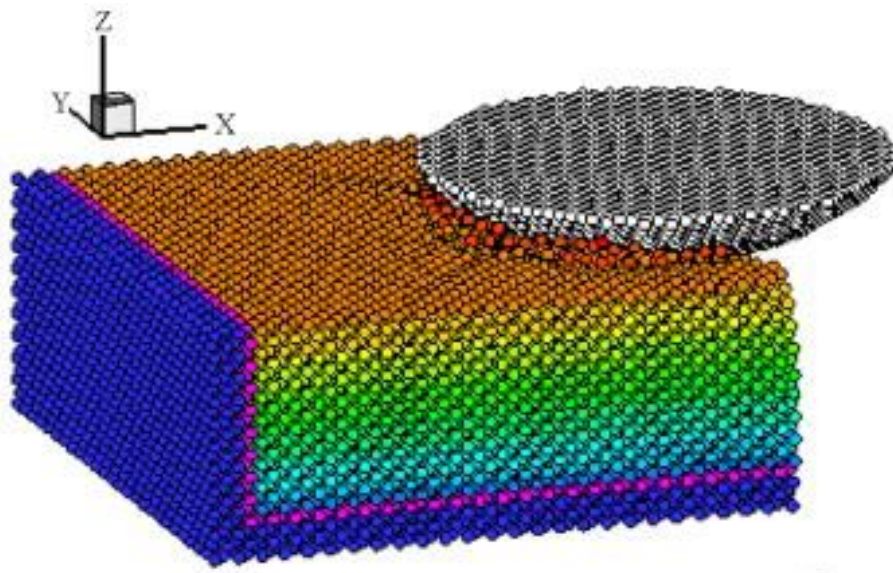




ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΤΩΝ ΚΑΤΕΡΓΑΣΙΩΝ

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ:

*Η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής και η χρήση της  
στις κοπές νανοκλίμακας*



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

Φοιτητής: Κωνσταντίνου Γεώργιος  
Α.Μ: 02106603

Αθήνα, 2013

Αθήνα, Ιούλιος 2013

## Περιεχόμενα

|   |           |
|---|-----------|
| Περίληψη .....  | 10        |
| Abstract.....   | 11        |
| <b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: Μέθοδοι μοριακών προσομοιώσεων .....</b>                             | <b>12</b> |
| 1.1 Γενικά περί προσομοιώσεων .....   | 12        |
| 1.2 Καθορισμός των παραμέτρων της προσομοίωσης .....                                | 13        |
| 1.3 Μοριακή Μηχανική (MM) .....   | 17        |
| 1.4 Monte Carlo (MC).....   | 19        |
| 1.5 Μοριακή Δυναμική (ΜΔ).....  | 21        |
| <b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: Θεωρία Μοριακής Δυναμικής .....</b>                                  | <b>28</b> |
| 2.1 Εισαγωγή-Βασικές Αρχές .....  | 28        |
| 2.2 Νευτώνια Άτομα .....  | 30        |
| 2.3 Υπολογισμοί Τροχιών με χρήση Αριθμητικής Ολοκλήρωσης.....                       | 32        |
| 2.3.1 Μέθοδος Βατραχοδρασκελισμών (Leapfrog-Type Method) .....                      | 33        |
| 2.3.2 Μέθοδος Verlet.....   | 35        |
| 2.3.3 Μέθοδοι Πρόβλεψης-Διόρθωσης.....  | 36        |
| 2.4 Εκφράσεις Ενέργειας Δυναμικού .....   | 40        |
| 2.4.1 Έκφραση δυναμικού Morse.....  | 45        |
| 2.4.2 Έκφραση δυναμικού Lennard-Jones .....   | 46        |
| 2.4.3 Έκφραση δυναμικού Born-Meyer .....  | 46        |
| 2.4.4 Δυναμικό πολλών ατόμων (Embedded-atom potential).....                         | 46        |
| 2.4.5 Δυναμικό Bolding-Anderson.....  | 47        |
| 2.5 Συνοριακά Άτομα .....   | 48        |
| 2.6 Συναρτήσεις Επανακαθορισμού Ταχυτήτων .....                                     | 50        |
| 2.6.1 Συνάρτηση επιθυμητής θερμοκρασίας .....                                       | 51        |
| 2.6.2 Επαναπροσδιορισμός ταχυτήτων .....  | 51        |
| <b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: Χρήση της Μοριακής Δυναμικής στις Κοπές<br/>Νανοκλίμακας      52</b> |           |
| 3.1 Εισαγωγή.....   | 52        |

|  |  |            |
|--|--|------------|
| <b>3.2</b>   | <b>Πλεονεκτήματα και Περιορισμοί.....</b>  | <b>55</b>  |
| 3.2.1  | Περιορισμοί ( και πιθανές λύσεις).....   | 56         |
| <b>3.3</b>   | <b>Επίδραση παραμέτρων διεργασίας στις νανοκοπές .....</b>                                     | <b>58</b>  |
| 3.3.1  | Επίδραση των διατομικών δυναμικών στην προσομοίωση μοριακής δυναμικής της νανοκατεργασίας..... | 58         |
| 3.3.2  | Επίδραση της γωνίας κοπής .....  | 73         |
| 3.3.3  | Επίδραση της ακτίνας ακμής και του βάθους κοπής στις νανοκοπές.....                            | 78         |
| <b>3.4</b>   | <b>Μοντελοποίηση αστοχίας εξόδου της κατεργασίας .....</b>                                     | <b>83</b>  |
| <b>3.5</b>   | <b>Προσομοίωση για γνωστή δομή ατελειών σε υλικό κατεργασίας</b>                               | <b>84</b>  |
| <b>3.6</b>   | <b>Νανοκοπή δομών νανοκλίμακας .....</b>   | <b>85</b>  |
| <b>3.7</b>   | <b>Υλικό κατεργασίας γνωστού κρυσταλλικού προσανατολισμού....</b>                              | <b>86</b>  |
| 3.7.1  | Επίδραση κρυσταλλικού προσανατολισμού.....   | 86         |
| <b>3.8</b>   | <b>Ελάχιστη σκληρότητα εργαλείου ως προς το υλικό κατεργασίας</b>                              | <b>91</b>  |
| <b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: Παραδείγματα Προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής σε Κατεργασίες .....</b> |  |            |
|  |  | <b>94</b>  |
| <b>4.1</b>   | <b>Μηχανική της νανοκοπής σε μη-σιδηρούχα υλικά.....</b>                                       | <b>94</b>  |
| <b>4.2</b>   | <b>Προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής Νανοκατεργασίας Χαλκού</b>                                   | <b>101</b> |
| <b>4.3</b>   | <b>Μηχανική της νανοκοπής σε ημιαγωγικά υλικά .....</b>  | <b>113</b> |
| <b>4.4</b>   | <b>Προσέγγιση ΜΔ κατά τη νανοκοπή μονοκρυσταλλικού πυριτίου</b>                                | <b>115</b> |
| <b>4.5</b>   | <b>Φθορά εργαλείου διαμαντιού κατά την νανοκοπή σιδήρου .....</b>                              | <b>127</b> |
| <b>4.6</b>   | <b>Τρισδιάστατη προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής της νανοκοπής</b>                               | <b>128</b> |
| <b>ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: Συμπεράσματα .....</b>  |  |            |
|  |  | <b>139</b> |
| <b>Βιβλιογραφία .....</b>  |  |            |
|  |  | <b>143</b> |

## Ευρετήριο Εικόνων

|   |    |
|---|----|
| Εικόνα 1.1: Σχηματική αναπαράσταση των συνοριακών συνθηκών στις 2 διαστάσεις.[119].....   | 15 |
| Εικόνα 1.2: Διάγραμμα ροής βημάτων τυπικής διαδικασίας για την παραγωγή τροχιάς με γνωστή έκφραση δυναμικού $U$ και γνωστό είδος συνοριακών συνθηκών [115].....   | 16 |
| Εικόνα 1.3: Μοντέλο νερού μέσα στο κουτί προσομοίωσης, μετά το τέλος του βήματος 6. [115] .....   | 17 |
| Εικόνα 1.4: Η μέθοδος Monte Carlo συγκρίνει την ενέργεια ενός συστήματος. Ο λόγος των πιθανοτήτων δύο ενεργειακών καταστάσεων $E$ , $E'$ συσχετίζεται με την ενεργειακή διαφορά των στερεοδιατάξεων. [116] .....  | 20 |
| Εικόνα 1.5: Διάγραμμα γενικής αρχής εφαρμογής των περιοδικών συνθηκών [115].....  | 25 |
| Εικόνα 1.6: Χρονική κλίμακα και κλίμακα μήκους για κάθε μέθοδο προσομοίωσης [117] .....   | 27 |
| Εικόνα 2.1: Αλληλεπίδραση ατόμων στη νανοκοπή [34] .....  | 41 |
| Εικόνα 2.2: (a)κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα fcc (b) μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα hcp [34] .....   | 41 |
| Εικόνα 2.3: Μεταβολή των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυνάμεων (a) και των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυναμικών ενέργειας (b), ως συνάρτηση της διατομικής απόστασης $r$ , μεταξύ δύο απομονωμένων ατόμων [16].....   | 44 |
| Εικόνα 2.4: Διδιάστατη αναπαράσταση των διαφόρων ζωνών ενός τεμαχίου. Οι άδαιοι κύκλοι, $O$ , είναι στην πρωταρχική ζώνη, όπου η κίνηση ελέγχεται μόνο με επίλυση των κλασσικών εξισώσεων κίνησης. Οι σκιασμένοι γκρι κύκλοι, είναι στη ζώνη $Q$ , όπου οι ταχύτητες ορίζονται ξανά μετά από χρονικό διάστημα $\Delta t$ . Οι γεμάτοι κύκλοι, είναι στο όριο της ζώνης $B$ . Είναι στάσιμοι και εξυπηρετούν την ίδια λειτουργία με το σφιγκτήρα του εργαλείου κατεργασίας. Διατηρούν το τεμάχιο σταθερό κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής, λείανσης ή οδόντωσης. [16]..... | 49 |
| Εικόνα 3.1: Το μοντέλο προσομοίωσης $M\Delta$ [49].....   | 63 |
| Εικόνα 3.2: Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για το δυναμικό LJ [49] .....  | 64 |
| Εικόνα 3.3: Δυναμική και ολική ενέργεια για το δυναμικό LJ [49].....  | 65 |

|   |    |
|---|----|
| Εικόνα 3.4: Θερμοκρασιακή διακύμανση για το δυναμικό LJ [49] .....  | 65 |
| Εικόνα 3.5: Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για το δυναμικό Morse [49] ..  | 66 |
| Εικόνα 3.6: Δυναμική και ολική ενέργεια για το δυναμικό Morse [49].....   | 67 |
| Εικόνα 3.7: Θερμοκρασιακή διακύμανση για το δυναμικό Morse [49].....  | 67 |
| Εικόνα 3.8: Προσομοίωση με δυναμικά EAM-Morse [49].....   | 68 |
| Εικόνα 3.9: Σύγκριση της δυναμικής ενέργειας για το δυναμικό EAM και τα δυναμικά EAM-Morse [49] .....   | 69 |
| Εικόνα 3.10: Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για το δυναμικό EAM [49] .  | 70 |
| Εικόνα 3.11: Δυναμική και ολική ενέργεια για το δυναμικό EAM [49].....  | 70 |
| Εικόνα 3.12: Θερμοκρασιακή διακύμανση για το δυναμικό EAM [49] .....  | 71 |
| Εικόνα 3.13: Διακύμανση των δυναμικών ενεργειών για τα δυναμικά LJ, Morse και EAM [49].....   | 72 |
| Εικόνα 3.14: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής χαλκού με χρήση εξαιρετικά αιχμηρού εργαλείου άπειρης σκληρότητας σε διαφορετικές αρνητικές γωνίες κοπής (0 ως 75°) [39].....   | 74 |
| Εικόνα 3.15: Μεταβολή της δύναμης κοπής και της δύναμης πρόωσης ανά μονάδα εύρους του λόγου της δύναμης πρόωσης προς τη δύναμη κοπής με τη μεταβολή της γωνίας [39] .....   | 75 |
| Εικόνα 3.16: Μεταβολή της ειδικής ενέργειας (δηλ. της ενέργειας που απαιτείται για την αποβολή μιας μονάδας όγκου του κατεργαζόμενου υλικού) ως προς τη γωνία κοπής. Παρουσιάζονται επίσης τα πειραματικά δεδομένα του Komanduri για βάθος κοπής 10μm και τα δεδομένα των Crawford και Merchant για βάθος κοπής 250μm [16]..... | 76 |
| Εικόνα 3.17: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής του χαλκού με χρήση εξαιρετικά αιχμηρού εργαλείου άπειρης σκληρότητας σε διάφορες θετικές γωνίες κοπής εργαλείου (μέχρι 45°) [39].....  | 78 |
| Εικόνα 3.18: Προσομοιώσεις ΜΔ νανοκοπής με εργαλείο στρογγυλού άκρου για λόγο d/r 0.1 και διάφορα βάθη κοπής (0.362-2.172 nm) [60]. .....   | 80 |
| Εικόνα 3.19: Διακύμανση της δύναμης κοπής και της δύναμης πρόωσης, και του λόγου πρόωσης προς κοπή, με την ακτίνα ακμής του εργαλείου για διαφορετικά βάθη κοπής [60] .....   | 82 |
| Εικόνα 3.20: Διακύμανση της ειδικής ενέργειας με το βάθος κοπής για διαφορετικούς λόγους d/r, όπου φαίνεται αύξηση της ειδικής ενέργειας για μειούμενα βάθη κοπής (επίδραση κλίμακας) [60].....   | 83 |

|  |     |
|--|-----|
| Εικόνα 3.21: (a) Προσομοίωση ΜΔ για την αστοχία εξόδου κατά τη νανοκοπή. (b) Οπτική μικρογραφία των πειραματικών αποτελεσμάτων της αστοχίας εξόδου κατά τις συμβατικές συνθήκες κατεργασίας [62].....  | 84  |
| Εικόνα 3.22: Προσομοίωση ΜΔ για διπλό κρύσταλλο. (a) αρχική θέση των ορίων των κόκκων του υλικού κατεργασίας (πριν την κοπή)· (b) στάδιο κατά το οποίο το εργαλείο έχει φτάσει τα όρια των κόκκων· (c) και (d) στάδια στα οποία φαίνεται η παραμόρφωση εμπρός και κάτω από το εργαλείο κατά την κοπή [16]..... | 85  |
| Εικόνα 3.23: Αποτελέσματα προσομοίωσης ΜΔ σε διάφορα στάδια νανοκοπής σε διαφορετικούς συνδυασμούς προσανατολισμών και κατευθύνσεις κοπής [68].....  | 87  |
| Εικόνα 3.24: Σχηματική απεικόνιση τριών τρόπων πλαστικής παραμόρφωσης στη ζώνη διάτμησης της νανοκοπής ενός μονοκρυστάλλου σε διαφορετικούς κρυσταλλικούς προσανατολισμούς και κατευθύνσεις κοπής [68].....  | 89  |
| Εικόνα 3.25: Προσομοίωση ΜΔ νανοκοπής σιδήρου: (a) με εργαλείο άπειρης σκληρότητας, (b) εργαλείο βολφραμίου, (c) εργαλείο χρωμίου και (d) εργαλείο σιδήρου [16].....   | 92  |
| Εικόνα 4.1: Απεικόνιση του υλικού κατεργασίας και του εργαλείου, όταν το εργαλείο έχει διανύσει μια δεδομένη απόσταση μέσα στο υλικό [76].....   | 95  |
| Εικόνα 4.2: Απεικόνιση του υλικού κατεργασίας μετά την απομάκρυνση των οριακών στρωμάτων κατά μήκος της ακμής προσβολής σε μια απόσταση $x$ ίση με τον αριθμό των στρωμάτων που αντικαθίστανται από την ακμή εκφυγής [76].....   | 95  |
| Εικόνα 4.3: Απεικόνιση του υλικού κατεργασίας μετά την αντικατάσταση νέων ατόμων στον ακμή προσβολής [76].....   | 96  |
| Εικόνα 4.4: Απεικόνιση της νανοκοπής σε προσομοίωση ΜΔ [34].....   | 96  |
| Εικόνα 4.5: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής του πυριτίου, η οποία δείχνει την πιθανότητα το υλικό του πυριτίου στο απόβλιττο και στα πρώτα στρώματα της νέας επιφάνειας να είναι άμορφο [3].....  | 98  |
| Εικόνα 4.6: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής χαλκού [34].....  | 99  |
| Εικόνα 4.7: Επίδραση της γωνίας κλίσης του εργαλείου στο σχηματισμό αποβλίττου (χαλκός) [34].....  | 99  |
| Εικόνα 4.8: Επίδραση της συνάρτησης δυναμικής ενέργειας (χαλκός) [34] .  | 100 |
| Εικόνα 4.9: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής αλουμινίου ) [34].....  | 100 |

|  |     |
|--|-----|
| Εικόνα 4.10: Επίδραση της γωνίας κλίσης του εργαλείου στο σχηματισμό αποβλίττου (αλουμίνιο) ) [34] .....   | 101 |
| Εικόνα 4.11: Επίδραση της συνάρτησης δυναμικής ενέργειας (αλουμίνιο) ) [34].....   | 101 |
| Εικόνα 4.12: Αρχική διάταξη του υλικού κατεργασίας και του εργαλείου με γωνία αποβλίττου $-45^\circ$ , πριν την νανοκοπή επιφάνειας (001) χαλκού. Το βάθος κοπής είναι 0.9 nm. Τα στρώματα στις πλευρές και στο κάτω μέρος του κελιού είναι άκαμπτα. Στο σχήμα φαίνεται το επίπεδο x-z των ατόμων (σταθερό επίπεδο y) [77] .....   | 102 |
| Εικόνα 4.13: Τελικές διαμορφώσεις μετά την προσομοίωση μοριακής δυναμικής κατά την νανοκοπή επιφάνειας (001) χαλκού με άκαμπτο εργαλείο γωνίας αποβλίττου $-45^\circ$ , για ταχύτητες κοπής 180, 18 και 1.8 m/s. Το βάθος κοπής σε κάθε περίπτωση είναι 1 nm [77] .....  | 106 |
| Εικόνα 4.14: Διαμόρφωση του υλικού κατεργασίας μετά τη χαλάρωση του, με το εργαλείο σε θέση φόρτισης, με χρόνο προσομοίωσης ΜΔ 120 ps (150000 βήματα), για ταχύτητες κοπής 180, 18 και 1.8 m/s. Οι τελικές διαμορφώσεις που φαίνονται στο Σχήμα 4.7 είχαν αφεθεί σε ηρεμία [77].....   | 108 |
| Εικόνα 4.15: Χωρική κατανομή της τοπικής θερμοκρασίας (K) στο υλικό κατεργασίας, μετά την προσομοίωση κοπής (διαμορφώσεις στο Σχήμα 2), συγκρινόμενη με τις θερμοκρασίες του υλικού αφού αφέθηκε σε ηρεμία για 120 ps (διαμόρφωση από την Εικόνα 4.14). Φαίνονται τα ζεύγη αποτελεσμάτων για ταχύτητες κοπής 180, 18 και 1.8 m/s. Σε κάθε φωτογραφία η κλίμακα διαφέρει, ενώ φαίνονται και οι τιμές σταθερής θερμοκρασίας για κάθε περίγραμμα [77] ..... | 109 |
| Εικόνα 4.16: Προσομοίωση νανοκατεργασίας ενός σημαντικά μεγαλύτερου συστήματος με 12000 άτομα, με επιφάνεια κατεύθυνσης (001). Η διάταξη που φαίνεται είναι μετά την νανοκατεργασία απόστασης 6.8 nm με ταχύτητα 18 m/s [77] .....   | 111 |
| Εικόνα 4.17: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής πυριτίου σε διάφορα στάδια σχηματισμού αποβλίττου με γωνία κοπής εργαλείου $-30^\circ$ [89] .....  | 114 |
| Εικόνα 4.18: Σχέδιο του μοντέλο προσομοίωσης ΜΔ [90].....  | 116 |
| Εικόνα 4.19: Τομή τρισδιάστατης διαδικασίας κοπής: (a) Αρχική αλληλεπίδραση μεταξύ εργαλείου και υλικού, (b) Δημιουργία αποβλίττου, (c) Κατεργασμένη επιφάνεια [90] .....  | 119 |
| Εικόνα 4.20: Δόνηση δύναμης κοπής: (a) Δύναμη κοπής (b) Συχνότητα της δύναμης κοπής [90].....  | 121 |



|  |     |
|--|-----|
| Εικόνα 4.21: Παραμόρφωση πλέγματος: (a) Σχέδιο για την παραμόρφωση πλέγματος, (b) RDF του αποβλίττου κοπής, (c) Φάσμα Raman του πραγματικού αποβλίττου κοπής [90]..... | 123 |
| Εικόνα 4.22: Δυνάμεις κοπής για διάφορα βάθη, (a) ακμή κοπής 1 nm, (b) ακμή κοπής 1.5 nm, (c) ακμή κοπής 2 nm, (d) ακμή κοπής 2.5 nm [90] .....                        | 124 |
| Εικόνα 4.23: Δύναμη κοπής για δημιουργία αποβλίττου [90] .....   | 125 |
| Εικόνα 4.24: Κατώφλι βάθους κοπής για δημιουργία αποβλίττου [90].....  | 126 |
| Εικόνα 4.25: Δύναμη κοπής για διάφορες ακμές κοπής [90] .....  | 127 |
| Εικόνα 4.26: Απεικόνιση κοπτικής ακμής με ομοεστιακό laser μικροσκόπιο σάρωσης [101] .....   | 128 |
| Εικόνα 4.27: Σχηματική απεικόνιση μοντέλου κοπτικού εργαλείου 2.5 Δ και 3Δ (a) μοντέλο κοπτικού εργαλείου 2.5 Δ (b) μοντέλο κοπτικού εργαλείου 3Δ [101].....           | 129 |
| Εικόνα 4.28: Σχηματική αναπαράσταση της δημιουργίας του μοντέλου ΜΔ κοπτικού εργαλείου [101].....  | 130 |
| Εικόνα 4.29: Αποτελέσματα της τρισδιάστατης προσομοίωσης ΜΔ (α) 1nm και (β) 3nm [101].....   | 131 |
| Εικόνα 4.30: Διακύμανση της δύναμης κοπής ως προς το χρονικό βήμα: (a) πάχος απαραμόρφωτου αποβλίττου 1 nm και (b) πάχος απαραμόρφωτου αποβλίττου 3 nm [101] .....     | 134 |
| Εικόνα 4.31: Μετασχηματισμοί φάσης γύρω από την κοπτική ακμή [101] ..  | 135 |
| Εικόνα 4.32: Σχηματική απεικόνιση του πειράματος κωνικής τομής με λόγο κλίσης 1:10000 [101].....   | 135 |
| Εικόνα 4.33: Αποτελέσματα προσομοίωσης ΜΔ κωνικής κοπής (a) βήμα 0, (b)βήμα 500 και (c) βήμα 4500 [101].....   | 136 |
| Εικόνα 4.34: Διακύμανση της δύναμης κοπής της προσομοίωσης ΜΔ κωνικής κοπής [101] .....  | 137 |
| Εικόνα 4.35: Τοπογραφικές απεικονίσεις κωνικής κοπής μονοκρυσταλλικού πυριτίου [101] .....   | 138 |

## Ευρετήριο Πινάκων

|  |     |
|--|-----|
| Πίνακας 1.1: Συνεισφορές για την περιγραφή των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων [119].....                | 14  |
| Πίνακας 1.2: Γενικά στοιχεία για τη μέθοδο της Μοριακής Μηχανικής [118]                                    | 19  |
| Πίνακας 1.3: Κύρια χαρακτηριστικά προσομοιώσεων σε μοριακό επίπεδο [115].....                              | 27  |
| Πίνακας 2.1: <i>Παράμετροι πρόβλεψης – διόρθωσης για δευτεροβάθμιες εξισώσεις</i> [15].....                | 39  |
| Πίνακας 2.2: <i>Παράμετροι πρόβλεψης – διόρθωσης για πρωτοβάθμιες εξισώσεις</i> [15].....                  | 40  |
| Πίνακας 3.1: Παράμετροι προσομοίωσης ΜΔ [49].....  | 62  |
| Πίνακας 4.1: Παράμετροι υλικού κατεργασίας και προσομοίωσης [77] .....                                     | 105 |
| Πίνακας 4.2: Δυναμικές ενέργειες του υλικού κατεργασίας μετά την κοπή, αλλά και μετά τη χαλάρωση [77]..... | 110 |
| Πίνακας 4.3: Υλικό κατεργασίας και συνθήκες προσομοίωσης [90].....   | 117 |
| Πίνακας 4.4: Παράμετροι δυναμικού [90].....  | 118 |
| Πίνακας 4.5 : Χαρακτηριστικά τεμαχίου και παράμετροι προσομοίωσης [101] .....                              | 132 |

## Περίληψη

Στην παρούσα διπλωματική εργασία παρουσιάζεται η μέθοδος προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής και συγκεκριμένα αναλύεται η εφαρμογή της σε κοπές νανοκλίμακας. Αρχικά τίθενται οι θεωρητικές βάσεις του μοντέλου της Μοριακής Δυναμικής και πιο συγκεκριμένα όλων των θεμελιωδών παραγόντων που το απαρτίζουν και το επηρεάζουν, όπως υπολογισμοί των τροχιών, η επιλογή ενέργειας δυναμικού ή/και ο καθορισμός της ταχύτητας κοπής, άρα και της θερμοκρασίας. Στη συνέχεια αναλύεται πιο ειδικά η χρήση της Μοριακής Δυναμικής στις νανοκοπές, τα πλεονεκτήματα, οι περιορισμοί της και οι παράμετροι διεργασίας που την επηρεάζουν, όπως το διατομικό δυναμικό που θα επιλεγεί για την προσομοίωση, η μεταβολή της γωνία κοπής του εργαλείου, το βάθος κοπής, η παραμόρφωση του υποστρώματος της επιφάνειας του υλικού κατεργασίας κ.α. Οι παράμετροι αυτοί εξετάστηκαν για τη μελέτη της μηχανικής των κοπών νανοκλίμακας και παρουσιάστηκαν τα αποτελέσματα τους στο τελικό κατεργασμένο υλικό. Για την ολοκλήρωση της βιβλιογραφικής ανασκόπησης έγινε παρουσίαση κάποιων χαρακτηριστικών περιπτώσεων προσομοίωσης Μοριακής δυναμικής για μη-σιδηρούχα υλικά, όπως ο χαλκός και το αλουμίνιο, για ημιαγωγικά υλικά, όπως το πυρίτιο, και τέλος για το σίδηρο που αποτελεί και το πιο κοινώς χρησιμοποιούμενο υλικό κατεργασίας. Τέλος περιγράφεται μια τρισδιάστατη προσομοίωση ΜΔ σε κοπή νανοκλίμακας, που αποτελεί την τελευταία λέξη της τεχνολογίας στον τομέα αυτό.

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

## Abstract

Molecular dynamics (MD) simulation, like other simulation techniques can play a significant role in addressing a number of machining problems at the atomic scale. It may be noted that atomic simulations are providing new data for various manufacturing processes and tribological phenomenon that cannot be obtained readily in any other way—theory, or experiment. In this thesis, the principles of MD simulation, relative advantages and current limitations, and its application to a range of machining problems and materials are reviewed. The main parameters of the MD simulations that have been examined are: the selected interatomic potential, the rake angle, the edge radius, the depth of cut on cutting and thrust forces, the subsurface deformation of the machined surface etc. Also there are more specific parameters that play a significant role in nanocutting processes such as crystal orientation.

Moreover for the completion of the review, have been examined the most common cases of materials, such as non-ferrous, like copper and aluminum, semiconductors, like silicon, and iron, which is the most widely used work material. Finally, it is described a 3D nanocutting model, which is the state of the art in its respective area, and the model is also verified by comparing with results obtained by other studies.

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

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: Μέθοδοι μοριακών προσομοιώσεων

## 1.1 Γενικά περί προσομοιώσεων

Η προσομοίωση αποτελεί ισχυρό εργαλείο, που επιτρέπει την άνετη και σχετικά μικρού κόστους μελέτη της συμπεριφοράς μίας διεργασίας με τη μεταβολή των παραμέτρων, των μεταβλητών λειτουργίας και των μεγεθών παρεμβολής εξωτερικών παραγόντων. Η προσομοίωση γενικά αναπαριστά τη συμπεριφορά μιας φυσικής, βιομηχανικής, βιολογικής, οικονομικής, κοινωνικής ή στρατιωτικής διεργασίας, μέσω υλικού υποδείγματος, οι παράμετροι και οι μεταβλητές του οποίου αποτελούν είδωλα των αντίστοιχων μεθόδων της μελετούμενης διεργασίας. Γενικά, τα δεδομένα εισόδου μίας προσομοίωσης είναι μεταβλητές απόφασης που καθορίζουν το σχεδιασμό της διαδικασίας, δηλαδή παράμετροι όπως λόγου χάρη η πρόωση και η ταχύτητα κοπής και τα αποτελέσματα εξόδου είναι δείκτες αποφάσεων, δηλαδή μεταβλητές της διαδικασίας όπως ο ρυθμός αφαίρεσης υλικού [106]. Από την οπτική γωνία του Μηχανικού θα μπορούσαμε να δώσουμε πολλούς ορισμούς για την προσομοίωση. Όλοι όμως αυτοί οι ορισμοί συμφωνούν πως η προσομοίωση αφορά τεχνικές που επιτρέπουν τη δυναμική μελέτη των μηχανισμών κίνησης των σωματιδίων ενός συστήματος σε μικροσκοπική λεπτομέρεια και τον προσδιορισμό μακροσκοπικών ποσοτήτων από τους μηχανισμούς αυτούς [107-109]. Λύνοντας για παράδειγμα τις εξισώσεις κίνησης του Newton σε μικροσκοπική κλίμακα μπορούμε να αντιληφθούμε και να κατανοήσουμε την μακροσκοπική συμπεριφορά ενός συστήματος [110]. Γενικότερα μέσω της προσομοίωσης εξυπηρετούνται οι παρακάτω σκοποί:

- να περιγραφεί η συμπεριφορά ενός συστήματος
- να διευρυνθούν οι ιδιότητες ενός υποθετικού συστήματος
- να σχεδιαστεί ένα καλύτερο σύστημα από το ήδη υπάρχον

Στο χώρο της Φυσικής αναπτύχθηκε η μέθοδος της Μοριακής Δυναμικής ως εναλλακτικός τρόπος μελέτης συστημάτων πολλών σωματιδίων. Η μέθοδος αυτή στηρίζεται στην επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Newton [110]

Η Μοριακή Μοντελοποίηση (Molecular Modeling) χρησιμοποιείται για να περιγράψει οποιαδήποτε διαδικασία λαμβάνει χώρα με σκοπό την απεικόνιση, περιγραφή και υπολογισμό των ιδιοτήτων ή της δομής ενός ή περισσότερων μορίων. Εναλλακτικά χρησιμοποιείται ο όρος Μοριακή Προσομοίωση (Molecular Simulation) και είναι ταυτόσημος της Μοριακής Μοντελοποίησης.

Η Μοριακή Προσομοίωση λειτουργεί συμπληρωματικά της εργαστηριακής πειραματικής διαδικασίας. Πιο συγκεκριμένα μπορεί να υποδείξει ή να απορρίψει πιθανά μοντέλα περιγραφής των φυσικών διεργασιών όπου λαμβάνουν χώρα σε ένα μοριακό σύστημα και να εξηγήσει τους εσωτερικούς μηχανισμούς τους σε ατομικό επίπεδο. Βοηθά δηλαδή στον καθορισμό των συνθηκών κάτω από τις οποίες γίνεται το εργαστηριακό πείραμα, συμβάλλει δε σε σημαντικό βαθμό στην κατανόηση των μηχανισμών που λαμβάνουν χώρα κατά την πειραματική διαδικασία. Σε σχέση με αντίστοιχες θεωρητικές προσεγγίσεις σε μακροσκοπικό επίπεδο, κατά κανόνα οι Μοριακές προσομοιώσεις παρουσιάζουν μεγαλύτερη ακρίβεια, δεδομένου ότι οι δεύτερες πραγματοποιούνται στην μελέτη της συμπεριφοράς της ύλης σε μοριακό και ατομικό επίπεδο. Η διαθέσιμη υπολογιστική ισχύς είναι ένας καθοριστικός παράγοντας για την αποτελεσματικότητα και πρακτική χρησιμότητα της Μοριακής Μοντελοποίησης. Όσο ταχύτερο είναι το υπολογιστικό σύστημα τόσο ταχύτερα μπορεί να εξομοιωθεί ένα Μοριακό σύστημα. Ταυτόχρονα, οι προσεγγίσεις στις οποίες στηρίζονται οι υπολογιστικές μέθοδοι μπορούν να μειωθούν και κατά συνέπεια να εξαχθούν ακριβέστερα αποτελέσματα. Η ισχύς δηλαδή του υπολογιστικού συστήματος δρα στην ουσία περιοριστικά στην ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Για αυτό και η μελέτη πολύπλοκων συστημάτων (και επομένως απαιτητικών σε υπολογιστική ισχύ) γίνεται με τη χρήση συστημάτων συστοιχίας ηλεκτρονικών υπολογιστών, όπου ο υπολογιστικός φόρτος διαμοιράζεται εξίσου σε αυτούς. Τα τελευταία χρόνια επικρατεί η τάση μελέτης και προσομοίωσης διαφόρων διεργασιών (φυσικών ή χημικών) σε μοριακό επίπεδο, με σκοπό την καλύτερη εξήγηση των αποτελεσμάτων τους μακρομοριακά. Για το λόγο αυτό, πολλές μέθοδοι προσομοίωσης σε μοριακό επίπεδο έχουν αναπτυχθεί πρόσφατα, από τις οποίες οι συχνότερα εφαρμοζόμενες είναι οι: Μοριακή Μηχανική - Molecular Mechanics (MM), Monte Carlo (MC) και Μοριακή Δυναμική - Molecular Dynamics (MD). [115]

## 1.2 Καθορισμός των παραμέτρων της προσομοίωσης

Η βάση όλων των μεθόδων μοριακής προσομοίωσης είναι ο καθορισμός μιας συνάρτησης δυναμικής ενέργειας  $U(r)$  (συναντάται και με τον όρο δυναμικό), μέσω της οποίας γίνεται ο υπολογισμός της δυναμικής ενέργειας του συστήματος προσομοίωσης, σαν συνάρτηση των συντεταγμένων των ατόμων (έστω  $N$ ) που το απαρτίζουν. Με  $r$  συμβολίζεται το διάνυσμα θέσης ενός ατόμου. Η  $U(r)$  αποτελείται από ένα σύνολο συνεισφορών, καθεμιά από τις



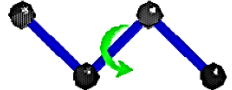
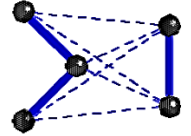
οποίες προέρχεται από κάποιο είδος αλληλεπίδρασης μεταξύ των ατόμων. Με γνωστή τη συνάρτηση αυτή, υπολογίζεται η δύναμη που ασκείται σε καθένα από τα άτομα μέσω της σχέσης:

$$\mathbf{F}_i = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i} U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (1.1)$$

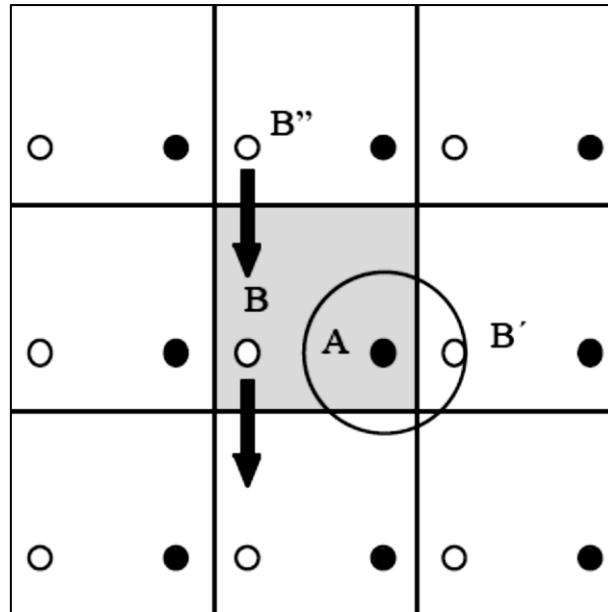
(με  $\partial$  συμβολίζεται η μερική παράγωγος). Ο δείκτης  $i$  αναφέρεται στο  $i$  άτομο του συστήματος, και παίρνει τιμές από 1 έως  $N$  (όσα και τα άτομα που υπάρχουν).

