σε αυξημένη δύναμη.



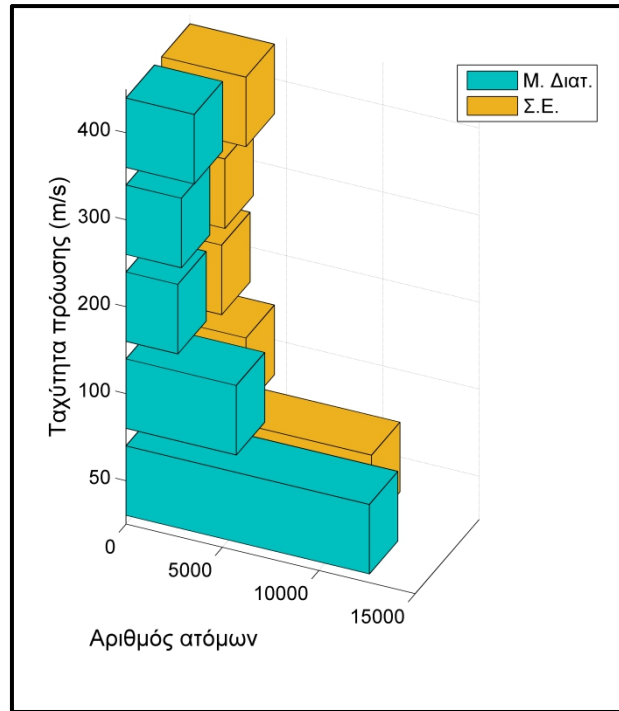
**Σχήμα 6.24.** Διακύμανση των δυνάμεων  $F_x$ ,  $F_y$  σε σχέση με την ταχύτητα πρόωσης.

Εκτός από την μελέτη της επίδρασης της ταχύτητας πρόωσης στις δυνάμεις κατά το νανο-φρεζάρισμα με φρεζοκεφαλή, θα γίνει ανάλυση και των μεταβολών της δομής του TE για διάφορες τιμές ταχύτητας πρόωσης. Όπως φαίνεται στο διάγραμμα 6.25, που προκύπτει από τα αποτελέσματα του CNA, όσο η ταχύτητα πρόωσης αυξάνεται από τα 50 στα 200 m/s ο αριθμός των ατόμων σε «άγνωστη» δομή μειώνεται από μια μεγάλη τιμή σε τιμές συγκρίσιμες αυτών που παρατηρήθηκαν σε προηγούμενες υποενότητες. Στη συνέχεια, παρατηρείται άνοδος του αριθμού αυτών των ατόμων μόνο πάνω από τα 300 m/s. Αυτή η συμπεριφορά υποδηλώνει ξεκάθαρα διαφορετικές τάσεις ανάλογα με την ταχύτητα πρόωσης. Όπως αναμενόταν, για ταχύτητες άνω των 300 m/s η ίδια ταχύτητα περιστροφής οδηγεί σε ένα οριακό σημείο, μετά το οποίο παύει να εκδηλώνεται η διακοπτόμενη φύση της κατεργασίας. Έτσι αυξάνεται η αταξία στο TE αναλογικά με την ταχύτητα. Για μικρότερες όμως τιμές πρόωσης από τα 200m/s, η ραγδαία αύξηση οφείλεται στο γεγονός ότι στο ίδιο χρονικό διάστημα εκτελούνται αρκετά περισσότερες περιστροφές με αποτέλεσμα να διαταράσσεται περισσότερο η δομή του TE αν και οι δυνάμεις είναι μικρότερες. Παρόμοια αποτελέσματα προκύπτουν και από την ανάλυση του CSP που απεικονίζεται στο διάγραμμα 6.26.

Επομένως, τα αποτελέσματα της παρούσας υποενότητας δείχνουν ότι όταν οι συνθήκες επιτρέπουν μεγαλύτερο αριθμό περιστροφών στον ίδιο χρόνο, είτε λόγω αυξημένης ταχύτητας περιστροφής είτε λόγω μικρότερης πρόωσης, αυτές συνδέονται άμεσα με μεγαλύτερες μεταβολές του TE. Για σταθερό αριθμό περιστροφών, τα αποτελέσματα της κατεργασίας συνδέεται με το ρυθμό αποβολής υλικού, καθώς οι συνθήκες γίνονται εντονότερες όταν αυξάνει ο αριθμός των κοπτικών ακμών.



**Σχήμα 6.25.** Μεταβολή της δομής του δοκιμίου: (α) άτομα σε «άγνωστη» δομή, (β) άτομα σε κυψελίδες FCC.



**Σχήμα 6.26.** Μεταβολή της δομής του δοκιμίου: άτομα σε σφάλματα επιστοιίβασης και άτομα σε μερικές διαταραχές.

### 6.3 Ανακεφαλαίωση βου κεφαλαίου

Έχοντας ολοκληρώσει τις διερευνήσεις σχετικά με το νανο-φρεζάρισμα με χρήση εργαλείου που προσομοιώνει το κονδύλι και τη φρεζοκεφαλή, κρίνεται σκόπιμο να συνοψιστούν οι παρατηρήσεις και τα συμπεράσματα των διερευνήσεων αυτών. Η κατεργασία του νανο-φρεζαρίσματος έχει μελετηθεί ελάχιστα στη σχετική βιβλιογραφία και ειδικότερα το νανο-φρεζάρισμα με φρεζοκεφαλή με ένθετους κοπτήρες δεν έχει μελετηθεί ακόμα. Επομένως, η διερεύνηση σε βάθος αυτών των κατεργασιών παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον.

Στην κατηγορία των προσομοιώσεων νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι αρχικά διερευνήθηκε η επίδραση της ταχύτητας περιστροφής για ένα μεγάλο εύρος ταχυτήτων. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι η επίδραση της ταχύτητας περιστροφής συνδέεται άμεσα με την κινηματική της κατεργασίας καθώς όταν για το ίδιο μήκος κοπής ο αριθμός των περιστροφών του ΚΕ που προκύπτει είναι σχετικά μικρός, το εργαλείο συμπεριφέρεται σαν στερεό σώμα χωρίς περιστροφή και οι δυνάμεις είναι υψηλές ενώ όταν αυξάνεται η ταχύτητα περιστροφής υπό σταθερή πρόωση προοδευτικά γίνεται εμφανής η διακοπτόμενη φύση του νανο-φρεζαρίσματος μέσω της σημαντικής πτώσης των δυνάμεων. Από κάποιο σημείο και μετά, η αύξηση της ταχύτητας περιστροφής γίνεται υπερβολική και οδηγεί σε συνθήκες κρούσης με έντονα αδρανιακά φαινόμενα οπότε και πάλι αυξάνονται οι δυνάμεις και γίνονται εντονότερες οι μεταβολές της δομής του ΚΕ. Στη συνέχεια έγινε διερεύνηση της επίδρασης του αριθμού των κοπτικών ακμών. Παρατηρήθηκε γενικά ότι η αύξηση του αριθμού των κοπτικών ακμών ιδίως για τις μεγαλύτερες ταχύτητες περιστροφής οδηγεί σε αυξημένες δυνάμεις κατά το νανο-φρεζάρισμα με κονδύλι καθώς αυξάνεται η επαφή ΚΕ-ΤΕ και ο ρυθμός αποβολής υλικού. Τέλος, η αύξηση του βάθους

κοπής οδήγησε σε μεγαλύτερες δυνάμεις και εντονότερες μεταβολές στη δομή του ΚΕ καθώς αυξάνεται η επιφάνεια επαφής ΚΕ-ΤΕ.

Στην κατηγορία των προσομοιώσεων νανο-φρεζαρίσματος με φρεζοκεφαλή αρχικά διερευνήθηκε η επίδραση της ταχύτητας περιστροφής η οποία από την προηγούμενη υποενοότητα είχε αναδειχθεί ως μια ιδιαίτερα κρίσιμη παράμετρος για την κατεργασία αυτή. Επομένως, έγιναν προσομοιώσεις σε ένα μεγάλο εύρος ταχυτήτων περιστροφής και τα αποτελέσματα που παρατηρήθηκαν ήταν ανάλογα με αυτά της προηγούμενης υποενοότητας καθώς αρχικά παρατηρήθηκε μια πτώση των δυνάμεων έως μια τιμή ταχύτητας περιστροφής και στη συνέχεια αφού οι τιμές των δυνάμεων παρέμειναν σχεδόν σταθερές, η αύξηση της ταχύτητας περιστροφής οδήγησε σε υπερβολική αύξηση των δυνάμεων λόγω των έντονων αδρανειακών φαινομένων και παρατηρήθηκαν τελικά ασταθείς συνθήκες με βίαιη εκτόξευση ατόμων από το ΤΕ. Στη συνέχεια μελετήθηκε η επίδραση του αριθμού των κοπτήρων κατά το νανο-φρεζάρισμα με φρεζοκεφαλή και παρατηρήθηκε ότι αύξηση του αριθμού των κοπτήρων οδηγεί σε ξεκάθαρη αύξηση της δύναμης  $F_x$  και σαφώς εντονότερες μεταβολές της δομής του ΤΕ. Τέλος, η μελέτη της επίδρασης της ταχύτητας πρόωσης στο νανο-φρεζάρισμα έδειξε μια ξεκάθαρη αύξηση των δυνάμεων όσο αυξάνεται η πρόωση ενώ οι μεταβολές της δομής του ΤΕ παρουσίασαν μια ιδιαίτερη τάση. Η μεγάλη αύξηση της αταξίας στη δομή του ΤΕ για μικρές ταχύτητες πρόωσης οφείλεται στο γεγονός ότι το ΚΕ εκτελεί σημαντικά περισσότερες περιστροφές για ίδιο μήκος κοπής και επομένως επηρεάζει περισσότερο το ΤΕ ενώ σε μεγαλύτερες ταχύτητες παρατηρείται εκ νέου σταδιακή αύξηση των μεταβολών της δομής με αυξανόμενη ταχύτητα πρόωσης όπως αναμένεται και στη γενική περίπτωση νανοκοπής.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7

### Συμπεράσματα

Έχοντας ολοκληρώσει την παρουσίαση των αναπτυχθέντων υπολογιστικών μοντέλων και έχοντας παρουσιάσει και αναλύσει τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων με χρήση των μοντέλων γενικής ναυοκοπής, ναυο-λείανσης και ναυο-φρεζαρίσματος είναι δυνατόν να εξαχθούν διάφορα χρήσιμα συμπεράσματα σχετικά με τις προαναφερθείσες ναυοκατεργασίες καθώς πραγματοποιήθηκαν διάφορες διερευνήσεις για ευρύ φάσμα παραμέτρων των ναυοκατεργασιών αυτών.

Με χρήση του μοντέλου **γενικής ναυοκοπής** εξήχθησαν τα εξής συμπεράσματα:

- Η μεταβολή του βάθους κοπής και του πλάτους του TE οδηγούν σε σχεδόν αναλογική αύξηση των δυνάμεων κοπής. Αυτό το αποτέλεσμα μπορεί να χρησιμοποιηθεί ώστε να γίνεται η επιλογή κατάλληλων τιμών βάθους και πλάτους σε συνδυασμό με άλλες παραμέτρους προκειμένου τελικά επιτυγχάνεται ο κατάλληλος συμβιβασμός μεταξύ αποδοτικότητας της κατεργασίας και ακεραιότητας του TE.
- Η ταχύτητα κοπής δε μπορεί να χρησιμοποιηθεί αυθαίρετα ως παράγοντας που επιταχύνει τις προσομοιώσεις για οποιοδήποτε εύρος ταχυτήτων. Η ταχύτητα κοπής παρουσιάζει μη γραμμική συσχέτιση με τις δυνάμεις κοπής και τις μεταβολές της δομής του TE και διακρίνονται τρεις ξεχωριστές περιοχές στο εύρος ταχυτήτων από 10-800 m/s. Επιλογή ταχύτητας έως 50 m/s μπορεί να γίνει χωρίς σημαντική διαφοροποίηση των αποτελεσμάτων, η επιλογή μεγαλύτερων ταχυτήτων έως 300 m/s οδηγεί σε σημαντική αύξηση των μεταβολών της δομής του TE, ενώ τέλος η επιλογή μεγαλύτερων τιμών ταχύτητας είναι απαγορευτική καθώς οδηγεί σε εξαιρετικά υψηλότερες δυνάμεις και μεγαλύτερες μεταβολές της δομής του TE λόγω έντονων αδρανειακών φαινομένων. Επομένως εάν η επιθυμητή ταχύτητα κοπής βρίσκεται μέσα στα εύρη 10-50 m/s ή 50-300 m/s είναι δυνατόν να χρησιμοποιηθούν μεγαλύτερες ταχύτητες για επιτάχυνση των προσομοιώσεων εάν αυτό υπαγορεύεται από χαμηλή υπολογιστική ισχύ, όμως δεν είναι δυνατόν να χρησιμοποιούνται αυθαίρετα ταχύτητες από άλλο εύρος ή ανώτερες των 300 m/s.
- Η γωνία αποβλίττου του KE επηρεάζει ιδιαίτερα τις δυνάμεις κοπής, το συντελεστή τριβής και το μέγεθος του αποβλίττου. Η μείωση της γωνίας αποβλίττου, ειδικά σε αρνητικές τιμές οδηγεί σε μεγάλη αύξηση της κάθετης συνιστώσας της δύναμης, τιμές του συντελεστή τριβής άνω της μονάδας και μειωμένο ύψος αποβλίττου λόγω έντονης συμπίεσης.

Με χρήση του μοντέλου **ναυο-λείανσης** εξήχθησαν τα εξής συμπεράσματα:

- Αύξηση του βάθους κοπής ή του μεγέθους κόκκου οδηγεί εκτός από αυξημένες δυνάμεις κοπής σε μειωμένο συντελεστή τριβής λόγω μεγαλύτερης αύξησης της οριζόντιας σε σχέση με την κάθετη συνιστώσα της δύναμης, σε αυξημένη θερμοκρασία, αυξημένο ύψος αποβλίττου και μέγεθος γρεζιού. Παράλληλα, η αύξηση

βάθους κοπής ή μεγέθους κόκκου προκαλεί σημαντικότερες μεταβολές στη δομή του TE. Επομένως ανάλογα και με τις υπόλοιπες συνθήκες κατεργασίες, είναι προτιμότερο να εξετάζεται η διεξαγωγή της κατεργασίας υπό περισσότερα πάσα όπως και η χρήση κόκκων μικρότερων διαστάσεων ώστε να περιορίζονται οι δυσμενείς συνέπειες στην ακεραιότητα του TE αλλά και να πραγματοποιείται αποδοτικά η αποβολή υλικού.

- Οι περιοδικές οριακές συνθήκες αποδεικνύονται αποτελεσματικές καθώς είναι δυνατόν τα μοντέλα με αυτές τις συνθήκες να προσεγγίζουν για την ίδια κατεργασία τη συμπεριφορά μοντέλων μεγαλύτερων διαστάσεων με καλή ακρίβεια. Η χρήση στρώσεων οριακών ατόμων εκτός του ότι συμβάλλει στην αποτροπή της ελεύθερης κίνησης του TE ως στερεό σώμα δεν οδηγεί σε διαφορετικά αποτελέσματα για ίδιο μέγεθος TE. Η χρήση μοντέλου μεγαλύτερου πλάτους όταν σε αυτή την διάσταση υπάρχουν περιοδικές οριακές συνθήκες δεν επηρεάζει ιδιαίτερα τα αποτελέσματα ενώ η χρήση μοντέλου μεγαλύτερου μήκους επηρεάζει σημαντικά τα αποτελέσματα σε κάθε περίπτωση. Επομένως, προτείνεται να χρησιμοποιούνται μοντέλα με περιοδικές οριακές συνθήκες κατά το πλάτος και μήκος σημαντικά μεγαλύτερο από το μήκος κοπής προκειμένου να μην επηρεάζονται τα αποτελέσματα από τις οριακές συνθήκες και το μέγεθος του μοντέλου.
- Το σχήμα του λειαντικού κόκκου το οποίο παρουσιάζει διάφορες γεωμετρίες στην πράξη και μεταβάλλεται καθώς αυξάνεται η φθορά, επηρεάζει τα αποτελέσματα της κατεργασίας διότι μεταβάλλεται η επιφάνεια επαφής κόκκου-TE. Για ίδια διάμετρο ή μέγιστη διάσταση, ορισμένες γεωμετρίες, όπως η οκταεδρική μπορεί να εμφανίσουν σημαντικά μειωμένες δυνάμεις κατεργασίας ή ηπιότερες μεταβολές της δομής του TE αλλά και σημαντικά μειωμένο ρυθμό αποβολής υλικού κάτι που είναι ανεπιθύμητο.
- Η διάταξη των κόκκων του λειαντικού τροχού επηρεάζει ιδιαίτερα την τοπογραφία της επιφάνειας και τη μορφολογία του αποβλίττου. Πιο συγκεκριμένα, η απόσταση μεταξύ των κόκκων στην εγκάρσια διεύθυνση οδηγεί σε διαφοροποίηση του μεγέθους των αυλακιών που παράγονται καθώς και του ύψους και του όγκου του αποβλίττου και του γρεζιού διότι για μικρές αποστάσεις μεταξύ των κόκκων δημιουργείται ενιαίο αυλάκι και απόβλιττο ενώ εάν οι κόκκοι βρίσκονται σε μεγαλύτερες αποστάσεις δημιουργούνται ξεχωριστά αυλάκια. Επομένως ανάλογα με την απόσταση των κόκκων πρέπει να επιλέγονται κατάλληλες τιμές των άλλων παραμέτρων της κατεργασίας ώστε η στρατηγική που ακολουθείται να είναι αποδοτική.
- Η γωνία αποβλίττου του λειαντικού κόκκου επηρεάζει ιδιαίτερα την κατεργασία της νανο-λείανσης καθώς όσο πιο αρνητική γίνεται η γωνία τόσο αυξάνονται οι δυνάμεις και ο συντελεστής τριβής υπερβαίνει τη μονάδα. Παράλληλα, η δημιουργία του αποβλίττου παρότι είναι δυνατή έως και για γωνίες αποβλίττου  $-60^\circ$ , καθίσταται ιδιαίτερα δύσκολη για μειούμενη γωνία αποβλίττου λόγω έντονης συμπίεσης που οδηγεί σε συνθήκες εξώθησης παρά κοπής.
- Η χρήση της τεχνικής προθέρμανσης του TE είναι κατάλληλη ώστε να μειώσει αισθητά τις δυνάμεις κατά τη νανο-λείανση όμως οδηγεί και σε αύξηση των μεταβολών της δομής του TE ιδιαίτερα για μεγαλύτερες θερμοκρασίες προθέρμανσης. Με βάση τα αποτελέσματα, προτείνεται επιλογή θερμοκρασιών προθέρμανσης μεταξύ 40% και 55% του σημείου τήξης του υλικού. Παρόλα αυτά συνιστάται η υιοθέτηση τεχνικής υποβοήθησης της κατεργασίας μέσω μιας πηγής υψηλής ενέργειας όπως π.χ. laser

προκειμένου να επιτυγχάνεται μείωση δυνάμεων αλλά και περιορισμένη επίδραση του επιπλέον ποσού θερμότητας στη δομή του TE.

Με χρήση του μοντέλου **νανο-φρεζαρίσματος** εξήχθησαν τα εξής συμπεράσματα:

- Η επιλογή της ταχύτητας περιστροφής είναι ιδιαίτερα σημαντική κατά το νανο-φρεζάρισμα με εργαλείο που προσομοιάζει το κονδύλι. Λόγω του ότι η γραμμική ταχύτητα πρέπει να είναι αρκετά μεγαλύτερη της πρόωσης ώστε να είναι εμφανής η διακοπτόμενη φύση της κατεργασίας και λόγω του ότι η πρόωση στις προσομοιώσεις νανοκοπής είναι σχετικά μεγάλη, το εύρος ταχυτήτων περιστροφής για ευσταθή κατεργασία είναι περιορισμένο και εξαρτάται και από την ταχύτητα πρόωσης. Για σταθερή πρόωση, μικρή ταχύτητα περιστροφής ουσιαστικά οδηγεί σε συνθήκες απλής κοπής όπως η νανο-εγχάραξη, μετά από ένα όριο επιτυγχάνεται η διακοπτόμενη φύση του νανο-φρεζαρίσματος και για ακόμα μεγαλύτερες ταχύτητες εμφανίζονται έντονα αδρανειακά φαινόμενα και αστάθεια. Επομένως διακρίνονται δύο οριακές τιμές ταχύτητας περιστροφής για ευσταθή κατεργασία, εκ των οποίων το κάτω όριο προσδιορίζεται από τη σχέση γραμμική ταχύτητα προς πρόωση ενώ το άνω όριο προσδιορίζεται από τη μέγιστη δυνατή ταχύτητα για ευσταθή κατεργασία π.χ. σε σχέση με την ταχύτητα διάδοσης του ήχου στο υλικό. Όσο μεγαλύτερη είναι η ταχύτητα πρόωσης τόσο πιο περιορισμένο είναι το εύρος των κατάλληλων ταχυτήτων. Τα αποτελέσματα αυτά αντικατοπτρίζονται τόσο στις δυνάμεις όσο και στις μεταβολές της δομής του TE.
- Η αύξηση του αριθμού των κοπτικών ακμών οδηγεί γενικά σε αύξηση δυνάμεων και μεγαλύτερες μεταβολές στη δομή ενώ σε χαμηλές ταχύτητες περιστροφής παρατηρούνται συνθήκες μετάβασης από απλή κοπή σε διακοπτόμενη κοπή μεταξύ περιπτώσεων με 2 και 4 κοπτικές ακμές. Επίσης, μεταβολή του βάθους κοπής οδηγεί σε σχεδόν αναλογική αύξηση των δυνάμεων και των μεταβολών της δομής του TE.
- Η ταχύτητα περιστροφής παίζει ιδιαίτερα σημαντικό ρόλο και στην περίπτωση νανο-φρεζαρίσματος με εργαλείο που προσομοιάζει τη φρεζοκεφαλή. Παρόμοια με την περίπτωση νανο-φρεζαρίσματος με κονδύλι, για σταθερή πρόωση, σε χαμηλές ταχύτητες περιστροφής επικρατούν συνθήκες απλής κοπής, στη συνέχεια για μέτριες ταχύτητες ευσταθής διακοπτόμενη κοπή ενώ για μεγαλύτερες ταχύτητες οι συνθήκες αλλάζουν ραγδαία με αστάθεια και έντονη εκτόξευση σωματιδίων από το TE λόγω αδρανειακών φαινομένων. Σε αντίθεση με το νανο-φρεζάρισμα με κονδύλι εμφανίζεται και entry side burr εκτός του top burr ενώ οι μεταβολές στη δομή γίνονται αρκετά μεγαλύτερες όταν εκδηλώνεται ο διακοπτόμενος χαρακτήρας της κατεργασίας.
- Η αύξηση του αριθμού κοπτήρων για σταθερή ταχύτητα πρόωσης και περιστροφής οδηγεί σε μετάβαση από συνθήκες απλής κοπής σε διακοπτόμενη κοπή για περισσότερους από έναν κοπτήρες και στη συνέχεια παρότι επιτυγχάνεται αύξηση του ρυθμού αποβολής υλικού παράλληλα προκύπτει αύξηση των δυνάμεων και των μεταβολών της δομής του TE.
- Η αύξηση της ταχύτητας πρόωσης εκτός του ότι οδηγεί στην αναμενόμενη αύξηση των δυνάμεων λόγω της αυξημένης επιφάνειας επαφής KE-TE, οδηγεί αρχικά σε μείωση των μεταβολών της δομής του TE διότι μειώνεται ο αριθμός των περιστροφών για ίδιο μήκος κοπής ενώ για μεγάλες τιμές πρόωσης παύει να εκδηλώνεται ο διακοπτόμενος



χαρακτήρας της ταχύτητας και οι μεταβολές της δομής αυξάνονται εκ νέου όπως σε κατεργασίες απλής κοπής π.χ. νανο-εγχάραξη.

Κλείνοντας, αξίζει να τονιστεί ότι η διενέργεια των προσομοιώσεων γενικής νανοκοπής, νανο-λείανσης και νανο-φρεζαρίσματος κατέδειξε τις δυνατότητες της μεθόδου ΜΔ και την καταλληλότητά της για τη μελέτη των νανοκατεργασιών, καθώς επιτρέπει άμεσα την παρατήρηση των μεταβολών τόσο της τοπογραφίας των ΤΕ που κατεργάζονται όσο και των μεταβολών που υφίσταται η δομή του υλικού των ΤΕ, τον υπολογισμό των δυνάμεων, του συντελεστή τριβής και της θερμοκρασίας. Επομένως η χρήση της μεθόδου ΜΔ επιτρέπει την κατάλληλη επιλογή παραμέτρων για τη βέλτιστη διεξαγωγή των νανοκατεργασιών αυτών ανάλογα με τους στόχους που τίθενται και μπορεί να εξηγήσει . Τα μοντέλα που αναπτύχθηκαν μπορούν να αποτελέσουν τη βάση για περαιτέρω διερευνήσεις σε πιο εξειδικευμένα θέματα σχετικά με τις νανοκατεργασίες καθώς και να ενταχθούν στο πλαίσιο πολυεπίπεδων προσομοιώσεων για την πιο λεπτομερή μελέτη των κατεργασιών αυτών σε διάφορες κλίμακες.

## Μελλοντικές προεκτάσεις της διατριβής

Τα μοντέλα που αναπτύχθηκαν στην παρούσα διατριβή μπορούν να αποτελέσουν τη βάση για μελλοντικές μελέτες στον τομέα των Νανοκατεργασιών είτε απευθείας με τη χρήση ΜΔ είτε ενταγμένα σε ένα πλαίσιο πολυεπίπεδης παραμόρφωσης. Επομένως, τα μοντέλα που παρουσιάστηκαν είναι δυνατόν να επεκταθούν στο μέλλον προκειμένου να είναι δυνατό να μελετηθούν πιο σύνθετα συστήματα ή να αυξηθεί ο βαθμός ρεαλισμού τους καθώς και να εφαρμοστούν σε υβριδικές κατεργασίες.

Όσον αφορά τη **νανο-λείανση**, είναι δυνατό να γίνουν διάφορες επιπλέον μελέτες όπως:

- Μελέτη της κατεργασίας σε περιβάλλον υγρού ή υπό συνθήκες χαμηλών θερμοκρασιών
- Μελέτη της κατεργασίας της νανο-λείανσης με πολλαπλά πάσα
- Μελέτη της επίδρασης της φθοράς των λειαντικών κόκκων
- Μελέτη της νανο-λείανσης υποβοηθούμενης από ταλαντώσεις ή δέσμη υψηλής ενεργείας
- Δημιουργία ενός μοντέλου πολλαπλών κλιμάκων σχετικό με τη νανο-λείανση

Όσον αφορά το **νανο-φρεζάρισμα**, είναι δυνατό να γίνουν επιπλέον μελέτες σχετικές με τα εξής θέματα:

- Επέκταση των υπάρχουσών μελετών για διάφορες ταχύτητες πρόωσης και προσδιορισμός του κατάλληλου εύρους ταχυτήτων για ευσταθή κατεργασία
- Δημιουργία ΚΕ με κλίση της κοπτικής ακμής
- Μελέτη της επίδρασης της στιβαρότητας του ΚΕ
- Μελέτη της καταλληλότητας άλλων τεχνικών φρεζαρίσματος

## Λίστα δημοσιεύσεων

Κατά τη διάρκεια εκπόνησης της διδακτορικής διατριβής πραγματοποιήθηκαν ορισμένες δημοσιεύσεις σχετικές με το αντικείμενο της μοντελοποίησης των Νανοκατεργασιών με τη μέθοδο ΜΔ:

- Σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά

**N.E. Karkalos** and A.P. Markopoulos, "Determination of the efficiency of hot nano-grinding of monocrystalline fcc metals using Molecular Dynamics method", *Micromachines*, Vol. XX, No. X, XX, 2022 (υπό κρίση)

**N.E. Karkalos** and A.P. Markopoulos, "Molecular Dynamics Study of the Effect of Abrasive Grains Orientation and Spacing during Nanogrinding", *Micromachines*, Vol. 11, No. 8, 712, 2020.

A.P. Markopoulos, **N.E. Karkalos**, E.-L. Papazoglou, "Meshless Methods for the Simulation of Machining and Micro-machining: A Review", *Archives of Computational Methods in Engineering*, 27, pp. 831–853, 2020.

**N.E. Karkalos** and A.P. Markopoulos, "Modeling Nano-Metric Manufacturing Processes with Molecular Dynamics Method: A Review", *Current Nanoscience*, Vol. 13(1), pp. 3-20, 2017

**N.E. Karkalos**, A.P. Markopoulos and D.E. Manolakas, "Cutting speed in nano-cutting as MD modeling parameter", *International Journal of Manufacturing, Materials, and Mechanical Engineering*, Vol. 6(1), pp. 1-13, 2016.

A.P. Markopoulos, I.K. Savvopoulos, **N.E. Karkalos** and D.E. Manolakas, "Molecular Dynamics modeling of a single diamond abrasive grain in grinding", *Frontiers of Mechanical Engineering*, Vol. 10(2), pp. 168-175, 2015.

A.P. Markopoulos, **N.E. Karkalos**, K.A.L. Kalteremidou, A. Balafoutis and D.E. Manolakas, "The influence of cutting conditions and cutting tool geometry on the atomistic modeling of precision cutting", *Engineering Solid Mechanics*, Vol. 3(3), pp. 195-206, 2015.