Στον Πίνακα 1.1 παρουσιάζονται οι συνήθεις συνεισφορές που λαμβάνονται υπόψη για την περιγραφή των αλληλεπιδράσεων μεταξύ ατόμων που ανήκουν στα υπό μελέτη μόρια . [120]

**Πίνακας 1.1:** Συνεισφορές για την περιγραφή των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων [119]

| <u>Ενεργειακός όρος</u>       | <i>Ταλάντωση δεσμών</i>   | <i>Ταλάντωση γωνιών</i>   | <i>Στρέψη διεδρων γωνιών</i>   | <i>Van Der Waals, ηλεκτροστατικές αλλ/σεις</i>  |
|-------------------------------|---|---|--|---|
| <u>Σχηματική αναπαράσταση</u> |  |  |  |  |

Ένα επόμενο βήμα είναι ο καθορισμός των συνοριακών συνθηκών του μοντέλου. Ένα υπολογιστικό μοντέλο αποτελείται από έναν πεπερασμένο αριθμό μορίων τα οποία τοποθετούνται σε μια αρχική διαμόρφωση στον τρισδιάστατο χώρο (όταν η προσομοίωση γίνεται στις 3 διαστάσεις). Θα μπορούσε κανείς να θεωρήσει ότι το σύστημα «τελειώνει» στα χωρικά όρια που καταλαμβάνει η αρχική διαμόρφωση. Ένα τέτοιο σύστημα θα ήταν κατάλληλο για την μελέτη ενός απομονωμένου συσσωματώματος από αυτά τα μόρια, δεν θα ήταν όμως κατάλληλο αν για παράδειγμα θα θέλαμε να προσομοιώσουμε ένα ρεαλιστικό ρευστό. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιούμε τις λεγόμενες περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Με το τέχνασμα αυτό, αν ένα άτομο βρίσκεται σε κάποια θέση  $\mathbf{r}$  μέσα στον αρχικό περιορισμένο όγκο (ένα «κουτί»), θεωρούμε ότι αυτό αντιπροσωπεύει ένα άπειρο σύνολο από άτομα, τα οποία είναι περιοδικές εικόνες του, όπως φαίνεται στο δισδιάστατο παράδειγμα που ακολουθεί (Εικόνα 1.1).



**Εικόνα 1.1:** Σχηματική αναπαράσταση των συνοριακών συνθηκών στις 2 διαστάσεις.[119]

Το άτομο A αλληλεπιδρά με την κοντινότερη «εικόνα» του ατόμου B, το B', αλλά όχι με το άτομο B, το οποίο βρίσκεται έξω από μια χαρακτηριστική ακτίνα αποκοπής των αλληλεπιδράσεων. Όταν το άτομο B μετακινείται έξω από το αρχικό κουτί (αυτό με το γκρι φόντο) όπως δείχνει το κάτω βέλος, η περιοδική του εικόνα B'' εισέρχεται στο κουτί προσομοίωσης, από το απέναντι κουτί (όπως δείχνει το πάνω βέλος)

Με τη βοήθεια αυτού του δισδιάστατου παραδείγματος, γίνεται φανερό πώς, ενώ πρακτικά προσομοιώνουμε (λύνουμε τις εξισώσεις κίνησης για) ένα πεπερασμένο σύνολο ατόμων μέσα στο αρχικό κουτί, είναι σαν να προσομοιώνουμε την συμπεριφορά ενός «άπειρου» συστήματος που καταλαμβάνει όλο τον χώρο, και άρα είναι πιο κοντά σε ένα ρεαλιστικό σύστημα. Στο παρακάτω διάγραμμα ροής φαίνεται μια τυπική διαδικασία βημάτων για την παραγωγή μια τροχιάς, εφόσον έχει επιλεγθεί το δυναμικό U και το είδος των συνοριακών συνθηκών.

1. Τοποθέτηση των ατόμων στο «κουτί» της προσομοίωσης
2. Ελαχιστοποίηση της ενέργειας του συστήματος (με βάση το επιλεγμένο δυναμικό U) με κατάλληλες υπολογιστικές τεχνικές.
3. Απόδοση αρχικών ταχυτήτων στα άτομα, συνήθως βάσει μιας κατανομής Maxwell-Boltzmann, θερμοκρασίας ίσης με την επιθυμητή
4. Επιβολή της επιθυμητής πίεσης ή/και θερμοκρασίας με κατάλληλες τεχνικές
5. Εξέλιξη του συστήματος για κάποια χρονική περίοδο, ώστε να έρθει όσο το

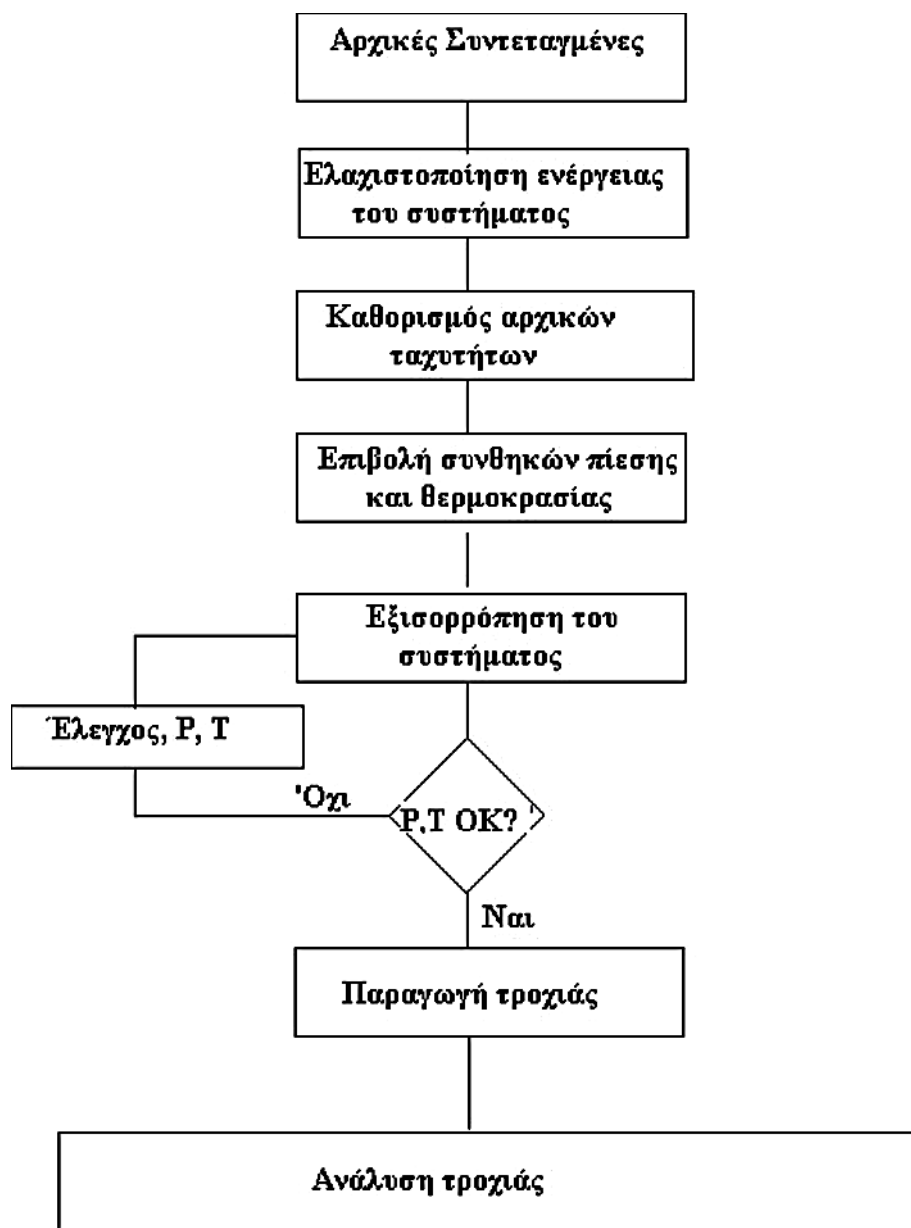


δυνατόν πιο κοντά στην κατάσταση ισορροπίας που αντιστοιχεί στις επιθυμητές συνθήκες όγκου, πίεσης και θερμοκρασίας.

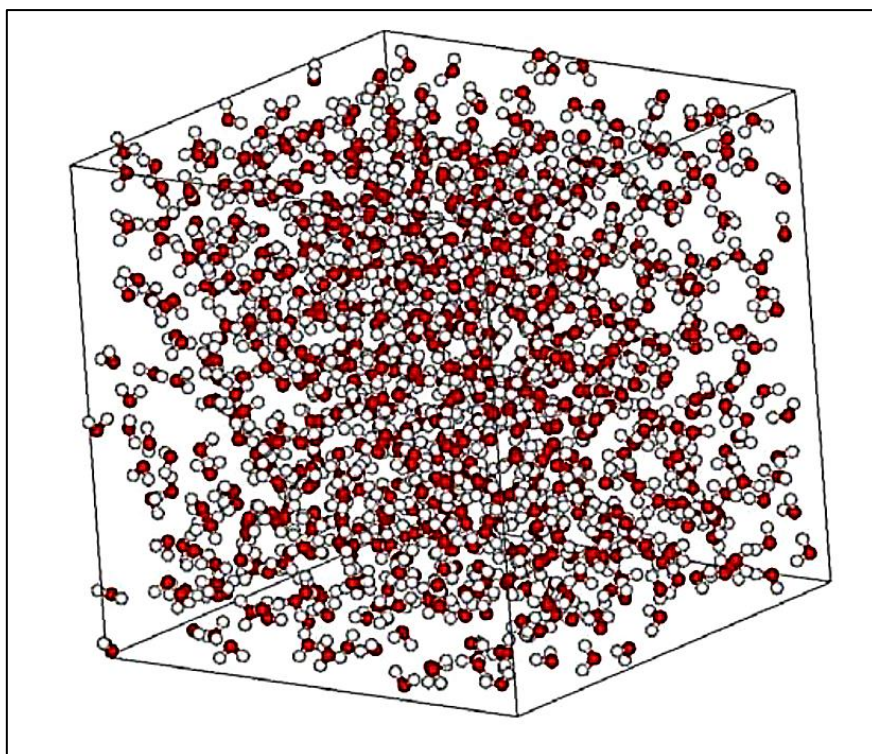
6. Έλεγχος για την επίτευξη των συνθηκών. Σε περίπτωση μη επίτευξης, επιβάλλεται επιπλέον περίοδος εξισορρόπησης.

7. Κατόπιν επίτευξης της ισορροπίας, παραγωγή της τροχιάς

8. Ανάλυση της τροχιάς με σκοπό τον υπολογισμό των ζητούμενων μεγεθών ή ιδιοτήτων .



**Εικόνα 1.2:** Διάγραμμα ροής βημάτων τυπικής διαδικασίας για την παραγωγή τροχιάς με γνωστή έκφραση δυναμικού  $U$  και γνωστό είδος συνοριακών συνθηκών [115]



**Εικόνα 1.3:** Μοντέλο νερού μέσα στο κουτί προσομοίωσης, μετά το τέλος του βήματος 6. [115]

Στο συγκεκριμένο παράδειγμα (Εικόνα 1.3) το μοντέλο αποτελείται από 900 μόρια νερού (τα άτομα O διακρίνονται με σκούρες σφαίρες, ενώ του H με γκρι), έχει εξισορροπηθεί σε θερμοκρασία 20 °C και πίεσης 1 atm, ενώ έχει και την αντίστοιχη πυκνότητα του νερού σε αυτή τη θερμοκρασία. [113, 114]

### 1.3 Μοριακή Μηχανική (MM)

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

Τα διάφορα πεδία δυνάμεων (force fields) της μοριακής μηχανικής χρησιμοποιούν τις εξισώσεις της κλασικής μηχανικής για να περιγράψουν τις επιφάνειες της δυναμικής ενέργειας και ορισμένες ιδιότητες των μορίων. Οι μέθοδοι αυτές συσχετίζουν την ενέργεια του συστήματος με ένδο- και διαμοριακές αλληλεπιδράσεις μέσα στο σύστημα οι οποίες καθορίζονται από

τις μεταβολές μήκους δεσμών και μεγέθους γωνιών, περιστροφή δεσμών και μη δεσμικές αλληλεπιδράσεις ατόμων του συστήματος (ηλεκτροστατικές και Van der Waals αλληλεπιδράσεις). Ένα συστατικό του πεδίου αυτού είναι η ενέργεια που προέρχεται από τη συσπείρωση και την επιμήκυνση των δεσμών. Το συστατικό αυτό συχνά θεωρείται ότι έχει την μορφή αρμονικού ταλαντωτή και έτσι μπορεί να υπολογιστεί από τον νόμο του Hooke: [118]

$$V_{\text{ελατηρίου}} = 1/2 K_r (r - r_o)^2 \quad (1.2)$$

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

Ο δεσμός μεταξύ δύο ατόμων είναι ανάλογος με ένα ελατήριο που ενώνει τις δύο μάζες. Χρησιμοποιώντας αυτή την αναλογία, η Εξίσωση (1.2) δίνει τη δυναμική ενέργεια του συστήματος των μαζών  $V_{\text{ελατηρίου}}$  και την σταθερά του ελατηρίου  $K_r$ . Η απόσταση των ατόμων στη θέση ισορροπίας και το πλάτος της ταλάντωσης (μέγιστη απόσταση ελατηρίου) είναι  $r$  και  $r_o$  αντίστοιχα. Τα  $K_r$  και  $r_o$  είναι σταθερά για συγκεκριμένο σύστημα ατόμων που συνδέονται με ένα συγκεκριμένο ελατήριο και αποτελούν τις παραμέτρους του πεδίου δυνάμεων.

Η δυναμική ενέργεια ενός μοριακού συστήματος είναι συνάρτηση:

- (α) του είδους των ατόμων που απαρτίζουν το μόριο
- (β) του είδους των δεσμών που το συγκροτούν, και
- (γ) των σχηματιζόμενων διέδρων γωνιών

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

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

**Πίνακας 1.2:** Γενικά στοιχεία για τη μέθοδο της Μοριακής Μηχανικής [118]

| <b>Μοριακή Μηχανική</b>  |   |   |   |
|--|---|---|---|
| <b>ΧΑΡΑΚΤΗΡΙΣΤΙΚΑ ΜΕΘΟΔΟΥ</b>  | <b>ΠΛΕΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ</b>  | <b>ΜΕΙΟΝΕΚΤΗΜΑΤΑ</b>  | <b>ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ</b>  |
| Χρησιμοποιεί αρχές της κλασικής μηχανικής                            | Μικρές υπολογιστικές απαιτήσεις.  | Το κάθε ενεργειακό πεδίο έχει ισχύ για μια περιορισμένη ομάδα παρεμφερών μορίων.                                      | Μεγάλα συστήματα (της τάξης των χιλίων ατόμων).                               |
| Βασίζεται σε πεδία δυνάμεων με καθορισμένες πειραματικά παραμέτρους. | Μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για την ανάλυση μεγαλομοριακών συστημάτων. | Δεν υπολογίζει ηλεκτρονικές ιδιότητες.  | Συστήματα και διαδικασίες που δεν περιλαμβάνουν διάσπαση ή δημιουργία δεσμών. |
|  |   | Απαραίτητη η ύπαρξη πειραματικών δεδομένων (ή δεδομένων από ab initio υπολογισμούς) για τον καθορισμό των παραμέτρων. |   |

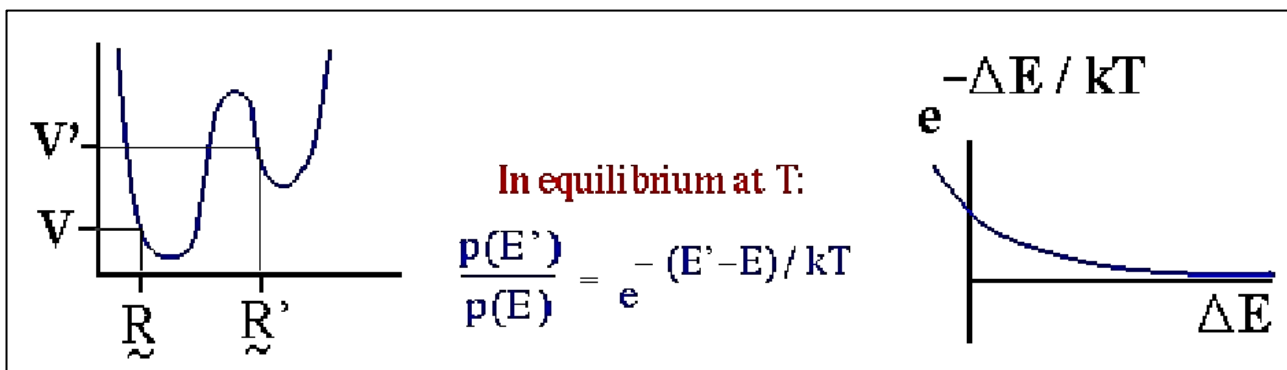
## 1.4 Monte Carlo (MC)

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

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

μόνο μέσα στον τομέα της φυσικής, έχει εφαρμοστεί επιτυχώς σε ένα ευρύ φάσμα προβλημάτων, από τα στοιχειώδη σωματίδια έως την αστρονομία.

Στην μέθοδο M.C. διαλέγουμε στην τύχη ένα πεπερασμένο σύνολο σημείων μέσα από το διάστημα ολοκλήρωσης. Η ανάγκη προσδιορισμού ολικού ενεργειακού ελαχίστου οδήγησε στην ανάπτυξη της μεθόδου Monte Carlo για στοχαστική διερεύνηση της επιφανειακής δυναμικής ενέργειας, τροποποιώντας τυχαία τη στερεοδιάταξη του μοριακού συστήματος. Η ενέργεια κάθε τυχαίας στερεοδιάταξης συγκρίνεται με την ενέργεια της προηγούμενης. Αν είναι χαμηλότερη τότε αυτή είναι η νέα διάταξη. Αν είναι υψηλότερη επιλέγεται τυχαία μία άλλη. [116]



**Εικόνα 1.4:** Η μέθοδος Monte Carlo συγκρίνει την ενέργεια ενός συστήματος. Ο λόγος των πιθανοτήτων δύο ενεργειακών καταστάσεων E, E' συσχετίζεται με την ενεργειακή διαφορά των στερεοδιατάξεων. [116]

Το πλεονέκτημα της μεθόδου είναι ότι η στοχαστική διερεύνηση μπορεί να υπερβεί πολλά ενεργειακά φράγματα. Για μεγάλους χρόνους προσομοίωσης η μέθοδος Monte Carlo πρέπει να παράγει τα ίδια αποτελέσματα με τη Μοριακή Δυναμική. Αν για παράδειγμα θέλει κάποιος τώρα να υπολογίσει τη θερμοδυναμική της ρόφησης, μπορεί να το πετύχει χρησιμοποιώντας διάφορες τεχνικές Μοριακής προσομοίωσης [117]. Μια πρώτη προσέγγιση είναι ο υπολογισμός του ολοκληρώματος απεικονίσεων (configurational integral) για ένα μόριο. Η ολοκλήρωση Monte Carlo είναι μια χρήσιμη τεχνική για τον υπολογισμό αυτό. Ο όρος Monte Carlo, δόθηκε στη μέθοδο επειδή χρησιμοποιεί τυχαίους αριθμούς και θυμίζει παιχνίδι τύχης.

## 1.5 Μοριακή Δυναμική (ΜΔ)

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

Η μέθοδος της ΜΔ αναπτύχθηκε αρχικά από τους Adler και Wainwright το 1956 [113] και συνίσταται στην αριθμητική επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Newton,  $N$  ατόμων, τα οποία υποθέτουμε ότι αλληλεπιδρούν μεταξύ τους με κάποιο γνωστό δυναμικό [115]. Η μελέτη αυτή συντέλεσε στην ανάδυση πολλών και σημαντικών νέων απόψεων για τη συμπεριφορά των απλών υγρών. Το επόμενο μεγάλο βήμα έγινε το 1964, όταν ο Rahman διεξήγαγε την πρώτη προσομοίωση χρησιμοποιώντας εξισώσεις που εκφράζουν με αρκετά ρεαλιστικό τρόπο τις διαμοριακές δυνάμεις στο υγρό Αργό (Ar) [120]. Η πρώτη Μοριακή Δυναμική προσομοίωση ενός ρεαλιστικού συστήματος έγινε πραγματικότητα από τους Rahman και Stillinger, προσομοιάζοντας το νερό στην υγρή κατάσταση το 1974. Το 1977 πρωτοεμφανίστηκαν οι προσομοιώσεις πρωτεϊνών με την εξομοίωση του παρεμποδιστή της παγκρεατικής θρυψίνης (Bovine Pancreatic Trypsin Inhibitor, BPTI).

Σήμερα κάθε ενδιαφερόμενος μπορεί να βρει πολυάριθμες μελέτες Μοριακής Δυναμικής προσομοίωσης διαλυμάτων πρωτεϊνών, συμπλεγμάτων πρωτεϊνών-DNA και συστημάτων λιπιδίων, που απευθύνονται σε μια ποικιλία προβλημάτων, όπως η θερμοδυναμική πίσω από την αναδίπλωση στο χώρο μικρών μορίων πρωτεΐνης. Για να λάβει κανείς πληροφορίες σχετικές με τη δυναμική κατάσταση, είναι απαραίτητο να ακολουθηθεί μια διαφορετική προσέγγιση, η οποία θα είναι ικανή να παρακολουθεί την εξέλιξη του συστήματος στον χρόνο.

Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής είναι από πολλές απόψεις παρόμοιες με τα πραγματικά πειράματα. Για παράδειγμα σε ένα πείραμα προετοιμάζουμε το υλικό που πρόκειται να μελετήσουμε. Φέρουμε το δείγμα σε μια διάταξη συνδεδεμένη με ένα όργανο μέτρησης π.χ. θερμόμετρο και μετρούμε την ιδιότητα που μας ενδιαφέρει για κάποιο χρονικό διάστημα. Αν οι μετρήσεις

υπόκεινται σε στατιστικό θόρυβο (noise), όπως συχνότατα συμβαίνει με τις περισσότερες μετρήσεις, αυξάνουμε τον αριθμό των μετρήσεων και παίρνουμε μέσο όρο ως προς χρόνο, παίρνοντας κατ' αυτόν τον τρόπο πιο ακριβείς εκτιμήσεις.

Σε μια Μοριακή Δυναμική προσομοίωση ακολουθείται ακριβώς η ίδια διαδικασία. Πρώτα ετοιμάζεται το δείγμα. Δηλαδή επιλέγεται το φυσικό σύστημα και το μοντέλο που το περιγράφει, όσο το δυνατόν περισσότερο αξιόπιστα. Έτσι για ένα σύστημα που αποτελείται από  $N$  σωματίδια, λύνουμε τις εξισώσεις του Newton μέχρις ότου οι ιδιότητες του συστήματος να μην αλλάζουν με την πάροδο του χρόνου. Με την επίτευξη της ισορροπίας του συστήματος πραγματοποιείται μέτρηση. Στην πραγματικότητα βέβαια πολλά από τα κοινά σφάλματα, που γίνονται σε ένα υπολογιστικό "πείραμα", είναι παρόμοια με τα σφάλματα που μπορούν να γίνουν και σε ένα πραγματικό πείραμα. Για παράδειγμα, το δείγμα μπορεί να μην έχει προετοιμαστεί κατάλληλα, η χρονική περίοδος της μέτρησης να είναι πολύ σύντομη, κατά τη διάρκειά της το σύστημα να υφίσταται κάποια μη αντιστρεπτή μεταβολή ή τελικά να μη μετρήθηκε αυτό που έπρεπε.

Η βασική ιδέα πίσω από τη Μοριακή Δυναμική είναι ότι αφού κάθε υλικό/ουσία δημιουργείται από στοιχειώδη σωματίδια, εάν καθορίσουμε τις βασικές δυναμικές παραμέτρους των σωματιδίων αυτών, τότε μπορούμε να καθορίσουμε τις μακροσκοπικές φυσικές ιδιότητες των υλικών/ουσιών με στατιστικές μεθόδους. Η Μοριακή Δυναμική ανάλυση βασίζεται στην επίλυση του δεύτερου νόμου του Νεύτωνα με σκοπό την παρακολούθηση της κίνησης κάθε ατόμου σε ένα σύστημα [114].

Στην περίπτωση μεταφορικής κίνησης ενός συμμετρικά σφαιρικού μορίου, ο νόμος παίρνει την απλή μορφή:

$$\mathbf{F} = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} \quad (1.3)$$

όπου  $\mathbf{F}$  είναι το διάνυσμα της συνισταμένης των δυνάμεων που ασκούνται στο μόριο από τα υπόλοιπα μόρια στο σύστημα,  $\mathbf{r}$  είναι το διάνυσμα θέσης του μορίου,  $t$  είναι ο χρόνος και  $m$  είναι η μάζα του μορίου.

Με ολοκλήρωση της παραπάνω εξίσωσης μπορούμε να εξαγάγουμε την ταχύτητα και τη μετατόπιση. Εάν οι ολοκληρώσεις αυτές γίνουν για κάθε άτομο και σε διάφορα χρονικά διαστήματα από μια αρχική κατάσταση, τότε μπορούν να συγκεντρωθούν αναλυτικές πληροφορίες για την κίνηση κάθε ατόμου [16]. Υπολογίζοντας μέσες τιμές σε χρόνο, χώρο ή και τα δύο, μπορούν να εξαχθούν μακροσκοπικές φυσικές ιδιότητες. Για μόρια με πολύπλοκη γεωμετρία ο νόμος του Newton δεν επαρκεί.

Ανάλογα με τον τύπο μοριακού μοντέλου που χρησιμοποιείται, στην προσομοίωση υιοθετείται μια γενικευμένη μορφή της εξίσωσης του Newton. Για παράδειγμα, όταν χρησιμοποιείται ένα μοντέλο στερεού σώματος, πρέπει να λαμβάνεται υπόψη η περιστροφή των μορίων γύρω από τη θέση ισορροπίας τους. Ωστόσο, όσο πολύπλοκη και αν είναι η εξίσωση κίνησης, η βασική διαδικασία προσομοίωσης είναι πάντα ίδια: αρχικά ολοκληρώνεται η εξίσωση κίνησης για κάθε μόριο και υπολογίζονται οι δυναμικές παράμετροι και στη συνέχεια υπολογίζονται οι μέσες τιμές των δυναμικών παραμέτρων για την εξαγωγή των μακροσκοπικών φυσικών ιδιοτήτων.

Ο υπολογισμός των διαμοριακών δυνάμεων, λόγω της ηλεκτρικής/ηλεκτρομαγνητικής φύσης των δυνάμεων, απαιτεί την ύπαρξη κατάλληλων μοντέλων διαμοριακού δυναμικού που περιγράφουν τις διαμοριακές αλληλεπιδράσεις. Τα μοντέλα αυτά συνήθως υπολογίζονται από πειραματικά δεδομένα ή από υπολογισμούς κβαντομηχανικής. Συνήθως λαμβάνεται υπόψη η αλληλεπίδραση ανάμεσα σε δύο ή τρία μόρια, καθώς η συνεισφορά περισσότερων σωματιδίων είναι αμελητέα και μπορεί να αγνοηθεί εντελώς ή να παρουσιαστεί σαν διορθωτικός συντελεστής στην εξίσωση δυναμικού.

Η Μοριακή Δυναμική, με την ραγδαία ανάπτυξη της υπολογιστικής ισχύος των σύγχρονων υπολογιστών, έχει αναπτυχθεί σημαντικά τα τελευταία χρόνια. Αποτελεί σημαντικό εργαλείο για τη μελέτη της διαδικασίας σχηματισμού υλικών και των ιδιοτήτων των τελευταίων, ενώ χρησιμοποιείται ολοένα και περισσότερο για τη μελέτη προβλημάτων μετάδοσης ενέργειας. Βασικοί περιορισμοί της μεθόδου αποτελούν η ανάγκη για καθορισμό μιας όσο το δυνατόν ακριβέστερης σχέσης δυναμικού και το μέγεθος των συστημάτων που μπορούν να μελετηθούν. Όσον αφορά τον πρώτο περιορισμό, υπάρχουν δοκιμασμένες εμπειρικές σχέσεις που περιγράφουν ικανοποιητικά τα περισσότερα από τα υλικά που ενδιαφέρουν

Όπως προαναφέρθηκε, ο μεγαλύτερος περιορισμός της Μοριακής Δυναμικής ανάλυσης είναι το μέγεθος των συστημάτων που μπορούν να προσομοιωθούν. Προσομοιώσεις ρευστών μπορεί να περιλαμβάνουν έως και 200,000 μόρια, ενώ στερεών από 10 έως 100 εκατομμύρια άτομα, ανάλογα με τον απαιτούμενο χρόνο προσομοίωσης. Δυστυχώς, ακόμα και ένας κύβος προσομοίωσης με ακμή 1000 Angstrom, ο οποίος μπορεί να περιέχει έως και 50 εκατομμύρια άτομα πυριτίου, απαιτεί μεγάλους χρόνους προσομοίωσης, ώστε να μπορούν αν εξαχθούν στατιστικά στοιχεία για τα phonons. Επιπλέον, η μέση ελεύθερη διαδρομή των φορέων θερμότητας (phonon) στο πυρίτιο είναι περίπου 3000 Angstrom. Για τη μελέτη της μετάδοσης θερμότητας έχουν επιστρατευτεί προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής ισορροπίας και μη-



ισορροπίας. Στην προσέγγιση μη-ισορροπίας επιβάλλεται μια διαφορά θερμοκρασίας ή ροή ενέργειας στο σύστημα, αλλάζοντας τα δυναμικά χαρακτηριστικά των ατόμων σε τοπικές συνοριακές περιοχές [16]. Γενικά, η Μοριακή Δυναμική προσομοίωση μη-ισορροπίας έχει τρία μειονεκτήματα: Πρώτον, το μοντέλο προσομοίωσης πρέπει να έχει μεγάλο αριθμό ατόμων στις συνοριακές περιοχές, ώστε να σταθεροποιούνται οι συνοριακές θερμοκρασίες, κάτι που αυξάνει τις υπολογιστικές απαιτήσεις. Δεύτερον, τα συστήματα που μπορούν να προσομοιωθούν είναι μικρότερα από τη μέση ελεύθερη οδό των ρηονον, κάτι το οποίο περιορίζει και το μέγιστο δυνατό μήκος κύματος των ρηονον. Τέλος, για τη σύγκλιση στατιστικών στοιχείων για τη θερμοκρασία απαιτείται μια αφύσικα μεγάλη κλίση θερμοκρασιών, κάτι το οποίο καθιστά δύσκολο τον καθορισμό της θερμικής αγωγιμότητας σε πρακτικές θερμοκρασίες.

Η προσέγγιση ισορροπίας βασίζεται σε μικρές διακυμάνσεις της θερμοκρασίας για τη δημιουργία στιγμιαίας ροής θερμότητας. Παρόλο που χρονικά η μέση τιμή αυτής της θερμικής ροής εξαφανίζεται, η θερμική αγωγιμότητα του συστήματος ως προς τη διαταραχή μπορεί να υπολογιστεί από τη συνάρτηση αυτοσυσχέτισης της ροής θερμότητας, όπως περιγράφεται από τη σχέση Green-Kubo [106]. Η διαδικασία σύγκλισης είναι αργή, όμως η Μοριακή Δυναμική προσομοίωση ισορροπίας δεν πάσχει από τα τρία μειονεκτήματα που αναφέραμε προηγουμένως (οι συνοριακές περιοδικές συνθήκες καταργούν τους περιορισμούς σχετικά με τη μέση ελεύθερη οδό). Ωστόσο, κατά τη διάρκεια Μοριακής Δυναμικής ανάλυσης ισορροπίας απαιτείται προσοχή, ώστε να μην εισέρχονται πλασματικές επιδράσεις μεγέθους λόγω του πεπερασμένου μεγέθους μοντέλου προσομοίωσης.

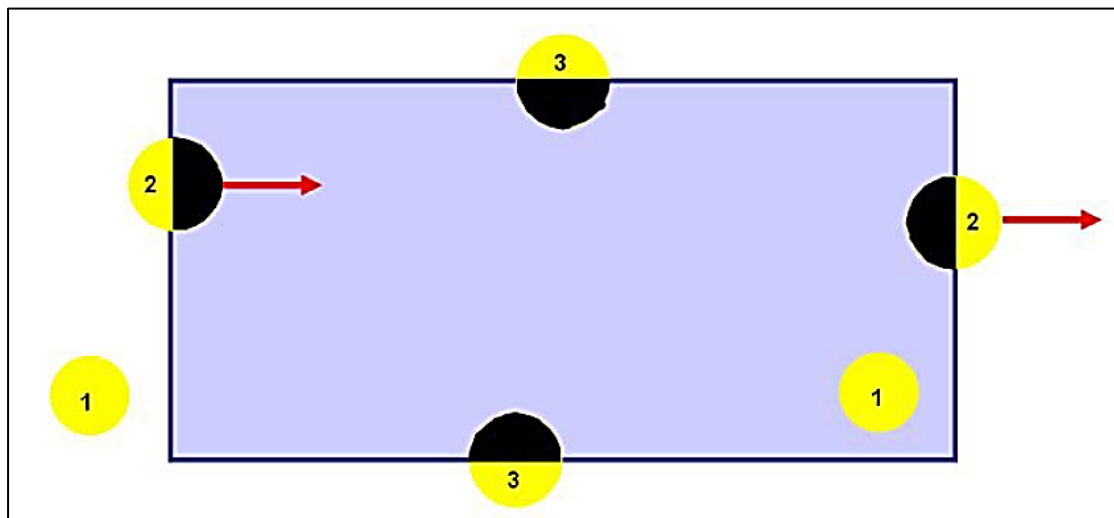
Μέσα από τη Μοριακή Δυναμική προσομοίωση, από τη χρονική εξέλιξη της τροχιάς και της ταχύτητας του κάθε ατόμου ξεχωριστά, μπορούν να υπολογιστούν χαρακτηριστικά όπως ο χρόνος χαλάρωσης, το φάσμα των ρηονον, η ταχύτητα και η πυκνότητα κάθε κατάστασης. Στην πράξη, οι πληροφορίες αυτές μπορούν να εισαχθούν στην εξίσωση Boltzmann και να αντιμετωπισθούν έτσι προβλήματα μετάδοσης θερμότητας στο μέσο-επίπεδο, κάτι το οποίο δε μπορεί να επιτευχθεί άμεσα με τη Μοριακή Δυναμική. Επιπλέον, η Μοριακή Δυναμική μπορεί να αποτελεί το ιδανικό εργαλείο για τη μελέτη των ελαττωματικών επιπέδων αλληλεπίδρασης και του μη αρμονικού διασκορπισμού. Ένα θεωρητικό μειονέκτημα της κλασικής Μοριακής Δυναμικής είναι ότι δεν συμπεριλαμβάνει αρχές κβαντικής στατιστικής και το μηχανισμό κβαντικού διασκορπισμού. Αυτό το μειονέκτημα περιορίζει τη χρήση της Μοριακής Δυναμικής σε προβλήματα υψηλών θερμοκρασιών. Πρέπει βέβαια να τονισθεί σε αυτό το σημείο πως οι μελέτες κλασικής

Μοριακής Δυναμικής εστιάζονται σε κλασικά συστήματα αποτελούμενα από ένα μεγάλο αριθμό σωματιδίων. Με τον όρο κλασικό εννοούμε πως η κίνηση των πυρήνων των σωματιδίων υπακούει τους νόμους της κλασικής μηχανικής. Αυτή είναι μια εξαιρετικά καλή προσέγγιση για ένα μεγάλο εύρος υλικών. Μόνο στην περίπτωση μεταφορικής ή περιστροφικής κίνησης ελαφρών ατόμων ή μορίων (He, H<sub>2</sub>, D<sub>2</sub>) ή δονητικής κίνησης με συχνότητα ν τέτοια ώστε  $h\nu \gg k_B T$  θα πρέπει να λαμβάνονται υπόψη κβαντικά φαινόμενα. [109]

Γενικά, θεωρούμε ότι τα N άτομα βρίσκονται μέσα σε ένα «κουτί» διαστάσεων  $L_x, L_y, L_z$ . Ο όγκος του κουτιού και ο αριθμός ατόμων καθορίζουν την πυκνότητα του συστήματος. Οι περιοδικές συνθήκες στα άκρα του κουτιού προσομοιώνουν το άπειρο σύστημα. Αυτές, από μαθηματικής πλευράς, εκφράζονται με την ακόλουθη σχέση για οποιοδήποτε μέγεθος A:

$$A(x) = A(x+nL) \quad (1.4)$$

όπου  $n=(n_1, n_2, n_3)$  για όλους τους ακέραιους  $n_1, n_2, n_3$  και  $L=(L_x, L_y, L_z)$ . Έτσι, κάθε φορά που ένα σωματίδιο βγαίνει από μία πλευρά του κουτιού θεωρούμε ότι εισέρχεται από την αντίθετη πλευρά με την ίδια ταχύτητα (Εικόνα 1.5).



**Εικόνα 1.5:** Διάγραμμα γενικής αρχής εφαρμογής των περιοδικών συνθηκών [115]

Γενικά η δυναμική ενέργεια των N σωματιδίων για ένα κεντρικό και προσθετικό δυναμικό ζεύγους είναι:

$$\varphi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \varphi_{ij}(|r_i - r_j|) \quad (1.5)$$

όπου  $r_i, r_j$  οι θέσεις των ατόμων  $i$  και  $j$  αντίστοιχα και  $\varphi$ , το δυναμικό που αναπτύσσεται μεταξύ των ανωτέρω ατόμων. Η χρήση των περιοδικών

συνθηκών επιβάλλει την εισαγωγή μίας εμβέλειας αλληλεπίδρασης του δυναμικού

$$r_i \leq \frac{1}{2} \min(L_x, L_y, L_z) \quad (1.6)$$

για τον υπολογισμό του δυναμικού και των δυνάμεων. Η εμβέλεια αυτή καλείται ακτίνα αποκοπής  $r_o$ , και χρησιμεύει στην πράξη στο να αποφευχθούν αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων  $i$  και  $j$  και ταυτόχρονα μεταξύ του  $i$  και των περιοδικών ειδώλων του  $j$ . Η δύναμη λοιπόν που ασκείται επάνω στα σωματίο  $i$  από τους γείτονες του θα είναι:

$$\bar{F}_i = - \sum_{i \neq j} \bar{\nabla} \varphi(\bar{r}_{ij}) \quad |\bar{r}_{ij}| \leq r_o \quad (1.7)$$

Μέσα στα όρια της κλασικής προσέγγισης, δηλαδή για θερμοκρασίες  $T > \Theta_{\text{DEBYE}}$ , και για χαρακτηριστικούς χρόνους διαδραματισμού ενός φαινομένου μεγαλύτερους από 10-16 sec, η εξίσωση κίνησης από τον νόμο του Newton είναι:

$$F_i = m_i \frac{\partial^2 r_i}{\partial t^2} \quad (1.8)$$

Έτσι για ένα σύστημα  $N$  ατόμων έχουμε να ολοκληρώσουμε  $3N$  διαφορικές εξισώσεις και απαιτούνται  $6N$  αρχικές συνθήκες. Αυτές οι αρχικές συνθήκες μπορούν να είναι οι θέσεις των ατόμων και οι ταχύτητές τους. Για ένα στερεό οι αρχικές θέσεις των ατόμων μπορούν κάλλιστα να είναι οι πλεγματικές τους θέσεις και οι ταχύτητες εκλέγονται με μία κατανομή Maxwell-Boltzmann, έτσι ώστε να αντιστοιχούν στη θερμοκρασία στην οποία επιθυμούμε να πραγματοποιήσουμε την προσομοίωση. Η έκφραση της κατανομής ταχυτήτων κατά Maxwell-Boltzmann δίδεται από τη σχέση:

$$N(v) = 4\pi N \left( \frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 \exp\left( -mv^2 / 2kT \right) \quad (1.9)$$

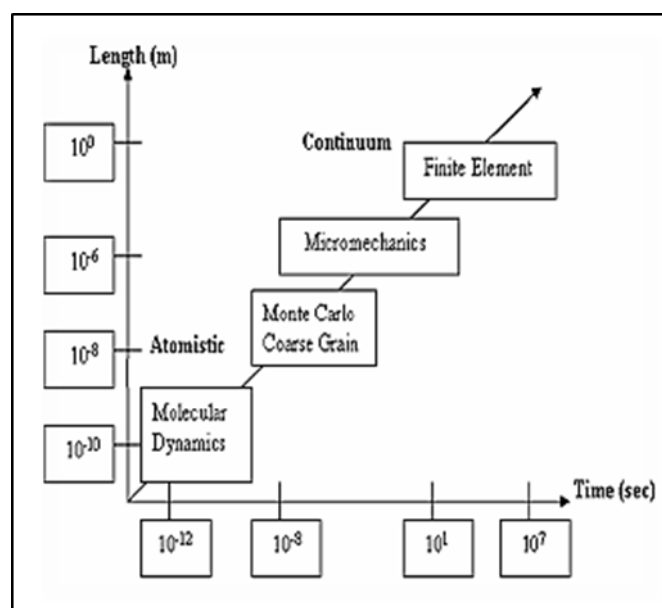
όπου  $N(v)$  είναι ο αριθμός των σωματιδίων με ταχύτητα  $v$ ,  $N$  ο συνολικός αριθμός των ατόμων του δείγματος,  $m$  η μάζα κάθε ατόμου,  $k_B$  η σταθερά του Boltzmann και  $T$  η θερμοκρασία στην οποία βρίσκεται το δείγμα. Το σύστημα που περιγράψαμε είναι μονωμένο άρα διατηρούνται σταθερά ο αριθμός σωματιδίων  $N$ , ο όγκος  $V$  και η ενέργεια  $E$ . Είναι δυνατόν το σύστημα να αλληλεπιδρά με το περιβάλλον, είτε για να έχουμε επιθυμητή σταθερή θερμοκρασία (κανονικό στατιστικό σύνολο, διατηρούνται σταθερά  $N$ ,  $V$ ,  $T$ ), είτε να έχουμε σταθερή πίεση (ισοβαρές στατιστικό σύνολο, διατηρούνται σταθερά  $N$ , πίεση  $P$ , ενθαλπία  $H$ ). [113, 115, 118]

Τέλος, παρακάτω παρουσιάζεται ένα συγκεντρωτικός πίνακας (1.3) με τα κύρια χαρακτηριστικά, με βάση τα όσα προαναφέρθηκαν, για τις τρεις βασικές μεθόδους προσομοίωσης.

**Πίνακας 1.3:** Κύρια χαρακτηριστικά προσομοιώσεων σε μοριακό επίπεδο [115]

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

Η κλίμακα χρόνου και η κλίμακα μήκους για κάθε μέθοδο προσομοίωσης φαίνονται στην Εικόνα 1.6.



**Εικόνα 1.6:** Χρονική κλίμακα και κλίμακα μήκους για κάθε μέθοδο προσομοίωσης [117]

Για τη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής έχουμε: κλίμακα μήκους  $10^{-10}$  m και κλίμακα χρόνου  $10^{-12}$  s, δηλαδή τις μικρότερες τάξεις μεγέθους σε σχέση με τις υπόλοιπες μεθόδους προσομοίωσης. [109]

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: Θεωρία Μοριακής Δυναμικής

### 2.1 Εισαγωγή-Βασικές Αρχές

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

Στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, οι διατομικές δυνάμεις δεσμών (ελκυστικές και απωστικές) ορίζονται μέσω μιας κατάλληλης εμπειρικής συνάρτησης ενέργειας δυναμικού. Η βάση όλων των μεθόδων μοριακής προσομοίωσης είναι ο καθορισμός μιας συνάρτησης δυναμικού, μέσω της οποίας γίνεται ο υπολογισμός της δυναμικής ενέργειας του συστήματος προσομοίωσης, σαν συνάρτηση των συντεταγμένων των ατόμων που το απαρτίζουν. Με γνωστή τη συνάρτηση αυτή, υπολογίζεται η δύναμη που ασκείται σε καθένα από τα άτομα. Για τα μέταλλα, χρησιμοποιούνται συχνά τα δυναμικά ζεύγους σωμάτων (*pairwise potentials*), όπως τα δυναμικά Morse ή Lennard-Jones. Οι προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής μπορούν να συσχετιστούν με τη δυναμική απόκριση ενός μη-γραμμικού συστήματος ελατηρίου-μάζας (άτομα ή θετικά ιόντα), υπό την εφαρμογή κάποιου φορτίου, ή συνθηκών ταχύτητας ή μετατόπισης. Από την άποψη αυτή, η Μοριακή

Δυναμική είναι παρόμοια με άλλες αναλύσεις που εκπονούν οι μηχανικοί σε καθημερινή βάση, όπως η ανάλυση των ταλαντώσεων ενός μηχανικού συστήματος, το οποίο αποτελείται από μια σειρά αταλάντευτων μαζών και αβαρών ελατηρίων και η απόκρισή του υπό γνωστό εξωτερικό φορτίο.

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

Στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, παρόλο που τα άτομα ταλαντώνονται γύρω από τις θέσεις ελάχιστης ενέργειας, οι ίδιες οι θέσεις ελάχιστης ενέργειας μετακινούνται, καθώς εξελίσσεται η κοπή. Υπάρχουν δύο προσεγγίσεις που περιγράφουν την κίνηση των ατόμων. Σύμφωνα με την πρώτη προσέγγιση, η οποία είναι γνωστή ως «προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής», το αντικείμενο εξέτασης, δηλαδή η θέση κάθε ατόμου, προσδιορίζεται με επίλυση των εξισώσεων κίνησης του Νεύτωνα με μεγάλο χρόνο διακριτικής ικανότητας (μικρότερο από την περίοδο της ταλάντωσης των ατόμων, η οποία είναι της τάξης των  $1 \times 10^{-15}$  s ή 1fs). Η μέθοδος αυτή όμως είναι αρκετά επίπονη, υπολογιστικά. Για παράδειγμα, ένα φυσικό φαινόμενο που διαρκεί για 1s, πρέπει να προσομοιωθεί σε χρονικά βήματα του  $1 \times 10^{-15}$  s, δηλαδή απαιτούνται  $1 \times 10^{15}$  χρονικές διαβαθμίσεις, για την κίνηση ενός ατόμου διάρκειας 1s. Σύμφωνα με τη δεύτερη προσέγγιση, η οποία ονομάζεται «Ανάλυση Μοριακής Στατικής», ακολουθούνται μόνο οι θέσεις στις οποίες η προκύπτουσα δύναμη πάνω σε κάθε άτομο είναι μηδενική. Βέβαια, στην περίπτωση αυτή τα άτομα ακολουθούν τις θέσεις ελάχιστης δυναμικής ενέργειας. Είναι στην πραγματικότητα μια ψευδο-στατική μέθοδος. Στην προσομοίωση αυτή, μόνο μερικές εκατοντάδες άτομα μπορούν να ληφθούν υπόψη και ως εκ τούτου, καταλήγουμε σε σημαντικά μικρότερο υπολογιστικό χρόνο. Όμως, η ερμηνεία και η ανάλυση των δεδομένων με τη μέθοδο αυτή είναι πιο πολύπλοκη.

Όταν ο αριθμός των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη στο μοριακό μοντέλο μιας διεργασίας γίνεται μεγάλος, οι μέθοδοι κβαντικής μηχανικής γίνονται δυσεπίλυτες. Στις περιπτώσεις αυτές, πρέπει να χρησιμοποιηθεί η προσέγγιση της κλασσικής ή ψευδο-κλασσικής τροχιάς. Στις μεθόδους αυτές, ο πυρήνας θεωρούμε ότι κινείται κλασσικά σε αδιαβατική επιφάνεια δυναμικής ενέργειας. Αν οι αρχικές στάθμες του συστήματος θεωρηθούν κβαντισμένες, η διαδικασία

ονομάζεται ψευδο-κλασσική. Στη συμβατική προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής, δε γίνεται προσπάθεια να επιλυθεί η πολύπλοκη εξίσωση του Schrödinger για την εύρεση του δυναμικού του συστήματος. Οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων μοντελοποιούνται βάσει του εμπειρικού δυναμικού.

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

- (α) τη διατύπωση και την ολοκλήρωση των κλαστικών εξισώσεων της κίνησης, για τα άτομα που συνιστούν το σύστημα που μας ενδιαφέρει,
- (β) την επιλογή του μοριακού μοντέλου,
- (γ) την ανάπτυξη μιας συνάρτησης δυναμικής ενέργειας επαρκούς ακρίβειας και
- (δ) την προσομοίωση των πειραματικών συνθηκών.

Πρέπει να δοθεί ιδιαίτερη σημασία σε καθένα από αυτά τα βήματα, ώστε τα αποτελέσματα που θα προκύψουν από τις προσομοιώσεις να είναι χρήσιμα, για την ερμηνεία και την πρόβλεψη των πειραματικών δεδομένων. [1-13]

## 2.2 Νευτώνια Άτομα

Στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, η αριθμητική ολοκλήρωση των κλαστικών εξισώσεων του Νεύτωνα για την κίνηση, πραγματοποιείται σε ένα σύνολο ατόμων (Νευτώνια άτομα). Έτσι ισχύει

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{d(m\mathbf{v}_i)}{dt} = \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} = \mathbf{F}_i \quad (2.1)$$

όπου  $m$  είναι η μάζα του ατόμου και  $\mathbf{r}_i$ ,  $\mathbf{v}_i$ ,  $\mathbf{p}_i$  και  $\mathbf{F}_i$  είναι η θέση, η ταχύτητα, η ορμή και η δύναμη που ασκείται στο άτομο  $i$ , αντίστοιχα. Το αποτέλεσμα της προσομοίωσης είναι οι τροχιές των ατόμων, καθώς και οι ταχύτητές τους. Η δύναμη  $F_i$  σε ένα άτομο  $i$ , είναι η κλίση της συνάρτησης δυναμικού ( $\Sigma\Delta$ ) ως προς τη θέση του ατόμου  $i$ , π.χ.

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_a}) \quad (2.2)$$

όπου

$V$  = συνάρτηση ενέργειας δυναμικού

$N_a$  = αριθμός ατόμων

$\mathbf{r}_i = x_i \mathbf{i} + y_i \mathbf{j} + z_i \mathbf{k}$  είναι η θέση του διανύσματος του ατόμου  $i$ , όπου  $x_i$ ,  $y_i$  και  $z_i$  είναι οι συντεταγμένες του ατόμου  $i$  και

$$\nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y_i} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z_i} \mathbf{k}$$

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

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

Για να δοθεί μια εκτίμηση της υπολογιστικής δυνατότητας που απαιτείται στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, πρέπει να σημειωθεί ότι το πλήθος των διαφορικών εξισώσεων που πρέπει να επιλυθούν είναι  $6N$ , όπου  $N$  το πλήθος των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη στο τεμάχιο, το οποίο μπορεί να ποικίλλει από μερικές εκατοντάδες ως αρκετές χιλιάδες άτομα. Όσο μεγαλύτερο το πλήθος, τόσο μεγαλύτερος και ο χρόνος επεξεργασίας. Σε γενικές γραμμές, 2000-10000 άτομα λαμβάνονται υπόψη σε κάθε προσομοίωση. Έτσι, ένα μοντέλο 2000 ατόμων, απαιτεί την επίλυση 12000 συζευγμένων, διαφορικών εξισώσεων κίνησης πρώτης τάξης. Στις περισσότερες προσομοιώσεις κατεργασιών, η συνάρτηση ενέργειας δυναμικού που χρησιμοποιείται, είναι η άθροιση των ζευγών αλληλεπιδράσεων. Το συνολικό πλήθος των ανά ζεύγη όρων σε ένα τέτοιο δυναμικό δίνεται από τη σχέση  $N(N-1)/2$ . Άρα, για  $N=2000$ , περίπου  $2 \times 10^6$  ανά ζεύγη όροι πρέπει να υπολογισθούν σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης. Άρα συνολικά για τον υπολογισμό μιας τροχιάς, απαιτούνται  $8 \times 10^6$  υπολογισμοί, αφού σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης απαιτούνται τέσσερις τέτοιοι υπολογισμοί. Ως εκ τούτου, ο υπολογιστικός χρόνος αυξάνεται πολύ γρήγορα, καθώς αυξάνεται το πλήθος των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη. Όμως, το μοντέλο πρέπει να παρουσιάζει «σύγκλιση μεγέθους», δηλαδή, τα τελικά αποτελέσματα δεν πρέπει να είναι ευαίσθητα στην προσθήκη νέων ατόμων στο μοντέλο. Για να προσδιορίσουμε αν ένα μοντέλο παρουσιάζει σύγκλιση μεγέθους, πρέπει να προηγηθούν εμπειρικές μελέτες, στις οποίες προσδιορίζεται η ευαισθησία των τελικών αποτελεσμάτων ανάλογα με το πλήθος των ατόμων. Το βέλτιστο πλήθος, είναι η μικρότερη τιμή του  $N$ , για την οποία τα τελικά αποτελέσματα κρίνονται επαρκώς ανεπηρέαστα από το  $N$ . Τυπικοί χρόνοι επεξεργασίας για ένα μοντέλο επίπεδης, διδιάστατης νανομετρικής κοπής 2000 ατόμων, είναι μερικές ώρες. [14]



## 2.3 Υπολογισμοί Τροχιών με χρήση Αριθμητικής Ολοκλήρωσης

Για τον υπολογισμό οποιασδήποτε ιδιότητας του μελετώμενου συστήματος, αναλύεται μια τροχιά. Η τροχιά είναι ένα σύνολο από χρονικά στιγμιότυπα του συστήματος, στο καθένα από τα οποία αποθηκεύονται οι συντεταγμένες (ή ακόμα και οι ταχύτητες ή και οι δυνάμεις) για κάθε άτομο. Οποιοσδήποτε υπολογισμός που βασίζεται στην τροχιά, είναι ουσιαστικά στατιστικής φύσης, μιας και λαμβάνονται χρονικές μέσες τιμές από τα στιγμιότυπα που περιέχει η τροχιά. Η αρχική ταχύτητα καθενός από τα άτομα επιλέγεται στατιστικά, ώστε να ακολουθεί την κατανομή Maxwell-Boltzmann, βάσει της αρχικής θερμοκρασίας. Ο υπολογισμός της τροχιάς, απαιτεί την αριθμητική ολοκλήρωση των διαφορικών εξισώσεων της κίνησης από την αρχική κατάσταση, η οποία στην περίπτωση μιας κατεργασίας είναι η κατάσταση όπου το κοπτικό εργαλείο πλησιάζει το τεμάχιο, αλλά δεν το έχει ακουμπήσει ακόμα, μέχρι μια τελική κατάσταση, η οποία μπορεί να θεωρηθεί, η στιγμή που ένα στρώμα υλικού έχει αφαιρεθεί από το τεμάχιο.

Υπάρχει μια πληθώρα διαθέσιμων μεθόδων, που μπορούν να πραγματοποιήσουν την ολοκλήρωση αυτή, από τις οποίες η Runge-Kutta τέταρτης τάξης, είναι η πιο χρησιμοποιούμενη, διότι παρουσιάζει αρκετά πλεονεκτήματα. Πρώτον, είναι αυτοεκκινούμενη και έτσι δεν είναι απαραίτητο να είναι γνωστές οι τιμές του  $Y$ , το οποίο είναι ένα διάνυσμα στήλη, του οποίου τα στοιχεία είναι οι συντεταγμένες και η συνολική ορμή τους σε μια χρονική στιγμή πριν από την  $t_0$ . Δεύτερον, το τοπικό σφάλμα σε ένα γνωστό βήμα ολοκλήρωσης είναι της τάξης του  $h^5$ , όπου  $h$  είναι το χρονικό βήμα ολοκλήρωσης η μέθοδος κατά συνέπεια παρέχει καλή ακρίβεια. Τρίτον, η μέθοδος είναι σταθερή και μπορεί εύκολα να προγραμματιστεί. Δύο μειονεκτήματα που σχετίζονται με αυτή τη μέθοδο είναι: (α) δεν παρέχει καμιά εκτίμηση για την ακρίβεια με την οποία έχει γίνει η ολοκλήρωση και (β) 24  $N$  παράγωγοι πρέπει να υπολογισθούν σε κάθε βήμα ολοκλήρωσης. Το πρώτο μειονέκτημα δεν είναι και τόσο σημαντικό, καθώς η ακρίβεια μπορεί να εκτιμηθεί με την παρακολούθηση της ενέργειας και άλλων σταθερών της κίνησης, κατά τη διάρκεια της ολοκλήρωσης. Η εμπειρία δείχνει ότι αν οι ποσότητες αυτές παραμένουν σταθερές σε τέσσερα ή πέντε σημαντικά ψηφία, η ακρίβεια είναι συνήθως επαρκής για τις περισσότερες εφαρμογές. Επίσης, μπορεί να εφαρμοσθεί μια διαδικασία μείωσης του εύρους του βήματος. Στη μέθοδο αυτή, η ευαισθησία των τελικών αποτελεσμάτων ως προς το  $h$ , λαμβάνεται με διαδοχικές ολοκληρώσεις με συνεχώς μικρότερες τιμές του  $h$ . Με εμπειρικό προσδιορισμό της μεγαλύτερης τιμής του  $h$ , για την οποία τα τελικά αποτελέσματα είναι ανεξάρτητα του  $h$ , μπορεί να ληφθεί το κατάλληλο

μέγεθος βήματος. Τελικά, η ακρίβεια της ολοκλήρωσης μπορεί να ελεγχθεί με πίσω ολοκλήρωση της τροχιάς. [15]

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

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

$$x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{x}(t) + O(h^3) \quad (2.3)$$

$$x(t-h) = x(t) - h\dot{x}(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{x}(t) + O(h^3) \quad (2.4)$$

όπου:

$$h = \Delta t$$

είναι το χρονικό βήμα.

Στη μέθοδο αυτή, το ανάπτυγμα Taylor μπορεί να γίνει ως εξής:

$$x(t+h) = x(t) + h\left(\dot{x}(t) + \frac{h}{2}\ddot{x}(t)\right) + O(h^3) = x(t) + h\dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) \quad (2.5)$$

$$x(t-h) = x(t) - h\left(\dot{x}(t) - \frac{h}{2}\ddot{x}(t)\right) + O(h^3) = x(t) - h\dot{x}\left(t - \frac{h}{2}\right) \quad (2.6)$$

Αφαιρώντας τις δύο τελευταίες εξισώσεις, έχουμε:

$$\dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) = \dot{x}\left(t - \frac{h}{2}\right) + h\ddot{x}(t) \quad (2.7)$$

$$\dot{x}(t+h) = \dot{x}(t) + h\ddot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) \quad (2.8)$$

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

Ο όρος βατραχοδρασκελισμός προέρχεται από το γεγονός ότι ο υπολογισμός των θέσεων και των ταχυτήτων γίνεται για διαφορετικές χρονικές στιγμές, όπως φαίνεται και από τις προηγούμενες σχέσεις. Βέβαια κάτι τέτοιο δεν αποτελεί πρόβλημα. Για να υπολογιστεί η ταχύτητα τη χρονική στιγμή  $t$ , μπορεί να χρησιμοποιηθεί μία από τις παρακάτω σχέσεις:

$$\dot{x}(t) = \dot{x}\left(t - \frac{h}{2}\right) + \frac{h}{2}\ddot{x}(t) \quad (2.9)$$

$$\dot{x}(t) = \dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) - \frac{h}{2}\ddot{x}(t) \quad (2.10)$$

Η μέθοδος των βατραχοδρασκελισμών μπορεί να μετασχηματιστεί σε έναν εναλλακτικό, αλγεβρικά ισοδύναμο τρόπο, που επιτρέπει να γίνεται ο υπολογισμός των θέσεων και των ταχυτήτων την ίδια χρονική στιγμή, προκειμένου να αποφεύγεται η αποθήκευση των θέσεων και των ταχυτήτων σε διαφορετικές χρονικές στιγμές και ο μετέπειτα υπολογισμός των ταχυτήτων για τη χρονική στιγμή  $t$ , από τις τελευταίες εξισώσεις [15]. Για να γίνει αυτό, οι υπολογισμοί χωρίζονται σε δύο μέρη:

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

$$\dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) = \dot{x}(t) + \frac{h}{2}\ddot{x}(t) \quad (2.11)$$

Στη συνέχεια, υπολογίζονται οι συντεταγμένες για ένα ολόκληρο χρονικό βήμα, χρησιμοποιώντας τις ενδιάμεσες τιμές των ταχυτήτων που υπολογίστηκαν από την προηγούμενη σχέση:

$$\dot{x}(t+h) = \dot{x}(t) + h\ddot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) \quad (2.12)$$

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

$$\dot{x}(t+h) = \dot{x}\left(t + \frac{h}{2}\right) + \frac{h}{2} \ddot{x}(t+h) \quad (2.13)$$

### 2.3.2 Μέθοδος Verlet

Ο αλγόριθμος ολοκλήρωσης Verlet, που επινοήθηκε από τον Loup Verlet, είναι αλγεβρικά ισοδύναμος με τον αλγόριθμο των βατραχοδρασκεισμών. Βασίζεται και αυτός στο ανάπτυγμα κατά Taylor:

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

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

και αν προστεθούν τα δύο παραπάνω αναπτύγματα προκύπτει

$$x(t+h) = 2x(t) - x(t-h) + h^2 \ddot{x}(t) + O(h^4) \quad (2.16)$$

Οι θέσεις για την παρούσα χρονική στιγμή και την προηγούμενή της, δηλαδή οι  $x(t)$  και  $x(t-h)$ , είναι γνωστές και επομένως μπορούν να υπολογιστούν και οι επιταχύνσεις των ατόμων, ως συνάρτηση των συντεταγμένων τους.

Ο υπολογισμός της ταχύτητας δεν εμπλέκεται στην επίλυση και εάν θέλουμε να υπολογίσουμε τις τιμές της, χρησιμοποιούμε τη σχέση:

$$\dot{x}(t) = \frac{x(t+h) - x(t-h)}{2h} + O(h^2) \quad (2.17)$$

Για τη μέθοδο αυτή μπορούμε να παρατηρήσουμε δύο χαρακτηριστικά. Το πρώτο είναι ότι για τον υπολογισμό της μετατόπισης από τη δύναμη δεν απαιτείται ο υπολογισμός κάποιας ενδιάμεσης μεταβλητής. Αυτό είναι ένα πολύ σημαντικό πλεονέκτημα, καθώς με αυτό τον τρόπο επιτυγχάνεται μεγάλη ακρίβεια, αποκοπή όρων και συσσώρευση αριθμητικών σφαλμάτων που εξαλείφονται. Το δεύτερο χαρακτηριστικό που μπορούμε να διακρίνουμε και

το οποίο είναι άμεση συνέπεια από το πρώτο, είναι ότι με τη μέθοδο αυτή επιτυγχάνεται ακρίβεια  $O(\Delta t^4)$  [15].

Για τις δύο παραπάνω μεθόδους μπορούμε να παρατηρήσουμε πως και οι δύο δίνουν ακρίβεια στον υπολογισμό των συντεταγμένων μέχρι και την τρίτη δύναμη του  $\Delta t$ . Στη μέθοδο της Μοριακής Δυναμικής μάς ενδιαφέρει συγκεκριμένες ποσότητες, όπως η ενέργεια, να διατηρούνται. Κάτι τέτοιο βέβαια είναι αδύνατο να επιτευχθεί απολύτως, λόγω των διαφορών αριθμητικών σφαλμάτων που εμφανίζονται, και προτιμώνται γενικότερα μέθοδοι οι οποίες να δίνουν καλή ακρίβεια στη διατήρηση της ενέργειας.

Γενικά, οι μέθοδοι των βατραχοδρασκεισμών και του Verlet, που είναι χαμηλής τάξης μέθοδοι, δίνουν καλύτερα και ακριβέστερα αποτελέσματα ως προς τη διατήρηση της ενέργειας σε σχέση με μεθόδους υψηλότερης τάξης. Επιπλέον, απαιτούν ελάχιστη μνήμη και χαρακτηρίζονται από υψηλότερη ευστάθεια σε σχέση με την απλή ολοκλήρωση κατά Euler.

### 2.3.3 Μέθοδοι Πρόβλεψης-Διόρθωσης

Οι μέθοδοι πρόβλεψης – διόρθωσης (predictor – corrector (PC) methods) είναι μέθοδοι πολλαπλών τιμών, με την έννοια ότι χρησιμοποιούν πλήθος πληροφοριών που υπολογίζονται σε ένα ή περισσότερα προηγούμενα χρονικά βήματα. Ουσιαστικά, προηγούνται στην αριθμητική ολοκλήρωση, υπολογίζοντας αρχικά κάποια εκτίμηση του μεγέθους και βελτιώνοντας την τιμή αυτή, καθώς προχωράει ο υπολογισμός. Οι δύο πιο δημοφιλείς μορφές της μεθόδου διακρίνονται από το εάν χρησιμοποιούνται οι τιμές της επιτάχυνσης προηγούμενων χρονικών βημάτων (μέθοδος Adams πολλαπλών βημάτων), ή εάν χρησιμοποιούνται παράγωγοι της επιτάχυνσης της παρούσας χρονικής στιγμής (μέθοδος Nordsieck). Σε περιπτώσεις όπου η ακρίβεια είναι συγκεκριμένη ως προς δεδομένη ισχύ του βήματος ολοκλήρωσης  $\Delta t$ , οι δύο παραπάνω μορφές αποδεικνύεται ότι είναι αλγεβρικά ισοδύναμες.

Οι μέθοδοι είναι υψηλότερης τάξης από τη μέθοδο των βατραχοδρασκεισμών, αλλά συνεπάγονται συγκεκριμένη ποσότητα από επιπλέον υπολογισμούς και απαιτούν μεγαλύτερη μνήμη για τις επιπλέον μεταβλητές που σχετίζονται με κάθε άτομο. Εδώ θα αναφερθούμε μόνο στις μεθόδους πολλαπλών βημάτων, όπως είναι η μέθοδος Adams, καθώς οι παράγωγοι της επιτάχυνσης απουσιάζουν, εφ' όσον δεν συμμετέχουν με φυσικό τρόπο στη δυναμική του Newton [15].

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

$$\ddot{x} = f(x, \dot{x}, t) \quad (2.18)$$

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

$$P(x): x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} (a_i f(t+(1-i)h)) \quad (2.19)$$

Για δεδομένη τιμή του  $k$ , ο παραπάνω τύπος παρέχει ακριβή αποτελέσματα για όλα τα πολυώνυμα:

$$x(t) = t^q, \forall q \leq k \quad (2.20)$$

και στη γενική περίπτωση το τοπικό σφάλμα είναι  $O(h^{k+1})$ . Προκειμένου να ισχύει η προηγούμενη απαίτηση, πρέπει οι συντελεστές  $\{a_i\}$  να ικανοποιούν το ακόλουθο σύστημα των  $k - 1$  εξισώσεων:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1-i)^q a_i = \frac{1}{(q+1)(q+2)}, q = 0, \dots, k-2 \quad (2.21)$$

Το παραπάνω αλλά και τα επακόλουθα συστήματα εξισώσεων εύκολα επιλύονται και δίνουν ρητές συναρτήσεις για τα  $a_i$ .

Παρόμοια συνάρτηση υπάρχει και για την ταχύτητα:

$$P(\dot{x}): h\dot{x}(t+h) = x(t+h) - x(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} (a_i' f(t+(1-i)h)) \quad (2.22)$$

με συντελεστές που να ικανοποιούν τις εξισώσεις:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (1-i)^q a_i' = \frac{1}{(q+2)} \quad (2.23)$$

Αφού λοιπόν υπολογιστούν οι προβλέψεις για τη θέση και την ταχύτητα της χρονικής στιγμής  $t + h$ , στη συνέχεια χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό

της τιμής του  $f(t + h)$ . Οι διορθώσεις γίνονται με τη βοήθεια του τύπου Adams – Moulton:

$$C(x): x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} (\beta_i f(t + (2-i)h)) \quad (2.24)$$

$$C(x): h\dot{x}(t+h) = x(t+h) - x(t) + h^2 \sum_{i=1}^{k-1} (\beta'_i f(t + (2-i)h)) \quad (2.25)$$

με τους συντελεστές να προκύπτουν από το ακόλουθο σύστημα:

$$\sum_{i=1}^{k-1} (2-i)^q \beta_i = \frac{1}{(q+1)(q+2)} \quad (2.26)$$

$$\sum_{i=1}^{k-1} (2-i)^q \beta'_i = \frac{1}{(q+2)} \quad (2.27)$$

Αυτό που μπορούμε να παρατηρήσουμε είναι ότι οι προβλέψεις δεν εμφανίζονται στις εξισώσεις διόρθωσης, πέρα από τη χρήση τους για τον υπολογισμό του  $f$ . Οι συντελεστές  $(\alpha_i)$  που προκύπτουν από την επίλυση των εξισώσεων αυτών για  $k = 4$  και για  $k = 5$  παρουσιάζονται στον επόμενο πίνακα (Πίνακας 2.1):

**Πίνακας 2.1:** Παράμετροι πρόβλεψης – διόρθωσης για δευτεροβάθμιες εξισώσεις [15]

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

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

Παρ' όλο που τα περισσότερα δυναμικά προβλήματα που μελετώνται στη φάση αυτή μπορούν να εκφραστούν ως διαφορικές εξισώσεις δεύτερης τάξης, υπάρχουν περιπτώσεις κατά τις οποίες χρειάζονται διαφορικές εξισώσεις πρώτης τάξης. Παρόμοιες μέθοδοι πρόβλεψης – διόρθωσης λοιπόν είναι διαθέσιμες για την εξίσωση:

$$\dot{x} = f(x, t) \quad (2.28)$$

Οι τύποι πρόβλεψης – διόρθωσης στην περίπτωση αυτή είναι:

$$P(x): x(t+h) = x(t) + h \sum_{i=1}^k (a_i f(t+(1-i)h)) \quad (2.29)$$

$$C(x): x(t+h) = x(t) + h \sum_{i=1}^k (\beta_i f(t+(2-i)h)) \quad (2.30)$$

με συντελεστές που να ικανοποιούν τις σχέσεις:



$$\sum_{i=1}^k (1-i)^q a_i = \frac{1}{q+1} \quad (2.31)$$

$$\sum_{i=1}^k (1-i)^q \beta_i = \frac{1}{q+1} \quad (2.32)$$

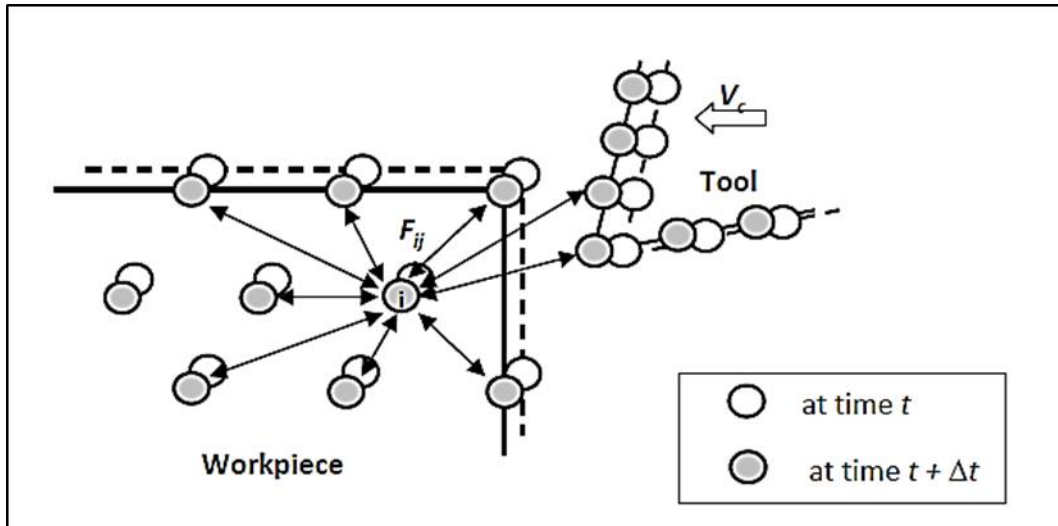
Τα αποτελέσματα στην περίπτωση αυτή φαίνονται στον ακόλουθο πίνακα (Πίνακας 2.2):

**Πίνακας 2.2:** Παράμετροι πρόβλεψης – διόρθωσης για πρωτοβάθμιες εξισώσεις [15]

|                       |    |     |    |    |
|-----------------------|----|-----|----|----|
| $k = 3 (\times 1/12)$ | 1  | 2   | 3  |    |
| $P(x):$               | 23 | -16 | 5  |    |
| $C(x):$               | 5  | 8   | -1 |    |
| $k = 4 (\times 1/24)$ | 1  | 2   | 3  | 4  |
| $P(x):$               | 55 | -59 | 37 | -9 |
| $C(x):$               | 9  | 19  | -5 | 1  |

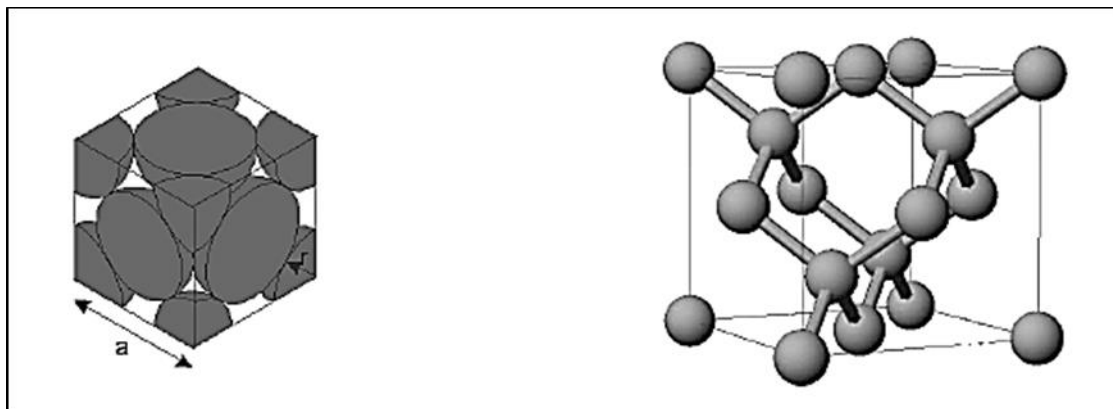
## 2.4 Εκφράσεις Ενέργειας Δυναμικού

Όποτε αντιμετωπίζουμε ένα πρόβλημα σε ατομικό επίπεδο, όπως στην περίπτωση της προσομοίωσης της ναυκοπής μέσω Μοριακής Δυναμικής, είναι απαραίτητο να λάβουμε υπόψη τις δυνάμεις που υπάρχουν μεταξύ των ατόμων, διότι αυτές είναι κυρίως οι δυνάμεις που «αποφασίζουν» τι θα συμβεί σε οποιοδήποτε φυσικό φαινόμενο. Όπως φαίνεται και στην Εικόνα 2.1, σε κάθε χρονικό βήμα ( $\Delta t$ ) κάθε άτομο αλλάζει θέση και αλληλεπιδρά με τα γειτονικά του άτομα με τρόπο, ο οποίος μπορεί να προσδιοριστεί από τη συνάρτηση διατομικών δυναμικών.