- Σε διεθνή επιστημονικά συνέδρια με πλήρη κρίση

**N.E. Karkalos**, A.P. Markopoulos, J. Kundrák, "3D Molecular Dynamics model for nano-machining of fcc and bcc materials", *Procedia CIRP*, Vol. 77, pp. 203-206, 2018. DOI: 10.1016/j.procir.2018.08.286

**N.E. Karkalos**, A.P. Markopoulos, "Molecular dynamics simulation of multi-pass nano-grinding process", *MATEC Web of Conferences*, 178, 03016, 2018, DOI: 10.1051/matecconf/201817803016

**N.E. Karkalos**, A.P. Markopoulos, J. Kundrák, “Molecular Dynamics Model of Nano-metric Peripheral Grinding”, *Procedia CIRP*, Vol. 58, pp. 281–286, 2017. DOI: 10.1016/j.procir.2017.03.189

**N.E. Karkalos** and A.P. Markopoulos, “Molecular Dynamics Simulation of Nano-Grinding with Multiple Abrasive Grains”, *Solid State Phenomena*, Vol. 261, pp. 115-120, 2017. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.261.115

A.P. Markopoulos, **N.E. Karkalos** and D.E. Manolagos, “Molecular dynamics study of abrasive grain morphology and orientation in nano-metric grinding”, *Key Engineering Materials*, Vol. 686, pp. 7-12, 2016. DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.686.7

- Κεφάλαια σε επιστημονικά συγγράμματα:

R. Rentsch, A.P. Markopoulos, **N.E. Karkalos**, “Modeling of Micro- and Nano-Scale Cutting”, *Microfabrication and Precision Engineering: Research and Development* (Ed. J.P. Davim), A volume in *Woodhead Publishing Reviews: Mechanical Engineering Series*, Elsevier Ltd., pp. 1-25, 2017. DOI: 10.1016/B978-0-85709-485-8.00001-2

# Βιβλιογραφία

- [1] Callister, W.J.; Rethwisch, D.G. *Materials Science and Engineering, An Introduction*, 8th ed., John Wiley & Sons, Inc., 2010.
- [2] Smallman, R.E., Ngan, A.H.W. *Modern Physical Metallurgy*, 8th ed., Elsevier Ltd., 2014.
- [3] Sólyom, J. *Fundamentals of the Physics of Solids, Volume 1 – Structure and Dynamics*, 7<sup>th</sup> ed., Springer, 2007.
- [4] Myers, H.P. *Introductory Solid State Physics*, 2nd ed., Taylor & Francis, 1997.
- [5] Askeland, D.R.; Wright, W.J. *The Science and Engineering of Materials*, 7th ed., CENGAGE Learning, 2016.
- [6] Shackelford, J.F. *Introduction to Materials Science for Engineers*, 8th ed., Pearson, 2015.
- [7] Μανωλάκος, Δ.Ε. *Τεχνικά Υλικά Ι (Πανεπιστημιακές σημειώσεις του μαθήματος)*, 2011.
- [8] Hull, D.; Bacon, D.J. *Introduction to Dislocations*, 5th ed., Elsevier Ltd., 2011.
- [9] Kittel, C. *Introduction to Solid State Physics*, 8th ed., John Wiley & Sons, Inc., 2005.
- [10] Smith, W., Hashemi, J. *Foundations of Materials Science and Engineering*, 6th ed., McGraw Hill Education, 2019.
- [11] Pelleg, J. *Mechanical Properties of Materials*, Springer, 2013.
- [12] Dieter, G.E. *Mechanical Metallurgy*, McGraw-Hill Book Co., 1988.
- [13] Cola, Ö.N.; Koç, M. *Micromanufacturing*, Modern Manufacturing Processes, 1st ed., John Wiley & Sons, Inc., 2020.
- [14] Koç, M.; Özel, T. *Fundamentals of Micro-Manufacturing*, Micro-Manufacturing: Design and Manufacturing of Micro-Products, 1st ed., John Wiley & Sons, Inc., 2011.
- [15] Fu, M.W.; Chan, W.L. *A review on the state-of-the-art microforming technologies*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 67, 2013, 2411-2437.
- [16] Vollertsen, F.; Schultze-Niehorf, H.; Hu, Z. *State of the art in micro forming*, International Journal of Machine Tools & Manufacture, 46, 2006, 1172-1179.
- [17] Fu, M.W.; Wang, J.L. *Size effects in multi-scale materials processing and manufacturing*, International Journal of Machine Tools & Manufacture, 167, 2021, 103755.
- [18] Vaezi, M.; Seitz, H.; Yang, S. *A review on 3D micro-additive manufacturing technologies*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 67, 2013, 1721-1754.
- [19] Jain, V.K.; Sidpara, A.; Balasubramaniam, R.; Lodha, G.S.; Dhamgaye, V.P.; Shukla, R. *Micromanufacturing: A review-Part I*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture, 228(9), 2014, 973-994.

- [20] Chu, W.S.; Kim, C.S.; Lee, H.T.; Choi J.O.; Park, J.I.; Song, J.H.; Jang, K.H.; Ahn, S.H. *Hybrid Manufacturing in Micro/Nano Scale: A review*, International Journal of Precision Engineering and Manufacturing- Green Technology, 1(1), 2014, 75-92.
- [21] Engel, U.; Eckstein, R. *Microforming – from basic research to its realization*, Journal of Materials Processing Technology, 125-126, 2002, 35-44.
- [22] Jain, V.K.; Dixit, U.S.; Paul, C.P; Kumar, A. *Micromanufacturing: A review-Part II*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture, 228(9), 2014, 995-1014.
- [23] Guo, K.W. *A review of Micro/Nano Welding and its Future Developments*, Recent Patents on Nanotechnology, 3, 2009, 53-60.
- [24] Zhou, Y.; Hu, A.; Khan, M.I.; Wu, W.; Tam, B.; Yavuz, M. *Recent progress in micro and nano-joining*. Journal of Physics: Conference Series, 165, 2009, 012012.
- [25] Esteve, F.; Olivier, D.; Hu, Q.; Baumers, M. *Micro-additive Manufacturing Technology*, Micro-Manufacturing Technologies and Their Applications: A Theoretical and Practical Guide, Springer International Publishing, 2017.
- [26] Cheng, K.; Huo, D. *Micro-cutting: Fundamentals and Applications*, 1st ed., John Wiley & Sons, Ltd., 2013.
- [27] Shore, P.; Morantz, P. *Ultra-precision: enabling our future*, Philosophical Transactions of the Royal Society A, 370, 2012, 3993-4014.
- [28] Kumar, S.P.L.; Jerald, J.; Kumanan, S.; Prabakaran, R. *A review on current research aspects in tool-based micromachining processes*, Materials and Manufacturing, 29, 2014, 1291-1337.
- [29] Brinksmeier, E.; Preuss, W. *Micro-machining*, Philosophical Transactions of the Royal Society A, 370, 2012, 3973-3992.
- [30] Dornfeld, D.; Min, S.; Takeuchi, Y. *Recent Advances in Mechanical Micromachining*, Annals of the CIRP, 55 (2), 2006, 745-768.
- [31] Simoneau, A.; Ng, E.; Elbestawi, M.A., *Chip formation during microscale cutting of a medium carbon steel*, International Journal of Machine Tools and Manufacture, 46 (5), 2006, 467-481.
- [32] Fang, F.; Xu, F. *Recent Advances in Micro/Nano-cutting: Effect of Tool Edge and Material Properties*, Nanomanufacturing and Metrology, 1(1), 2018, 4-31.
- [33] Goel, S.; Luo, X.; Agrawal, A.; Reuben, R.L. *Diamond machining of silicon: A review of advances in molecular dynamics simulation*, International Journal of Machine Tools and Manufacture, 88, 2015, 131-164.
- [34] Gherman, L.; Gleadall, A.; Bakker, O.; Ratchev, S. *Manufacturing Technology: Micro-machining*, Micro-Manufacturing Technologies and Their Applications, Springer International Publishing, 2017.
- [35] Boswell, B.; Islam, M.; Davies, I. *A review of micro-mechanical cutting*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 94 (1-4), 2017, 789-806.
- [36] Zhang, S.J.; To, S.; Zhu, Z.W.; Zhang, G.Q. *A review of fly cutting applied to surface generation in ultra-precision machining*, International Journal of Machine Tools and Manufacture, 103, 2016, 13-27.

- [37] Anand, R.S.; Patra, K. *Modeling and Simulation of Mechanical Micro-Machining- A Review*, Machining Science and Technology: An International Journal, 18 (3), 2014, 323-347.
- [38] Chavoshi, S.Z.; Goel, S.; Morantz, P. *Current trends and future of sequential micro-machining processes on single machine tool*, Materials and Design, 127, 2017, 37-53.
- [39] Gao, S.; Huang, H. *Recent advances in micro- and nano-machining technologies*, Frontiers of Mechanical Engineering, 12 (1), 2017, 18-32.
- [40] Cardoso, P.; Davim, J.P. *A brief review on micromachining of materials*, Reviews on Advanced Materials Science, 30(1), 2012, 98-102.
- [41] Shunmugam, M.S. *Machining Challenges: Macro to Micro Cutting*, Journal of the Institution of Engineers (India): Series C, 97, 2016, 223-241.
- [42] Lee, Y.J., Wang, H. *Current understanding of surface effects in microcutting*, Materials and Design, 192, 2020, 108688.
- [43] Oliaei, S.N.B.; Karpat, Y.; Davim, J.P.; Perveen, A. *Micro tool design and fabrication: A review*, Journal of Manufacturing Processes, 36, 2018, 496-519.
- [44] Balázs, B.Z.; Geier, N.; Takács, M.; Davim, J.P. *A review on micro-milling: recent advances and future trends*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 112, 2021, 655-684.
- [45] Robinson, G.M.; Jackson, M.J.; Whitfield, M.D. *A review of machining theory and tool wear with a view to developing micro and nano machining processes*, Journal of Materials Science, 42, 2007, 2002-2015.
- [46] Hasan, J.; Zhao, J.; Jiang, Z. *A review of modern advancements in micro drilling techniques*, Journal of Manufacturing Processes, 29, 2017, 343-375.
- [47] Huang, J. *Micro grinding applications*, Micro-Cutting: Fundamentals and Applications, 1<sup>st</sup> ed., John Wiley & Sons, Ltd., 2013.
- [48] Park, H.W.; Liang, S.Y. *Force modeling of micro-grinding incorporating crystallographic effects*, International Journal of Machine Tools & Manufacture, 48, 2008, 1658-1667.
- [49] Aurich, J.C.; Carella, M.; Walk, M. *Micro grinding with ultra small micro pencil grinding tools using an integrated machine tool*, CIRP Annals- Manufacturing Technology, 64, 2015, 325-328.
- [50] Arrabiyeh, P.A.; Setti, D.; Basten, S.; Kirsch, B.; Aurich, J.C. *Micro grinding 16MnCr5 hardened steel using micro pencil grinding tools with diameters ~50 μm*, CIRP Journal of Manufacturing Science and Technology, 27, 2019, 1-10.
- [51] Pratap, A.; Patra, K.; Dyakonov, A.A. *Manufacturing Miniature Products by Micro-grinding: A Review*, Procedia Engineering, 150, 2016, 969-974.
- [52] Kadivar, M. *High Precision Micro-Grinding of Advanced Materials*, Διδακτορική Διατριβή, Chalmers University of Technology, Sweden, 2021.
- [53] Ren, Y.; Li, C.; Li, W.; Li, M.; Liu, H. *Study on micro-grinding quality in micro-grinding tool for single crystal silicon*, Journal of Manufacturing Processes, 42, 2019, 246-256.

- [54] Li, W.; Chen, Q.; Ren, Y.; Jiao, Y., Ibrahim, A.M.M. *Hybrid micro-grinding process for manufacturing meso/micro-structures on monocrystalline silicon*, Materials and Manufacturing Processes, 36 (1), 2021, 17-26.
- [55] Wang, T.; Liu, H.; Wu, C.; Cheng, J.; Yu, T.; Chen, M. *Wear characteristics of small ball-end fine diamond grinding pins dressed by on-machine electrical discharge*, Wear, 476, 2021, 203765.
- [56] Jackson, M.J. *Recent advances in ultraprecision abrasive machining processes*, SN Applied Sciences, 2, 2020, 1172.
- [57] Li, W.; Ren, Y.; Li, C.; Li, Z.; Li, M. *Investigation of machining and wear performance of various diamond micro-grinding tools*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 106, 2020, 921-935.
- [58] Arrabiyeh, P.A.; Kirsch, B.; Aurich, J.C. *Development of Micro Pencil Grinding Tools Via an Electroless Plating Process*, Journal of Micro and Nano Manufacturing, 5(1), 2017, 011002.
- [59] Butler-Smith, P.W.; Axinte, D.A.; Daine, M. *Solid diamond micro-grinding tools: From innovative design and fabrication to preliminary performance evaluation in Ti-6Al-4V*, International Journal of Machine Tools & Manufacture, 59, 2012, 55-64.
- [60] Yu, T.; Cheng, J.; Gao, C.; Wu, J.; Guo, Z. *Modeling and experimental study of different discontinuous micro-grinding tools*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 107, 2020, 4009-4032.
- [61] Zhou, T.; He, Y.; Yu, Q.; Liang, Z.; Li, S.; Liu, X.; Dong, X.; Wang, X. *Study on electroless composite plating for an Ni-P bond micro diamond wheel*, Journal of Materials Processing Technology, 279, 2020, 116561.
- [62] Wang, C.; Gong, Y.; Cheng, J.; Wen, X.; Zhou, Y. *Fabrication and evaluation of micromill-grinding tools by electroplating CBN*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 87, 2016, 3513-3526.
- [63] Biermann, D.; Feldhoff, M. *Abrasive points for drill grinding of carbon fibre reinforced thermoset*, CIRP Annals-Manufacturing Technology, 61 (1), 2012, 299-302.
- [64] Cheng, J.; Yin, G. Q. ; Wen, Q. ; Song, H. ; Gong, Y. D. *Study on grinding force modelling and ductile regime propelling technology in micro drill-grinding of hard-brittle materials*, Journal of Materials Processing Technology, 223, 2015, 150-163.
- [65] Cheng, J.; Gong, Y.; Liu, Y.; Yang, J. *Experimental Study of Micro Mill-Grinding Process on Al 6061-T6*, Advanced Engineering Forum, 2-3, 2012, 797-800.
- [66] Wang, C.; Yadong, G.; Guoqiang, Y.; Xuelong, W.; Jun, C. *Study on Micro Mill-Grinding Technology*, Applied Mechanics and Materials, 390, 2013, 586-590.
- [67] Gong, Y.; Wang, C.; Cheng, J.; Wen, X.; Yin, G. *Influence of Processing Parameters on Surface Roughness in Micro Mill-Grinding Aluminum Alloy 6061*, 1017, 2014, 495-499.
- [68] Wen, X.; Gong, Y.; Wang, C. *Experimental research on micro mill-grinding AISI 1045 steel with a cold spraying compound micro cutting tool*, Journal of Mechanical Science and Technology, 32(12), 2018, 5863-5874.



- [69] Malshe, A.P.; Rajurkar, K.P.; Virwani, K.R.; Taylor, C.R.; Bourell, D.L.; Levy, G.; Sundaram, M.M.; McGeough, J.A.; Kalyanasundaram, V.; Samant, A.N. *Tip-based nanomanufacturing by electrical, chemical, mechanical and thermal processes*, CIRP Annals-Manufacturing Technology, 59, 2010, 628-651.
- [70] Fang, F.Z.; Zhang, X.D.; Gao, W.; Guo, Y.B.; Byrne, G.; Hansen, H.N. *Nanomanufacturing – Perspective and applications*, CIRP Annals – Manufacturing Technology, 66(2), 2017, 683-705.
- [71] Fang, F.; Zhang, N.; Guo, D.; Ehmann, K.; Cheung, B.; Liu, K.; Yamamura, K. *Towards atomic and close-to-atomic guide manufacturing*, International Journal of Extreme Manufacturing, 1, 2019, 012001.
- [72] Mathew, P.T.; Rodriguez, B.J.; Fang, F. *Atomic and Close-to-Atomic Scale Manufacturing: A Review on Atomic Layer Removal Methods Using Atomic Force Microscopy*, Nanomanufacturing and Metrology, 3, 2020, 167-186.
- [73] Yan, Y.; Geng, Y.; Hu, Z. *Recent advances in AFM tip-based nanomechanical machining*, International Journal of Machine Tools & Manufacture, 99, 2015, 1-18.
- [74] Hu, H.; Kim, H.J.; Somnath, S. *Tip-based Nanofabrication for Scalable Manufacturing*, Micromachines, 8, 2017, 90.
- [75] Fang, F.; Xu, F. *Recent Advances in Micro/Nano-cutting: Effect of Tool Edge and Material Properties*, Nanomanufacturing and Metrology, 1, 2018, 4-31.
- [76] Islam, S.; Ibrahim, R.N. *Mechanism of Abrasive Wear in Nanomachining*, Tribology Letters, 42, 2011, 275-284.
- [77] Yan, Y.; Hu, Z.; Zhao, X.; Sun, T.; Dong, S.; Li, X. *Top-Down Nanomechanical Machining of Three-Dimensional Nanostructures by Atomic Force Microscopy*, Small, 6 (6), 2010, 724-728.
- [78] Tseng, A.A. *Advancements and challenges in development of atomic force microscopy for nanofabrication*, Nano Today, 6, 2011, 493-509.
- [79] Wang, J.; Yan, Y.; Li, Z.; Geng, Y. *Towards understanding the machining mechanism of the atomic force microscopy tip-based nanomilling process*, International Journal of Machine Tools and Manufacture, 162, 2021, 103701.
- [80] Gozen, B.A.; Ozdoganlar, O.B. *A rotating-tip-based, mechanical nano-manufacturing process: nanomilling*, Nanoscale Research Letters, 5, 2010, 1403-1407.
- [81] Gozen, B.A.; Ozdoganlar, O.B. *Design and evaluation of a mechanical nanomanufacturing system for nanomilling*, Precision Engineering – Journal of the International Society of Precision Engineering, 36, 2012, 49-58.
- [82] Zhang, J.; Cui, T.; Ge, C.; Sui, Y.; Yang, H. *Review of micro/nano machining by utilizing elliptical vibration cutting*, International Journal of Machine Tools and Manufacture, 106, 2016, 109-126.
- [83] Wang, Y.; Shi, J.; Wang, X. *Influences of silicon crystal anisotropy in nano-machining processes using AFM*, Proceedings of the ASME 2013 International Mechanical Engineering Congress and Exposition, 2013, San Diego, California, USA.
- [84] Ahn, B.W.; Lee, S.H. *Characterization and acoustic emission monitoring of AFM nanomachining*, Journal of Micromechanics and Microengineering, 19, 2009, 045028.