Εικόνα 2.1: Αλληλεπίδραση ατόμων στη νανοκοπή [34]

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



Εικόνα 2.2: (a)κυβικό εδροκεντρωμένο σύστημα fcc (b) μέγιστης πυκνότητας εξαγωνικό σύστημα hcp [34]

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

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

Υπάρχουν δύο προσεγγίσεις για τον προσδιορισμό των διατομικών δυναμικών. Η πρώτη μέθοδος είναι μια *ab initio* μέθοδος, ενώ η δεύτερη χρησιμοποιεί βασικά εμπειρικά δυναμικά. Στην *ab initio* μέθοδο, οι παράμετροι της συνάρτησης δυναμικού μπορούν να προσδιοριστούν, θεωρητικά, επιλύοντας την κυματική εξίσωση του Schrödinger. Όμως, στην πράξη είναι δύσκολο να βρεθούν οι διατομικές δυνάμεις με αυτή τη μέθοδο, με εξαίρεση ορισμένα πολύ απλά συστήματα.

Πρέπει να τονισθεί ότι ο όρος εμπειρικός μπορεί να είναι παραπλανητικός ή υπεραπλουστευτικός. Στην πραγματικότητα, τα δυναμικά αυτά παρουσιάζουν μια πιο ρεαλιστική άποψη των ατομικών αλληλεπιδράσεων, σε σύγκριση με τα δυναμικά που προκύπτουν από καθαρά θεωρητικές προσεγγίσεις. Τα εμπειρικά δυναμικά βασίζονται σε απλές μαθηματικές εκφράσεις για τις ανά ζεύγη αλληλεπιδράσεις μεταξύ δύο ατόμων ή ιόντων, και περιέχουν μία ή

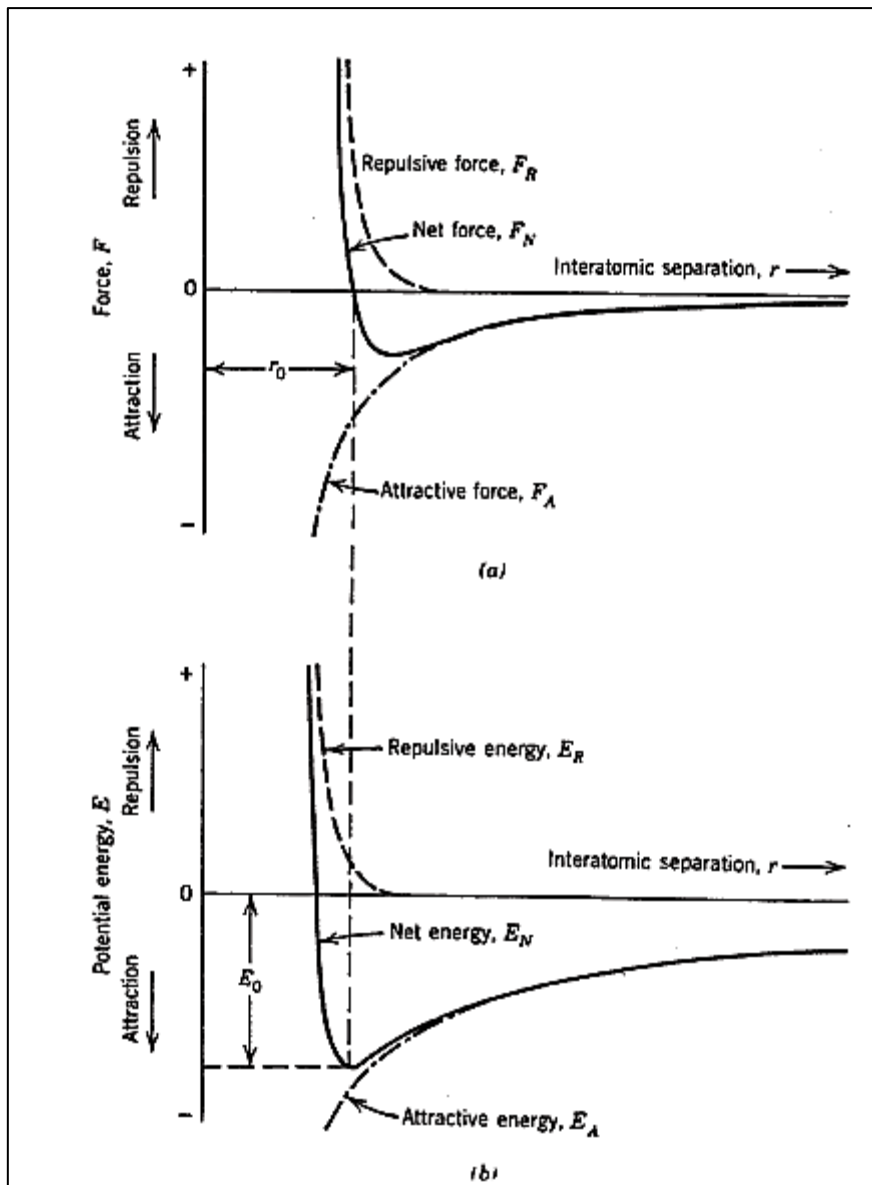
περισσότερες παραμέτρους προσαρμοσμένες στα πειραματικά δεδομένα. Η εγκυρότητα της συνάρτησης καθώς και η σταθερότητα του κρυστάλλου για ένα δεδομένο υλικό, ελέγχονται για διάφορες ιδιότητες, όπως είναι η ενέργεια συνοχής, η θερμοκρασία Debye, η σταθερά πλέγματος, η συμπιεστότητα και οι ελαστικές σταθερές, καθώς και η εξίσωση κατάστασης. Κατά συνέπεια, τα δυναμικά αυτά μπορούν να θεωρηθούν αξιόπιστα για απλά μέταλλα κυβικής δομής.

Σε μεγαλύτερα συστήματα, χρησιμοποιούνται εμπειρικές συναρτήσεις δυναμικού, οι οποίες λαμβάνουν υπόψη παράγοντες όπως την έκταση του ομοιοπολικού δεσμού, τη μεταβολή της γωνίας του δεσμού λόγω κάμψης, στρέψης ή αλληλεπιδράσεων van der Waals και Coulomb. Αυτή είναι η δεύτερη και πιο συνήθης μέθοδος, όπου οι παράμετροι προσδιορίζονται βάσει των φυσικών ιδιοτήτων κάθε υλικού. Οι παράμετροι μπορούν να ληφθούν είτε από πειραματικές μελέτες, είτε από υπολογισμούς κβαντικής μηχανικής. Η διατομική δυναμική ενέργεια συνήθως λαμβάνεται ως το άθροισμα των (εμπειρικών) δυναμικών των  $n$  σωμάτων, το οποίο εξαρτάται μόνο από την απόσταση μεταξύ των ατόμων. Τα δυναμικά αυτά κατατάσσονται περαιτέρω, σε δυναμικά δύο, τριών ή περισσότερων σωμάτων, ανάλογα με την ομάδα των ατόμων από τα οποία εξαρτώνται οι όροι του δυναμικού. Στη συνέχεια θα δοθούν οι εκφράσεις μερικών εμπειρικών δυναμικών, που χρησιμοποιούνται ευρέως.

Στην Εικόνα 2-1 φαίνεται η εξάρτηση των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυνάμεων (a) και δυναμικών ενεργειών (b), ως συνάρτηση της διατομικής απόστασης,  $r$ , δύο απομονωμένων ατόμων. Η ελκτική δύναμη συνδέει τα άτομα μεταξύ τους ενώ η απωστική τα εμποδίζει από το να καταστραφούν λόγω σύγκρουσης. Το μέγεθος των δύο δυνάμεων αυξάνεται, καθώς η απόσταση μεταξύ των ατόμων μειώνεται, και η απωστική δύναμη αυξάνεται γρηγορότερα σε σχέση με την ελκτική. Η καμπυλότητα της έκφρασης ενέργειας δυναμικού προσδιορίζεται κυρίως από την απωστική δύναμη, η οποία υπαγορεύει την ελαστική συμπεριφορά του στερεού.

Το μήκος του δεσμού  $r_0$ , είναι η απόσταση των κέντρων των ατόμων. Οι ισχυροί δεσμοί φέρνουν τα άτομα σε μικρότερη απόσταση, και έτσι το μήκος του δεσμού είναι μικρότερο σε σύγκριση με τους ασθενείς δεσμούς. Στο σημείο  $r_0$ , οι ελκτικές και οι απωστικές δυνάμεις εξισορροπούνται και η συνισταμένη δύναμη είναι μηδενική. Η κατάσταση αυτή αντιστοιχεί σε σταθερή ισορροπία ελάχιστης ενέργειας δυναμικού, το μέγεθος της οποίας είναι η ενέργεια του δεσμού. Οι ιδιότητες συνοχής ενός στερεού, η συμπεριφορά τήξης και ατμοποίησης προσδιορίζονται από το μέγεθος της μέγιστης ενέργειας δεσμού, η οποία καθορίζεται από την ελκτική συνιστώσα

της διατομικής δύναμης. Όσο μεγαλύτερη είναι η ενέργεια δεσμού, τόσο μεγαλύτερη είναι η θερμοκρασία τήξης και το μέτρο ελαστικότητας του Young, και τόσο μικρότερος ο συντελεστής θερμικής διαστολής. Η κλίση της καμπύλης της δύναμης στο σημείο  $r_0$ , δίνει το μέτρο ελαστικότητας. Οι μεγάλες «βυθίσεις» του δυναμικού είναι πιο συμμετρικές γύρω από τη θέση ισοροπίας  $r_0$ , σε σχέση με τις πιο «ρηχές» βυθίσεις.



**Εικόνα 2.3:** Μεταβολή των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυνάμεων (a) και των ελκτικών, απωστικών και συνισταμένων δυναμικών ενέργειας (b), ως συνάρτηση της διατομικής απόστασης  $r$ , μεταξύ δύο απομονωμένων ατόμων [16]

Οι εκφράσεις ενέργειας δυναμικού γενικά αφορούν σε ένα μέτριο εύρος απόστασης ζευγών σε εξαιρετικά μικρά όμως επίπεδα ενέργειας. Αγνοώντας

τις διατομικές επιδράσεις κάτω από ένα σημείο αποκοπής, μπορεί να επιτευχθεί μια σημαντική μείωση στο υπολογιστικό χρόνο με ασήμαντη απώλεια ακρίβειας. Η αποκοπή του δυναμικού καταλήγει επίσης και σε παρόμοια αποκοπή στην καμπύλη της δύναμης. Η απόσταση αποκοπής μπορεί να επιλεγεί σε οποιοδήποτε σημείο, αλλά γενικά επιλέγεται σε απόσταση τέτοια, όπου η τιμή της δυναμικής ενέργειας είναι 3 ως 5% της τιμής της δυναμικής ενέργειας ισορροπίας. [17-25]

## 2.4.1 Έκφραση δυναμικού Morse

Το δυναμικό Morse είναι μια συχνά χρησιμοποιούμενη έκφραση ενέργειας δυναμικού. Είναι ένα δυναμικό ζεύγους κατάλληλο για τη μοντελοποίηση μετάλλων κυβικής δομής. Το δυναμικό αυτό παράγει απωστικές δυνάμεις σε μικρά εύρη, ελκτικές σε μεσαία και εξασθενεί ομαλά στο μηδέν σε μεγάλα εύρη. Χρησιμοποιεί μια μορφή δυναμικού που περιέχει δύο εκθετικούς όρους αντί για ένα νόμο που εξαρτάται από την ισχύ. Η έκφραση του δυναμικού Morse δίνεται από τη σχέση

$$V_{ij} = D\{\exp[-2a(r_{ij} - r_e)] - 2\exp[-a(r_{ij} - r_e)]\} \quad (2.33)$$

όπου

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

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

Για παράδειγμα, τα  $r_e$ ,  $a$  και  $D$  λαμβάνονται από την κοντινότερη απόσταση μεταξύ των ατόμων (αποστάσεις ισορροπίας πλέγματος), τη θερμοκρασία Debye και την ενέργεια εξάχνωσης. Η εγκυρότητα της συνάρτησης καθώς και η σταθερότητα του κρυστάλλου για ένα δοσμένο υλικό ελέγχεται ως προς διάφορες ιδιότητες, οι οποίες περιλαμβάνουν την ενέργεια συνοχής, τη σταθερά πλέγματος, τη σταθερά συμπιεστότητας και ελαστικότητας καθώς και την εξίσωση φάσης και την σταθερότητα του κρυστάλλου. [17,26]

Οι Girifalco και Weizer [27] υπολόγισαν τις παραμέτρους Morse με χρήση πειραματικών τιμών για την ενέργεια ατμοποίησης, τις σταθερές πλέγματος και τη συμπιεστότητα. Η εξίσωση φάσης, οι ελαστικές σταθερές και οι συνθήκες σταθερότητας υπολογίστηκαν με χρήση των παραμέτρων Morse για μέταλλα με κυβική δομή, και βρέθηκε ότι τα αποτελέσματα συμφωνούσαν με τα πειραματικά.

## 2.4.2 Έκφραση δυναμικού Lennard-Jones

Ένα ακόμα απλό δυναμικό ζεύγους για μεταλλικά υλικά, που περιγράφονται βάσει του μοντέλου των σκληρών σφαιρών (hard- sphere model), όπως και στο δυναμικό Morse, και χρησιμοποιείται ευρέως είναι το δυναμικό Lennard-Jones ή δυναμικό «6-12». Το δυναμικό Lennard-Jones δίνεται από τη σχέση:

$$V_{ij} = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} \right] \quad (2.34)$$

όπου οι σταθερές  $\sigma$  και  $\varepsilon$  προσδιορίζονται από τις φυσικές ιδιότητες του υλικού. Βάσει σύμβασης, οι απωστικές δυνάμεις θεωρούνται θετικές και οι ελκτικές αρνητικές. [17,28,29]

## 2.4.3 Έκφραση δυναμικού Born-Meyer

Ένα πλήθος δυναμικών δημιουργήθηκαν ώστε να λαμβάνεται υπόψη μόνο η απωστική αλληλεπίδραση, σε μικρές αποστάσεις. Η ανάπτυξη του δυναμικού αυτού πραγματοποιήθηκε για δύο λόγους. Πρώτον, μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε περιπτώσεις όπου η ελκτική συνιστώσα παίζει δευτερεύοντα ή ασήμαντο ρόλο. Δεύτερον, η ελκτική συνιστώσα σε μεγάλη απόσταση, μπορεί να περιγραφεί από μια άλλη κατάλληλη συνάρτηση. Το δυναμικό Born-Meyer αναπαριστά την απώθηση των ιοντικών κρυστάλλων που βρίσκονται κοντά στο κέλυφος, και δίνεται από τη συνάρτηση:

$$V_{ij} = A \left\{ \exp \left[ -2a(r_{ij} - r_o) \right] \right\} \quad (2.35)$$

όπου τα  $A$  και  $r_o$  είναι σταθερές που προσδιορίζονται από τις φυσικές ιδιότητες του υλικού. Η απωστική δύναμη εξασθενεί ομαλά καθώς η απόσταση  $r_{ij}$  αυξάνεται. Το δυναμικό αυτό εφαρμόζεται ειδικά στα κεραμικά υλικά. [45,59]

## 2.4.4 Δυναμικό πολλών ατόμων (Embedded-atom potential)

Τα δυναμικά πολλών ατόμων για μέταλλα με κυβική δομή αναπτύχθηκαν πρόσφατα, για να περιγράψουν το μεταλλικό δεσμικό χαρακτήρα με μεγαλύτερη ακρίβεια σε σχέση με αυτή που είναι εφικτή με το δυναμικό δύο

ατόμων. Το δυναμικό αυτό αποτελεί μια επέκταση του δυναμικού δύο ατόμων για τα μέταλλα και αναμένεται να λάβει υπόψη του την επίδραση των ελεύθερων ηλεκτρονίων που περιβάλλουν τα άτομα. Είναι μια πιο ρεαλιστική συνάρτηση δυναμικού, που μπορεί να μοντελοποιήσει με ακρίβεια τη μεταβολή των ιδιοτήτων του μετάλλου κοντά σε μια ελεύθερη επιφάνεια. Η ολική ενέργεια του συστήματος αναπαρίσταται από μια έκφραση της μορφής:

$$E = \frac{1}{2} [\sum \phi_{ij}(r_{ij})] + \sum \phi_j [\sum \phi_j(r_{ij})] \quad (2.36)$$

όπου τα  $i$  και  $j$  αναφέρονται στα άτομα,  $r_{ij}$  είναι η διατομική απόσταση μεταξύ των ατόμων και τα  $\phi_{ij}$  και  $\phi_j$  εξαρτώνται από τα εμπλεκόμενα είδη, καθώς και από τα ορίσματά τους. Ο πρώτος όρος χαρακτηρίζει το συμβατικό δυναμικό ζεύγους, και ο δεύτερος όρος είναι η ενέργεια που απαιτείται, ώστε να ενσωματωθεί ένα άτομο  $i$  σε ένα νέφος ηλεκτρονίων. Έτσι, στο δυναμικό αυτό, το δυναμικό ζεύγους αυξάνεται κατά ένα πρόσθετο άθροισμα ζευγών. Κατά συνέπεια, η μέθοδος αυτή, μπορεί να ενσωματώσει την εξάρτηση των αλληλεπιδράσεων από τις συντεταγμένες. Ένας σημαντικός περιορισμός είναι το εύρος των μεταλλικών συστημάτων, στα οποία η μέθοδος αυτή είναι ακριβής. Σύμφωνα με το τροποποιημένο μοντέλο δυναμικού πολλών ατόμων, υπάρχουν έντεκα παράμετροι που το επηρεάζουν, από τις οποίες οι τρεις μπορούν να ορισθούν στις ονομαστικές τους τιμές. Κάθε μία από τις εναπομείνουσες οκτώ παραμέτρους συνδέεται άμεσα με μια φυσική ποσότητα, δηλαδή, την ενέργεια εξάχνωσης, τη σταθερά του πλέγματος, το μέτρο διόγκωσης, δύο διατμητικές σταθερές, δύο δομικές ενεργειακές διαφορές και την ενέργεια σχηματισμού κενού χώρου. [17,30,31]

## 2.4.5 Δυναμικό Bolding-Anderson

Για την περίπτωση των ημιαγωγικών υλικών, όπως είναι το πυρίτιο, το γερμάνιο και το διαμάντι, τα οποία είναι μέταλλα ομοιοπολικών δεσμών, τα δυναμικά δύο σωμάτων Morse ή Lennard-Jones δεν είναι αποδεκτά. Για τη μελέτη της κοπής σε πυρίτιο ή διαμάντι, είναι προτιμότερο να χρησιμοποιηθεί το δυναμικό Bolding-Anderson, το οποίο είναι μια σύνθετη συνάρτηση πολλών σωμάτων, η οποία μπορεί να αναπαράξει όλα τα απαραίτητα χαρακτηριστικά των συστημάτων της πυριτίου ή του διαμαντιού. Τα δυναμικά πολλών σωμάτων επινοήθηκαν, για να περιγράψουν τον ομοιοπολικό δεσμό με χαρακτηριστικά κατεύθυνσης.



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

$$V_{ij} = V_R(r_{ij}) - \bar{B}_{ij} V_A(r_{ij}) \quad (2.37)$$

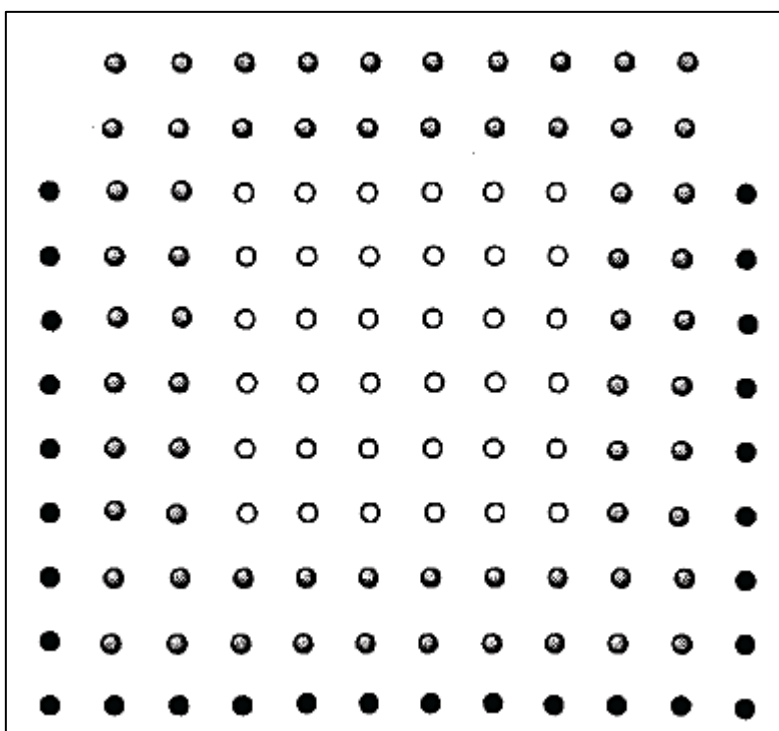
όπου  $V_R(r_{ij})$  και  $V_A(r_{ij})$  είναι τα δυναμικά μεταξύ των ατόμων  $i$  και  $j$  λόγω των απωστικών και των ελκτικών δυνάμεων. Το μέγεθος  $\bar{B}_{ij}$  λαμβάνει υπόψη του την κατεύθυνση και το μήκος του δεσμού.

Συνοψίζοντας, μπορεί να τονισθεί ότι η επιλογή μιας έκφρασης δυναμικού εξαρτάται από το υλικό, καθώς και από τον τύπο της εφαρμογής. Κατά συνέπεια, η έκφραση του δυναμικού ενέργειας παίζει πολύ σημαντικό ρόλο σε μια προσομοίωση, καθώς υπαγορεύει το μέγεθος και την κατεύθυνση των δυνάμεων που ασκούνται σε ένα άτομο κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Το πιο κρίσιμο και δύσκολο μέρος μιας προσομοίωσης μοριακής δυναμικής είναι η ανάπτυξη μιας επιφάνειας δυναμικού ενέργειας, η οποία να είναι ικανοποιητικά κοντά στο δυναμικό των αντίστοιχων πειραματικών συστημάτων που εξετάζονται, ώστε τα αποτελέσματα των δυναμικών υπολογισμών να έχουν νόημα. [17, 23]

## 2.5 Συνοριακά Άτομα

Τα συνοριακά άτομα του εργαλείου και του τεμαχίου θεωρούνται ανεπηρέαστα από την κατεργασία κοπής, καθώς είναι μακριά από την διεπιφάνεια εργαλείου-τεμαχίου. Κατά συνέπεια, οι θέσεις των συνοριακών ατόμων δε θα μεταβληθούν η μια ως προς την άλλη κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής. Στην Εικόνα 2.4, η ακμή του εργαλείου (γεμάτοι κύκλοι) θεωρείται άκαμπτη (δηλ. δεν παραμορφώνεται) ή άπειρης σκληρότητας. Αυτή είναι γενικά η περίπτωση, όταν έναν μαλακό τεμάχιο, όπως η χαλκός ή το αλουμίνιο, κατεργάζεται από ένα σκληρό κοπτικό εργαλείο, όπως ένα εργαλείο από διαμάντι. Εναλλακτικά, οι κοπτικές ακμές αποτελούνται από Νευτώνια άτομα, και τα συνοριακά άτομα μετακινούνται προς τα εξωτερικά τοιχώματα του εργαλείου, όπου στην περίπτωση αυτή, το εργαλείο μπορεί να παραμορφωθεί κατά τον ίδιο τρόπο που παραμορφώνεται και το τεμάχιο κατεργασίας. Αυτή είναι η περίπτωση όπου ένα τεμάχιο από χαλκό κατεργάζεται από ένα σιδερένιο εργαλείο, ή όπου η διαφορική σκληρότητα των δύο υλικών είναι μικρή. Ομοίως, τα συνοριακά άτομα στην πλευρά μακριά από το εργαλείο

στην Εικόνα 2.4 μπορούν να αναπαρασταθούν ως γεμάτοι κύκλοι, ή μπορούν να αντικατασταθούν (μαζί με άτομα θερμοστάτες, άτομα δηλαδή που απορροφούν θερμότητα ώστε να διατηρείται η θερμοκρασία του συνόλου σταθερή) από Νευτώνια άτομα (άδειοι κύκλοι), στην οποία περίπτωση το όριο δεν είναι πλέον άκαμπτο. Η πλαστική παραμόρφωση του εργαλείου, η φθορά του εργαλείου και οι χημικές αλληλεπιδράσεις μεταξύ του εργαλείου και του τεμαχίου μπορούν να μελετηθούν μέσω αυτής της προσέγγισης. Καθώς η δημιουργία προεξοχών στις κατεργασίες συμβαίνει στην πλευρά εξόδου του τεμαχίου λόγω έλλειψης περιορισμού ακαμψίας, στην προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής τα συνοριακά άτομα (μαζί με τα άτομα θερμοστάτες) στη μακρινή πλευρά του τεμαχίου (ως προς την αρχική θέση του εργαλείου) απομακρύνονται, ώστε να επιτραπεί η παραμόρφωση των ατόμων χωρίς περιορισμό, όταν μοντελοποιείται η αστοχία εξόδου ή η δημιουργία προεξοχών. Τα άτομα που βρίσκονται σε δύο γειτονικά στρώματα ως προς τα οριακά άτομα, λειτουργούν ως θερμοστατικά άτομα. [16]



**Εικόνα 2.4:** Διδιάστατη αναπαράσταση των διαφόρων ζωνών ενός τεμαχίου. Οι άδειοι κύκλοι, O, είναι στην πρωταρχική ζώνη, όπου η κίνηση ελέγχεται μόνο με επίλυση των κλασικών εξισώσεων κίνησης. Οι σκιασμένοι γκρι κύκλοι, είναι στη ζώνη Q, όπου οι ταχύτητες ορίζονται ξανά μετά από χρονικό διάστημα  $\Delta t$ . Οι γεμάτοι κύκλοι, είναι στο όριο της ζώνης B. Είναι στάσιμοι και εξυπηρετούν την ίδια λειτουργία με το σφιγκτήρα του εργαλείου κατεργασίας. Διατηρούν το τεμάχιο σταθερό κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής, λείανσης ή οδόντωσης. [16]

## 2.6 Συναρτήσεις Επανακαθορισμού Ταχυτήτων

Καθώς η πλαστική παραμόρφωση στη ζώνη διάτμησης και η τριβή στη διεπιφάνεια αποβλίττου- εργαλείου μετατρέπονται σε θερμότητα, η θερμότητα αυτή πρέπει να αποβάλλεται διαρκώς. Στις πραγματικές κατεργασίες, μεγάλο μέρος της θερμότητας απομακρύνεται με το απόβλιττο και το λιπαντικό, καθώς και από το εργαλείο και το κατεργαζόμενο υλικό. Η πιο αποτελεσματική μέθοδος προσομοίωσης αποβολής της παραγόμενης κατά την κατεργασία θερμότητας είναι η *χρήση των συναρτήσεων ορισμού θερμότητας*. Οι μέθοδοι αυτές προτάθηκαν από τους Agrawal *et al* [32] και Riley *et al* [33]. Η διαδικασία αυτή επιτρέπει τις στατιστικές διακυμάνσεις γύρω από μια θερμοκρασία ισορροπίας.

Για να εφαρμοσθεί η μέθοδος αυτή, τα  $N$  άτομα του πλέγματος πρέπει να χωρισθούν σε τρεις ζώνες. Η πρωτεύουσα ζώνη (P- ζώνη) περιέχει τα νευτώνια άτομα που μας ενδιαφέρουν. Μια δευτερεύουσα ζώνη (Q- ζώνη) συνίσταται από όλα τα περιφερειακά άτομα του κρυστάλλου. Τα πιο εξωτερικά άτομα είναι στο όριο ή στη B- ζώνη. Στους υπολογισμούς Μοριακής Δυναμικής, οι κινήσεις των ατόμων της P- ζώνης προσδιορίζονται μόνο από τις δυνάμεις που παράγονται από την αλληλεπίδραση του δυναμικού και της διαδικασίας κοπής. Οι κινήσεις των ατόμων της Q- ζώνης τροποποιούνται λόγω του επανακαθορισμού ταχυτήτων ή των συναρτήσεων θερμοποίησης, που αφορούν κάθε άτομο της ζώνης. Η συνάρτηση θερμοποίησης για τη  $x$  συνιστώσα της ταχύτητας του  $i$ -οστού ατόμου του πλέγματος δίνεται από τη σχέση:

$$V_{x_i}^n = (1-w)^{1/2} V_{x_i}^o + w^{1/2} V_{x_i}^r(\xi, T) \quad (2.38)$$

όπου  $V_{x_i}^n$  είναι η νέα  $x$  συνιστώσα της ταχύτητας για το άτομο  $i$  τη χρονική στιγμή  $t_n$  και  $V_{x_i}^o$  είναι η παλιά του ταχύτητα. Η  $V_{x_i}^r(\xi, T)$  είναι η τυχαία ταχύτητα που επιλέγεται από την κατανομή Boltmann σε θερμοκρασία  $T$  από ένα τυχαίο πλήθος  $x$ . Η  $w$  είναι μια παράμετρος που ελέγχει τη δύναμη του επανακαθορισμού. Ανάλογες εξισώσεις χρησιμοποιούνται και για τις  $y$  και  $z$  συνιστώσες της ταχύτητας. Αυτή η διαδικασία επανακαθορισμού, εφαρμόζεται σε κάθε άτομο της Q- ζώνης σε ίσα δομημένα χρονικά διαστήματα  $\Delta t$ . Η χρήση της Εξίσωσης (2.8) προσομοιώνει με ακρίβεια τα φαινόμενα μεταφοράς ενέργειας του υλικού και επιτρέπει τον ακριβή υπολογισμό της θερμοκρασιακής κλίσης κατά τη διάρκεια της κατεργασίας κοπής. [33]

### 2.6.1 Συνάρτηση επιθυμητής θερμοκρασίας

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

$$T = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{i=1}^N v_i^2 = \frac{1}{N} \frac{m_i}{3k_B} \sum_{i=1}^N (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2) \quad (2.39)$$

Αν  $|T - T_d| \leq 3$  τότε η συνθήκη ικανοποιείται, διαφορετικά απαιτείται ανάθεση νέων ταχυτήτων.  $T_d$  είναι η επιθυμητή θερμοκρασία. Εάν η απόλυτη διαφορά μεταξύ της μετρούμενης θερμοκρασίας και αυτής που επιθυμείται δεν υπερβαίνει τους 3 K τότε η ακρίβεια θεωρείται ικανοποιητική. οπότε η προσομοίωση προχωρά. Σε αντίθετη περίπτωση αναθέτονται νέες ταχύτητες μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο. [106]

### 2.6.2 Επαναπροσδιορισμός ταχυτήτων

Στην περίπτωση που απαιτείται ανάθεση νέων ταχυτήτων, αυτό γίνεται ακολουθώντας τις παρακάτω εξισώσεις και επιστρέφονται για την επίλυση των εξισώσεων κίνησης με τον αλγόριθμο Verlet.

$$v_i = \sqrt{\frac{T_d}{T}} v_i \quad i = 1, \dots, N \quad (2.40)$$

$$\begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix}^{New} = \sqrt{\frac{T_d}{T}} \begin{bmatrix} v_{ix} \\ v_{iy} \\ v_{iz} \end{bmatrix} \quad i = 1, \dots, N \quad (2.41)$$

Είναι σημαντικό να σημειώσουμε ότι μερικοί θεωρητικοί δε θεωρούν την προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής ως μια πειραματική τεχνική διότι δεν εκτελούνται καθόλου μετρήσεις σε πραγματικά συστήματα, δηλαδή οι προσομοιώσεις της Μοριακής Δυναμικής είναι το αποτέλεσμα καθαρών υπολογισμών. Οι πειραματιστές θεωρούν ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, όπως τα πειράματα, χρησιμοποιούνται για να ελέγξουν τις θεωρίες και υπόκεινται σε προβλήματα αναπαραξιμότητας και στατιστικών σφαλμάτων. [106]

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: Χρήση της Μοριακής Δυναμικής στις Κοπές Νανοκλίμακας

### 3.1 Εισαγωγή

Οι συμβατικές κατεργασίες περιλαμβάνουν την αποβολή του ανεπιθύμητου υλικού με τη μορφή αποβλίττου, από ένα κοπτικό εργαλείο πολύ σκληρότερο (το λιγότερο 20%) από το κατεργαζόμενο υλικό. Για το φινίρισμα του τεμαχίου, η πρακτική είναι να απομακρύνεται το επιπλέον υλικό και να ακολουθεί λείανση, ώστε να επιτευχθεί η επιθυμητή μορφή και ακρίβεια. Πρόσφατα, οι κατεργασίες υπερακριβείας με χρήση εργαλείου από μονοκρύσταλλο διαμαντιού, έχουν οδηγήσει στη δημιουργία επιφανειών εξαιρετικής ποιότητας («καθρέπτες») σε μια πληθώρα υλικών, από μη-σιδηρούχα, όπως χαλκός και αλουμίνιο ως ημιαγώγιμα υλικά, όπως το πυρίτιο και το γερμάνιο. Η διαδικασία αυτή, περιλαμβάνει την αποβολή εξαιρετικά μικρών ποσοτήτων ανεπιθύμητου υλικού (το βάθος κοπής είναι της τάξης του μικρόμετρου ή λιγότερο) με μια εξαιρετικά στιβαρή μηχανή κατεργασίας υψηλής ακρίβειας. Τα εργαλεία κατεργασίας αποτελούνται από αεροστατικές ατράκτους, υδροστατικές πλάκες και αριθμητικό έλεγχο μέσω υπολογιστή (CNC), και είναι ικανά να παράγουν επιφάνειες με πολύ ακριβές περίγραμμα (π.χ. ασφαιρικός φακός), της τάξεως των 5 Angstrom.

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

Από τη δεκαετία του 70, οι προσεγγίσεις της συνεχούς μηχανικής (μέθοδος των πεπερασμένων διαφορών και μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων) εφαρμόστηκαν στα προβλήματα της κοπής μετάλλων. Εδώ, το υλικό θεωρείται ως συνεχές, αγνοώντας τα μικροσυστατικά (χημεία, κρυσταλλική δομή, διάταξη πλέγματος, μέγεθος κόκκων, σωματίδια δεύτερης φάσης κλπ) του κατεργαζόμενου υλικού ή του τεμαχίου, εκτός από κάποιες φυσικές ιδιότητες. Ο αριθμός των κόμβων και οι αποστάσεις μεταξύ τους, επιλέγονται αυθαίρετα.

Επιλέγεται ένα χονδροειδές πλέγμα, όταν θέλουμε να κερδίσουμε σε ταχύτητα επεξεργασίας και ένα πιο λεπτομερές πλέγμα, όταν θέλουμε να κερδίσουμε σε ακρίβεια. Η ανάλυση αυτή, σε συνδυασμό με άλλες μεθόδους, συνέβαλε προς μια καλύτερη κατανόηση της μηχανικής της κοπής, από υπολογιστικής άποψης.

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

Η μελέτη της Μοριακής Δυναμικής ξεκίνησε στα τέλη της δεκαετίας του 50 στο Εργαστήριο Ακτινοβολίας Lawrence (LRL) στις Η.Π.Α από τους Alder και Wainwright στο πεδίο της στατιστικής μηχανικής ισορροπίας και μη ισορροπίας, ώστε να υπολογιστεί η απόκριση αρκετών εκατοντάδων αλληλεπιδράσεων κλασσικών σωματιδίων. Έκτοτε, η Μοριακή Δυναμική εφαρμόστηκε σε ένα ευρύ πεδίο που περιλαμβάνει την ανάπτυξη κρυστάλλων, την οδόντωση, την τριβολογία, τη σύνθεση διαμαντιού σε χαμηλή πίεση και τις αλληλεπιδράσεις με laser κ.λ.π. Η Μοριακή Δυναμική μπορεί να θεωρηθεί μια ώριμη μέθοδος, από την άποψη ότι έχουν γραφεί πολλές μελέτες και βιβλία πάνω στο αντικείμενο. Όμως, η εφαρμογή της στις κατεργασίες είναι μια πιο

πρόσφατη τάση και μόνο λίγες ερευνητικές ομάδες ανά τον κόσμο εμπλέκονται ενεργά με την διερεύνηση των διαδικασιών αυτών. [16]

Οι Belak *et al* [1-4] διεξήγαγαν βασικά πρωτότυπες μελέτες στην προσομοίωση μέσω Μοριακής δυναμικής της νανοκοπής του χαλκού με κοπτικό εργαλείο από διαμάντι. Αυτό οδήγησε άλλους επιστήμονες, κυρίως στην Ιαπωνία, να ερευνήσουν και να επεκτείνουν την προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής στις νανοκοπές. Οι Belak *et al* [3] μελέτησαν τόσο τη διδιάστατη όσο και την τρισδιάστατη κοπή του χαλκού με χρήση της μεθόδου πολλών ατόμων σε ταχύτητα κοπής 100 m/s με εργαλεία διαφορετικής ακτίνας ακμής και σε διαφορετικά βάθη κοπής. Τα άτομα του άνθρακα στο εργαλείο διαμαντιού δεν έχουν δυνατότητα μετακίνησης (εργαλείο άπειρης σκληρότητας) στην περίπτωση της κοπής του χαλκού. Αυτό είναι λογικό, καθώς η σκληρότητα του χαλκού είναι μόνο ένα μικρό κλάσμα της σκληρότητας του εργαλείου διαμαντιού. Οι Belak *et al* [3] μελέτησαν επίσης την κατεργασία του πυριτίου με χρήση εργαλείου διαμαντιού στα 540 m/s, με εργαλείο, στο οποίο επιτρέπεται η δυνατότητα παραμόρφωσης και η αλληλεπίδραση με το υλικό του τεμαχίου. Βρέθηκε ότι ένα στρώμα ατόμων μεταφέρθηκε στο εργαλείο διαμαντιού. Οι Belak *et al* ανέφεραν επίσης ότι το υλικό του πυριτίου στο απόβλιττο και στα λίγα πρώτα στρώματα της νέας επιφάνειας που προέκυψε από την κοπή φαινόταν άμορφο. Βρέθηκε ότι απαιτείται λιγότερη ενέργεια για να μετατραπεί ο κρύσταλλος σε άμορφο στερεό, σε σύγκριση με την ενέργεια που απαιτείται για να διατμηθεί ο κρύσταλλος. Οι παρατηρήσεις αυτές είναι πολύ σημαντικές, όταν επιχειρήθηκε η κατανόηση των μηχανισμών αποβολής υλικού σε ημιαγωγικά υλικά.

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

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

νανοδομής, η οποία δε μπορεί να επιτευχθεί εύκολα με οποιαδήποτε άλλη μέθοδο, σε τέτοιο επίπεδο.

### **3.2 Πλεονεκτήματα και Περιορισμοί**

Σε αντίθεση με τη μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων, στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής οι κόμβοι και αποστάσεις μεταξύ τους δεν επιλέγονται αυθαίρετα, αλλά με βάση τις πιο θεμελιώδεις μονάδες του υλικού, δηλαδή τα κέντρα των ατόμων επιλέγονται ως κόμβοι και οι διατομικές αποστάσεις ως απόσταση μεταξύ των κόμβων. Κατά συνέπεια, η δομή του πλέγματος είναι και το πλέγμα της Μοριακής Δυναμικής.

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

Οι τεχνικές Μοριακής Δυναμικής μπορούν να χρησιμοποιηθούν αρκετά στην προσομοίωση της μηχανικής της νανοκοπής και δεν απαιτούν τη χρήση ακριβού εξοπλισμού όπως μια μηχανή τόννευσης υπερακριβείας με διαμάντι, εργαλεία από διαμάντι και σημαντικές πειραματικές εργασίες, ώστε να ληφθούν αποτελέσματα. Στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, καθώς η διαδικασία μπορεί να αναχθεί στις θεμελιώδεις μονάδες της για ανάλυση, τα δεδομένα παρέχουν τα θεωρητικά όρια της κατεργασίας.

Η επίδραση διαφόρων παραμέτρων, όπως η ακτίνα ακμής, γωνία κοπής και το βάθος κοπής μπορούν να μεταβάλλονται εύκολα και αποτελεσματικά στην προσομοίωση. Η πειραματική εργασία απαιτεί ακριβή εργαλεία διαμαντιού μονοκρυστάλλου, προσεκτικό χαρακτηρισμό του εργαλείου και σημαντικό έλεγχο με μηχανή υπερακριβείας, τα οποία απαιτούν χρόνο και χρήμα. Στις προσομοιώσεις Μοριακής Δυναμικής, οι μεταβλητές αυτές μπορούν να ορισθούν και στη συνέχεια να πραγματοποιηθούν οι προσομοιώσεις.

Είναι εύκολο να μεταβάλουμε τις ιδιότητες του κατεργαζόμενου υλικού και του κοπτικού εργαλείου στις προσομοιώσεις. Για να μελετήσουμε την επίδραση της σχετικής συχνότητας του εργαλείου ως προς το κατεργαζόμενο υλικό, οι τιμές της σκληρότητας, μπορούν απλά να προσδιοριστούν μέσω της προσομοίωσης, αντί να βρούμε εργαλεία της συγκεκριμένης σκληρότητας, το οποίο μπορεί να είναι από δύσκολο έως αδύνατο σε ορισμένες περιπτώσεις.



Σε αντίθεση με τη γενική αντίληψη ότι η Μοριακή Δυναμική μπορεί να εφαρμοσθεί μόνο σε ιδανικά υλικά και όχι σε πραγματικά, φαίνεται ότι ελαττωματικές δομές, όπως τα όρια των κόκκων, οι ρωγμές, τα σωματίδια δεύτερης φάσης κλπ, μπορούν να μοντελοποιηθούν με ακρίβεια, μολονότι σε περιορισμένη κλίμακα.

Οι αλληλεπιδράσεις εργαλείου- τεμαχίου που δε μπορούν να μελετηθούν βάσει της Μεθόδου των Πεπερασμένων Στοιχείων, μπορούν να μελετηθούν με χρήση της Μοριακής Δυναμικής. Κατά συνέπεια, η φθορά, η πλαστική παραμόρφωση του εργαλείου και η παραμόρφωση του υποστρώματος του υλικού κατεργασίας, μπορούν να μελετηθούν για απλά συστήματα.

Η επίδραση του προσανατολισμού του κρυστάλλου του κατεργαζόμενου υλικού και του εργαλείου στη μηχανική του σχηματιζόμενου αποβλίττου μπορεί να μελετηθεί. Η αντίστοιχη πειραματική εργασία θα ήταν αρκετά ακριβή, λόγω του υψηλού κόστους των υλικών μονοκρυστάλλων και του χρόνου προετοιμασίας. [16]

### 3.2.1 Περιορισμοί ( και πιθανές λύσεις)

Το πλήθος των ατόμων που λαμβάνονται υπόψη στο κατεργαζόμενο υλικό είναι σχετικά μικρό (κυμαίνεται από μερικές εκατοντάδες ως μερικές χιλιάδες άτομα) και μερικές εκατοντάδες άτομα στο εργαλείο. Περίπου  $1 \times 10^6$  άτομα είναι το ανώτατο όριο για το κατεργαζόμενο υλικό. Ο περιορισμός αυτός υπάρχει λόγω του υπολογιστικού χρόνου που απαιτείται, αν η ταχύτητα κοπής μειωθεί κοντά στη συμβατική, περίπου 2 m/s. Όμως, είναι εφικτό να προσομοιώσουμε μεγαλύτερο πλήθος, συνδυάζοντας τη Μοριακή Δυναμική με στατιστικές μηχανικές προσεγγίσεις, δηλαδή με μοντελοποίηση Monte Carlo.

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

Οι ταχύτητες κοπής που εφαρμόζονται είναι εξαιρετικά υψηλές (500m/s) λόγω των μεγάλων χρόνων κατεργασίας. Είναι αναμφίβολο ότι οι ταχύτητες κοπής που χρησιμοποιούνται στις προσομοιώσεις αυτές είναι εξαιρετικά υψηλές και κάποιες φορές μη ρεαλιστικές. Όμως, με την εισαγωγή απομονωμένων και ταχέων σταθμών εργασίας με χρήση παράλληλης επεξεργασίας η ταχύτητα αυτή μπορεί να μειωθεί αισθητά και να φτάσει σε συμβατικές ταχύτητες

κατεργασίας. Επίσης, βελτιστοποιώντας το μέγεθος του βήματος ολοκλήρωσης, είναι πιθανό να αυξηθεί η ταχύτητα κατά 2-5 φορές.

Οι Raff και Thomson [35] ανέπτυξαν μια μέθοδο « διαταραχής-τροχιάς» που μπορεί να μειώσει σημαντικά τον υπολογιστικό χρόνο. Στη μέθοδο αυτή, τα άτομα που λαμβάνονται υπόψη διαιρούνται σε τρεις ζώνες, P, Q και R. Η πρώτη ζώνη, η P ζώνη περιλαμβάνει τα άτομα που εμπλέκονται άμεσα στη διαδικασία που μας ενδιαφέρει συν ένα πλήθος αυθαίρετων ατόμων που καταλαμβάνουν γειτονικές θέσεις. Η ζώνη Q περιλαμβάνει ένα μεγαλύτερο πλήθος ατόμων, πιο απομακρυσμένα από την περιοχή ενδιαφέροντος. Τα άτομα αυτά θεωρούμε ότι επηρεάζουν τη διαδικασία μόνο έμμεσα, μέσω της μεταφοράς ενέργειας εντός και εκτός της P ζώνης. Σε ορισμένες περιπτώσεις, συμπεριλαμβάνεται επίσης μια οριακή ζώνη (B ζώνη) , για να μειώσει τα φαινόμενα των άκρων. Η μέθοδος αυτή ενσωματώνει την επίδραση των ατόμων της ζώνης Q πάνω στη ζώνη P, πράγμα το οποίο απλοποιεί τις υπολογιστικές απαιτήσεις του προβλήματος, ενώ παράλληλα διατηρεί τη σωστή συναρτησιακή εξάρτηση των αλληλεπιδράσεων της P και Q ζώνης. Όταν η τεχνική αυτή εφαρμόστηκε σε προσομοιώσεις κατεργασιών Μοριακής Δυναμικής, παρατηρήθηκε περαιτέρω μείωση του υπολογιστικού χρόνου. Επίσης η χρήση λιγότερων ατόμων (π.χ. 2000 αντί για 10000) , τα οποία όμως είναι αρκετά, αυξάνει την ταχύτητα κατά 5 φορές. [36]

Πρόσφατα οι προσομοιώσεις ΜΔ εφαρμόζονται μόνο σε απλά συστήματα, όπως απλά στοιχεία για το υλικό κατεργασίας και τα εργαλείο. Για το λόγο αυτό, οι επιφάνειες ενέργειας δυναμικού αναπτύσσονται για άλλα συστήματα υλικών, πράγμα το οποίο δε είναι τετριμμένο. Υπάρχει όμως ένα σημαντικό πλήθος εφαρμογών ναυοκοπής μη σιδηρούχων υλικών κατεργασίας, όπως ο χαλκός, το αλουμίνιο και τα ημιαγωγικά υλικά, όπως το πυρίτιο και το γερμάνιο με ένα εργαλείο μονοκρυσταλλικού διαμαντιού. Παρομοίως, η φθορά του διαμαντιού στην κατεργασία του σιδήρου μπορεί να προσομοιωθεί. Επίσης, είναι εφικτή η πραγματοποίηση προσομοιώσεων ΜΔ σε κατεργαζόμενα υλικά που είναι κράματα, οι συνιστώσες των οποίων είναι το ίδιο διαλυτές τόσο σε υγρή όσο και σε στερεή κατάσταση, όπως τα κράματα νικελίου-χαλκού. Η κατανομή των ατόμων στο κατεργαζόμενο υλικό είναι ανάλογη του επί τοις εκατό ατομικού βάρους των αντίστοιχων στοιχείων.

Κατά συνέπεια, η προσομοίωση ΜΔ εφαρμόζεται σε υλικά που δεν είναι καθαρά, καθώς περιέχουν ελαττώματα, όπως ρωγμές, όρια κόκκων , σωματίδια δεύτερης φάσης κ.λ.π. Η πυκνότητα, το μέγεθος και το σχήμα των ελαττωμάτων μπορούν να ληφθούν υπόψη, με την ενσωμάτωση στατιστικών μηχανικών προσεγγίσεων, όπως η προσομοίωση Monte Carlo.

Ο χρόνος προσομοίωσης είναι μεγάλος (μπορεί να φτάσει αρκετές εκατοντάδες ώρες για κάθε προσομοίωση). Ευτυχώς, με τη διαθεσιμότητα σταθμών εργασίας χαμηλού κόστους με μεγάλες υπολογιστικές ταχύτητες και σημαντική μνήμη, η προσομοίωση μπορεί να διεξαχθεί χωρίς την ανθρώπινη παρουσία κατά τη μεγαλύτερη περίοδο.

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

Στις περισσότερες μελέτες που έχουν διεξαχθεί έως τώρα, το εργαλείο θεωρείται γενικά άπειρης σκληρότητας· ως εκ τούτου οι αλληλεπιδράσεις εργαλείου-τεμαχίου, η φθορά και η παραμόρφωση του εργαλείου αμελούνται. Αυτός ο περιορισμός μπορεί να απλουστευθεί, όμως οι παράμετροι διεπιφάνειας μπορούν να αναπτυχθούν για τη συνάρτηση δυναμικού. [37]

### **3.3 Επίδραση παραμέτρων διεργασίας στις νανοκοπές**

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

#### **3.3.1 Επίδραση των διατομικών δυναμικών στην προσομοίωση μοριακής δυναμικής της νανοκατεργασίας**

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η προσομοίωση ΜΔ αποτελείται από την αριθμητική βήμα προς βήμα επίλυση των κλασσικών εξισώσεων της κίνησης

βάσει του δεύτερου νόμου του Newton. Για ένα σύνολο  $N$  σωματιδίων ή ατόμων

$$F_i = m_i \cdot a_i \quad (3.1)$$

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

Οι Rentsch and Inasaki [38] μοντελοποίησαν ένα τεμάχιο χαλκού και ένα εργαλείο διαμαντιού με χρήση της συνάρτησης δυναμικού Lennard-Jones (LJ) για τις αλληλεπιδράσεις των ατόμων χαλκού. Θεώρησαν ότι τα σύνορα και το εργαλείο είναι άκαμπτα και παρατήρησαν ένα φαινόμενο συσσώρευσης ύστερα από 25000 βήματα.

Οι Komanduri et al.[39] χρησιμοποίησαν ένα τεμάχιο χαλκού και ένα εργαλείο τουγκστενίου άπειρης σκληρότητας για την προσομοίωσή τους. Χρησιμοποίησαν τα δυναμικά Morse και μια ταχύτητα κοπής 500 m/s. Οι Ye et al.[40] ερεύνησαν την χημικομηχανική στίλβωση του χαλκού από ένα σωματίδιο απόξεσης, με χρήση του δυναμικού πολλών σωματιδίων (EAM).

Οι Lin et al.[41] μελέτησαν τα χαρακτηριστικά της αποβολής ενέργειας λείανσης, την τάση λείανσης, την κατάσταση παραμόρφωσης, τη θερμοκρασία λείανσης, το μηχανισμό αποβολής υλικού σε νανοκλίμακα και την παραγωγή επιφάνειας. Χρησιμοποίησαν πυρίτιο τόσο στο τεμάχιο όσο και στο υλικό κατεργασίας. Οι Brinksmeimier et al.[42] πραγματοποίησαν μια τρισδιάστατη προσομοίωση ΜΔ της κατεργασίας λείανσης με χρήση του δυναμικού EAM. Μοντελοποίησαν δύο αποξεστικά τα οποία κόβουν το τεμάχιο των 100000 ατόμων σε όλο το μήκος του. με ταχύτητα 100 m/s.

Οι Pei et al.[43] και οι Promyoo et al.[44] πραγματοποίησαν νανοκοπή του χαλκού με εργαλείο διαμαντιού. Μελέτησαν την επίδραση της γωνίας αποβλίττου και των διατομικών δυναμικών (Morse και EAM)στη διεργασία. Οι Pei et al.[43] βρήκαν ότι δεν υπάρχει μεγάλη διαφορά στην προσομοιωμένη διαδικασία σχηματισμού αποβλίττου, αλλά το δυναμικό Morse καταλήγει σε περίπου 5-70% υψηλότερες δυνάμεις κοπής από το δυναμικό EAM. Και οι δύο κατέληξαν στο ότι το δυναμικό EAM είναι καλύτερο για τις προσομοιώσεις σε σύγκριση με το Morse. Η μελέτη τους βασίστηκε σε διδιάστατα μοντέλα, αλλά η απόδοση των τρισδιάστατων προσομοιώσεων παραμένει άγνωστη.

## Διατομικά δυναμικά για τη ΜΔ

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

$$E = \sum_i V_1(r_i) + \sum_{i<j} V_2(r_i r_j) + \sum_{i<j<k} V_3(r_i r_j r_k) + \dots \quad (3.2)$$

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

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

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

$$V = \sum_i \sum_{j<i} V(r_{ij}) \quad (3.3)$$

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

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

Στην προσομοίωση θα χρησιμοποιούν οι εκφράσεις δυναμικού που περιγράφηκαν στο Κεφάλαιο 2, και αναφέρονται ξανά για λόγους πληρότητας.

### Δυναμικό Lennard-Jones (LJ)

$$V_{ij} = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3.4)$$

όπου  $\sigma$  και  $\varepsilon$  είναι σταθερές που εξαρτώνται από τις φυσικές ιδιότητες του υλικού.

### Δυναμικό Morse

$$V_{ij} = D \{ \exp[-2a(r_{ij} - r_e)] - 2 \exp[-a(r_{ij} - r_e)] \} \quad (3.5)$$

όπου

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

$D$  και  $\alpha$  = σταθερές που προσδιορίζονται βάσει των φυσικών ιδιοτήτων του υλικού

### ***Δυναμικό πολλών σωμάτων (EAM)***

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

$$E_{tot} = \sum_i G_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V_{i,j}(r_{ij}) \quad (3.6)$$

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

### ***Προσομοίωση***

Στη συγκεκριμένη ενότητα παρουσιάζεται η προσομοίωση που έκαναν οι Chen et al. [49] ώστε να μελετήσουν την επίδραση των διαφόρων διατομικών στις δυνάμεις κοπής, τη δυναμική και τη συνολική ενέργεια του συστήματος και τη θερμοκρασιακή διακύμανση.

Στον Πίνακα 3.1 παρουσιάζονται οι συνθήκες προσομοίωσης. Το τεμάχιο αποτελείται από 16000 άτομα χαλκού με τέλεια εδροκεντρωμένο πλέγμα (FCC). Περιλαμβάνει τρία είδη ατόμων, δηλαδή, συνοριακά άτομα, άτομα θερμοστάτες και Νευτώνεια άτομα. Τα συνοριακά άτομα διατηρούνται σταθερά ώστε να μειώνεται η επίδραση των άκρων. Τα άτομα θερμοστάτες άγουν τη θερμότητα που παράγεται κατά τη διαδικασία κοπής έξω από την περιοχή κοπής. Αυτό επιτυγχάνεται με τη διαβάθμιση της ταχύτητας των θερμοστατικών ατόμων με τη μετατροπή μεταξύ της κινητικής ενέργειας (KE) και της θερμοκρασίας ως εξής [47,48]

$$\sum_i \frac{1}{2} m_i v_i^2 = \frac{3}{2} N k_B T_i \quad (3.7)$$

όπου  $m_i$  είναι η μάζα του  $i$ -τού ατόμου,  $v_i$  είναι η συνισταμένη ταχύτητα του  $i$ -τού ατόμου,  $N$  είναι το πλήθος των θερμοστατικών ατόμων,  $T_i$  είναι η θερμοκρασία του  $i$ -τού ατόμου και  $k_B$  είναι η σταθερά Boltzmann.

**Πίνακας 3.1:** Παράμετροι προσομοίωσης ΜΔ [49]

| Παράμετροι         | Τιμές                        |
|--------------------|------------------------------|
| Θερμοκρασία υλικού | 293 K                        |
| Κατεύθυνση κοπής   | [100] Κατά μήκος του άξονα x |
| Ταχύτητα κοπής     | 150 m/s                      |
| Βάθος κοπής        | 1.0 nm                       |
| Χρονικό βήμα       | 0.3 fs                       |
| Εκτέλεση           | 100000 βήματα                |

Όταν η θερμοκρασία των θερμοστατικών ατόμων ξεπερνά την καθορισμένη θερμοκρασία των του υλικού, οι ταχύτητες ανακατατάσσονται βάσει της εξίσωσης

$$v_{i,new} = v_i \sqrt{\frac{T_{desired}}{T_{current}}} \quad (3.8)$$

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

Το κοπτικό εργαλείο αποτελείται από 912 άτομα άνθρακα με δομή πλέγματος διαμαντιού. Το κοπτικό εργαλείο είναι αιχμηρό και μοντελοποιείται ως άκαμπτο σώμα.

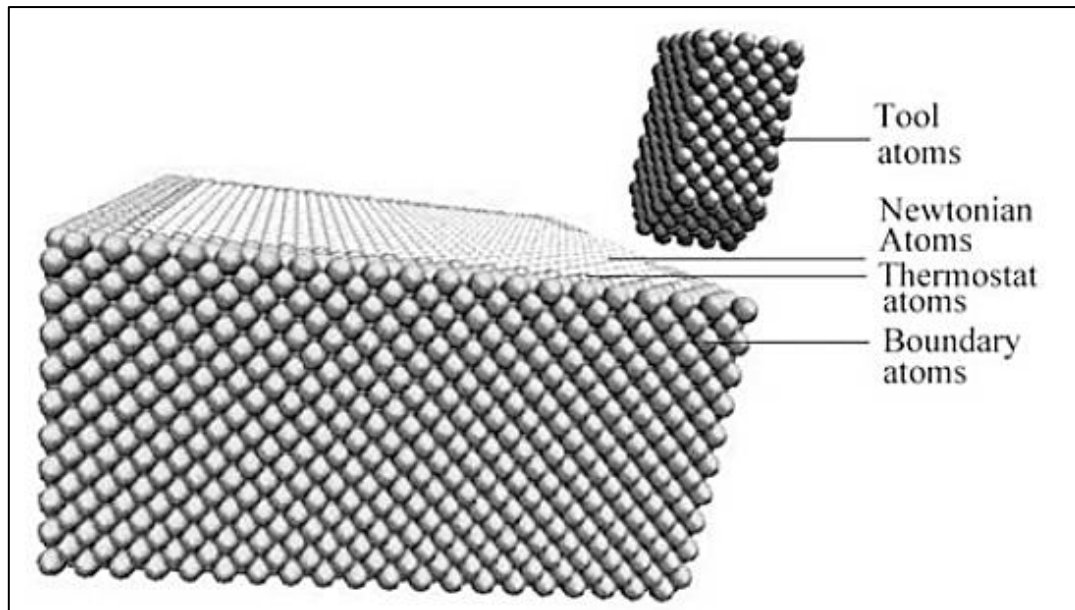
Στο Σχήμα 3.1 παρουσιάζεται το μοντέλο προσομοίωσης ΜΔ.

Οι ατομικές αλληλεπιδράσεις στην προσομοίωση είναι οι εξής:

Cu-Cu: Αλληλεπιδράσεις μεταξύ ατόμων χαλκού

Cu-C: Αλληλεπιδράσεις μεταξύ ατόμων χαλκού και ατόμων διαμαντιού

C-C: Αλληλεπιδράσεις μεταξύ ατόμων διαμαντιού (θεωρούνται άκαμπτα)



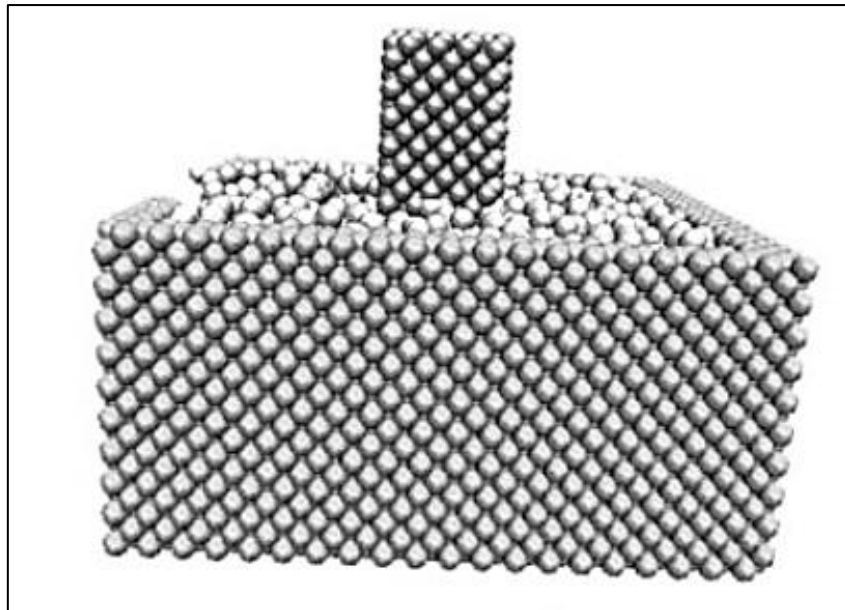
Εικόνα 3.1: Το μοντέλο προσομοίωσης ΜΔ [49]

### Μοντελοποίηση με το δυναμικό LJ

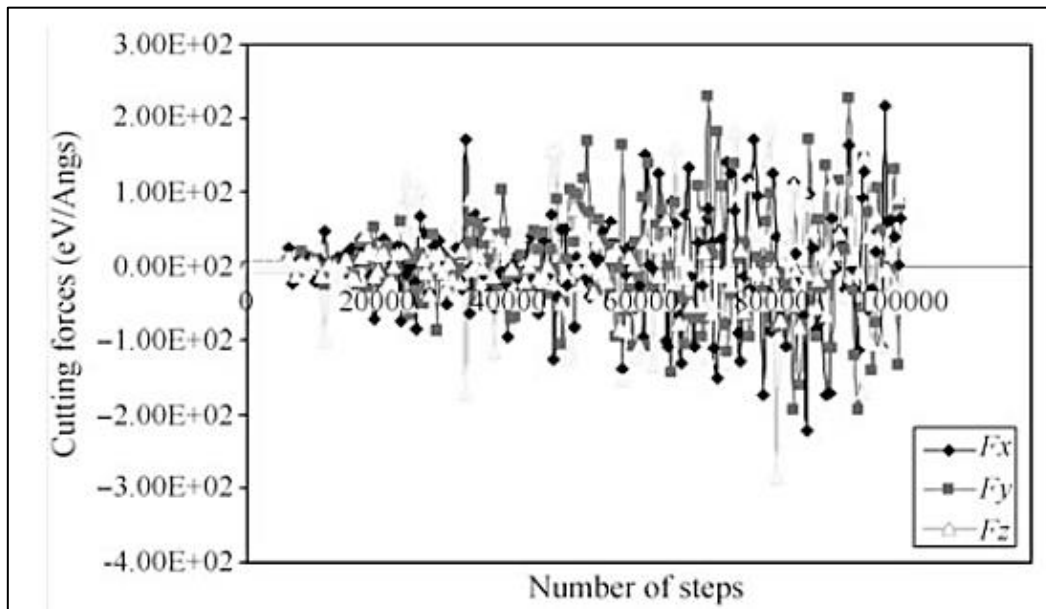
Χρησιμοποιείται η Εξίσωση 3.4, όπου τα  $\sigma$  και  $\epsilon$  είναι σταθερές οι οποίες εξαρτώνται από τις φυσικές ιδιότητες του υλικού. Οι παράμετροι LJ που χρησιμοποιήθηκαν για τις ατομικές αλληλεπιδράσεις είναι  $\sigma = 2.2277$  Angstroms και  $\epsilon = 0.415$  eV [50], οι οποίες εφαρμόζονται τόσο στις αλληλεπιδράσεις Cu-Cu όσο και στις αλληλεπιδράσεις Cu-C.

Η προσομοίωση και οι δυνάμεις κοπής φαίνονται στην Εικόνα 3.2 ( 3.2α και 3.2β) .





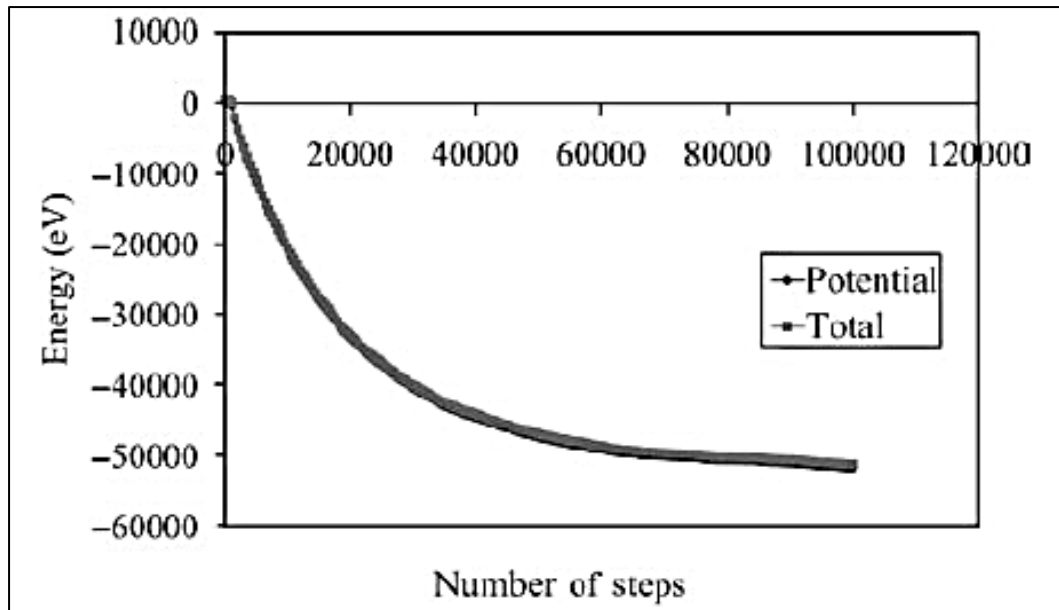
(α) Προσομοίωση με το δυναμικό LJ



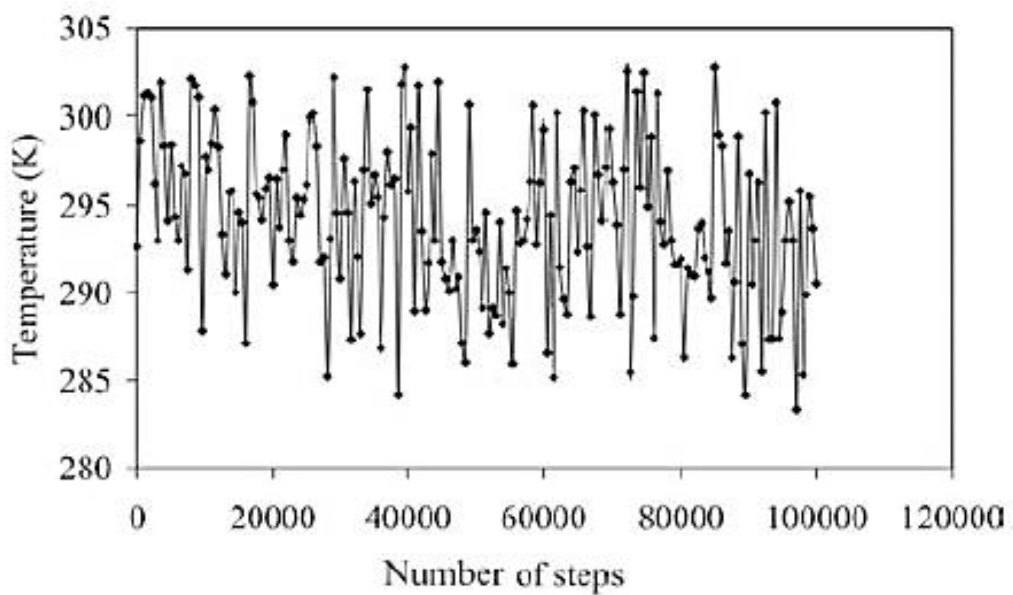
(β) Δυνάμεις κοπής με το δυναμικό LJ

**Εικόνα 3.2:** Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για το δυναμικό LJ [49]

Η δυναμική ενέργεια και η ολική ενέργεια για μια προσομοίωση LJ δίνονται στην Εικόνα 3.3 και η διακύμανση της θερμοκρασίας φαίνεται στην Εικόνα 3.4.