- [85] Brousseau, E.; Al-Musawi, R.S.J.; Lebiez, D. *A hybrid roll-to-roll AFM set-up for high throughput tip-based nano-machining*, Manufacturing Letters, 6, 2015, 10-13.
- [86] Cheng, F.; Dong, J. *Monitoring tip-based nanomachining process by time series analysis using support vector machine*, Journal of Manufacturing Processes, 38, 2019, 158-166.
- [87] Fang, T.H.; Chang, W.J.; Weng, C.I. *Surface analysis of nanomachined films using atomic force microscopy*, Materials Chemistry and Physics, 92, 2005, 379-383.
- [88] Geng, Y.Q.; Yan, Y.D.; Zhao, X.S.; Hu, Z.J.; Liang, Y.C.; Sun, T.; Dong, S. *Fabrication of millimeter scale nanochannels using the AFM tip-based nanomachining method*, Applied Surface Science, 266, 2013, 386-394.
- [89] Geng, Y.; Yan, Y.; Xing, Y.; Zhao, X.; Hu, Z. *Modelling and experimental study of machined depth in AFM-based milling of nanochannels*, International Journal of Machine Tools & Manufacture, 73, 2013, 87-96.
- [90] Geng, Y.; Brousseau, E.B.; Zhao, X.; Gensheimer, M.; Bowen, C.R. *AFM tip-based nanomachining with increased cutting speed at the tool-workpiece interface*, Precision Engineering, 51, 2018, 536-544.
- [91] Huang, J.C.; Lee, J.W.; Li, C.L. *Nano-scratching and nano-machining in different environments on Cr<sub>2</sub>N/Cu multilayer thin films*, Thin Solid Films, 519, 2011, 4992-4996.
- [92] Kawasegi, N.; Takano, N.; Oka, D.; Morita, N.; Yamada, S.; Kanda, K.; Takano, S.; Obata, T.; Ashida K. *Nanomachining of Silicon Surface Using Atomic Force Microscope With Diamond Tip*, Journal of Manufacturing Science and Engineering, 128, 2006, 723-729.
- [93] Peng, P.; Shi, T.; Liao, G.; Tang, Z.; Liu, C. *Scratch of Submicron Grooves on Aluminum Film with AFM Diamond Tip*, Proceedings of the 2009 4th IEEE International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular System, 2009, Shenzhen, China.
- [94] Yan, Y.; Sun, T.; Liang, Y.; Dong, S. *Investigation on AFM-based micro/nano-CNC machining system*, International Journal of Machine Tools & Manufacture, 47, 2007, 1651-1659.
- [95] Zhang, F.; Zhang, H.; Yan, Y.; Wang, J. *Research on Nano-scale Material Removal Process Using Atomic Force Microscopy*, Key Engineering Materials, 359-360, 2008, 269-273.
- [96] Zhang, H.L.; Kuai, J.C.; Zhang, F.H. *Minimum Thickness of Cut in Nanomachining using Atomic Force Microscopy*, 2010 International Conference on E-Product E-service and E-Entertainment, 2010, Henan, China.
- [97] Zhao, Q.; Sun, T.; Liang, Y.; Dong, S.; Chen, M. *Atomic force microscope using a diamond tip: a tool for micro-nanomachining on single crystal silicon surface*, Proceedings of SPIE, 4601, 2001, 73-78.
- [98] Mekid, S. *Dedicated instruments for nano-engineering education: Integrated nano-manipulation and micro-nanomachining*, International Journal of Mechanical Engineering Education, 49(1), 2021, 60-71.
- [99] Deng, J.; Zhang, L.; Dong, J.; Cohen, P.H. *AFM-based 3D Nanofabrication using Ultrasonic Vibration Assisted Nanomachining*, Procedia Manufacturing, 1, 2015, 584-592.
- [100] Deng, J.; Zhang, L.; Dong, J.; Cohen, P.H. *AFM-based 3D nanofabrication using ultrasonic vibration assisted nanomachining*, Journal of Manufacturing Processes, 24, 2016, 195-202.

- [101] Kong, X.; Cohen, P.H.; Dong, J. *Predictive modeling of feature dimension for tip-based nanomachining process*, Journal of Manufacturing Processes, 24, 2016, 338-345.
- [102] Kong, X.; Dong, J.; Cohen, P.H. *Modeling of the dynamic machining force of vibration-assisted nanomachining process*, Journal of Manufacturing Processes, 28, 2017, 101-108.
- [103] Kong, X.; Deng, J.; Dong, J.; Cohen, P.H. *Study of tip wear for AFM-based vibration-assisted nanomachining process*, Journal of Manufacturing Processes, 50, 2020, 47-56.
- [104] Liu, W.; Yan, Y.; Hu, Z.; Zhao, X.; Yan, J.; Dong, S. *Study on the nano machining process with a vibrating AFM tip on the polymer surface*, Applied Surface Science, 258, 2012, 2620-2626.
- [105] Park, S.S.; Mostofa, M.G.; Park, C.I.; Mehrpouya, M.; Kim, S. *Vibration assisted nano mechanical machining using AFM probe*, CIRP Annals- Manufacturing Technology, 63(1), 2014, 537-540.
- [106] Shi, J.; Liu, L.; Yu, P., Li, G. *Phase mode nanomachining on ultra-thin films with atomic force microscopy*, Materials Letters, 209, 2017, 437-440.
- [107] Zhou, H.; Dmuchowski, C.; Ke, C.; Deng, J. *External-energy-assisted nanomachining with low-stiffness atomic force microscopy probes*, Manufacturing Letters, 23, 2020, 1-4.
- [108] Gao, W.; Hocken, R.J.; Patten, J.A.; Lovingood, J.; Lucca, D.A. *Construction and testing of a nanomachining instrument*, Precision Engineering – Journal of the International Societies for Precision Engineering and Nanotechnology, 24, 2000, 320-328.
- [109] Guo, Z.; Tian, Y.; Liu, X.; Wang, F.; Zhou, C.; Zhang, D. *Experimental investigation of the tip based micro/nano machining*, Applied Surface Science, 426, 2017, 406-417.
- [110] Gao, W.; Hocken, R.J.; Patten, J.A.; Lovingood, J. *Force measurement in a nanomachining instrument*, Review of scientific instruments, 71(11), 2000, 4325-4329.
- [111] Sun, F.; Gamstedt, E.K. *Experimental and numerical investigation on shear banding during nanomachining of an amorphous glassy polymer*, International Journal of Mechanical Sciences, 151, 2019, 13-21.
- [112] Fang, F.; Liu, B.; Xu, Z. *Nanometric cutting in a scanning electron microscope*, Precision Engineering, 41, 2015, 145-152.
- [113] Liao, L.D.; Chao, P.C.P.; Lin, Y.J.; Chiu, C.W.; Miaou, S.G.; Chang, M.; Huang, J.S. *Precision micro-/nano-machining in a scanning electron microscope by run-to-run control based on image feedbacks*, Microelectronic Engineering, 86, 2009, 1162-1168.
- [114] Liu, B.; Xu, Z.; Chen, C.; Li, R.; Wang, C.; Yang, X. *In situ experimental study on material removal behaviour of single-crystal silicon in nanocutting*, International Journal of Mechanical Sciences, 152, 2019, 378-383.
- [115] Alder, B.J.; Wainwright, T.E. *Studies in Molecular Dynamics. I. General Method*, The Journal of Chemical Physics, 31, 1959, 459.
- [116] Belak, J.; Glosli, J.N.; Boercker, D.B.; Stowers, I.F. *Molecular Dynamics Simulation of Mechanical Deformation of Ultra-Thin Metal and Ceramic Films*, 389, 1995, 181.
- [117] Goel, S.; Luo, X.; Reuben, R.L.; Rashid, W.B. *Atomistic aspects of ductile responses of cubic silicon carbide during nanometric cutting*, Nanoscale Research Letters, 6, 2011, 589.

- [118] Xu, F.; Fang, F.; Zhang, X. *Side flow effect on surface generation in nano cutting*, *Nanoscale Research Letters*, 12, 2017, 359.
- [119] Cheong, W.C.D.; Zhang, L.; Tanaka, H. *Some essential of Simulation Nano-Surfacing Processes Using the Molecular Dynamics Method*, *Key Engineering Materials*, 196, 2001, 31-42.
- [120] Pei, Q.X.; Lu, C.; Lee, H.P. *Large scale molecular dynamics study of nanometric machining of copper*, *Computational Materials Science*, 41, 2007, 177-185.
- [121] Jones, J.E. *On the determination of molecular fields II from the equation of state of a gas*, *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, 106 (738), 1924, 463-477.
- [122] Komanduri, R.; Raff, L.M. *A review on the molecular dynamics simulation of machining at the atomic scale*, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture*, 215, 2001, 1639-1672.
- [123] Morse, P.M. *Diatomic molecules according to the wave mechanics. II. Vibrational levels*, *Physical Review*, 34, 1929, 57.
- [124] Cui, D.D.; Mylvaganam, K.; Zhang, L.C.; Liu, W.D. *Some critical issues for a reliable molecular dynamics simulation of nano-machining*, *Computational Materials Science*, 90, 2014, 23-31.
- [125] Abdulkadir, L.N.; Abou-El-Hossein, K.; Jumare, A.I.; Liman, M.M.; Olaniyan, T.A.; Odedeyi, P.B. *Review of molecular dynamics/experimental study of diamond-silicon behavior in nanoscale machining*, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 98, 2018, 317-371.
- [126] Girifalco, L.A.; Weizer, V.G. *Application of the morse potential function to cubic metals*, *Physical Review*, 114 (3), 1959, 687-690.
- [127] Daw, M.S.; Baskes, M.I. *Semiempirical, Quantum Mechanical Calculation of Hydrogen Embrittlement in Metals*, *Physical Reviews Letters*, 50, 1983, 1285-1288.
- [128] Baskes, M.I.; Nelson, J.S.; Wright, A.F. *Semi-empirical modified embedded-atom potentials for silicon and germanium*, *Physical Reviews B*, 40 (9), 1989, 6085-6100.
- [129] Baskes, M.I. *Application of the embedded-atom method to covalent materials: a semi-empirical potential for silicon*, *Physical Reviews Letters*, 59 (23), 1987, 2666-2669.
- [130] Baskes, M.I.; Johnson, R.A. *Modified embedded atom potentials for HCP metals*, *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2 (1), 1994, 147-163.
- [131] Baskes, M.I. *Determination of modified embedded atom method parameters for nickel*, *Materials Chemistry and Physics*, 50, 1997, 152-158.
- [132] Lee, B.J.; Shim, J.H; Baskes, M.I. *Semi-empirical atomic potentials for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, Al and Pb based on first and second nearest-neighbor modified embedded atom method*, *Physical Reviews B*, 68 (14), 2003, 144112.
- [133] Ackland, G.J.; Bacon, D.J.; Calder, A.F.; Harry, T. *Computer simulation of point defect properties in dilute Fe-Cu alloy using a many-body interatomic potential*, *Philosophical Magazine A*, 75 (3), 1997, 713-732.

- [134] Mishin, Y.; Mehl, M.J.; Papaconstantopoulos, D.A. *Embedded-atom potential for B2-NiAl*, Physical Review B, 65, 2002, 224114.
- [135] Mendeleev, M.I.; Han, S.; Srolovitz, D.J.; Ackland, G.J.; Sun, D.Y.; Asta, M. *Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron*, Philosophical Magazine, 83, 2005, 3977-3994.
- [136] Wang, Z.; Liang, Y.; Chen, M.; Tong, Z.; Chen, J. *Analysis about diamond tool wear in nano-metric cutting of single crystal silicon using molecular dynamics method*, 5<sup>th</sup> International Symposium on Advanced Optical Manufacturing and Testing Technologies: Advanced Optical Manufacturing Technologies.
- [137] Brenner, D.W. *Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films*, Physical Review B, 42, 1990, 9458-9471.
- [138] Stillinger, F.H.; Weber, T.A. *Computer simulation of local order in condensed phases of silicon*, Physical Review B, 31 (8), 1985, 5262-5671.
- [139] Stuart, S.J.; Tutein, A.B.; Harrison, J.A. *A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions*, Journal of Chemistry Physics, 112, 2000, 6472-6486.
- [140] Goel, S.; Joshi, S.S.; Abdelal, G.; Agrawal, A. *Molecular Dynamics Simulation of Nanoindentation of Fe<sub>3</sub>C and Fe<sub>4</sub>C*, Materials Science and Engineering: A, 597, 2014, 331-341.
- [141] Tersoff, J. *New empirical model for the Structural Properties of Silicon*, Physical Review Letters, 56 (6), 1986, 632-635.
- [142] Tersoff, J. *New empirical approach for the structure and energy of covalent systems*, Physical Review B, 37 (12), 1988, 6991-7000.
- [143] Ye, Y.Y.; Biswas, R.; Morris, J.R.; Bastawros, A.; Chandra, A. *Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper*, Nanotechnology, 14, 2003, 390-396.
- [144] Kulikov, G.Y. *On quasi-consistent integration by Nordsieck methods*, Journal of Computational and Applied Mathematics, 225 (1), 2009, 268-287.
- [145] Beeman, D., *Some multistep methods for use in molecular dynamics calculations*, Journal of Computational Physics, 20(2), 1976, 130-139.
- [146] Narulkar, R.; Bukkapatnam, S.; Raff, L.M.; Komanduri, R. *Graphitization as a precursor to wear of diamond in machining pure iron: A molecular dynamics investigation*, Computational Materials Science, 45 (2), 2009, 358-366.
- [147] Markopoulos, A.P.; Karkalos, N.; Kalteremidou, K.-A.; Balafoutis, A.; Manolagos, D. *The influence of cutting conditions and cutting tool geometry on the atomistic modeling of precision cutting*. Engineering Solid Mechanics, 3(3), 2015, 195-206.
- [148] Hayashi, K.; Sakudo, N.; Kawai, T. *A new measure of local temperature distribution in non-equilibrium molecular dynamics simulation of friction*, Surface and Coatings Technology, 83, 1996, 313-316.

- [149] Hayashi, K.; Tanaka, D.; Araki, H.; Maruyama, T.; Matsumura, D.; Omote, N.; Kaneko, M. *Velocity-dependent threshold behavior of wearless nano-friction*, Computational Materials Science, 44, 2008, 152-155.
- [150] Hayashi, K.; Shiraishi, T.; Toyoda, K.; Tanaka, F.; Mori, T.; Hata, T. *Temperature-controlled molecular dynamics study on velocity-dependent threshold behavior of dynamic nano-friction*. Computer Physics Communications, 182, 2011, 2082-2085.
- [151] Kim, C.-J.; Mayor, R.; Ni, J. *Molecular Dynamics Simulation of plastic material deformation in machining with a round cutting edge*, International Journal of precision engineering and manufacturing, 13 (8), 2012, 1303-1309.
- [152] Ren, J.; Zhao, J.; Dong, Z.; Liu, P. *Molecular dynamics study on the mechanism of AFM-based nanoscratching process with water-layer lubrication*, Applied Surface Science, 346, 2015,84-98.
- [153] Guo, X.; Gou, Y.; Dong, Z.; Yuan, S.; Li, M.; Du, W.; Kang, R. *Study on subsurface layer of nano-cutting single crystal tungsten in different crystal orientations*, Applied Surface Science, 526, 2020, 146608.
- [154] Hosseini, S.V.; Vahdati, M.; Shokuhfar, A. *Effect of tool nose radius on nano-machining process by molecular dynamics simulation*, Defect and Diffusion Forum, 312-315, 2011, 977-882.
- [155] Li, J.; Fang, Q.; Liu, Y.; Zhang, L. *Scratching of copper with rough surfaces conducted by diamond tip simulated using molecular dynamics*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 77, 2015,1057-1070.
- [156] Huang, J.-C. *The study on the nanocutting by rigid body tool and elastic body tool using molecular dynamics simulations*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol II, 2013, London, UK.
- [157] Shimizu, J.; Eda, H.; Zhou, L.; Okabe, H. *Molecular dynamics simulation of adhesion effect on material removal and tool wear in diamond grinding of silicon wafer*, Tribology Online, 3 (5), 2008, 248-253.
- [158] Cai, M.B.; Li, X.P.; Rahman, M. *Characteristics of “dynamic hard particles” in nanoscale ductile mode cutting of monocrystalline silicon with diamond tools in relation to tool groove wear*, Wear, 263, 2007, 1459-1466.
- [159] Goel, S.; Luo, X.; Reuben, R.L.; Pen, H. *Influence of temperature and crystal orientation on tool wear during single point diamond turning of silicon*. Wear, 284-285, 2012, 65-72.
- [160] Li, D.; Wang, F.C.; Yang, Z.Y.; Zhao, Y.P. *How to identify dislocations in molecular dynamics simulations?*, Science China Physics, Mechanics & Astronomy, 57 (12), 2014, 2177-2187.
- [161] Stukowski, A. *Structure identification methods for atomistic simulations of crystalline materials*, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 20, 2012, 045021.
- [162] Tong, Z.; Liang, Y.; Yang, X.; Luo, X. *Investigation on the thermal effects during nanometric cutting process while using nanoscale diamond tools*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 74, 2014, 1709-1718.

- [163] Amigo, N.; Gutiérrez, G.; Ignat, M. *Atomistic simulation of single crystal copper nanowires under tensile stress: Influence of silver impurities in the emission of dislocations*, Computational Materials Science, 87, 2014, 76-82.
- [164] Kelchner, C.L.; Plimpton, S.J.; Hamilton, J.C. *Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation*, Physical Review B, 58 (17), 1998, 11085-11088.
- [165] Wang, J.; Zhang, X.; Fang, F.; Chen, R. *A numerical study on the material removal and phase transformation in the nanometric cutting of silicon*, Applied Surface Science, 455, 2018, 608-615.
- [166] Stukowski, A. *Computational Analysis Methods in Atomistic Modeling of Crystals*, JOM, 66(3), 2014, 399-407.
- [167] Shimada, S.; Ikawa, N.; Ohmori, G.; Tanaka, H.; Uchikoshi, U. *Molecular Dynamics Analysis as compared with experimental results of micromachining*, Annals of the CIRP, 41(1), 1992, 117-120.
- [168] Shimada, S.; Ikawa, N.; Tanaka, H. *Structure of micromachined surface simulated by Molecular Dynamics Analysis*, Annals of the CIRP, 43(1), 1994, 51-54.
- [169] Komanduri, R.; Chandrasekaran, N.; Raff, L.M. *Molecular dynamics simulation of the nanometric cutting of silicon*, Philosophical Magazine B, 81(12), 2001, 1989-2019.
- [170] Huang, J.C. *Evaluation of tribological behavior of Al-Co-Cr-Fe-Ni high entropy alloy using Molecular Dynamics simulation*, Scanning, 34(5), 2012, 325-331.
- [171] Otieno, T.; Abou-El-Hossein, K. *Molecular dynamics analysis of nanomachining of rapidly solidified aluminium*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 94, 2018, 121-131.
- [172] Luo, X.; Goel, S.; Reuben, R.L. *A quantitative assessment of nanometric machinability of major polytypes of single crystal silicon carbide*, Journal of the European Ceramic Society, 32, 2012, 3423-3434.
- [173] Zhao, L.; Hu, W.; Zhang, Q.; Zhang, J.; Zhang, J.; Sun, T. *Atomistic origin of brittle-to-ductile transition behavior of polycrystalline 3C-SiC in diamond cutting*, Ceramics International, 47(4), 2021, 23895-23904.
- [174] Wang, J.; Fang, F.; Zhang, X. *Nanometric cutting of silicon with an amorphous-crystalline layered structure: A molecular dynamics study*, Nanoscale Research Letters, 12, 2017, 41.
- [175] Vardanyan, V.H.; Zhang, Z.; Alhafez, I.A.; Urbassek, H.M. *Cutting of Al/Si bilayer systems: molecular dynamics study of twinning, phase transformation, and cracking*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 107, 2020, 1297-1307.
- [176] Chen, J.; Li, M.; Wang, F.; Lu, L.; Qin, J.; Shang, Q.; Miao, X.; Niu, L.; Liu, H.; Zhou, G.; Yuan, X.; Pen, H. *Effects of anisotropy on single-crystal SiO<sub>2</sub> in nano-metric cutting*, Advances in Mechanical Engineering, 12(2), 2020, 1-9.
- [177] Goel, S.; Kovalchenko, A.; Stukowski, A.; Cross, G. *Influence of microstructure on the cutting behaviour of silicon*, Acta Materialia, 105, 2016, 464-478.
- [178] Shi, J.; Wang, Y.; Yang, X. *Nano-scale machining of polycrystalline coppers-effects of grain size and machining parameters*, Nanoscale Research Letters, 8, 2013, 500.

- [179] Shi, J.; Ji, C.; Wang, Y.; Wang, S.H.M. *Tool/Chip Interfacial Friction Analysis in Atomistic Machining of Polycrystalline Coppers*, Journal of Micro- and Nano-Manufacturing, 2, 2014, 041001.
- [180] Zhao, P.; Wu, J.; Chen, H.; Liu, H.; Li, D.; Tan, J. *Molecular dynamics simulation study of interaction mechanism between grain boundaries and subgrain boundaries in nano-cutting*, Journal of Manufacturing Processes, 67, 2021, 418-426.
- [181] Avila, K.E.; Vardanyan, V.H.; Alhafez, I.A.; Zimmermann, M.; Kirsch, B.; Urbassek, H.M. *Applicability of cutting theory to nanocutting of metallic glasses: Atomistic simulation*, Journal of Non-Crystalline Solids, 550, 2020, 120363.
- [182] Avila, K.E.; Kuechemann, S.; Alhafez, I.A.; Urbassek, H.M. *An atomistic study of shear-band formation during cutting of metallic glasses*, Journal of Applied Physics, 127, 2020, 115101.
- [183] Xiong, J.; Wang, H.; Zhang, G.; Chen, Y.; Ma, J.; Ruodong, M. *Machinability and surface generation of Pd40Ni10Cu30P20 bulk metallic glass in single-point diamond turning*, Micromachines, 11, 2020,4.
- [184] Zhu, P.Z.; Qiu, C.; Fang, F.Z.; Yuan, D.D.; Shen, X.C. *Molecular dynamics simulations of nanometric cutting mechanisms of amorphous alloy*, Applied Surface Science, 317, 2014, 432-442.
- [185] Wang, Q.; Zhang, C.; Wu, M.; Chen, J. *Effect of fluid media on material removal and subsurface defects evolution of monocrystal copper in nano-cutting process*, Nanoscale Research Letters, 14, 2019, 239.
- [186] Lautenschlaeger, M.P.; Stephan, S.; Urbassek, H.M., Kirsch, B.; Aurich, J.C.; Horsch, M.T.; Hasse, H. *Applied Mechanics and Materials*, 869, 2017, 85-93.
- [187] Huang, J.C.; Cheng, F.J. *The nanocutting by rigid/elastic tools with nose radius at the gas environment using molecular dynamics simulations*, Applied Mechanics and Materials, 599-601, 2014, 507-510.
- [188] Lai, M.; Zhang, X.D.; Fang, F.Z. *Study on critical rake angle in nanometric cutting*, Applied Physics A, 108, 2012, 809-818.
- [189] Dai, H.; Du, H.; Chen, J.; Chen, G. *Investigation of tool geometry in nanoscale cutting single-crystal copper by molecular dynamics simulation*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part J: Journal of Engineering Tribology, 233(8), 2019, 1208-1220.
- [190] Liu, B.; Xu, Z.; Chen, C.; Pang, K.; Wang, Y.; Ruan, Q. *Effect of tool edge radius on material removal mechanism of single-crystal silicon: Numerical and experimental study*, Computational Materials Science, 163, 2019, 127-133.
- [191] Dai, H.; Chen, G.; Li, S.; Fang, Q.; Hu, B. *Influence of laser nanostructured diamond tools on the cutting behavior of silicon by molecular dynamics simulation*, RSC Advances, 7, 2017, 15596.
- [192] Liu, C.; Zhang, J.; Zhang, J.; Chen, X. *Influence of micro grooves of diamond tool on silicon cutting: a molecular dynamic study*, Molecular Simulation, 46(2), 2020, 92-101.
- [193] Liu, C.; Chen, P.; Qin, F. *Molecular dynamics simulations of nano-cutting of 4H-silicon carbide (SiC) by two diamond tools*, 21st International Conference on Electronic Packaging Technology (ICEPT), 2020, Guangzhou, China.



- [194] Chen, Y.; Xiong, J.; Zhang, G. *Generation mechanism of irregular micro-structures on the machined surface in single-point diamond turning*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 113, 2021, 2701-2714.
- [195] Zhang, L.; Zhao, H.; Yang, Y.; Huang, H.; Ma, Z.; Shao, M. *Evaluation of repeated single-point diamond turning on the deformation behavior of monocrystalline silicon via molecular dynamic simulations*, Applied Physics A, 116, 2014, 141-150.
- [196] Fan, Y.H.; Wang, W.Y.; Hao, Z.P.; Zhan, C.Y. *Work hardening mechanism based on molecular dynamics simulation in cutting Ni-Fe-Cr series of Ni-based alloy*, Journal of Alloys and Compounds, 819, 2020, 153331.
- [197] Goel, S.; Luo, X.; Reuben, R.L.; Rashid, W.B. *Replacing diamond cutting tools with CBN for efficient nanometric cutting of silicon*, Materials Letters, 68, 2012, 507-509.
- [198] Hao, Z.P.; Lou, Z.Z.; Fan, Y.H. *Study on phase transformation in cutting Ni-base superalloy based on molecular dynamics method*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science, 235 (11), 2021, 2065-2086.
- [199] Kang, Q.; Fang, X.; Sun, L.; Ding, J.; Jiang, Z. *Research on mechanism of nanoscale cutting with arc trajectory for monocrystalline silicon based on molecular dynamics simulation*, Computational Materials Science, 170, 2019, 109175.
- [200] Liu, C.; He, W.; Chu, J.; Zhang, J.; Xiao, C.; Xiao, J.; Xu, J. *Molecular Dynamics Simulation on Cutting Mechanism in the Hybrid Machining Process of Single Crystal Silicon*, Nanoscale Research Letters, 16, 2021, 66.
- [201] Komanduri, R.; Lee, M.; Raff, L.M. *The significance of normal rake in oblique machining*, International Journal of Machine Tools & Manufacture, 44, 2004, 1115-1124.
- [202] Li, H.; Shao, Z.; Feng, R.; Qi, Y.; Wu, Q.; Lei, C. *Subsurface defect evolution and crystal-structure transformation of single-crystal copper in nanoscale combined machining*, Philosophical Magazine, 101 (1), 2021, 38-58.
- [203] Liu, C.; Chen, X.; Zhang, J.; Zhang, J.; Chu, J.; Xiao, J.; Xu, J. *Molecular dynamic simulation of tool groove wear in nanoscale cutting of silicon*, AIP Advances, 10, 2020, 015327.
- [204] Cheng, K.; Luo, X.; Ward, R.; Holt, R. *Modeling and simulation of the tool wear in nanometric cutting*, Wear, 225, 2003, 1427-1432.
- [205] Chu, B.; Shi, Y.; Samuel, J. *Mitigation of chemical wear by graphene platelets during diamond cutting of steel*, Carbon, 108, 2016, 61-71.
- [206] Wang, J.; Xin, M.; Cao, S.; Zhao, T. *Graphitization wear of diamond tool in nanometric cutting of single crystal silicon*, Key Engineering Materials, 609-610, 2014, 751-757.
- [207] Zou, L.; Yin, J.; Huang, Y.; Zhou, M. *Essential causes for tool wear of single crystal diamond in ultra-precision cutting of ferrous metals*, Diamond and Related Materials, 86, 2018, 29-40.
- [208] Fung, K.Y.; Tang, C.Y.; Cheung, C.F. *Molecular dynamics analysis of the effect of surface flaws of diamond tools on tool wear in nanometric cutting*, Computational Materials Science, 133, 2017, 60-70.
- [209] Wang, Z.; Liang, Y.; Chen, J. *Adhesion of silicon to the tool during diamond cutting silicon by molecular dynamics*, Key Engineering Materials, 552, 2012, 197-200.

- [210] Zhao, W.; Hong, H.; Wang, H. *Mechanism of unstable material removal modes in micro cutting of silicon carbide*, *Micromachines*, 10, 2019, 696.
- [211] Xu, F.; Fang, F.; Zhang, X. *Effects of recovery and side flow on surface generation in nano-cutting of single crystal silicon*, *Computational Materials Science*, 143, 2018, 133-142.
- [212] Xu, F.; Fang, F.; Zhang, X. *Side flow effect on surface generation in nano cutting*, *Nanoscale Research Letters*, 12, 2017, 359.
- [213] Dai, H.; Chen, G. *A molecular dynamics investigation into the mechanisms of material removal and subsurface damage of nanoscale high speed laser-assisted machining*, *Molecular Dynamics*, 43(1), 2017, 42-51.
- [214] Liu, Z.; Lin, B.; Liang X.; Du, A. *Study on the effect of laser-assisted machining on tool wear based on molecular dynamics simulation*, *Diamonds & Related Materials*, 109, 2020, 108022.
- [215] Liu, C.; Zhang, J.; Zhang, J.; Chen, X.; Xiao, J.; Xu, J. *A simulation investigation on elliptical vibration cutting of single-crystal silicon*, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 108(7-8), 2020, 2231-2243.
- [216] Shimizu, J.; Tanaka, H.; Zhou, L.; Eda, H. *Molecular dynamics analysis of ultra high-acceleration and vibration cutting*, *Key Engineering Materials*, 257-258, 2004, 21-26.
- [217] Wang, J.; Fang, F.; Yan, G.; Guo, Y. *Study on diamond cutting of ion implanted tungsten carbide with and without ultrasonic vibration*, *Nanomanufacturing and Metrology*, 2, 2019, 177-185.
- [218] Zhao, L.; Zhang, J.; Zhang, J.; Hartmaier, A. *Atomistic investigation of machinability of monocrystalline 3C-SiC in elliptical vibration-assisted diamond cutting*, *Ceramics International*, 47(2), 2021, 2358-2366.
- [219] Xu, Z.; Liu, L.; He, Z.; Tian, D.; Hartmaier, A.; Zhang, J.; Luo, X.; Rommel, M.; Nordlund, K.; Zhang, G.; Fang, F. *Nanocutting mechanism of 6H-SiC investigated by scanning electron microscope online observation and stress-assisted and ion implant-assisted approaches*, *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 106, 2020, 3869-3880.
- [220] Liu, L.; Xu, Z.; Tian, D. *MD simulation of stress-assisted nanometric cutting mechanism of 3C silicon carbide*, *Industrial Lubrication and Tribologic*, 71(5), 2019, 686-691.
- [221] Fang, F.Z.; Chen, Y.H.; Zhang, X.D.; Hu, X.T.; Zhang, G.X. *Nanometric cutting of single crystal silicon surfaces modified by ion implantation*, *CIRP Annals - Manufacturing Technology*, 60, 2011, 527-530.
- [222] Wang, J.; Zhang, X.; Fang, F. *Molecular dynamics study on nanometric cutting of ion implanted silicon*, *Computational Materials Science*, 117, 2016, 240-250.
- [223] Rashid, W.B.; Goel, S.; Luo, X.; Ritchie, J. *The development of a surface defect machining method for hard turning processes*, *Wear*, 302(1-2), 2013, 1124-1135.
- [224] Rashid, W.B.; Goel, S. *Advances in the surface defect machining (SDM) of hard steels*, *Journal of Manufacturing Process*, 23, 2016, 37-46.
- [225] Chavoshi, S.Z.; Xu, Shuozhi, X.; Luo, X. *Dislocation-mediated plasticity in silicon during nanometric cutting: A molecular dynamics simulation study*, *Materials Science in Semiconductors Processing*, 51, 2016, 60-70.