Εικόνα 3.3: Δυναμική και ολική ενέργεια για το δυναμικό LJ [49]



Εικόνα 3.4: Θερμοκρασιακή διακύμανση για το δυναμικό LJ [49]

### Μοντελοποίηση με το δυναμικό Morse

Χρησιμοποιείται η Εξίσωση (3.5):

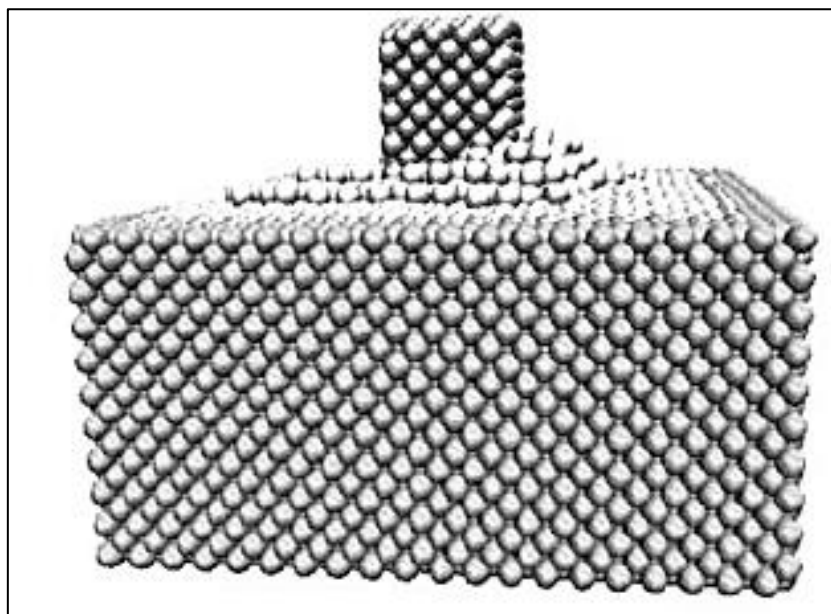
1) Για αλληλεπιδράσεις Cu-Cu [43, 51]:

$D = 0.3429 \text{ eV}$  ;  $\alpha = 0.13588 \text{ (nm)}^{-1}$  ;  $r_e = 0.2866 \text{ nm}$ :

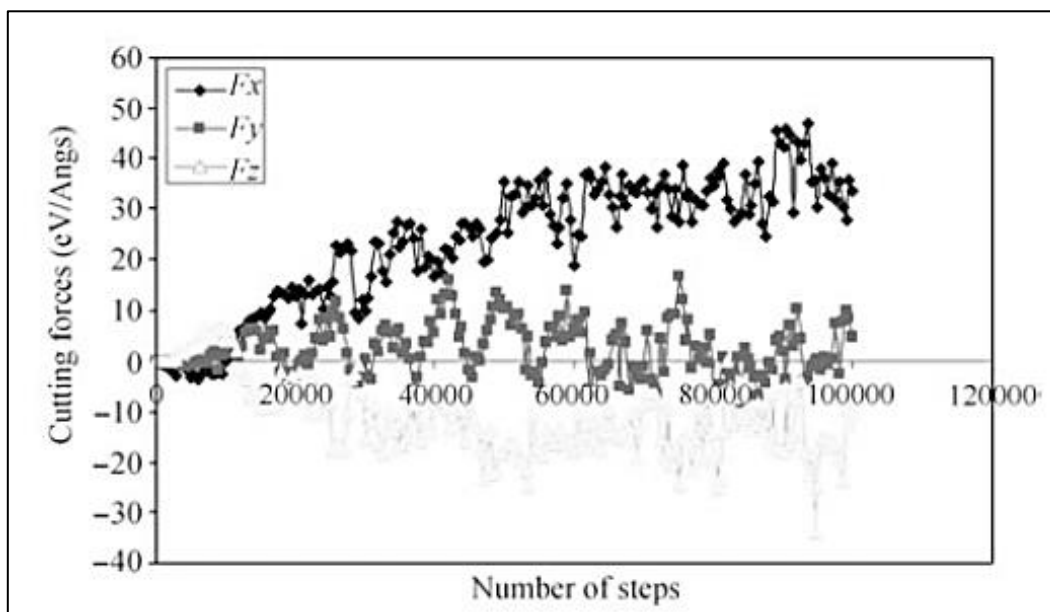
2) Για αλληλεπιδράσεις Cu-C [50]

$D = 0.087 \text{ eV}$  ;  $\alpha = 0.17 \text{ (nm)}^{-1}$  ;  $r_e = 0.22 \text{ nm}$ :

Η απόσταση αποκοπής είναι 6.4 Angstroms, δηλαδή οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ ατόμων που βρίσκονται σε μεγαλύτερη απόσταση από αυτή αμελούνται. Η προσομοίωση και οι δυνάμεις κοπής φαίνονται στην Εικόνα 3.5 (3.5α και 3.5 β).



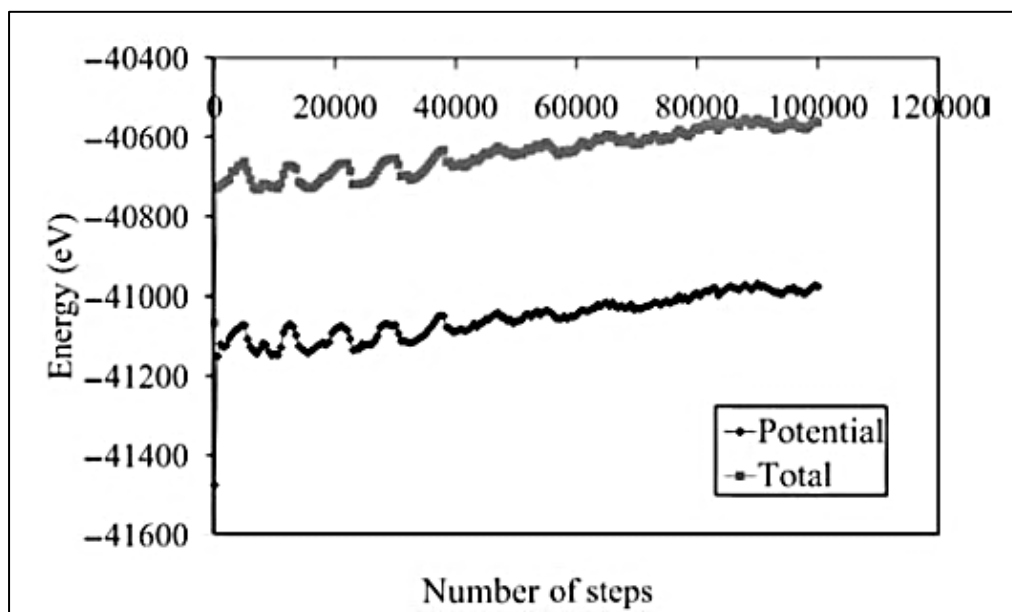
(α) Προσομοίωση με το δυναμικό Morse



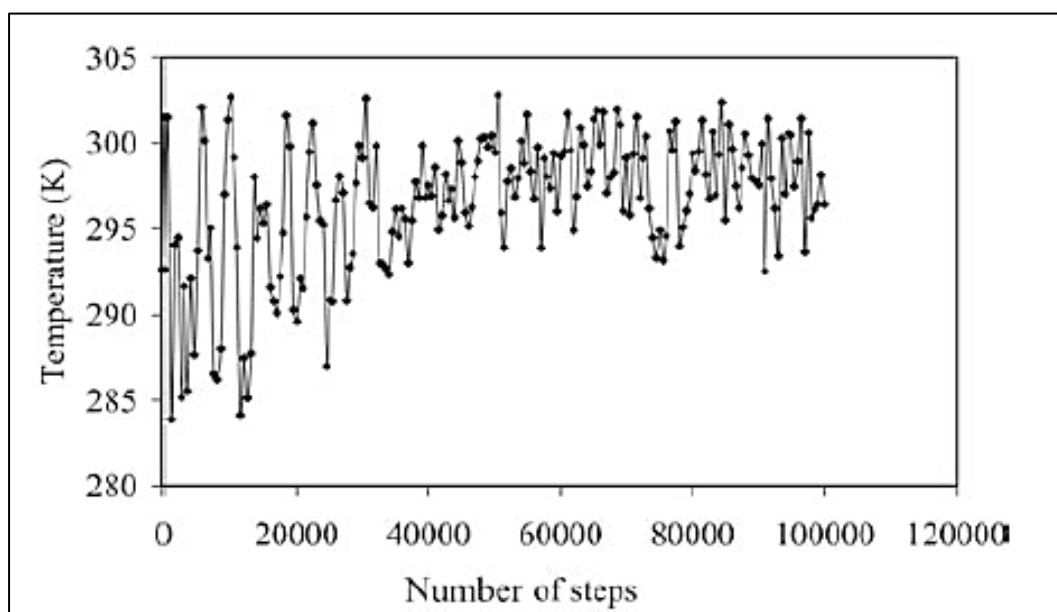
(β) Δυνάμεις κοπής για το δυναμικό Morse

Εικόνα 3.5: Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για το δυναμικό Morse [49]

Η δυναμική ενέργεια και η ολική ενέργεια για την προσομοίωση Morse δίνονται στην Εικόνα 3.6 και η θερμοκρασιακή διακύμανση στην Εικόνα 3.7



Εικόνα 3.6: Δυναμική και ολική ενέργεια για το δυναμικό Morse [49]



Εικόνα 3.7: Θερμοκρασιακή διακύμανση για το δυναμικό Morse [49]

### Μοντελοποίηση με το δυναμικό EAM

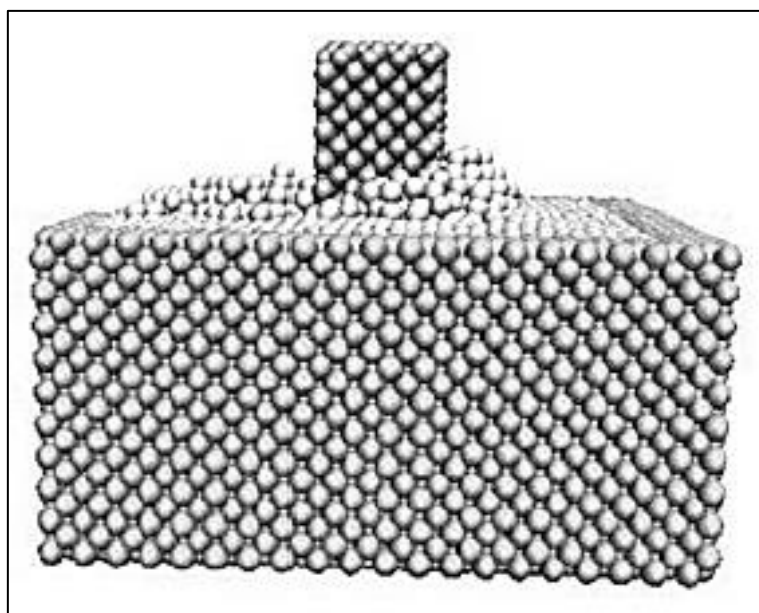
Χρησιμοποιείται η Εξίσωση (3.6) , με τα εξής δεδομένα:

- σταθερά πλέγματος του χαλκού: 3.615 Angstroms
- απόσταση πυκνότητας: 5.01E-4
- απόσταση διαχωρισμού: 1.00E-2
- απόσταση αποκοπής 4.95 Angstroms.

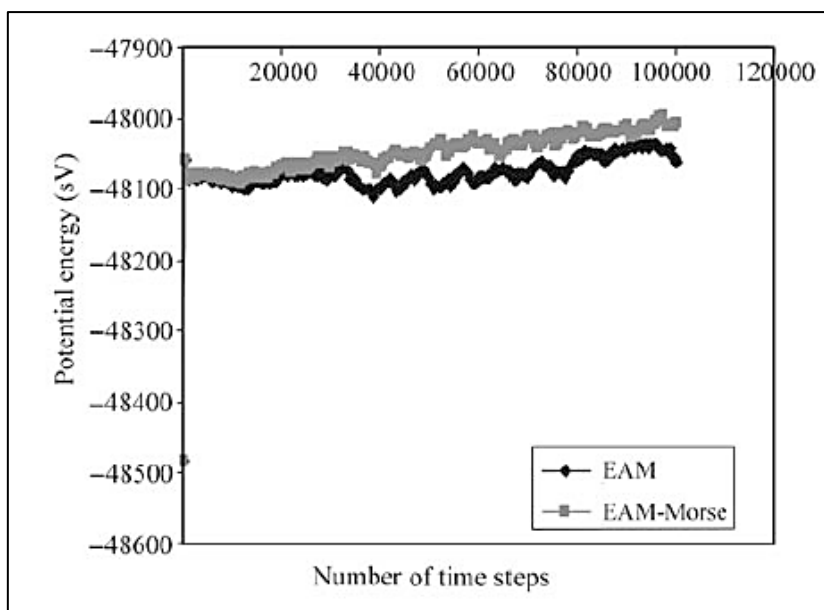
Δεν υπάρχουν διαθέσιμες παράμετροι δυναμικού EAM μεταξύ ατόμων Cu και C[43].

Για μια πιο ρεαλιστική περίπτωση, πραγματοποιήθηκε μια ακόμα προσομοίωση με δυναμικά EAM για τις αλληλεπιδράσεις Cu-Cu και παραμέτρους δυναμικού Morse για τις αλληλεπιδράσεις Cu-C. Οι παράμετροι Morse που χρησιμοποιήθηκαν είναι οι εξής:

$$D = 0.087 \text{ eV}, \quad \alpha = 0.17 \text{ (nm)}^{-1}; \quad r_e = 0.22 \text{ nm}.$$



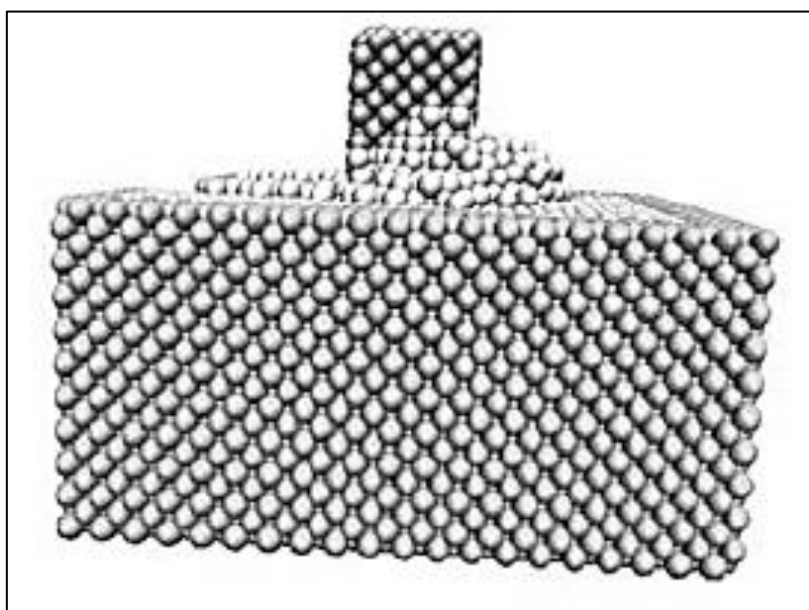
Εικόνα 3.8: Προσομοίωση με δυναμικά EAM-Morse [49]



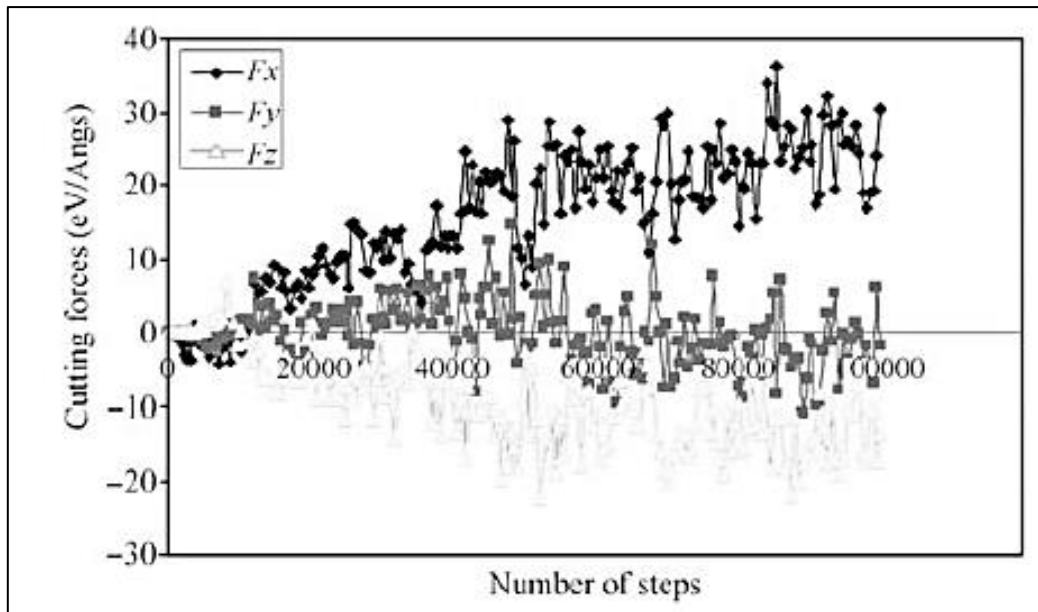
**Εικόνα 3.9:** Σύγκριση της δυναμικής ενέργειας για το δυναμικό EAM και τα δυναμικά EAM-Morse [49]

Η σύγκριση της δυναμικής ενέργειας των δύο προσομοιώσεων (EAM και EAM-Morse) δείχνει ότι το σφάλμα ή η διαφορά είναι μηδαμινή. Λόγω του ότι οι δυνάμεις εξάγονται από τη δυναμική ενέργεια, η διαφορά στις δυνάμεις κοπής θα είναι επίσης μικρή.

Η προσομοίωση και οι δυνάμεις κοπής για τη μοντελοποίηση EAM φαίνονται στις **Εικόνες 3.10** (3.10(α) και 3.10(β)) .



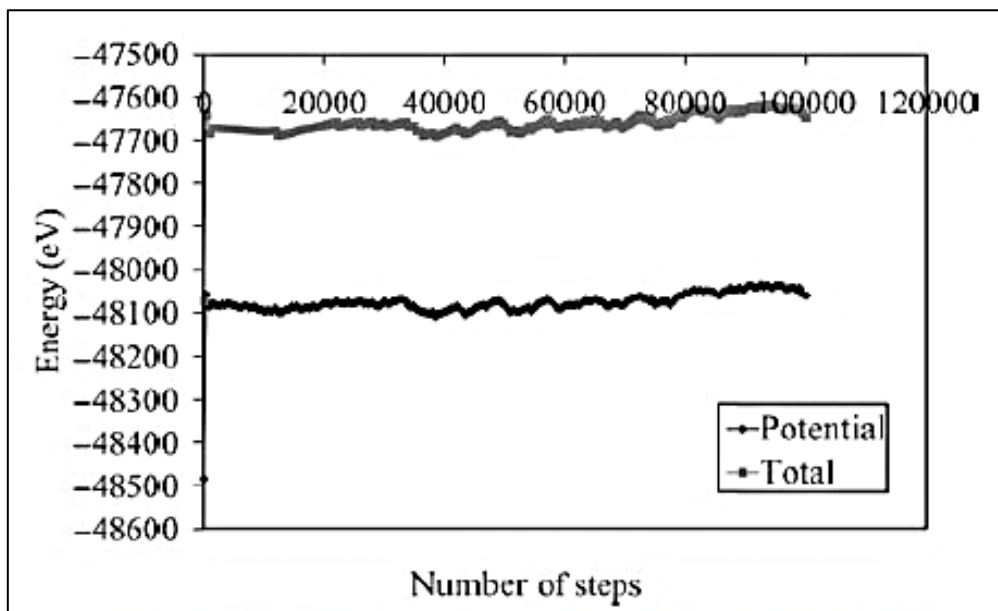
(α) Προσομοίωση με το δυναμικό EAM



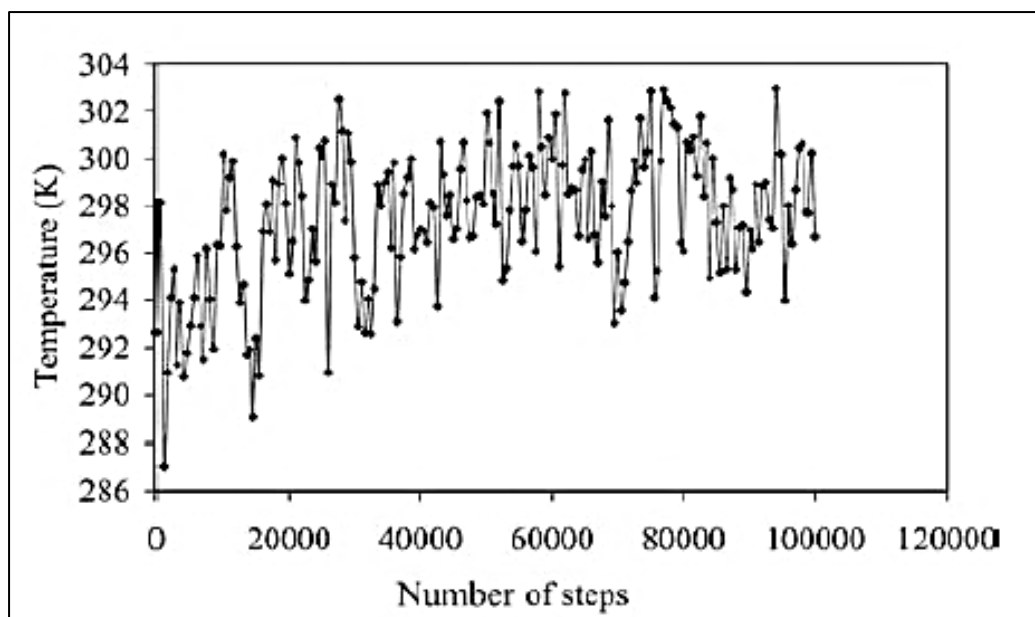
(β) Δυνάμεις κοπής για το δυναμικό EAM

Εικόνα 3.10: Προσομοίωση και δυνάμεις κοπής για το δυναμικό EAM [49]

Η δυναμική ενέργεια και η ολική ενέργεια δίνονται στην Εικόνα 3.11 και η διακύμανση θερμοκρασίας στην Εικόνα 3.12.



Εικόνα 3.11: Δυναμική και ολική ενέργεια για το δυναμικό EAM [49]



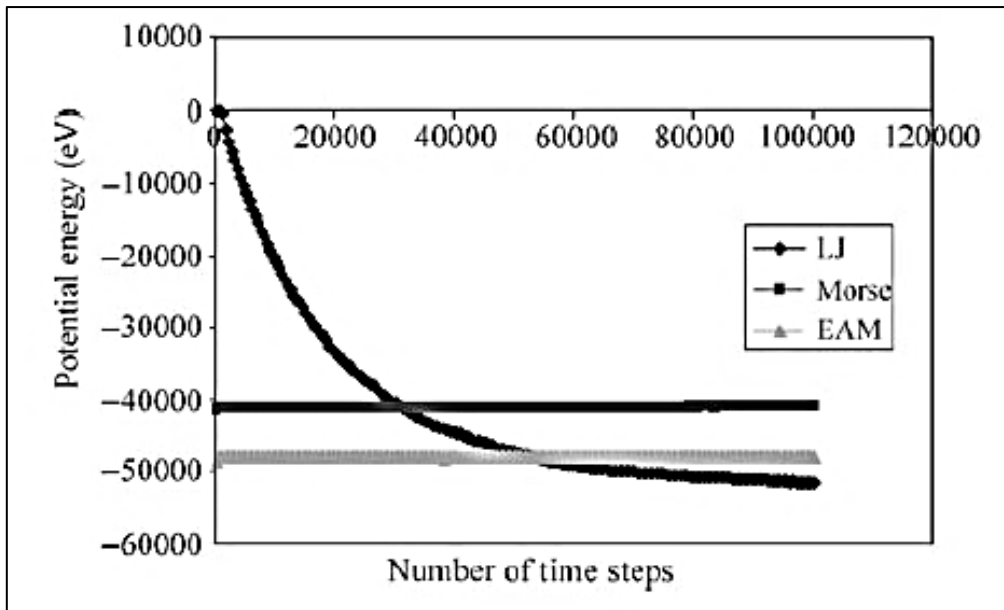
Εικόνα 3.12: Θερμοκρασιακή διακύμανση για το δυναμικό EAM [49]

Για τη μοντελοποίηση LJ, η δυναμική ενέργεια και η ολική ενέργεια είναι αρχικά ασταθείς, και σταθεροποιούνται ύστερα από 60000 βήματα. Επίσης, η δυναμική ενέργεια ήταν αρχικά υψηλή αλλά μειώθηκε σημαντικά γύρω στα 5200 eV προς το τέλος της προσομοίωσης στα 100000 βήματα. Η εφαπτομενική συνιστώσα των δυνάμεων κοπής κυμάνθηκε στο εύρος από  $-354\text{E-}9\text{N}$  ως  $346\text{E-}9\text{N}$ , με μέση τιμή στα  $-1.33\text{E-}9\text{N}$ .

Όπως παρατηρήθηκε στην Εικόνα 3.2α τα άτομα του χαλκού συμπεριφέρονται περισσότερο ως αέρια παρά ως στερεά, καθώς δεν δείχνουν τη συνεκτικότητα των στερεών. Η θερμοκρασιακή διακύμανση παρουσιάζει μια ελαφρά μέση μείωση με την αύξηση του αριθμού των βημάτων προσομοίωσης.

Για το μοντέλο Morse, η δυναμική και η ολική ενέργεια αρχικά παρουσιάζουν διακυμάνσεις και σταθεροποιούνται ύστερα από 80000 βήματα. Επίσης, το δυναμικό είναι υψηλότερο σε σύγκριση με το δυναμικό EAM (Εικόνα 3.13) Η εφαπτομενική συνιστώσα των δυνάμεων κοπής κυμάνθηκε στο εύρος από  $-5.62\text{E-}9\text{N}$  ως  $70.51\text{E-}9\text{N}$ , με μέση τιμή στα  $37.34\text{E-}9\text{N}$ . Η θερμοκρασιακή διακύμανση παρουσιάζει μια ελαφρά μέση αύξηση με την αύξηση του αριθμού των βημάτων προσομοίωσης. Τα άτομα συμπεριφέρονται περισσότερο ως στερεά, συνδεδεμένα μεταξύ τους. [49]





Εικόνα 3.13: Διακύμανση των δυναμικών ενεργειών για τα δυναμικά LJ, Morse και EAM [49]

Για το μοντέλο EAM, η δυναμική και η ολική ενέργεια ήταν σχετικά σταθερές. Επίσης, η δυναμική ενέργεια είναι χαμηλότερη σε σύγκριση με το δυναμικό Morse, η εφαπτομενική συνιστώσα των δυνάμεων κοπής κυμάνθηκε στο εύρος από  $-6.74 \times 10^{-9} \text{ N}$  ως  $58.2 \times 10^{-9} \text{ N}$ , με μέση τιμή στα  $24.99 \times 10^{-9} \text{ N}$ . Η θερμοκρασιακή διακύμανση παρουσιάζει μια ελαφρά μέση αύξηση με την αύξηση του αριθμού των βημάτων προσομοίωσης. Τα άτομα συμπεριφέρονται όπως στα στερεά, συνδεδεμένα μεταξύ τους, όπως παρατηρήθηκε και για το δυναμικό Morse. Ο λόγος μεταξύ της εφαπτομενικής, της περιφερειακής και της κάθετης συνιστώσας των δυνάμεων κοπής είναι παρόμοιος με αυτόν που έχει βρεθεί για το δυναμικά Morse και EAM σε συμβατικές κατεργασίες.

Τα αποτελέσματα του δυναμικού EAM είναι συγκρίσιμα με της βιβλιογραφίας [43,44], όπου το δυναμικό EAM περιγράφει καλύτερα το μεταλλικό δεσμό των ατόμων χαλκού. Αντιθέτως, τα δυναμικά ζεύγους (LJ και Morse) δεν ενσωματώνουν την επίδραση πολλών σωμάτων. Δεν παρουσιάζουν περιβαλλοντική εξάρτηση και δε λαμβάνουν υπόψη την κατεύθυνση των δεσμών στα μέταλλα.

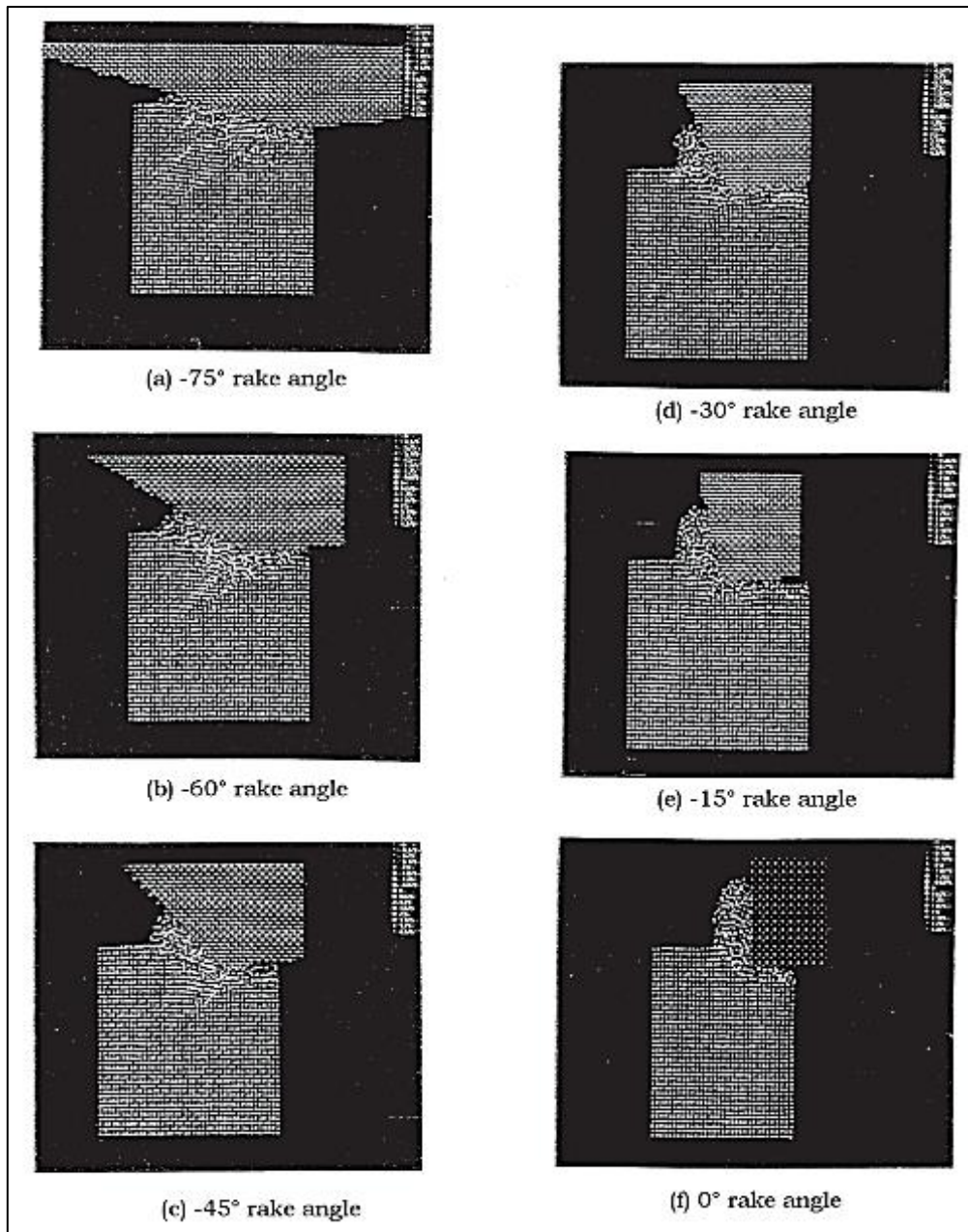
Από την παραπάνω διερεύνηση γίνεται αντιληπτό ότι το δυναμικό EAM είναι το καταλληλότερο από τα τρία δυναμικά και χρησιμοποιείται για τη μοντελοποίηση της νανοκατεργασίας χαλκού με εργαλείο διαμαντιού. Αυτό οφείλεται στο ότι το δυναμικό EAM παρέχει την καλύτερη περιγραφή του μεταλλικού δεσμού στο τεμάχιο. Επίσης οι δυνάμεις κοπής είναι οι μικρότερες και οι δυναμικές και ολικές ενέργειες είναι πιο σταθερές για το βάθος κοπής που θεωρήθηκε. Κατά συνέπεια το δυναμικό EAM θα πρέπει να προτιμάται σε

σχέση με τα δυναμικά LJ και Morse για τη μοντελοποίηση του χαλκού και άλλων εδροκεντρωμένων (FCC) μετάλλων. [49]

### 3.3.2 Επίδραση της γωνίας κοπής

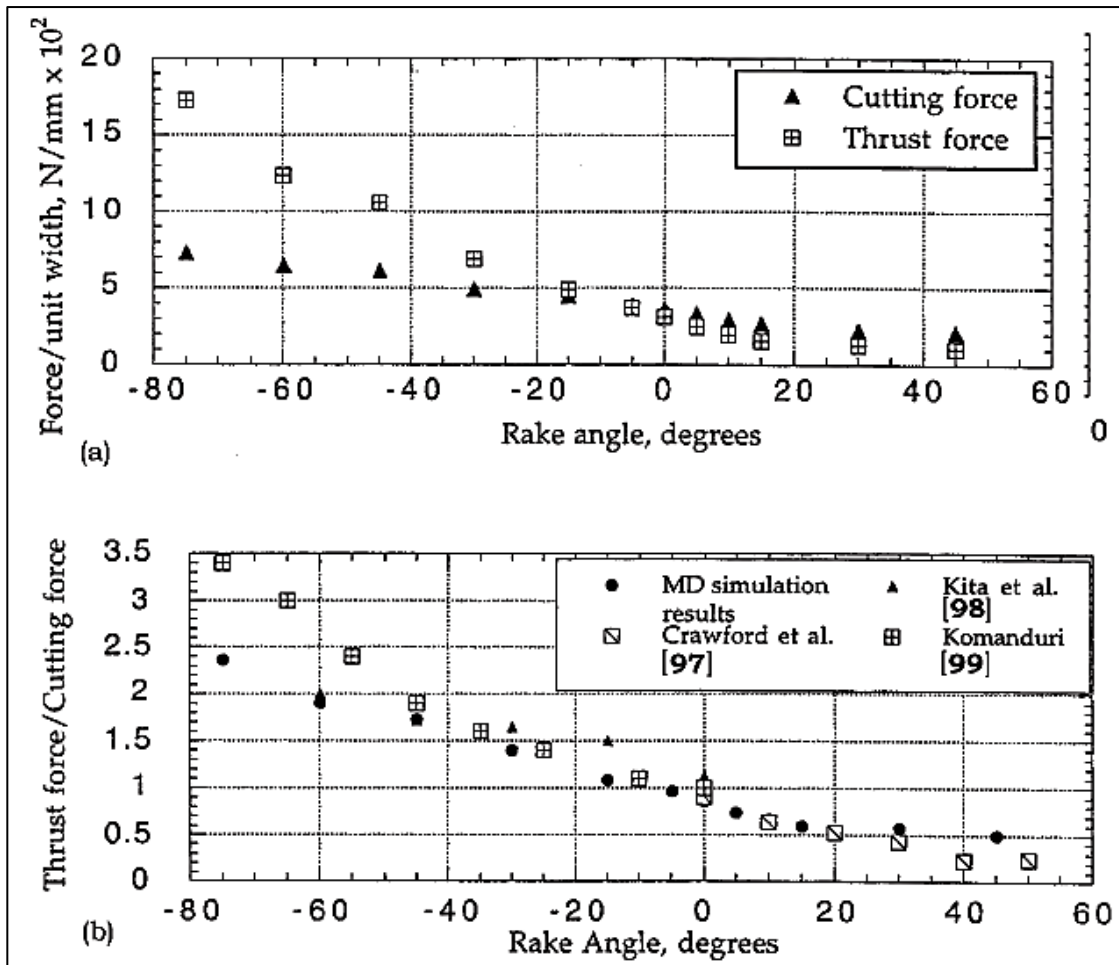
#### (α) Αρνητικές γωνίες κοπής

Ενώ οι πολύ αρνητικές γωνίες κοπής ( $>-15^\circ$ ) χρησιμοποιούνται σπάνια στις κατεργασίες, χρησιμοποιούνται κατά κανόνα στη λείανση. Ο Hahn εισήγαγε την υπόθεση του κόκκου στίλβωσης στη λείανση, σύμφωνα με την οποία κάποιοι κόκκοι εκτριβής μπορεί απλώς να τρίβουν την κατεργαζόμενη επιφάνεια, προκαλώντας αύξηση των δυνάμεων τριβής στην επιφάνεια ελευθερίας, αλλά καμία δύναμη κοπής στην επιφάνεια κοπής του εργαλείου, ενώ άλλοι κόκκοι εκτριβής συμμετέχουν στη διαδικασία διαμόρφωσης του αποβλίττου [52]. Σύμφωνα με τον Hahn, αν η διαδικασία είναι παρόμοια με το φρεζάρισμα αλλά σε μικροκλίμακα, δε θα ήταν διαφορετικός ο λόγος δυνάμεων στο φρεζάρισμα από ότι στην κοπή. Όμως, στην κοπή μετάλλων με θετική γωνία κοπής του εργαλείου, η δύναμη πρόωσης είναι σχεδόν η μισή σε σχέση με τη δύναμη κοπής, ενώ στη λείανση η δύναμη πρόωσης είναι διπλάσια της δύναμης κοπής. Ως εκ τούτου, η μελέτη των κατεργασιών με πολύ αρνητικές γωνίες κοπής εργαλείου διευκολύνει κατά πολύ την προσομοίωση της διαδικασίας λείανσης. Στις Εικόνες 3.14 a-f παρουσιάζεται η νανοκοπή του χαλκού με χρήση εξαιρετικά κοφτερού εργαλείου, άπειρης σκληρότητας σε διαφορετικές αρνητικές γωνίες κοπής του εργαλείου (0 ως  $-75^\circ$ ) [39]. Απεικονίζεται ο εξοπλισμός του αρχικού εργαλείου και του υλικού κατεργασίας, καθώς και η κίνηση του εργαλείου σε δεδομένη απόσταση με διαφορετικές γωνίες κοπής του εργαλείου. Η πλαστική παραμόρφωση μπροστά από το κοπτικό άκρο και την κατεργασμένη επιφάνεια είναι εμφανής. Εμφανή είναι επίσης τα εξής: μείωση στο μήκος του αποβλίττου (ή αύξηση στο πάχος του αποβλίττου) αύξηση της άροσης του εργαλείου στο κατεργαζόμενο υλικό και αύξηση του βαθμού παραμόρφωσης του υποστρώματος με αύξηση της αρνητικής γωνίας κοπής του εργαλείου. Επίσης, μπορούν να παρατηρηθούν η παραγωγή και η μετακίνηση των μετατοπίσεων μέσα στο υλικό κατεργασίας, καθώς και η ελαστική επαναφορά της κατεργασμένης επιφάνειας. Καθώς οι γωνίες κοπής γίνονται πιο αρνητικές, η ζώνη διάτμησης περιστρέφεται προς την κατεργασμένη επιφάνεια όπως υποδεικνύεται από τη μείωση της γωνίας διάτμησης, η οποία οφείλεται στην περιστροφή του προκύπτοντος διανύσματος δυνάμεων.