- [226] Hosseini, S.V. *Investigation of Interatomic Potential on Chip Formation Mechanism in Nanometric Cutting using MD simulation*, Defect and Diffusion Forum, 312-315, 2011, 983-988.
- [227] Kalkhoran, S.N.A.; Vahdati, M. *The effect of interatomic potential function on nanometric machining of single crystal silicon*, Journal of applied and computational sciences in mechanics, 30 (2), 2019, 17-32.
- [228] Wang, J.; Zhang, J.; Li, N.; Kou, Y. *Effect of potential function on molecular dynamics simulation of copper processing*, Key Engineering Materials, 407-408, 2009, 368-371.
- [229] Liang, Y.; Li, D.; Bai, Q.; Tang, Y. *Research on nano-cutting processes based on parallel molecular dynamics*, Materials Science Forum, 532-533, 2006, 357-360.
- [230] Pei, Q.X.; Lu, C.; Lee, H.P.; Zhang, Y.W. *Study of materials deformation in nanometric cutting by large-scale molecular dynamics simulations*, Nanoscale Research Letters, 4, 2009, 444.
- [231] Khan, H.M.; Kim, S.G. *On the wear mechanism of thin nickel film during AFM-based scratching process using molecular dynamics*, Journal of Mechanical Science and Technology, 25(8), 2011, 2111-2120.
- [232] Yan, Y.; Sun, T.; Dong, S.; Liang, Y. *Study on effects of the feed on AFM-based nano-scratching process using MD simulation*, Computational Materials Science, 40, 2007, 1-5.
- [233] Zhang, J.; Sun, T.; Yan, Y.; Liang, Y. *Molecular dynamics study of scratching velocity dependency in AFM-based nanometric scratching process*, Materials Science and Engineering A, 505, 2009, 65-69.
- [234] Alhafez, I.A.; Brodyanski, A.; Kopnarski, M.; Urbassek, H.M. *Influence of tip geometry on nanoscratching*, Tribology Letters, 65, 2017, 26.
- [235] Yan, Y.; Li, Z.; Jia, J.; Wang, J.; Geng, Y. *Molecular dynamics simulation of the combination effect of the tip inclination and scratching direction on nanomachining of single crystal silicon*, Computational Materials Science, 186, 2021, 110014.
- [236] Korayem, M.H.; Hefzabad, R.N.; Homayooni, A.; Aslani, H. *Molecular dynamics simulation of nanomanipulation based on AFM in liquid ambient*, Applied Physics A, 122, 2016, 977.
- [237] Korayem, M.H.; Homayooni, A.; Hefzabad, R.N. *Non-classic multiscale modeling of manipulation based on AFM, in aqueous and humid ambient*, Applied Surface Science, 671, 2018, 27-35.
- [238] Cui, D.D.; Mylvaganam, K.; Zhang, L.C. *Atomic-scale grooving on copper: End-milling vs Peripheral-milling*, Advanced Materials Research, 565, 2012, 546-551.
- [239] Ji, C.; Sun, S.; Liu, Z.; Sui, T. *Influence of tool rotation on 3D surface topography at the nanometric scale*, Molecular Simulation, 44(17), 2018, 1426-1432.
- [240] Wu, C.D.; Fang, T.H.; Kuo, C.H. *Atomistic simulation of nanodrilling mechanics and mechanism on Cu substrates*, Applied Physics A, 118, 2015, 307-313.
- [241] Wu, C.D.; Fang, T.H.; Kuo, C.H. *Nanomilling mechanism on Cu surfaces investigated using atomistic simulation*, Molecular Simulation, 41(14), 2015, 1159-1165.
- [242] Cui, D.D.; Zhang, L.C. *Nano-machining of materials: understanding the process through molecular dynamics simulation*, Advanced Manufacturing, 5, 2017, 20-34.

- [243] Cui, D.; Zhang, L.; Mylvaganam, K.; Liu, W.; Xu, W. *Nano-milling on monocrystalline copper: A molecular dynamics simulation*, *Machining science and technology*, 21(1), 2017, 67-85.
- [244] Cui, D.; Zhang, L.; Liu, W. *Understanding the burr formation in nano-milling with molecular dynamics*, *Proceedings of the 20th International Symposium on Advances in Abrasive Technology*, 2017, Okinawa, Japan.
- [245] Cui, D.; Zhang, L.; Mylvaganam, K.; Liu, W. *Molecular dynamics simulation of multi-groove nano-milling*, *Machining science and technology*, 23(3), 2019, 455-476.
- [246] Cui, D.D.; Mylvaganam, K.; Zhang, L.C. *Nano-grooving on copper by nano-milling and nano-cutting*, *Advanced materials research*, 325, 2011, 576-581.
- [247] Rentsch, R.; Inasaki, I. *Molecular Dynamics Simulation for Abrasive Processes*, *Annals of the CIRP*, 43(1), 1994, 327-330.
- [248] Rentsch, R.; Inasaki, I. *Investigation of surface integrity by Molecular Dynamics Simulation*, 44(1), 1995, 295-298.
- [249] Brinskmeier, E.; Aurich, J.C.; Govekar, E.; Heinzl, C.; Hoffmeister, H.-W.; Klocke, F.; Peters, J.; Rentsch, R.; Stephenson, D.J.; Uhlmann, E.; Weinert, K.; Wittmann, M. *Advances in Modeling and Simulation of Grinding Processes*, *CIRP Annals*, 55(2), 2006, 667-696.
- [250] He, L.; Zhu, F.; Liu, Y.; Liu, S. *Investigation of machining mechanism of monocrystalline silicon in nanometric grinding*, *AIP Advances*, 7, 2017, 055104.
- [251] Zhang, Z.; Chen, P.; Qin, F. *Molecular dynamics simulation on subsurface damage layer during nano grinding process of silicon wafer*, 2017 18th International Conference on Electronic Packaging Technology (ICEPT), 2017, Harbin, China.
- [252] Chen, P.; Zhang, Z.; Tong, A.; Yu, H.; Qin, F. *Generation and distribution of residual stress during nano-grinding of monocrystalline silicon*, *Japanese Journal of Applied Physics*, 57, 2018, 121302.
- [253] Zhang, Z.; Chen, P.; Qin, F.; Tong, A.; Yu, H. *Mechanical properties of silicon in subsurface damage layer from nano-grinding studied by atomistic simulation*, *AIP Advances*, 8, 2018, 055223.
- [254] Zhou, P.; Zhu, Y.; Sun, T.; Lin, L.; Li, J.; Wang, Z.; Li, X. *Stress-induced structural phase transition of 3C-SiC with TLK structure in a nano-abrading process*, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 112, 2020, 104893.
- [255] Li, J.; Meng, W.; Dong, K.; Zhang, X.; Zhao, W. *Study of Effect of Impacting Direction on Abrasive Nanometric Cutting Process with Molecular Dynamics*, *Nanoscale Research Letters*, 13, 2018, 11.
- [256] Meng, B.; Yuan, D.; Zheng, J.; Xu, S. *Molecular dynamics study on femtosecond laser aided machining of monocrystalline silicon carbide*, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 101, 2019, 1-9.
- [257] Tong, R.; Quan, Z.; Zhao, Y.; Han, B.; Liu, G. *Influence of Nanoscale Textured Surfaces and Subsurface Defects on Friction Behaviors by Molecular Dynamics Simulation*, *Nanomaterials*, 9, 2019, 1617.
- [258] Papanikolaou, M.; Salonitis, K. *Fractal roughness effects on nanoscale grinding*, *Applied Surface Science*, 467-468, 2019, 309-319.

- [259] Wang, G.; Feng, Z.; Zheng, Q.; Li, B.; Zhou, H. *Molecular dynamics simulation of nano-polishing of single crystal silicon on non-continuous surface*, Materials Science in Semiconductor Processing, 118, 2020, 105168.
- [260] Wang, G.; Feng, Z.; Hu, Y.; Liu, J.; Zheng, Q. *Effects of Anisotropy on Single Crystal Silicon in Polishing Non-Continuous Surface*, Micromachines, 11, 2020, 742.
- [261] Eder, S.J.; Bianchi, D.; Cihar-Bayr, U.; Vernes, A.; Betz, G. *An analysis method for atomistic abrasion simulations featuring rough surfaces and multiple abrasive particles*, Computer Physics Communications, 185(10), 2014, 2456-2466.
- [262] Zhou, P.; Sun, T.; Shi, X.; Li, J.; Zhu, Y.; Wang, Z. *Atomic-scale study of vacancy defects in SiC affecting on removal mechanisms during nano-abrasion process*, Tribology International, 145, 2020, 106136.
- [263] Huang, Y.; Wang, M.; Xu, Y.; Zhu, F. *Investigation on gallium nitride with N-vacancy defect nano-grinding by molecular dynamics*, Journal of Manufacturing Processes, 57, 2020, 153-162.
- [264] Ren, J.; Liang, G.X.; Lv, M. *Effect of Different Crystal Orientations on the Surface Integrity During Nanogrinding of Monocrystalline Nickel*, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 27, 2019, 075007.
- [265] Dai, L.; Chen, G.; Shan, Z. *Study on ultra-high speed nano-grinding of monocrystalline copper with V-shaped diamond abrasive grains based on molecular dynamics method*, Diamonds & Related Materials, 111, 2021, 108224.
- [266] Huang, Y.; Wang, M.; Li, J.; Zhu, F. *Effect of abrasive particle shape on the development of silicon substrate during nano-grinding*, Computational Materials Science, 193, 2021, 110420.
- [267] Meng, B.; Yuan, D.; Xu, S. *Study on strain rate and heat effect on the removal mechanism of SiC during nano-scratching process by molecular dynamics simulation*, International Journal of Mechanical Sciences, 151, 2019, 724-732.
- [268] Chen, J.; Liang, Y.; Bai, Q.; Tang, Y.; Chen, M. *Mechanism of Material Removal and the Generation of Defects by MD Analysis in Three-Dimensional Simulation in Abrasive Processes*, Key Engineering Materials, 359-360, 2008, 6-10.
- [269] Meng, B.; Qiu, P.; Yuan, D.; Xu, S. *Influence of microstructure on the diamond-machinability of hot-pressed silicon carbide: A molecular dynamics study*, Ceramics International, 45, 2019, 22872-22879.
- [270] Chen, J.X.; Liang, Y.C.; Hu, X.L.; Wang, Z.G.; Wang, Q.L. *Atomic simulation of multi-tool nanomachining process*, Current Nanoscience, 8, 2012, 84-88.
- [271] Wang, Y.; Guo, J. *Effect of abrasive size on nano abrasive machining for wurtzite GaN single crystal via molecular dynamics study*, Materials Science in Semiconductor Processing, 121, 2021, 105439.
- [272] Komanduri, R.; Chandrasekaran, N.; Raff, L.M. *Some aspects of machining with negative-rake tools simulating grinding: a molecular dynamics simulation approach*, Philosophical Magazine B, 79(7), 1999, 955-968.

- [273] Zhou, K.; Liu, J.; Xiao, G.; Huang, Y.; Song, K.; Xu, J.; Chen, B. *Probing residual stress evolution of titanium alloy due to belt grinding based on molecular dynamics method*, Journal of Manufacturing Processes, 66, 2021, 446-459.
- [274] Fang, X.; Kang, Q.; Ding, J.; Sun, L.; Maeda, R.; Jiang, Z. *Stress Distribution in Silicon Subjected to Atomic Scale Grinding with a Curved Tool Path*, Materials, 13, 2020, 1710.
- [275] Li, J.; Fang, Q.; Liu, Y.; Zhang, L. *A molecular dynamics investigation into the mechanisms of subsurface damage and material removal of monocrystalline copper subjected to nanoscale high speed grinding*, Applied Surface Science, 303, 2014, 331-343.
- [276] Guo, X.; Li, Q.; Liu, T.; Zhai, C.; Kang, R.; Jin, Z. *Molecular dynamics study on the thickness of damage layer in multiple grinding of monocrystalline silicon*, Materials Science in Semiconductor Processing, 51, 2016, 15-19.
- [277] Liu, T.; Guo, X.; Li, Q.; Kang, R.; Guo, D. *Study on the Surface Damage Layer in Multiple Grinding of Quartz Glass by Molecular Dynamics Simulation*, Journal of Nano Research, 46, 2017, 192-202.
- [278] Liang, S.W.; Wang, C.H.; Fang, T.H. *Rolling Resistance and Mechanical Properties of Grinded Copper Surfaces Using Molecular Dynamics Simulation*, Nanoscale Research Letters, 11, 2016, 401.
- [279] Shimizu, J.; Zhou, L.; Eda, H. *Molecular dynamics simulation of effect of grinding wheel stiffness on nanogrinding process*, International Journal of Abrasive Technology, 1 (3-4), 2008, 316-326.
- [280] Papanikolaou, M.; Salonitis, K. *Contact stiffness effects on nanoscale high-speed grinding: A molecular dynamics approach*, Applied Surface Science, 493, 2019, 212-224.
- [281] Li, J.; Fang, Q.; Zhang, L.; Liu, Y. *The effect of rough surface on nanoscale high speed grinding by a molecular dynamics simulation*, Computational Materials Science, 98, 2015, 252-262.
- [282] Li, J.; Fang, Q.; Zhang, L.; Liu, Y. *Subsurface damage mechanism of high speed grinding process in single crystal silicon revealed by atomistic simulations*, Applied Surface Science, 324, 2015, 464-474.
- [283] Ren, J.; Hao, M.; Lv, M.; Wang, S.; Zhu, B. *Molecular dynamics research on ultra-high-speed grinding mechanism of monocrystalline nickel*, Applied Surface Science, 455, 2018, 629-634.
- [284] Liu, Y.; Zheng, Y.; Li, B. *Investigation of high-speed nanogrinding mechanism based on molecular dynamics*, Proceedings of the ASME 2018 13th International Manufacturing Science and Engineering Conference, 2018, College Station, USA.
- [285] Khatri, N.; Manoj, J.X.; Mishra, V.; Garg, H.; Karar, V. *Experimental and simulation study of nanometric surface roughness generated during magnetorheological finishing of Silicon*, Materials Today: Proceedings, 5, 2018, 6391-6400.
- [286] Eder, S.J.; Cihak-Bayr, U.; Pauschitz, A. *Nanotribological simulations of multi-grit polishing and grinding*, Wear, 340, 2015, 25-30.
- [287] Eder, S.J.; Bianchi, D.; Cihak-Bayr, U.; Gkagkas, K. *Methods for atomistic abrasion simulations of laterally periodic polycrystalline substrates with fractal surfaces*, Computer Physics Communications, 212, 2017, 100-112.
- [288] Eder, S.J.; Grutzmacher, P.G.; Spenger, T.; Heckes, H.; Rojacz, H.; Nevosad, A.; Haas, F. *Experimentally validated atomistic simulation of the effect of relevant grinding parameters on work piece topography, internal stresses, and microstructure*, Friction, 2021.