**Εικόνα 3.14:** Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής χαλκού με χρήση εξαιρετικά αιχμηρού εργαλείου άπειρης σκληρότητας σε διαφορετικές αρνητικές γωνίες κοπής (0 ως 75°) [39]

Στην Εικόνα 3.15 παρουσιάζεται η μεταβολή των δυνάμεων κοπής και των δυνάμεων πρόωσης ανά μονάδα εύρους, καθώς και ο λόγος της δύναμης πρόωσης προς τη δύναμη κοπής, ως προς τη γωνία κοπής.

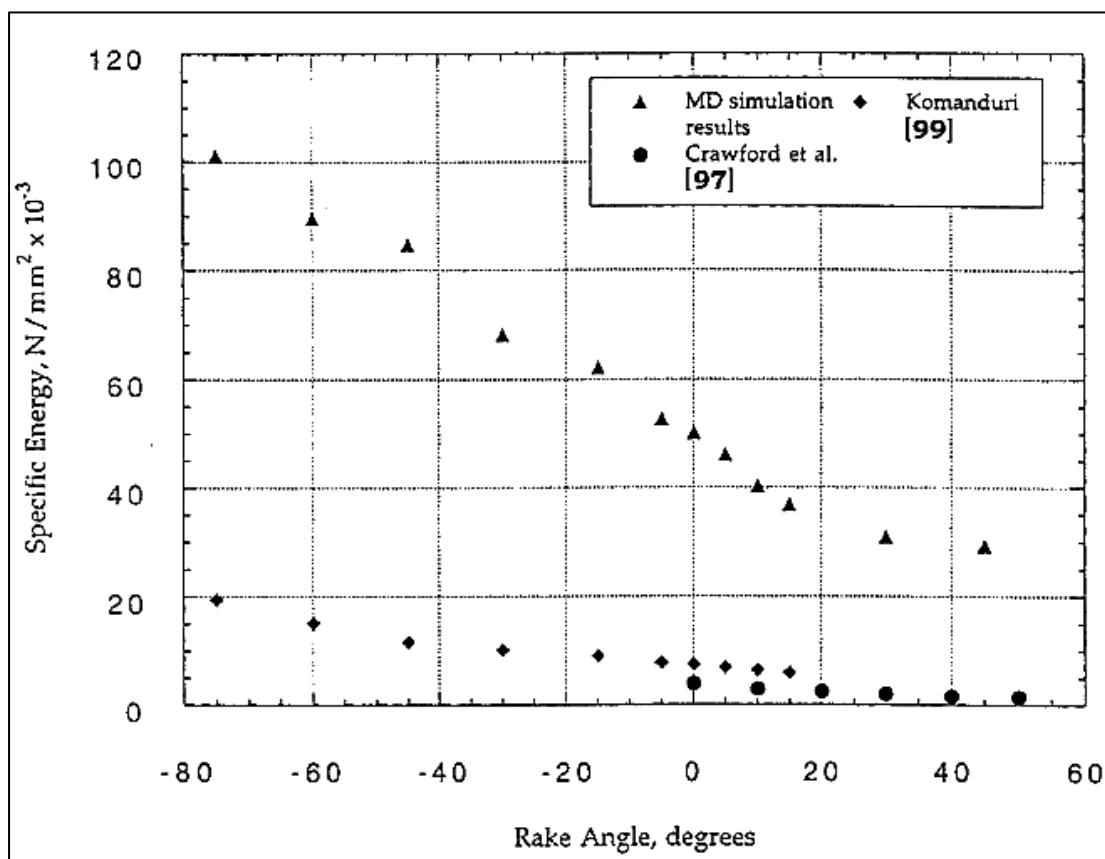


Εικόνα 3.15: Μεταβολή της δύναμης κοπής και της δύναμης πρόωσης ανά μονάδα εύρους του λόγου της δύναμης πρόωσης προς τη δύναμη κοπής με τη μεταβολή της γωνίας [39]

Στην Εικόνα 3.15b, παρουσιάζεται η υπέρθεση των αποτελεσμάτων διαφόρων ερευνητών σε διάφορες γωνίες κοπής. [39]. Μπορεί να φανεί από την Εικόνα 3.15a ότι, καθώς η γωνία κοπής μειώνεται από τις +10° προς αρνητικές γωνίες κοπής, η δύναμη πρόωσης αυξάνεται γρήγορα μέχρι τις -75°. Η δύναμη κοπής παρουσιάζει επίσης αυξητική τάση, αλλά σε σημαντικά χαμηλότερο ρυθμό. Ο λόγος της δύναμης πρόωσης προς τη δύναμη κοπής αυξάνεται επίσης, καθώς η γωνία κοπής μεταβάλλεται σε πιο αρνητικές τιμές. Σε γωνία 10°, η δύναμη πρόωσης είναι 0.6 φορές η δύναμη κοπής. Ο λόγος αυξάνεται καθώς η γωνία κοπής μεταβάλλεται σε πιο αρνητικές τιμές, για παράδειγμα σε -75°. Εκτός από πολύ αρνητικές γωνίες, όπου τα αποτελέσματα της προσομοίωσης είναι χαμηλότερα από τους συμβατικούς ελέγχους κατεργασίας, φαίνεται εν γένει ότι η συμφωνία μεταξύ των αποτελεσμάτων είναι λογική. Η ασυμφωνία αυτή μπορεί να αποδοθεί στη φθορά των εργαλείων κατά τους συμβατικούς ελέγχους με αρνητικές γωνίες κοπής, ενώ στις προσομοιώσεις ΜΔ δεν περιλαμβάνεται η φθορά του εργαλείου. Οι Marshall και Shaw [53]

βρήκαν το μέσο συντελεστή λείανσης ίσο με 0.47, ο οποίος είναι ο λόγος της δύναμης κοπής προς τη δύναμη πρόωσης για τροχό καρβιδίου του πυριτίου. Συγκρίνοντας όλες αυτές τις τιμές, φαίνεται ότι υπάρχει ομοιότητα μεταξύ της λείανσης υπερακριβείας (UPG) και της νανοκοπής σε πολύ αρνητικές γωνίες, με τη μέση γωνία κοπής στη λείανση στην περιοχή των  $-60^\circ$ .

Στην Εικόνα 3.16 παρουσιάζεται η μεταβολή της ειδικής ενέργειας (δηλ. της ενέργειας που απαιτείται για την αποβολή μιας μονάδας όγκου του υλικού κατεργασίας) με τη γωνία κοπής. Στο διάγραμμα απεικονίζονται επίσης τα πειραματικά δεδομένα του Komanduri [54] για βάθος κοπής 10 $\mu\text{m}$  και τα πειραματικά δεδομένα των Crawford και Merchant [55] για βάθος κοπής 250 $\mu\text{m}$ .



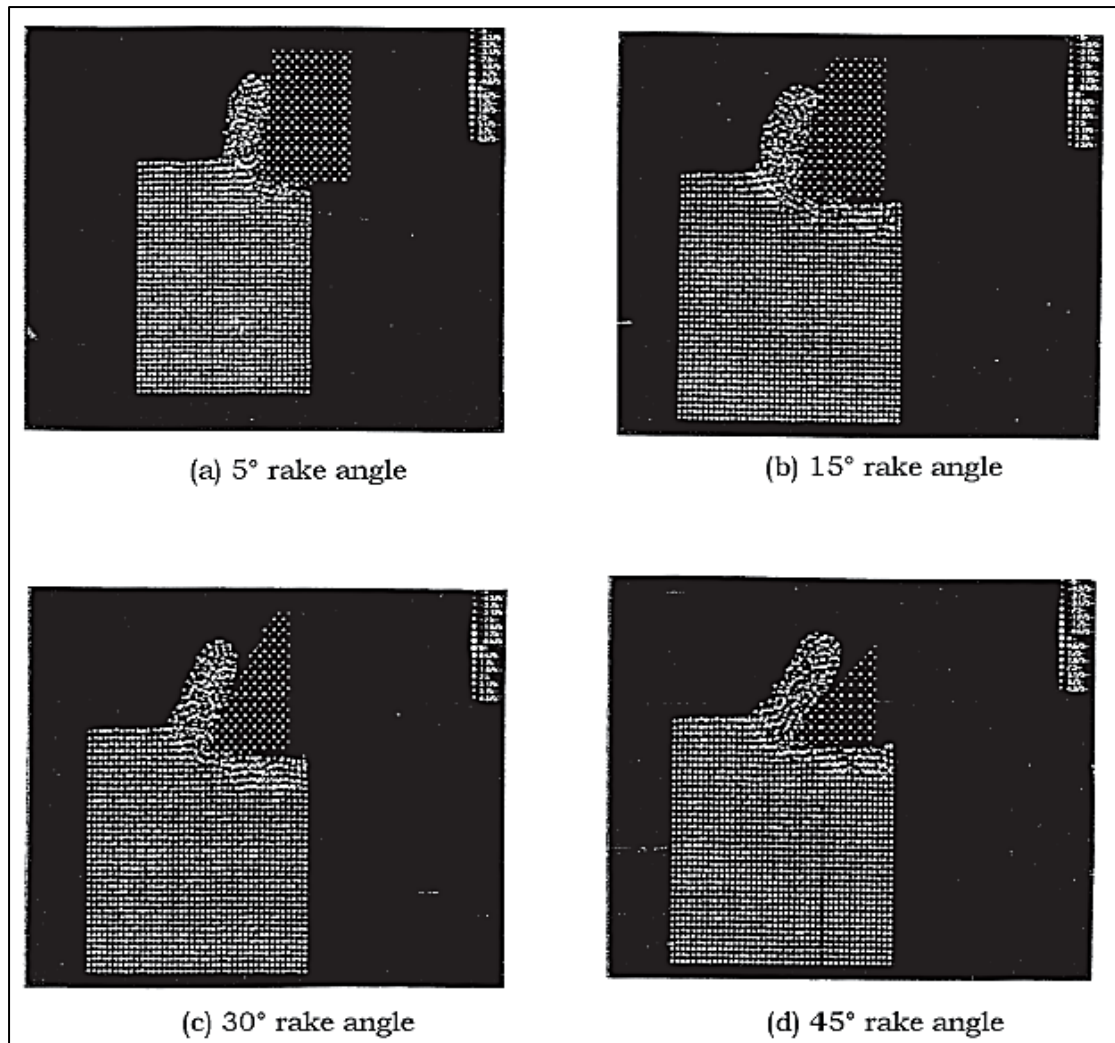
**Εικόνα 3.16:** Μεταβολή της ειδικής ενέργειας (δηλ. της ενέργειας που απαιτείται για την αποβολή μιας μονάδας όγκου του κατεργαζόμενου υλικού) ως προς τη γωνία κοπής. Παρουσιάζονται επίσης τα πειραματικά δεδομένα του Komanduri για βάθος κοπής 10 $\mu\text{m}$  και τα δεδομένα των Crawford και Merchant για βάθος κοπής 250 $\mu\text{m}$  [16]

Μπορεί να παρατηρηθεί μια αύξηση στην ειδική ενέργεια με μείωση της γωνίας κοπής, παρόμοια με αυτή που αναφέρεται από άλλους ερευνητές, αλλά με πολύ μεγαλύτερο ρυθμό. Επίσης, είναι φανερό ότι υπάρχει καλή συμφωνία

μεταξύ των πειραμάτων του Komanduri [54] και των Crawford και Merchant [55] σε ένα μεγάλο εύρος γωνιών. Όμως, η ειδική ενέργεια στη νανοκοπή, βρέθηκε να είναι σημαντικά υψηλότερη ( περίπου μια τάξη μεγέθους μεγαλύτερη) σε σύγκριση με τη συμβατική κοπή. Η αύξηση της ειδικής ενέργειας αποδίδεται στην επίδραση κλίμακας, η οποία έχει αναφερθεί και από πολλούς άλλους ερευνητές στο παρελθόν [56-58]. Καθώς το υλικό κατεργασίας στις προσομοιώσεις ΜΔ νανοκοπής είναι αρχικά χωρίς σημειακά, γραμμικά ή επιφανειακά ελαττώματα, και το μέγεθος του υπό εξέταση κατεργαζόμενου υλικού είναι μόνο μερικά νανόμετρα σε κάθε πλευρά του παραλληλεπίπεδου, ένα τέτοιο συμπέρασμα είναι εύλογο.

### *(β) Θετικές γωνίες κοπής*

Καθώς δίνεται πλέον ιδιαίτερη έμφαση στις «ξηρές κατεργασίες» (κατεργασία χωρίς ή με ελάχιστη χρήση υγρού κοπής) ή στις «πράσινες κατεργασίες», μια σημαντική μείωση στην ενέργεια (πλαστική παραμόρφωση στην πρωτεύουσα ζώνη διάτμησης και τριβή στη διεπιφάνεια αποβλίπτου-εργαλείου) μπορεί να μεταφραστεί απευθείας σε σημαντική μείωση της θερμοκρασίας του εργαλείου και κατά συνέπεια σε αύξηση της διάρκειας ζωής του εργαλείου. Παρόλο που τα πιο πυρίμαχα εργαλεία, όπως οι νανοεπενδύσεις πολλών στρωμάτων [59], ή τα προηγμένα κεραμικά μπορεί να επιτρέπουν την κατεργασία χωρίς τη χρήση υγρού κοπής, η γεωμετρία πολύ θετικών γωνιών μπορεί να επεκτείνει περαιτέρω τη διάρκεια ζωής του εργαλείου ή να βελτιώσει την παραγωγικότητα, αποβάλλοντας το υλικό σε υψηλότερες ταχύτητες και με μικρότερη κατανάλωση ενέργειας. Οι πολύ θετικές γωνίες κοπής (~45°) είναι ιδιαίτερα ελκυστικές για την κατεργασία μη-σιδηρούχων υλικών χαμηλής αντοχής, όπως το αλουμίνιο, όπου η φθορά του εργαλείου ή η δύναμη του εργαλείου δεν μας ενδιαφέρουν [59]. Μια μελέτη προσομοίωσης ΜΔ διεξήχθη με θετικές γωνίες κοπής εργαλείου, ώστε να διερευνηθεί το εύρος της μείωσης στις δυνάμεις και η συνεπακόλουθη μείωση ενέργειας ως προς τη γωνία κοπής. Στην Εικόνα 3.17 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων ΜΔ σε διάφορες θετικές γωνίες κοπής (μέχρι 45°) [39].



**Εικόνα 3.17:** Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής του χαλκού με χρήση εξαιρετικά αιχμηρού εργαλείου άπειρης σκληρότητας σε διάφορες θετικές γωνίες κοπής εργαλείου (μέχρι 45°) [39]

Παρουσιάζεται αύξηση στη γωνία διάτμησης, μείωση στο μήκος επαφής εργαλείου- αποβλίττου ( μειωμένη τριβή) και καμπύλωση του αποβλίττου με αύξηση στη θετική γωνία κοπής. Στην Εικόνα 3.17a παρουσιάζεται μείωση σχεδόν 50% στη δύναμη κοπής και συνεπακόλουθη μείωση στην ενέργεια κοπής με χρήση θετικών γωνιών κοπής εργαλείου (~45°) , σε σύγκριση με εργαλείο μηδενικής γωνίας κοπής.

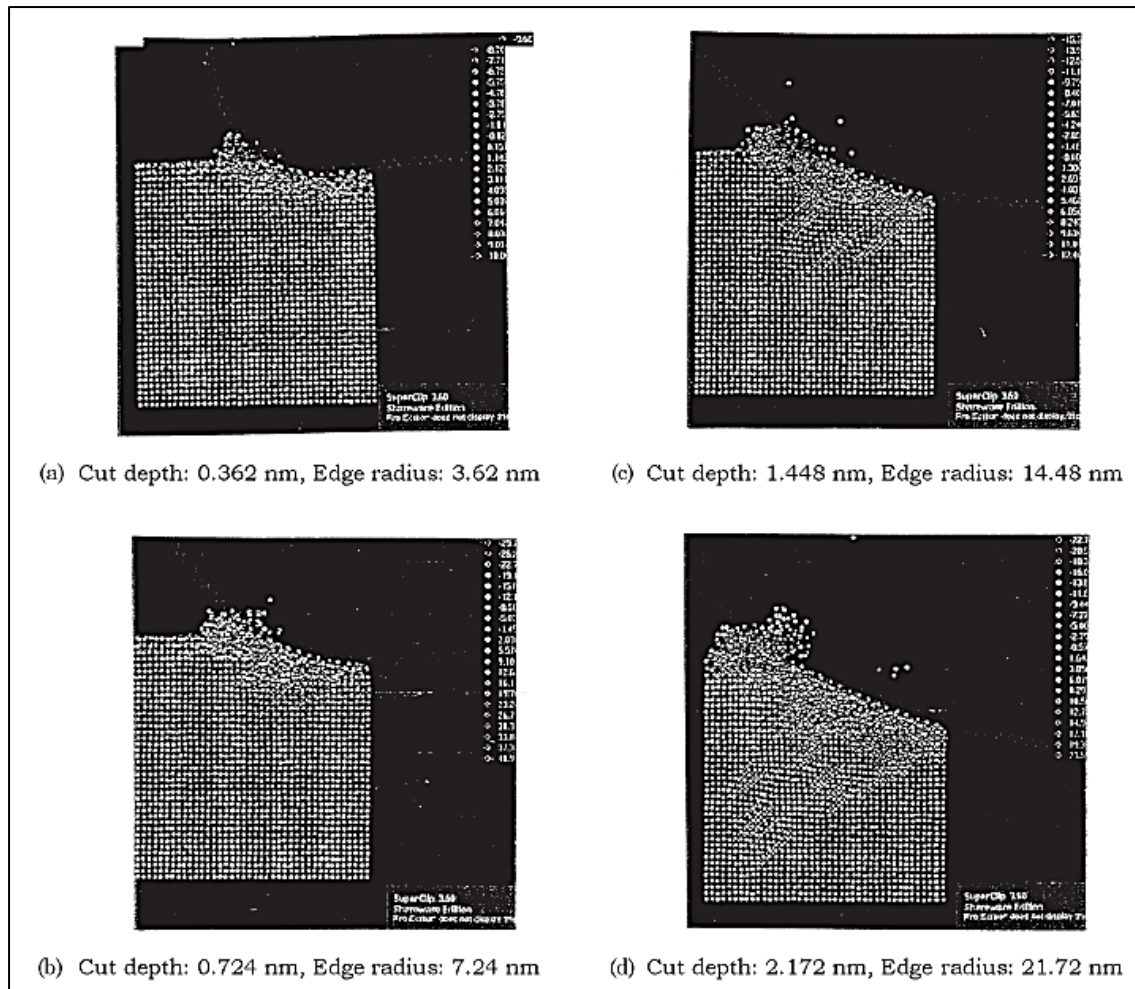
### 3.3.3 Επίδραση της ακτίνας ακμής και του βάθους κοπής στις νανοκοπές

Προσομοιώσεις ΜΔ των νανοκοπών διεξάχθησαν με εργαλεία με διαφορετικές ακτίνες ακμής,  $r$  (1.207-21.72 nm), και βάθη κοπής,  $d$  (0.362-2.172 nm)

διατηρώντας το λόγο  $d/r$  σταθερό (στα 0.1, 0.2 και 0.3) [60]. Έχουν ερευνηθεί διακυμάνσεις όσον αφορά τις δυνάμεις κοπής και ώθησης, το λόγο δυνάμεων, την ειδική ενέργεια και την υποστρωματική παραμόρφωση σε σχέση με τη γεωμετρία του εργαλείου και τα βάθη κοπής. Με βάση αυτές τις μελέτες βρέθηκε ότι οι παράμετροι κοπής έχουν σημαντική επίδραση στις παραμέτρους εξόδου, όπως στις δυνάμεις, στο λόγο δυνάμεων και στην ειδική ενέργεια.

Οι Εικόνες 3.18 a-d δείχνουν τα αποτελέσματα προσομοίωσης ΜΔ για λόγο  $d/r$  της τάξεως 0.1 και για διαφορετικά βάθη κοπής (0.362-2.172 nm) [60]. Η Εικόνα 3.18 δείχνει αύξηση στην έκταση της πλαστικής παραμόρφωσης κατά μήκος της γραμμής του εργαλείου καθώς και ευρεία υποστρωματική παραμόρφωση με αύξηση στο βάθος κοπής για συγκεκριμένο λόγο  $d/r$ . Επίσης μπορούν να παρατηρηθούν μετατοπίσεις ειδικά σε μεγαλύτερα βάθη κοπής. Αυτό οφείλεται στη δημιουργία επιπρόσθετων μετατοπίσεων λόγω τη αλληλεπίδρασης με τις δημιουργηθείσες μετατοπίσεις. Χάρη στην απουσία εγγενών ατλειών στο υλικό κατεργασίας που χρησιμοποιήθηκαν κατά την μοντελοποίηση της προσομοίωσης ΜΔ, όπως ρωγμές, εγκλείσματα και όρια των κόκκων, τα μόνα εμπόδια στην κίνηση των μετατοπίσεων είναι η αλληλεπίδραση των μετατοπίσεων που οδηγούν στη δημιουργία επιπρόσθετων μετατοπίσεων. Επίσης ο αριθμός των μετατοπίσεων αυξάνεται με την αύξηση του βάθους κοπής για συγκεκριμένο λόγο βάθους κοπής προς την ακτίνα ακμής του εργαλείου  $d/r$ , λόγω της αύξησης της δύναμης που δημιουργεί αυτές τις μετατοπίσεις. Τέλος, η έκταση της παραμόρφωσης του υποστρώματος φαίνεται να μειώνεται με μείωση του λόγου  $d/r$ , ενώ από την άλλη το παραχθέν απόβλιττο αυξάνεται ως επακόλουθο της αύξησης του λόγου  $d/r$ . Αυτό υποδεικνύει αύξηση της δυνατότητας κοπής και μείωση στην εκτριβή μεταξύ του εργαλείου κοπής και του υλικού κατεργασίας όσο αυξάνεται ο λόγος  $d/r$ . Επίσης, για δοθέν βάθος κοπής, αύξηση στην ακτίνα ακμής του εργαλείου (π.χ. μικρότεροι λόγοι  $d/r$ ) μειώνει τη δημιουργία του αποβλίττου. Αυτό συμβαίνει γιατί για μεγαλύτερες τιμές ακτίνας ακμής, η γωνία κοπής του εργαλείου θα είναι πιο αρνητική και επακόλουθα δεν θα συμβάλλει σε μεγάλο βαθμό στη διαδικασία διαμόρφωσης του αποβλίττου. Επιπρόσθετα, για δοθέν λόγο  $d/r$ , η αύξηση στην ακτίνα της ακμής αυξάνει την αρνητική γωνία κοπής με συνέπεια η ζώνη διάτμησης να περιστρέφεται προς την κατεύθυνση του υλικού κατεργασίας.



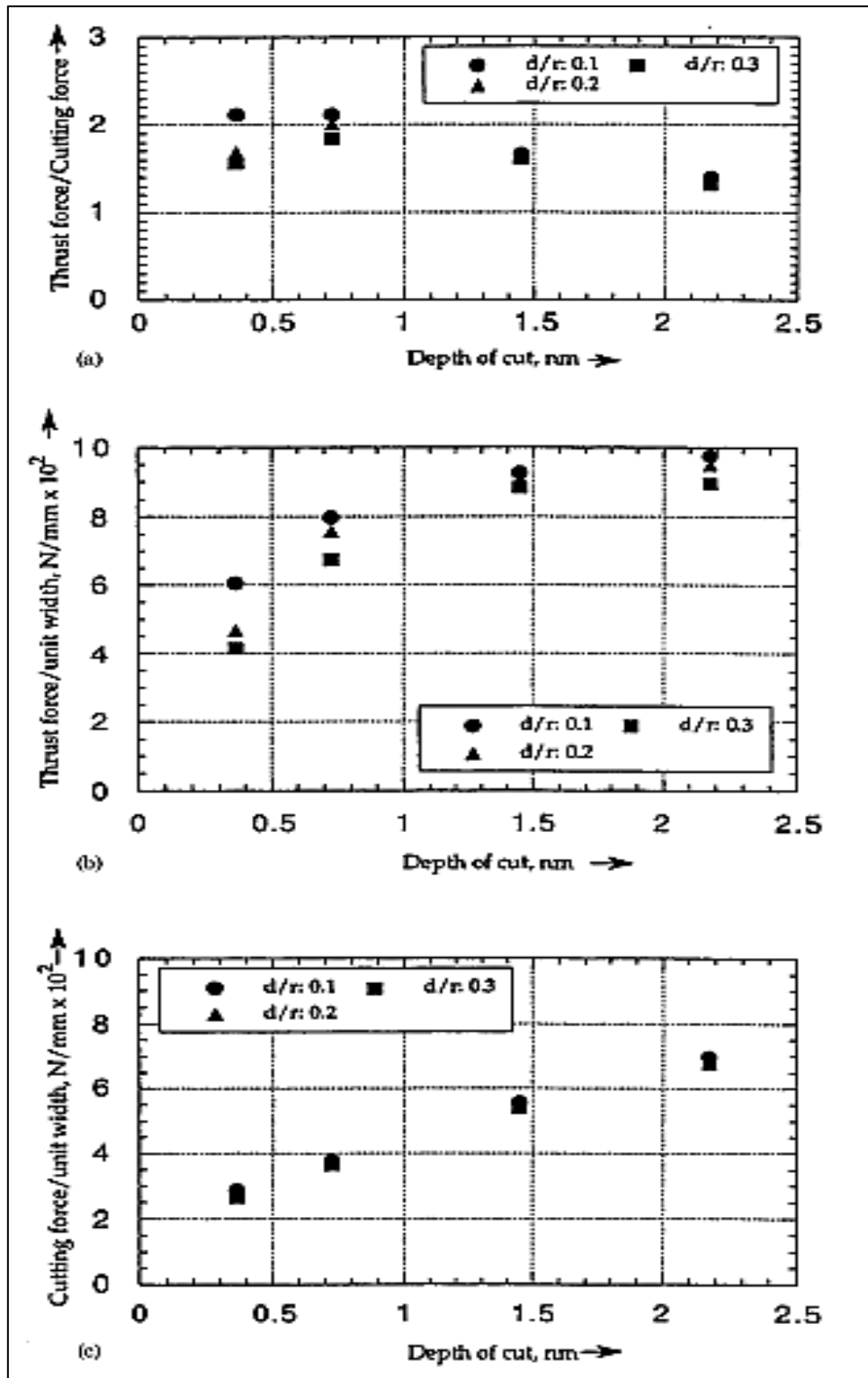


**Εικόνα 3.18:** Προσομοιώσεις ΜΔ νανοκοπής με εργαλείο στρογγυλού άκρου για λόγο  $d/r$  0.1 και διάφορα βάθη κοπής (0.362-2.172 nm) [60].

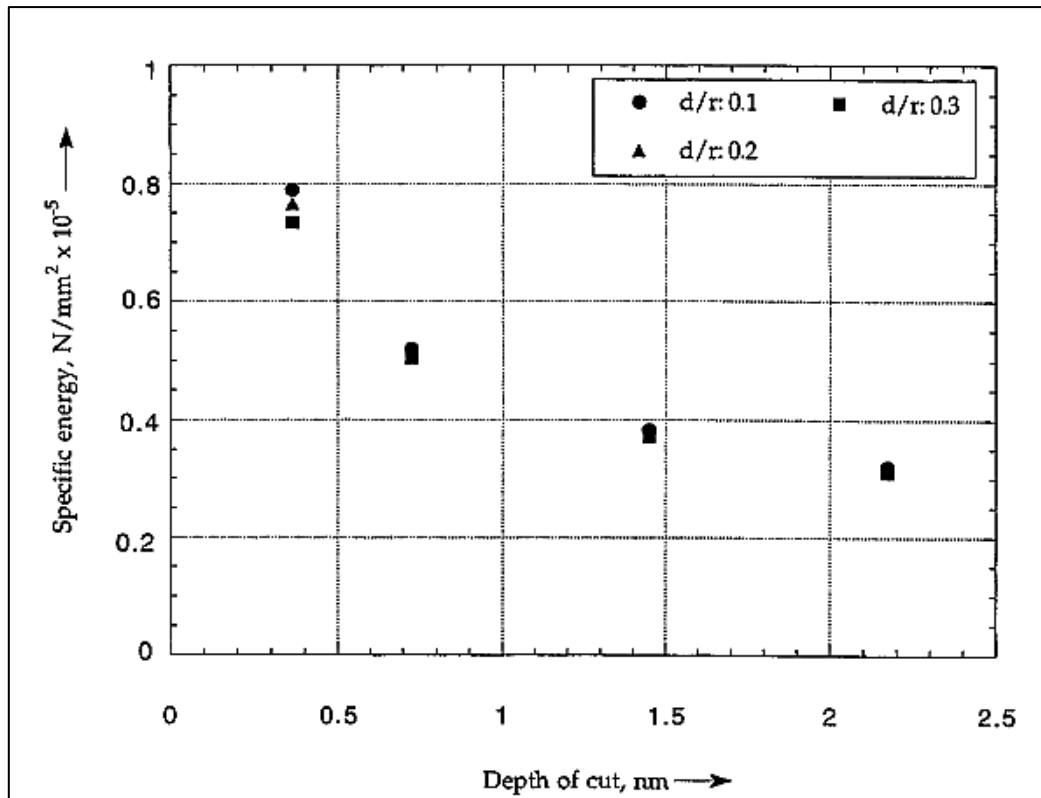
Οι Εικόνες 3.19a-c δείχνουν τη διακύμανση των δυνάμεων κοπής και πρόωσης, και το λόγο δύναμης πρόωσης προς κοπής σε σχέση με την ακτίνα ακμής του εργαλείου για διαφορετικά βάθη κοπής [60]. Ενώ η δύναμη κοπής φαίνεται να μεταβάλλεται γραμμικά με το βάθος κοπής, η δύναμη πρόωσης φαίνεται να μεταβάλλεται με ταχύ ρυθμό αρχικά και στη συνέχεια κορεννύεται για μεγαλύτερα βάθη κοπής. Επίσης, ο λόγος δύναμης πρόωσης προς δύναμης κοπής είναι ίδιος όπως και στη λείανση ή στην κατεργασία με εργαλεία με μεγάλες αρνητικές γωνίες κοπής.