- [289] Eder, S.J.; Leroch, S.; Grutzmacher, P.G.; Spenger, T.; Heckes, H. *A multiscale simulation approach to grinding ferrous surfaces for process optimization*, International Journal of Mechanical Sciences, 194, 2021, 106186.
- [290] Huang, Y.; Wang, M.; Xu, Y.; Zhu, F. *Investigation of vibration-assisted nano-grinding of gallium nitride via molecular dynamics*, Materials Science in Semiconductor Processing, 121, 2021, 105372.
- [291] Li, J.Y.; Xie, H.C.; Meng, W.Q.; Zhang, X.M.; Zhao, W.H.; Shi, G.F. *Evolution mechanism of subsurface defect structure in particle micro-cutting iron-carbon alloy process*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part J: Journal of Engineering Tribology, 235 (5), 2021, 931-944.
- [292] Wang, J.; Chi, H.; Lv, M.; Liu, X.; Li, Y.; Zhao, Y. *Effect of silicon carbide hard particles scratch on the diamond cutting tools groove wear*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part C: Journal of Mechanical Engineering Science, 234(10), 2020, 2053-2063.
- [293] Wang, Y.; Tang, S.; Guo, J. *Molecular dynamics study on deformation behaviour of monocrystalline GaN during nano abrasive machining*, Applied Surface Science, 510, 2020, 145492.
- [294] Xu, Y.; Zhu, F.; Wang, M.; Liu, X.; Liu, S. *Molecular Dynamics Simulation of GaN Nano-grinding*, 2018 IEEE 20th Electronics Packaging Technology Conference, 2018, Singapore.
- [295] Zhang, C.; Dong, Z.; Yuan, S.; Guo, X.; Kang, R.; Guo, D. *Study on subsurface damage mechanism of gallium nitride in nano-grinding*, Materials Science in Semiconductor Processing, 128, 2021, 105760.
- [296] Yao, J.; Wu, Y.; Sun, J.; Xu, Y.; Wang, H.; Zhou, P. *Research on the metamorphic layer of silicon nitride ceramic under high temperature based on molecular dynamics*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 109, 2020, 1249-1260.
- [297] Ren, J.; Hao, M.; Liang, G.; Wang, S.; Lv, M. *Study of subsurface damage of monocrystalline nickel in nanometric grinding with spherical abrasive grain*, Physica B: Condensed Matter, 560, 2019, 60-66.
- [298] Zhang, W.; Guo, G.; Huang, Y.; Huang, Z. *Plastic deformation of nanometric grinding process for FCC metal*, Advanced Materials Research, 154-155, 2011, 1336-1341.
- [299] Li, H.; Qiao, H.; Feng, R.; Wang, Q.; Wang, M.; Li, J.H. *Effect of cutting depth on mechanical properties of single crystal  $\gamma$ -TiAl alloy*, Rare Metal Materials and Engineering, 49(6), 2020, 1931-1937.
- [300] Guo, X.; Wang, X.; Yiuang, S.; Li, Y.; Kang, R.; Jin, Z. *Study on grinding damage of high chromium alloy based on molecular dynamics*, International Journal of Nanomanufacturing, 16(4), 2020, 328-339.
- [301] Fang, Q.; Wang, Q.; Li, J.; Zeng, X.; Liu, Y.W. *Mechanisms of subsurface damage and material removal during high speed grinding processes in Ni/Cu multilayers using a molecular dynamics study*, RSC Advances, 7, 2017, 42047.
- [302] Zhang, Y.; Xiao, W.; Peng, P. *Study of processability of Cu/Ni bilayers using molecular dynamics simulation*, Journal of Nano Research, 52, 2018, 43-53.
- [303] Wang, Q.; Fang, Q.; Li, J.; Tian, Y.; Liu, Y. *Subsurface damage and material removal of Al-Si bilayers under high speed grinding using molecular dynamics (MD) simulation*, Applied Physics A, 125, 2019, 514.

- [304] Xu, Y.; Wang, M.; Zhu, F.; Liu, X.; Chen, Q.; Hu, J.; Lu, Z.; Zeng, P.; Liu, Y. *A molecular dynamic study of nano-grinding of a monocrystalline copper/silicon substrate*, Applied Surface Science, 493, 2019, 933-947.
- [305] Xu, Y.; Wang, M.; Zhu, F.; Liu, X.; Liu, Y.; He, L. *Study on subsurface damage of wafer silicon containing through silicon via in thinning*, European Physical Journal Plus, 134, 2019, 234.
- [306] Liu, D.; Wang, G.; Yu, J.; Rong, Y. *Molecular dynamics simulation on formation mechanism of grain boundary steps in micro-cutting of polycrystalline copper*, Computational Materials Science, 126, 2017, 418-425.
- [307] Wang, Z.; Sun, T.; Zhang, H.; Li, G.; Li, Z.; Zhang, J.; Yan, Y.; Hartmaier, A. *The interaction between grain boundary and tool geometry in nanocutting of a bi-crystal copper*, International Journal of Extreme Manufacturing, 1, 2019, 045001.
- [308] Chen, H.; Hagiwara, I.; Zhang, D.; Huang, T. *Parallel Molecular Dynamics Simulation of Nanometric Grinding*, 2005, Transactions of JSCEs, 20050005.
- [309] Xiao, G.; Ren, M.; Hong, H. *50 million atoms scale molecular dynamics modelling on a single consumer graphics card*, Advances in Engineering Software, 124, 2018, 66-72.
- [310] Roth, J.; Sonntag, S.; Karlin, J.; Paredes, C.T.; Sartison, M.; Krauss, A., Trebin, H.R. *Molecular dynamics simulations studies of laser ablation in metals*, AIP Conference Proceedings, 1464(1), 2012, 504-523.
- [311] Shih, C.Y.; Wu, C.; Shugaev, M.V.; Zhigilei, L.V. *Atomistic modeling of nanoparticle generation in short pulse laser ablation of thin metal films in water*, Journal of Colloid and Interface Science, 489, 2017, 3-17.
- [312] Schafer, C.; Urbassek, H.M.; Zhigilri, L.V. *Metal ablation by picosecond laser pulses: A hybrid simulation*, Physical Review B, 66, 2002, 115404.
- [313] Xiong, Q.L.; Li, Z.; Kitamura, T. *Effect of Crystal Orientation on Femtosecond Laser-Induced Thermomechanical Responses and Spallation Behaviors of Copper Films*, Scientific Reports, 7, 2017, 9218.
- [314] Zhou, W.; Gong, K.; Wan, J.; Quan, L.; Chu, Y.; Cao, Y. *Molecular dynamics simulation study on ablation of silicon by water-jet-guided laser*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part E: Journal of Process Mechanical Engineering, 231(6), 2016, 1217-1225.
- [315] Menon, V.A.; James, S. *Molecular Dynamics Simulation Study of Liquid-Assisted Laser Beam Micromachining Process*, Journal of Manufacturing and Materials Processing, 2(3), 2018, 51.
- [316] James, S.; Menon, V.A.; Parnar, M. *Molecular Dynamics Simulation Study of Liquid-Assisted Laser Beam Machining Process*, ASME 2018 13th International Manufacturing Science and Engineering Conference, 2018, Texas, USA.
- [317] James, J.; Patil, A. *Study on multiscale modeling and simulation of liquid-assisted laser beam machining process*, International Journal of Advanced Manufacturing Process, 106(6), 2020, 1-12.
- [318] James, S.; Sundaram, M.M. *A feasibility study of vibration-assisted nano-impact machining by loose abrasives using atomic force microscope*, Journal of Manufacturing Science and Engineering, 143, 2012, 061014.



- [319] James, S.; Sundaram, M.M. *A molecular dynamics study of the effect of impact velocity, particle size and angle of impact of abrasive grain in the Vibration Assisted Nano Impact-machining by Loose Abrasives*, *Wear*, 303(1-2), 2013, 510-518.
- [320] Shockly, M.; Duong, N.; Ma, J.; Lei, S.; Jahan, M.P.; Sundaram, M. *Numerical investigation of the effects of operating parameters in the vibration assisted nano impact machining of single crystalline silicon by loose abrasive using molecular dynamics simulation*, *Journal of Manufacturing Processes*, 43, 2019, 12-19.
- [321] James, S.; Sundaram, M.M. *Molecular dynamics simulation study of tool wear in vibration assisted nano-impact-machining by loose abrasives*, *Journal of Micro- and Nano-Manufacturing*, 3, 2015, 011001.
- [322] James, S.; Sundaram, M. *A molecular dynamics simulation study of material removal mechanisms in vibration assisted nano impact-machining by loose abrasives*, *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 139, 2017, 081014.
- [323] James, S.; Sundaram, M. *Effects of water molecules on material removal behavior in vibration assisted nano impact-machining by loose abrasives- a molecular dynamics simulation study*, *Procedia Manufacturing* 26,2018, 552-559.
- [324] Chen, R.; Liang, M.; Luo, J.; Lei, H.; Guo, D.; Hu, X. *Comparison of surface damage under the dry and wet impact: Molecular dynamics simulation*, *Applied Surface Science*, 258, 2011, 1756-1761.
- [325] Chen, R.; Jiang, R.; Lei, H.; Liang, M. *Material removal mechanism during porous silica cluster impact on crystal silicon substrate studied by molecular dynamics simulation*, *Applied Surface Science*, 264, 2013, 148-156.
- [326] Chen, R.; Wu, Y.; Lei, H.; Jiang, R.; Liang, M. *Study of material removal processes of the crystal silicon substrate covered by an oxide film under a silica cluster impact: Molecular dynamics simulation*, *Applied Surface Science*, 305, 2014, 609-616.
- [327] Joshi, A.; James, S. *Molecular dynamics simulation study of cold spray process*, *Journal of Manufacturing Processes*, 53, 2018, 136-143.
- [328] Chen, R.; Zhang, D.; Wu, Y. *Study on the influence of standoff distance on substrate damage under an abrasive water jet process by molecular dynamics simulation*, *Friction*, 6(2), 2018, 195-207.
- [329] Kim, Y.S.; Na, K.H.; Choi, S.O.; Yang, S.H. *Atomic force microscopy-based nano-lithography for nano-patterning: a molecular dynamic study*, *Journal of Materials Processing Technology*, 155-156, 2004, 1847-1854.
- [330] Xiao, G.; He, Y.; Geng, Y.; Yan, Y.; Ren, M. *Molecular dynamics and experimental study on comparison between static and dynamic ploughing lithography of single crystal copper*, *Applied Surface Science*, 463, 2019, 96-104.
- [331] Yan, Y.D.; Sun,T.; Dong, S.; Liang, Y.C. *MD analysis on tip geometry effects in AFM-based lithography process*, *Key Engineering Materials*, 339, 2007, 228-233.
- [332] Yan, Y.; He, Y.; Xiao, G.; Geng, Y.; Ren, M. *Effects of diamond tip orientation on the dynamic ploughing lithography of single crystal copper*, *Precision Engineering*, 57, 2019, 127-136.

- [333] Yuan, Y.; Zhang, J.; Sun, T.; Liu, C.; Geng, Y.; Yan, Y.; Jin, P. *Crystallographic orientation-dependent pattern replication in direct imprint of aluminum nanostructures*, *Nanoscale Research Letters*, 10, 2015, 96.
- [334] Sun, J.; Zhuang, J.; Liu, Y.; Xu, H.; Home, J.; Wujcik, E.K.; Liu, H.; Ryu, J.E.; Wu, D.; Guo, Z. *Development and application of hot embossing in polymer processing: A review*, *ES Materials & Manufacturing*, 6, 2019, 3-17.
- [335] Weng, C.; Yang, D.; Mingyong, Z. *Molecular dynamics simulations on the demolding process for nanostructures with different aspect ratios in injection molding*, *Micromachines*, 10, 2019, 636.
- [336] Wu, C.D.; Xu, W.X. *Atomistic analysis of nanoextrusion process for fabrication of gold nanowires*, *Journal of Applied Physics*, 126, 2019, 205104.
- [337] Long, Y.; He, B.; Cui, W.; Ji, Y.; Zhuang, X.; Twiefel, J. *Investigations on the mechanism of microweld changes during ultrasonic wire bonding by molecular dynamics simulation*, 192, 2020, 108718.
- [338] Saitoh, K.; Sameshima, Y.; Daira, S. *Nano-scale modelling and simulation of metal wire drawing by using molecular dynamics method*, *World Journal of Nano Science and Engineering*, 4, 2014, 70-83.
- [339] Saitoh, K.; Yoshida, K.; Oda, K.; Sato, T.; Takuma, M.; Takahashi, Y. *Molecular dynamics study on nano-sized wire drawing: possible atomistic process and application to pearlitic steel wire*, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 307, 2018, 012039.
- [340] Reddy, K.V.; Pal, S. *Dynamic probing of structural evolution of single crystal Fe during rolling process using atomistic simulation*, *Steel research international*, 90 (7), 2019, 1800636.
- [341] Reddy, K.V.; Pal, S. *Structural evolution and dislocation behaviour during nano-rolling process of FCC metals: A molecular dynamics simulation based investigation*, *Journal of Applied Physics*, 125, 2019, 095101.
- [342] Reddy, K.V. *Atomistic simulation of nano-rolling process for nanocrystalline tungsten*, *JOM*, 72, 2020, 3977-3986.
- [343] Reddy, K.V.; Pal, S. *Influence of rolling temperature on the structural evolution and residual stress generation of nanocrystalline Nickel during nano-rolling process*, *Computational Materials Science*, 184, 2020, 109935.
- [344] Zarudi, I.; Cheong, W.C.D.; Zou, J.; Zhang, L.C. *Atomistic structure of monocrystalline silicon in surface nano-modification*, *Nanotechnology*, 15, 2004, 104-107.
- [345] Yang, Y.; Zhao, H.; Zhang, L.; Shao, M.; Liu, H.; Huang, H. *Molecular dynamics simulation of self-rotation effects on ultra-precision polishing of single-crystal copper*, *AIP Advances*, 3, 2013, 102106.
- [346] Yang, Y.; Zhao, H.; Liu, H.; Zhang, L. *A study of abrasive rotating velocity effect on monocrystalline silicon in ultra-precision mechanical polishing via molecular dynamic simulation*, *Key Engineering Materials*, 609-610, 2014, 362-369.
- [347] Dai, H.; Zhang, F.; Zhou, Y. *Numerical study of three-body diamond abrasive polishing single crystal Si under graphene lubrication by molecular dynamics simulation*, *Computational Materials Science*, 171, 2020, 109214.

- [348] Yang, N.; Huang, W.; Lei, D. *The effects of diamond amorphous layer on the diamond lapping surface*, *Procedia CIRP*, 71, 2018, 140-143.
- [349] Huang, Z.G.; Guo, Z.N.; Chen, X.; Yu, Z.Q.; Yu, T.M.; Lee, W.B. *Microscopic machining mechanism of polishing based on vibrations of liquid*, *Nanotechnology*, 18, 2007, 105703.
- [350] Sun, J.; Fang, L.; Han, J.; Han, Y.; Chen, H.; Sun, K. *Phase transformations of mono-crystal silicon induced by two-body and three-body abrasion in nanoscale*, *Computational Materials Science*, 82, 2014, 140-150.
- [351] Ngygen, V.T.; Fang, T.H. *Material removal and interactions between an abrasive and a SiC substrate: A molecular dynamics simulation study*, *Ceramics International*, 46(5), 2020, 5623-5633.
- [352] Zhou, P.; Li, J.; Wang, Z.; Chen, J.; Li, X.; Zhu, Y. *Molecular dynamics study of the removal mechanism of SiC in a fixed abrasive polishing in water lubrication*, *Ceramics International*, 46, 2020, 24961-24974.
- [353] Zhou, P.; Shi, X.; Li, J.; Sun, T.; Zhu, Y.; Wang, Z.; Chen, J. *Molecular dynamics simulation of SiC removal mechanism in a fixed abrasive polishing process*, *Ceramics International*, 45, 2019, 14614-14624.
- [354] Dai, H.; Yue, H.; Hu, Y.; Li, P. *The removal mechanism of monocrystalline Si in the process of double diamond abrasive polishing by molecular dynamics simulation*, *Tribology Letters*, 69, 2021, 66.
- [355] Dai, H.; Zhang, F.; Chen, Z. *A study of ultraprecision mechanical polishing of single-crystal silicon with laser nano-structured diamond abrasive by molecular dynamics simulation*, *International Journal of Mechanical Sciences*, 157-158, 2019, 254-266.
- [356] Zhang, R.; Wang, X.; Shrotriya, P.; Biswas, R.; Bastawros, A.; Chandra, A. *Molecular approach to material detachment mechanism during chemical mechanical planarization*, *Machining Science and Technology*, 11, 2007, 515-530.
- [357] Han, X.; Hu, Y.; Yu, S. *Investigation of material removal mechanism of silicon wafer in the chemical mechanical polishing process using molecular dynamics simulation method*, *Applied Physics A*, 95, 2009, 899-905.
- [358] Si, L.; Guo, D.; Luo, J.; Lu, X.; Xie, G. *Abrasive rolling effects on material removal and surface finish in chemical mechanical polishing analyzed by molecular dynamics simulation*, *Journal of Applied Physics*, 109, 2011, 084335.
- [359] Agrawal, P.M.; Raff, L.M.; Bukkapatnam, S.; Komanduri, R. *Molecular dynamics investigations on polishing of a silicon wafer with a diamond abrasive*, *Applied Physics A*, 100, 2010, 89-104.
- [360] Ranjan, P.; Balasubramaniam, R.; Jain, V.K. *Investigations into the mechanism of material removal and surface modification at atomic scale on stainless steel using molecular dynamics simulation*, 98(16), 2018, 1437-1469.
- [361] Ngygen, V.T.; Fang, T.H. *Molecular dynamics simulation of abrasive characteristics and interfaces in chemical mechanical polishing*, *Applied Surface Science*, 509, 2020, 144676.
- [362] Ngygen, V.T.; Fang, T.H. *Abrasive mechanisms and interfacial mechanics of amorphous silicon carbide thin films in chemical-mechanical planarization*, *Journal of Alloys and Compounds*, 845, 2020, 156100.

- [363] Agrawal, P.M.; Narulkar, R.; Bukkapatnam, S.; Raff, L.M.; Komanduri, R. *A phenomenological model of polishing of silicon with diamond abrasive*, Tribology International, 43, 2010, 100-107.
- [364] Han, X. *Analysis the physical essence of microscopic fluid-based wear process in the chemical mechanical planarization process*, Journal of Applied Physics, 110, 2011, 063525.
- [365] Chen, L.; Wen, J.; Zhang, P.; Yu, B.; Chen, C.; Ma, T.; Lu, X.; Kim, S.H.; Qian, L. *Nanomanufacturing of silicon surface with a single atomic layer precision via mechanochemical reactions*, Nature Communications, 9, 2018, 1542.
- [366] Han, X.; Gan, Y.X. *Analysis the microscopic solid-based wear process in the chemical mechanical planarization*, Surface and Interface Analysis, 44(5), 2012, 590-600.
- [367] Yuan, S.; Guo, X.; Huang, J.; Gou, Y.; Jin, Z.; Kang, R.; Guo, D. *Insight into the mechanism of low friction and wear during the chemical mechanical polishing process of diamond: A reactive molecular dynamics simulation*, Tribology International, 148, 2020, 106308.
- [368] Guo, X.; Yuan, S.; Gou, Y.; Wang, X.; Guo, J.; Jin, Z.; Kang, R. *Study on chemical effects of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and glycine in the copper CMP process using ReaxFF MD*, Applied Surface Science, 508, 2020, 145262.
- [369] Guo, X.; Yuan, S.; Huang, J.; Chen, C.; Kang, R.; Jin, Z.; Guo, D. *Effects of pressure and slurry on removal mechanism during the chemical mechanism polishing of quartz glass using ReaxFF MD*, Applied Surface Science, 505, 2019, 144610.
- [370] Ranjan, P.; Balasubramaniam, R.; Jain, V.K. *Mechanism of material removal during nanofinishing of aluminium in aqueous KOH: A reactive molecular dynamics simulation study*, Computational Materials Science, 156, 2019, 35-46.
- [371] Ranjan, P.; Sharma, A.; Balasubramaniam, R. *Improvement in surface quality of diamond-turned aluminum substrate by using hydrogen peroxide: a molecular dynamics simulation study*, Journal of Micromanufacturing, 4(1), 2021, 27-35.
- [372] Shi, Z.; Jin, Z.; Guo, X.; Yuan, S.; Gou, J. *Insights into the atomistic behavior in diamond chemical mechanical polishing with OH environment using ReaxFF molecular dynamics simulation*, Computational Materials Science, 166, 2019, 136-142.
- [373] Meng, F.; Zhang, Z.; Gao, P.; Liu, T.; Boyjoo, Y.; Gou, D. *Design of composite abrasives and substrate materials for chemical mechanical polishing applications*, Applied Nanoscience, 10, 2020, 1379-1393.
- [374] Shi, J.; Fang, L.; Sun, K.; Peng, W.; Ghen, J.; Zhang, M. *Surface removal of a copper thin film in an ultrathin environment by a molecular dynamics study*, Friction, 8(2), 2020, 323-334.
- [375] Shimada, S.; Tanaka, H.; Mohri, N.; Takezawa, H.; Ito, Y.; Tanabe, R. *Molecular dynamics analysis of self-sharpening phenomenon of thin electrode in single discharge*, Journal of Materials Processing Technology, 149, 2004, 358-362.
- [376] Songsong, L.; Chuanxiao, P.; Yong, L.; Kan, W.; Huanghai, K.; Zhiyuan, W. *Molecular dynamics simulation and experimental research on fabrication of micro spherical electrode combined by electrochemical etching with spark discharge*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 103, 2019, 4721-4729.

- [377] Yue, X.; Yang, X.; Kunieda, M. *Influence of metal vapor jets from tool electrode on material removal of workpiece in EDM*, Precision Engineering, 53, 2018, 278-288.
- [378] Yue, X.; Yang, X. *Molecular dynamics simulation of the material removal process and gap phenomenon of nanoEDM in deionized water*, RSC Advances, 5, 2015, 66502-66510.
- [379] Yue, X.; Yang, S. *Study on the Distribution of Removal Material of EDM in Deionized Water and Gas with Molecular Dynamics Simulation*, Procedia CIRP, 42, 2016, 691-696.
- [380] Roy, T.; Sharma, A.; Datta, D.; Balasubramaniam, R. *Molecular dynamics simulation of single discharge and dimensionless correlation with actual material removal in micro electrical discharge machining*, 45(13), 2019, 985-995.
- [381] Yang, X.; Guo, J.; Chen, X.; Kunieda, M. *Molecular dynamics simulation of the material removal mechanism in micro-EDM*, Precision Engineering, 35(1), 2011, 51-57.
- [382] Yue, X.; Yang, X. *Molecular dynamics simulation of material removal process and crystal structure evolution in EDM with discharge on different crystal planes*, International Journal of Advanced Manufacturing Technology, 92(1), 2017, 3155-3165.
- [383] Yang, X.; Han, X.; Zhou, F.; Kunieda, M. *Molecular Dynamics Simulation of Residual Stress Generated in EDM*, Procedia CIRP, 6, 2013, 432-437.
- [384] Roy, T.; Sharma, A.; Datta, D.; Balasubramaniam, R. *Molecular dynamics study on the effect of discharge on adjacent craters on micro EDMed surface*, Precision Engineering, 52, 2018, 469-476.
- [385] Yue, X.; Yang, X. *Molecular dynamics simulation of machining properties of polycrystalline copper in electrical discharge machining*, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part B: Journal of Engineering Manufacture, 233(2), 2019, 371-380.
- [386] Guo, J.; Zhang, G.; Huang, Y.; Ming, W.; Liu, M.; Huang, H. *Investigation of the removing process of cathode material in micro-EDM using an atomistic-continuum model*, Applied Surface Science, 3(5), 2014, 323-336.
- [387] Li, H.; Guo, J.; Ming, W.; Zhang, Z. *Combined atomistic-continuum modeling of Nano-EDM process*, Advanced Materials Research, 887-888, 2014, 1210-1214.
- [388] Zhang, G.; Guo, J.; Ming, W.; Huang, Y.; Shao, X.; Zhang, Z. *Study of the machining process of nano-electrical discharge machining based on combined atomistic-continuum modeling method*, Applied Surface Science, 290, 2014, 359-367.
- [389] Tian, Z.; Chen, X.; Xu, X. *Molecular dynamics simulation of the material removal in the scratching of 4H-SiC and 6H-SiC substrates*, International Journal of Extreme Manufacturing, 2, 2020, 045104.
- [390] Liang, Y.C.; Chen, J.X.; Chen, M.J.; Tang, Y.L.; Bai, Q.S. *Integrated MD simulation of scratching and shearing of 3D nanostructure*, Computational Materials Science, 43, 2008, 1130-1140.
- [391] Zhang, P.; Cao, X.; Zhang, X.; Wang, Y. *Effects of cutting parameters on the subsurface damage of single crystal copper during nanocutting process*, Vacuum, 187(1), 2020, 109420.
- [392] Promyoo, R.; El-Mounayri, H.; Yang, X. *Molecular dynamics simulation of nanometric cutting*, Machining Science and Technology, 14(4), 2010, 423-439.

- [393] Romero, P.A.; Anciaux, G.; Molinari, A.; Molinari, J.F. *Friction at the tool-chip interface during orthogonal nanometric machining*, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 20, 2012, 055007.
- [394] Guo, Y.B.; Liang, Y.C.; Chen, M.J.; Bai, Q.S.; Lu, L.H. *Molecular dynamics simulations of thermal effects in nanometric cutting process*, Science China Technological Sciences, 53(3), 2010, 870-874.
- [395] Romero, P.A.; Anciaux, G.; Molinari, A.; Molinari, J.F. *Insights into the thermo-mechanics of orthogonal nanometric machining*, Computational Materials Science, 72, 2013, 116-126.
- [396] Su, H.; Tang, Q.H. *Chip formation dependence of machining velocities in nano-scale by molecular dynamics simulations*, Science China Technological Sciences, 57(12), 2014, 2426-2433.
- [397] Chen, C.; Lai, M.; Fang, F. *Study on the crack formation mechanism in nano-cutting of gallium arsenide*, Applied Surface Science, 540, 2021, 148322.
- [398] Chen, C.; Lai, M.; Fang, F. *Subsurface deformation mechanism in nano-cutting of gallium arsenide using molecular dynamics simulation*, Nanoscale Research Letters, 16, 2021, 117.
- [399] Wang, P.; Yu, J.; Zhang, Q. *Nano-cutting mechanical properties and microstructure evolution mechanism of amorphous/single crystal alloy interface*, Computational Materials Science, 184, 2020, 109915.
- [400] Dong, G.; Wang, X.; Gao, S. *Molecular dynamics simulation and experiment research of cutting-tool wear mechanism for cutting aluminum alloy*, 96, 2018, 1123-1137.
- [401] Eder, S.J.; Grützmacher, P.G.; Ripoll, M.R.; Belak, J.F. *Elucidating the onset of plasticity in sliding contacts using differential computational orientation tomography*, Tribology Letters, 69, 2021, 79.
- [402] Lin, Z.C.; Huang, J.C. *The influence of different cutting speeds on the cutting force and strain-stress behaviors of single crystal copper during nano-scale orthogonal cutting*, Journal of Materials Processing Technology, 201, 2008, 477-482.
- [403] Fang, T.H.; Weng, C.I. *Three-dimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale*, Nanotechnology, 11, 2000, 148-153.
- [404] Pen, H.; Bai, Q.; Liang, Y.; Chen, M. *Multiscale simulation of nanometric cutting of single crystal copper – effect of different cutting speeds*, Acta Metallurgica Sinica (English Letters), 22(6), 2009, 440-446.
- [405] Dai, H.; Chen, G.; Fang, Q.; Yin, J. *The effect of tool geometry on subsurface damage and material removal in nanometric cutting single-crystal silicon by a molecular dynamics simulation*, Applied Physics A, 122, 2016, 804.
- [406] Pei, Q.X.; Lu, C.; Fang, F.Z.; Wu, H. *Nanometric cutting of copper: A molecular dynamics study*, 37, 2006, 434-441.
- [407] Zhao, H.; Zhang, L.; Zhang, P.; Shi, C. *Influence of geometry in nanometric cutting single-crystal copper via MD simulation*, Advanced Materials Research, 421, 2012, 123-128.
- [408] Xie, W.; Fang, F. *Rake angle effect in cutting-based single atomic layer removal*, Journal of Manufacturing Processes, 56, 2020, 280-294.

- [409] Alhafez, I.A.; Urbassek, H.M. *Influence of the Rake Angle on Nanocutting of Fe Single Crystals: A Molecular-Dynamics Study*, Crystals, 10, 2020, 516.
- [410] Stukowski, A. *Computational Analysis Methods in Atomistic Modeling of Crystals*, JOM, 66 (3), 2014, 399-407.
- [411] Huang, Y.; Wang, M.; Li, J.; Zhu, F. *Effect of abrasive particle shape on the development of silicon substrate during nano-grinding*, Computational Materials Science, 193, 2021, 110420.
- [412] Ge, J.H.; Zhang, C.H.; Wang, Y.P.; Sui, X.L.; Guo, Y.B. *Simulation analysis of the effects of tool rake angle for workpiece temperature in single crystal copper nanometric cutting process*, International Journal of Hybrid Information Technology, 9(3), 2016, 407-414.
- [413] Zhang, J.; Zheng, H.; Shuai, M.; Li, Y.; Yang, Y.; Sun, T. *Molecular dynamics modeling and simulation of diamond cutting of cerium*, Nanoscale Research Letters, 12, 2017, 464.
- [414] Tang, Y.; Liu, Q.; Wu, Y.; Zhang, K. *Generation mechanism of micro/nano machined surfaces based on molecular dynamics*, Advanced Materials Research, 97-101, 2010, 3104-3107.
- [415] Chavoshi, S.Z.; Goel, S.; Luo, X. *Influence of temperature on the anisotropic cutting behaviour of single crystal silicon: A molecular dynamics simulation investigation*, Journal of Manufacturing Processes, 23, 2016, 201-210.
- [416] Fan, P.; Goel, S.; Luo, X.; Yan, Y.; Geng, Y.; He, Y.; Wang, Y. *Molecular dynamics simulation of AFM tip-based hot scratching of nanocrystalline GaAs*, Materials Science in Semiconductor Processing, 130, 2021, 105832.
- [417] Goel, S.; Rashid, W.B.; Luo, X.; Agrawal, A.; Jain, V.K. *A theoretical assessment of surface defect machining and hot machining of nanocrystalline silicon carbide*, Journal of Manufacturing Science and Engineering, 136, 2014, 021015.

## Παράρτημα

Προθέματα που υποδηλώνουν πολλαπλάσια και υποπολλαπλάσια της μονάδας στο SI

Ονομασία	Σύμβολο	Τιμή
Yotta	Y	$10^{24}$
Zetta	Z	$10^{21}$
Exa	E	$10^{18}$
Peta	P	$10^{15}$
Tera	T	$10^{12}$
Giga	G	$10^9$
Mega	M	$10^6$
kilo	k	$10^3$
hecto	h	$10^2$
deca	da	$10^1$
deci	d	$10^{-1}$
centi	c	$10^{-2}$
milli	m	$10^{-3}$
<b>micro</b>	<b>μ</b>	<b><math>10^{-6}</math></b>
<b>nano</b>	<b>n</b>	<b><math>10^{-9}</math></b>
<b>pico</b>	<b>p</b>	<b><math>10^{-12}</math></b>
<b>femto</b>	<b>f</b>	<b><math>10^{-15}</math></b>
atto	a	$10^{-18}$
zepto	z	$10^{-21}$
yocto	y	$10^{-24}$

Ειδικά, τα προθέματα που χρησιμοποιούνται συχνά στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής σημειώνονται με έντονο χρώμα. Μια μονάδα που δεν παρουσιάζεται στον πίνακα είναι το Ångstrom (Å) για το οποίο ισχύει  $1 \text{ Å} = 10^{-1} \text{ nm}$ .