Παρατηρείται ότι ενώ οι δυνάμεις αυξάνονται με την ακτίνα ακμής εργαλείου ειδικά για μικρότερες ακτίνες ακμής (αυτό είναι πιο εμφανές στην περίπτωση της δύναμης πρόωσης σε σχέση με τη δύναμη κοπής), γίνονται πιο ανεξάρτητες για μεγαλύτερες ακτίνες ακμής του εργαλείου. Αυτό συμβαίνει γιατί για μεγάλες τιμές της ακτίνας ακμής του εργαλείου, η ισοδύναμη

αρνητική γωνία κοπής είναι μεγάλη και μεταβάλλεται σε μικρό μόνο εύρος, ενώ σε χαμηλότερες τιμές η ακτίνα ακμής του εργαλείου μεταβάλλεται εντονότερα. Επίσης, για μεγαλύτερες ακτίνες ακμής, ο λόγος δύναμης πρόωσης προς κοπής παραμένει σταθερός, ενώ για μικρότερες ακτίνες ακμής του εργαλείου, ο λόγος αυξάνεται για μεγαλύτερες ακτίνες (βλέπε Εικόνα 3.19c). Ο λόγος μειώνεται με αύξηση του βάθους κοπής, το οποίο καταδεικνύει μεγαλύτερη κοπή και λιγότερη πλαστική παραμόρφωση του υποστρώματος του υλικού κατεργασίας. Η Εικόνα 3.20 δείχνει τη διακύμανση της ειδικής ενέργειας με το βάθος κοπής για διαφορετικούς λόγους  $d/r$  δείχνοντας αύξηση της ειδικής ενέργειας για μειούμενα βάθη κοπής (επίδραση κλίμακας). Πρέπει να επισημανθεί ότι για να μελετηθεί η επίδραση του βάθους κοπής για εργαλεία διαφόρων ακτινών ακμής, είναι απαραίτητη η διατήρηση σταθερού λόγου  $d/r$ . Για παράδειγμα, η δύναμη κοπής φαίνεται να αυξάνεται με το βάθος κοπής ανεξάρτητα με το λόγο  $d/r$ . [60]



Εικόνα 3.19: Διακύμανση της δύναμης κοπής και της δύναμης πρόωσης, και του λόγου πρόωσης προς κοπή, με την ακτίνα ακμής του εργαλείου για διαφορετικά βάθη κοπής [60]



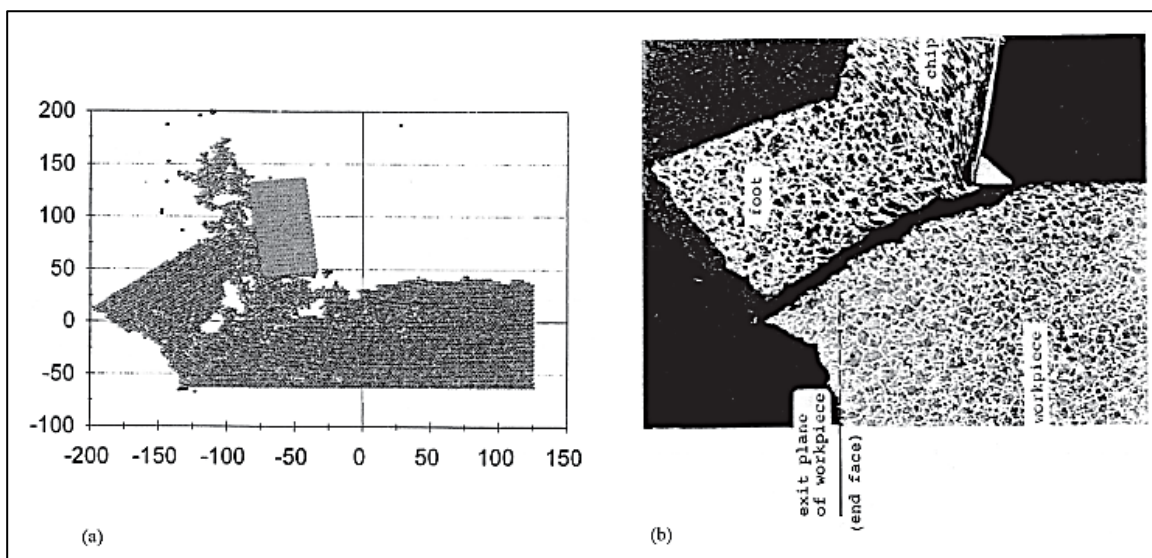
**Εικόνα 3.20:** Διακύμανση της ειδικής ενέργειας με το βάθος κοπής για διαφορετικούς λόγους  $d/r$ , όπου φαίνεται αύξηση της ειδικής ενέργειας για μειούμενα βάθη κοπής (επίδραση κλίμακας) [60]

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

### 3.4 Μοντελοποίηση αστοχίας εξόδου της κατεργασίας

Η δημιουργία προεξοχών εμφανίζεται στην έξοδο κατά την κατεργασία λόγω έλλειψης ελαστικότητας του υλικού κατεργασίας. Ο Pekelharing [61] ήταν από τους πρώτους που ανέφερε την ύπαρξη αυτού του μηχανισμού στην αστοχία εξόδου, όπου το τέλος της κοπής προσομοιάζει ένα πόδι. Ο Lucca διεξήγαγε μια συστηματική πειραματική μελέτη της αστοχίας εξόδου σε διάφορα υλικά υπό διαφορετικές συνθήκες κατεργασίας χρησιμοποιώντας φωτογραφίες υψηλής ταχύτητας [63]. Τα αντικείμενα αυτής της μελέτης ήταν η κατανόηση του μηχανισμού δημιουργίας προεξοχών και η ανάπτυξη μεθόδων μείωσης του φαινομένου στο υλικό κατεργασίας. Παρόμοιες μελέτες μπορούν να διεξαχθούν με προσομοίωση ΜΔ. Στην πράξη, τα οριακά άτομα στην πλευρά της εξόδου του υλικού κατεργασίας αφαιρέθηκαν ώστε να δημιουργηθούν

συνθήκες «ανελαστικού περιορισμού». Η Εικόνα 3.21a είναι μια προσομοίωση ΜΔ και η Εικόνα 3.21b είναι οπτική μικρογραφία πειραματικών αποτελεσμάτων, τα οποία δείχνουν αξιοσημείωτη ομοιότητα [62]. Αυτή η μελέτη μπορεί να επεκταθεί για εξέταση της αστοχίας εξόδου για διάφορα υλικά κατεργασίας, γωνίες κοπής και βάθος κοπής.

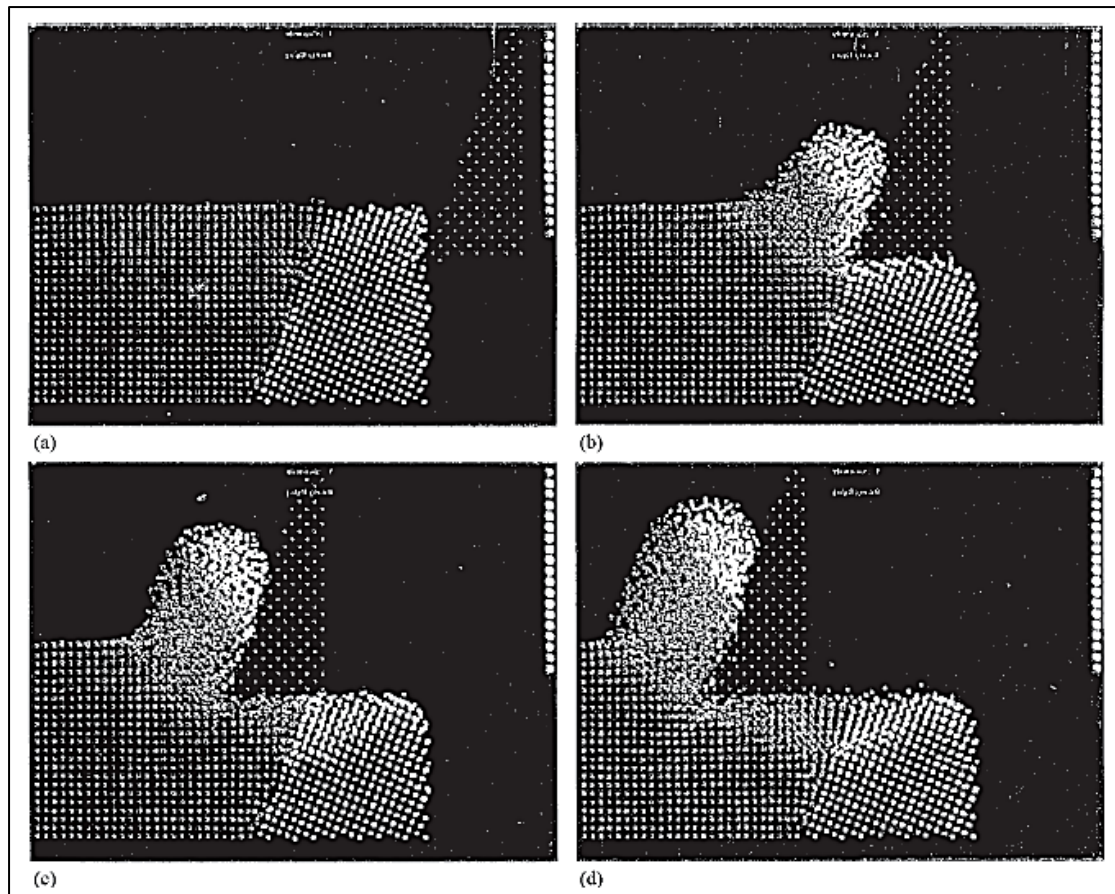


**Εικόνα 3.21:** (a) Προσομοίωση ΜΔ για την αστοχία εξόδου κατά τη νανοκοπή. (b) Οπτική μικρογραφία των πειραματικών αποτελεσμάτων της αστοχίας εξόδου κατά τις συμβατικές συνθήκες κατεργασίας [62]

### 3.5 Προσομοίωση για γνωστή δομή ατελειών σε υλικό κατεργασίας

Ένα από τα επιχειρήματα εναντίον της προσομοίωσης κατεργασίας ΜΔ είναι ότι μπορεί να εφαρμοστεί μόνο σε ιδανικά υλικά, π.χ. καθαρά μονοκρυσταλλικά μέταλλα χωρίς προεξοχές.

Εξάλλου είναι κοινή πρακτική, οι προσομοιώσεις ΜΔ μετά την εισαγωγή κάποιων ατελειών, όπως τα όρια των κόκκων, να εμφανίζονται ρωγμές και σωματίδια δεύτερης φάσης στο υλικό κατεργασίας [64-66]. Οι Εικόνες 3.22a-d δείχνουν προσομοίωση διπλού κρυστάλλου. Η Εικόνα 3.22a δείχνει την αρχική θέση των ορίων των κόκκων, η Εικόνα 3.22b δείχνει τις συνθήκες που υφίστανται όταν το εργαλείο φτάνει στα όρια των κόκκων και οι Εικόνες 3.22c και d δείχνουν την παραμόρφωση που υφίσταται το υλικό κατεργασίας εμπρός καθώς και κάτω από το εργαλείο κατά την κοπή [67].



**Εικόνα 3.22:** Προσομοίωση ΜΔ για διπλό κρύσταλλο. (a) αρχική θέση των ορίων των κόκκων του υλικού κατεργασίας (πριν την κοπή)· (b) στάδιο κατά το οποίο το εργαλείο έχει φτάσει τα όρια των κόκκων· (c) και (d) στάδια στα οποία φαίνεται η παραμόρφωση εμπρός και κάτω από το εργαλείο κατά την κοπή [16].

### 3.6 Νανοκοπή δομών νανοκλίμακας

Η νέα γενιά προηγμένων υλικών που αναπτύσσεται θα φέρει νανοδομές χωρίς την ύπαρξη ατελειών. Θα ήταν χρήσιμο να προσομοιωθεί η κατεργασία αυτών των υλικών μιας και δεν υπάρχουν διαθέσιμες πληροφορίες για κάποια άλλη τεχνική, θεωρία ή πείραμα. Είναι επίσης δυνατό να προσομοιωθεί η απόδοση της δομής του υπερπλέγματος, που προς το παρόν θεωρείται ως επίστρωση σε κοπτικά εργαλεία υψηλής απόδοσης. Τα όρια των κόκκων μπορεί να παίζουν σημαντικό ρόλο στα νανοκρυσταλλικά υλικά μιας και οι αριθμοί τους αυξάνονται ραγδαία. Τα θέματα που πρέπει να ληφθούν υπόψη σε αυτά τα υλικά είναι το πάχος των ορίων των κόκκων σε σχέση με το μέγεθος των κόκκων.

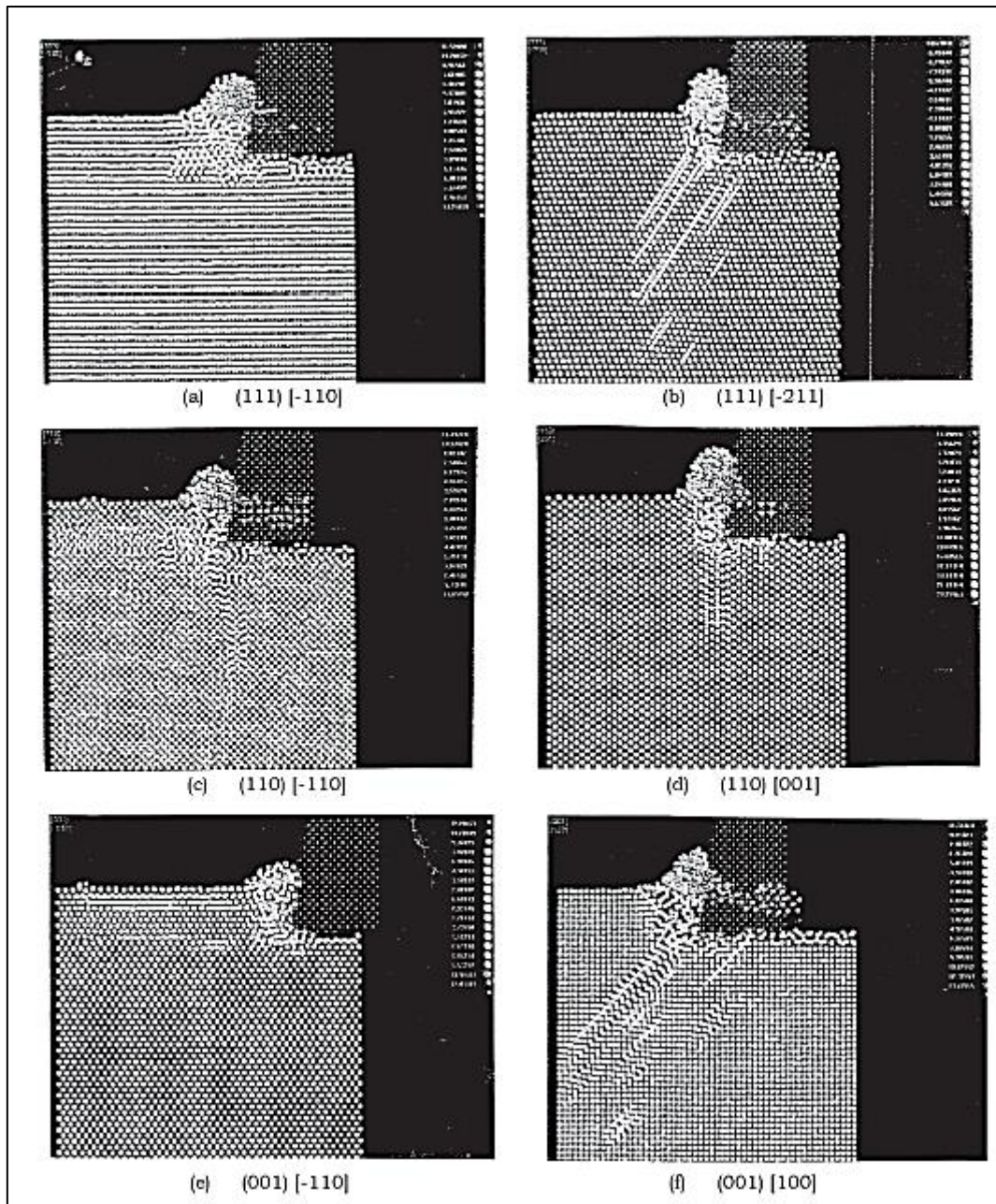
### **3.7 Υλικό κατεργασίας γνωστού κρυσταλλικού προσανατολισμού**

#### **3.7.1 Επίδραση κρυσταλλικού προσανατολισμού**

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

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

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



**Εικόνα 3.23:** Αποτελέσματα προσομοίωσης ΜΔ σε διάφορα στάδια νανοκοπής σε διαφορετικούς συνδυασμούς προσανατολισμών και κατευθύνσεις κοπής [68]

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

Για να μελετηθεί η ανισοτροπική συμπεριφορά του μονοκρυσταλλικού αλουμινίου, διεξήχθησαν προσομοιώσεις ΜΔ για διαφορετικούς προσανατολισμούς και κατευθύνσεις κοπής. Οι Εικόνες 3.23a -f παρουσιάζουν τα αποτελέσματα ΜΔ σε διάφορα στάδια νανοκοπής για διαφορετικούς

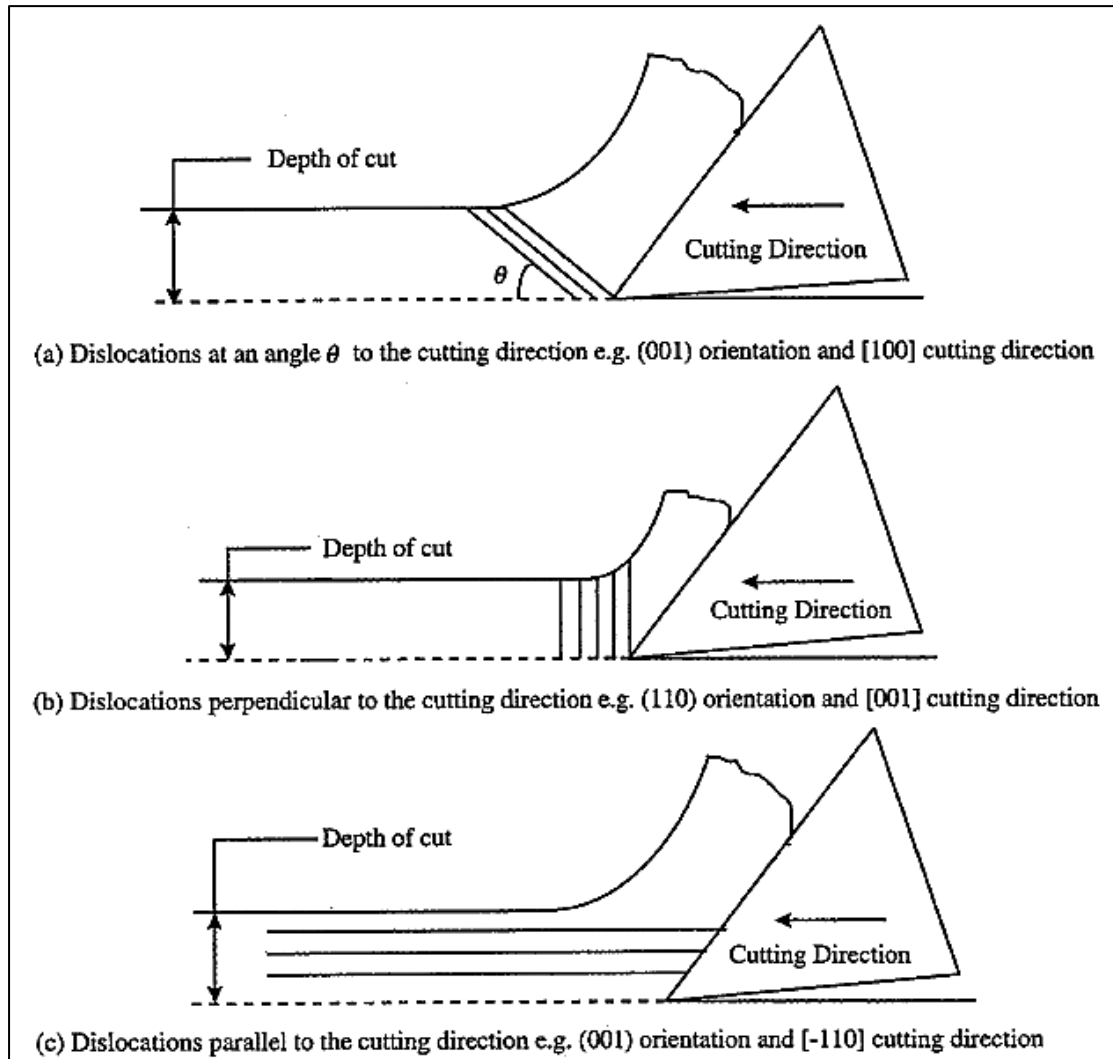


προσανατολισμούς και κατευθύνσεις κοπής (111, 110, 001, 110 211, 100). Για παράδειγμα για τον προσανατολισμό (111), οι κατευθύνσεις κοπής που χρησιμοποιήθηκαν είναι (110) και (211), για τον προσανατολισμό (110) είναι (110) και (011), και για τον προσανατολισμό (001) οι κατευθύνσεις είναι (110) και (100).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

Όταν ένας κρύσταλλος αλουμίνιου προσανατολίζεται στο επίπεδο (111), και κόβεται κατά την κατεύθυνση (110), οι μετατοπίσεις βρέθηκε ότι δημιουργούνται κατά μήκος της κατεύθυνσης κοπής. Συνεπώς, η επακόλουθη υποστρωματική παραμόρφωση καθώς ο κρύσταλλοι αναδιοργανώνονται χάρη στην ελαστική επαναφορά τους. Εν αντιθέσει, όταν ο κρύσταλλος προσανατολίστηκε στο επίπεδο (110) αλλά κόπηκε προς την κατεύθυνση (001), οι μετατοπίσεις δημιουργήθηκαν κανονικά προς την κατεύθυνση κοπής, ενώ η παραμόρφωση έμπροσθεν του εργαλείου βρέθηκε να περιλαμβάνει περισσότερο συμπίεση παρά διάτμηση. Στην περίπτωση του επιπέδου (110) και κατεύθυνσης κοπής (110), οι μετατοπίσεις βρέθηκαν ότι είναι παράλληλες ή κάθετες στην κατεύθυνση κοπής. Εν αντιθέσει, για την περίπτωση προσανατολισμού (001) και κατεύθυνσης (100), βρέθηκαν εκτεταμένες

μετατοπίσεις σε  $\sim 45^\circ$  προς την κατεύθυνση κοπής. Παρόμοια, για περίπτωση προσανατολισμού (111) και κατεύθυνσης κοπής (211), παρατηρήθηκαν κινήσεις μετατοπίσεων σε  $\sim 60^\circ$  προς την κατεύθυνση κοπής. [95]

Η Εικόνα 3.24a-c δείχνει σχηματικά τρεις τρόπους πλαστικής παραμόρφωσης στη ζώνη διάτμησης της νανοκοπής .



**Εικόνα 3.24:** Σχηματική απεικόνιση τριών τρόπων πλαστικής παραμόρφωσης στη ζώνη διάτμησης της νανοκοπής ενός μονοκρυστάλλου σε διαφορετικούς κρυσταλλικούς προσανατολισμούς και κατευθύνσεις κοπής [68]

Στην Εικόνα 3.24a παρουσιάζεται η περίπτωση της διαδικασίας σχηματισμού αποβλίττου , στην οποία ο προσανατολισμός του επιπέδου διάτμησης είναι παρόμοιος με αυτόν που χρησιμοποιείται συνήθως στη συμβατική κατεργασία πολυκρυσταλλικών υλικών και συμβατικά βάθη κοπής. Στην περίπτωση

προσανατολισμού (001) και κατεύθυνσης κοπής (100), η διαδικασία σχηματισμού του αποβλίττου και ο προσανατολισμός της γωνίας διάτμησης βρέθηκαν παρόμοια με τη συμβατική διάτμηση μπροστά από το υλικό του εργαλείου όπως φαίνεται στην Εικόνα 3.24a. Ως εκ τούτου, συνίσταται να χρησιμοποιείται ο συνδυασμός αυτός για την προσομοίωση της κατεργασίας, εάν πρέπει να επιλεγεί μόνο ένας προσανατολισμός. Όμως, σε ορισμένους άλλους προσανατολισμούς κρυσταλλικού προσανατολισμού και κατεύθυνσης κοπής, οι γωνίες διάτμησης βρέθηκαν πολύ μεγαλύτερες από  $45^\circ$ . Για παράδειγμα, στην περίπτωση του προσανατολισμού (110) και της κατεύθυνσης (001), βρέθηκε ότι παράγονται μετατοπίσεις σε θετικές γωνίες ως προς την κατεύθυνση της κοπής, δηλ. το υλικό παραμορφώνεται περιφερειακά της κατεύθυνσης κοπής. Κατά συνέπεια, η γωνία διάτμησης είναι μεγαλύτερη από  $60^\circ$ . Αυτός ο τρόπος παραγωγής μετατοπίσεων και πλαστικής παραμόρφωσης της ζώνης διάτμησης φαίνεται σχηματικά στην Εικόνα 3.24b. Αντιθέτως, όταν η κατεργασία λαμβάνει χώρα κατά τον προσανατολισμό (001) και την κατεύθυνση (100), βρέθηκε ότι οι μετατοπίσεις παράγονται παράλληλα προς την κατεύθυνση της κοπής. Κατά συνέπεια, το υλικό παραμορφώνεται παράλληλα προς την κατεύθυνση κοπής και η γωνία διάτμησης είναι πολύ μικρότερη από τις  $45^\circ$ . Αυτός ο τρόπος παραγωγής μετατοπίσεων και πλαστικής παραμόρφωσης της ζώνης διάτμησης φαίνεται σχηματικά στην Εικόνα 3.24c. Αυτές οι παραλλαγές στον τρόπο παραμόρφωσης της ζώνης διάτμησης δεν ήταν ανιχνεύσιμες παλαιότερα, καθώς οι περισσότερες δοκιμές πραγματοποιούνταν σε πολυκρυσταλλικό αλουμίνιο. Παρόλο που ορισμένοι ερευνητές ανέφεραν γωνίες διάτμησης  $>45^\circ$ , δεν μπορούσε να δοθεί καμία εξήγηση για τη συμπεριφορά μονοκρυσταλλικών υλικών. Αυτό οφείλεται στη δυσκολία της επί τόπου παρατήρησης της κοπής με άλλες πειραματικές τεχνικές, ενώ η προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής επιτρέπει την επί τόπου παρατήρηση. [69,70]

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

του προσανατολισμού (001) και της κατεύθυνσης κοπής (100), παρουσιάστηκε εκτεταμένη μετατόπιση στις  $45^\circ$  ως προς την κατεύθυνση κοπής. Παρόμοια, στην περίπτωση (111) προσανατολισμού και κατεύθυνσης κοπής (211), η κίνηση των μετατοπίσεων παρατηρήθηκε στις  $60^\circ$  ως προς την κατεύθυνση κοπής.

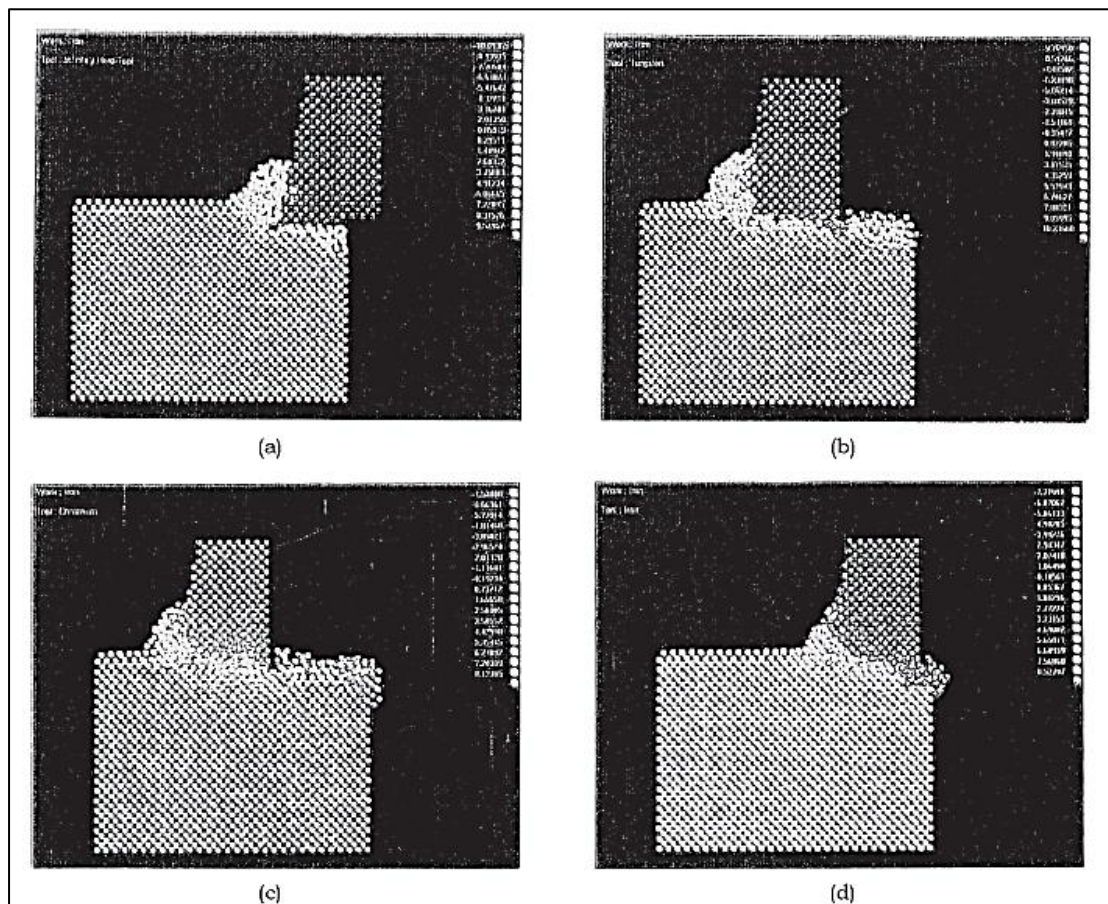
### **3.8 Ελάχιστη σκληρότητα εργαλείου ως προς το υλικό κατεργασίας**

Το 1825 ο Mohs [71] ανέπτυξε μια κλίμακα σκληρότητας για γεωλογικές εφαρμογές, η οποία φέρει το όνομά του, επιλέγοντας προσεκτικά δέκα ορυκτά σε αύξουσα σειρά σκληρότητας χάραξης, έτσι ώστε κάθε ορυκτό να μπορεί να χαράξει όσα βρίσκονται στην κλίμακα κάτω από αυτό, αλλά δε μπορεί να χαράξει όσα βρίσκονται πάνω από αυτό. Τα πρότυπα που επιλέχθηκαν ήταν όλα ανόργανα ψαθυρά υλικά. Κατά συνέπεια, κατά τη διάρκεια της χάραξης, δεν υφίστανται μεγάλη πλαστική παραμόρφωση, παρόλο που η διαφορική σκληρότητα μπορεί να είναι μικρή. Αυτό δεν περιγράφει την περίπτωση των μετάλλων, καθώς η πλαστική παραμόρφωση κυριαρχεί της ψαθυρότητας. Στην κοπή, το εργαλείο έχει γενικά λιγότερο από το μισό της περικλείουσας γωνίας σε σύγκριση με το τεμάχιο κατεργασίας. Κατά συνέπεια, κατά τη διάρκεια της κοπής, το εργαλείο μπορεί να παραμορφωθεί πλαστικά πολύ περισσότερο από το τεμάχιο, αν η διαφορική σκληρότητα δεν είναι σημαντική, όπως θα φανεί στη συνέχεια.

Ο Tabor [70] ανέπτυξε μια κλίμακα σκληρότητας χάραξης για τα μέταλλα, όπου το χαρακτηριστικό υλικό πρέπει να είναι τουλάχιστον 20% σκληρότερο από το υλικό κατεργασίας. Ο Richardson [73] απέδειξε πειραματικά ότι η σκληρότητα του υλικού χάραξης πρέπει να είναι τουλάχιστον 25% υψηλότερη, αν πρόκειται να χαραχθεί μέταλλο σε οποιοδήποτε βαθμό. Όμως, δεν έχει δοθεί θεωρητική εξήγηση στα παρατηρούμενα αποτελέσματα. Ο Tabor [74] έδειξε ότι η κλίμακα Mohs παρέχει τιμές της σκληρότητας χάραξης οι οποίες αντιστοιχούν σε σκληρότητες διείσδυσης, όπου κάθε βήμα στην κλίμακα Mohs αντιστοιχεί σε περίπου 60% αύξηση στην σκληρότητα διείσδυσης. Η σημασία της ελάχιστης τιμής σκληρότητας στην κοπή, τη χάραξη και την εκτριβή, χρειάζεται εκ νέου αξιολόγηση. Για παράδειγμα, τι συμβαίνει όταν το εργαλείο είναι μόνο 20% σκληρότερο από το υλικό κατεργασίας; Ποια είναι η φύση του σχηματισμού αποβλίττου υπό αυτές τις συνθήκες; Επίσης, προκύπτουν και άλλα ερωτήματα όσον αφορά το άλλο άκρο της κλίμακας. Για παράδειγμα, υπάρχει διαφορά στη φύση του σχηματισμού αποβλίττου, στην παραμόρφωση του υποστρώματος και στην παραμόρφωση του εργαλείου, όταν

χρησιμοποιούνται εργαλεία διαφορετικής σκληρότητας (τουλάχιστον 1.2 φορές τη σκληρότητα του υλικού κατεργασίας); Αυτό είναι πιο κρίσιμο στο φινίρισμα των ημιαγωγικών υλικών, καθώς μπορεί να επηρεάσουν την ποιότητα επιφάνειας του υλικού κατεργασίας. Δεν είναι πάντα εφικτό να βρίσκονται υλικά εργαλείου, τα οποία να είναι 1.2 φορές σκληρότερα από το κατεργαζόμενο υλικό. Όμως, αυτό δεν αποτελεί περιορισμό για την προσομοίωση ΜΔ, καθώς μπορεί να επιλεγεί ένα αυθαίρετο υλικό οποιασδήποτε σκληρότητας.

Οι προσομοιώσεις ΜΔ πραγματοποιήθηκαν σε σίδηρο με εργαλείο άπειρης σκληρότητας, εργαλείο βολφραμίου, εργαλείο χρωμίου και εργαλείο σιδήρου. Οι σκληρότητες του βολφραμίου, του χρωμίου και του σιδήρου είναι 435,125 και 82 kg/mm<sup>2</sup>, αντίστοιχα [75].



**Εικόνα 3.25:** Προσομοίωση ΜΔ ναοκοπής σιδήρου: (a) με εργαλείο άπειρης σκληρότητας, (b) εργαλείο βολφραμίου, (c) εργαλείο χρωμίου και (d) εργαλείο σιδήρου [16]

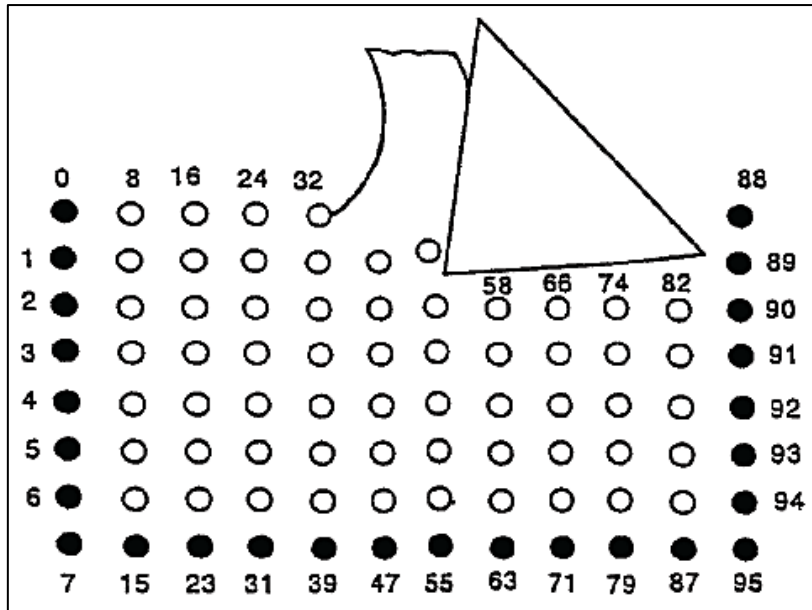
Όπως αναμένεται, δεν υπάρχει φθορά του εργαλείου με κανονικό σχηματισμό αποβλίττου με εργαλείο άπειρης σκληρότητας (βλ. Εικόνα 3.25a). Με εργαλείο βολφραμίου, το οποίο είναι επίσης σκληρό, η φθορά του εργαλείου

είναι ελάχιστη με λογικό σχηματισμό αποβλίττου να λαμβάνει χώρα μπροστά από το τεμάχιο (βλ. Εικόνα 3.25b). Με το χρώμιο, το οποίο είναι ελαφρώς σκληρότερο από το σίδηρο (βλ. Εικόνα 3.25c) και το σίδηρο (βλ. Εικόνα 3.25d), ο οποίος έχει ίδια σκληρότητα με το υλικό κατεργασίας (σίδηρος), η φθορά του εργαλείου είναι σημαντική και ο σχηματισμός αποβλίττου αναποτελεσματικός. Λόγω της μικρότερης περικλείουσας γωνίας του εργαλείου, τα άτομα του εργαλείου παραμορφώνονται και εκτοπίζονται. Παρόμοιες μελέτες μπορούν να γίνουν και με εργαλείο διαμαντιού. Ως εκ τούτου, πολλά από τα προβλήματα αυτά μπορούν να λυθούν μέσω της προσομοίωσης ΜΔ. Για παράδειγμα, είναι εφικτό να ληφθεί ένα εργαλείο ίδιας σκληρότητας (ή και μαλακότερο) από το υλικό κατεργασίας, για να διερευνηθεί η φύση της παραμόρφωσης τόσο στο εργαλείο όσο και στο υλικό κατεργασίας. Υπάρχει επίσης ανάγκη αναθεώρησης της διαφορικής σκληρότητας που απαιτείται μεταξύ του εργαλείου και του τεμαχίου, όταν το εργαλείο είναι είτε όλκιμο είτε ψαθυρό.

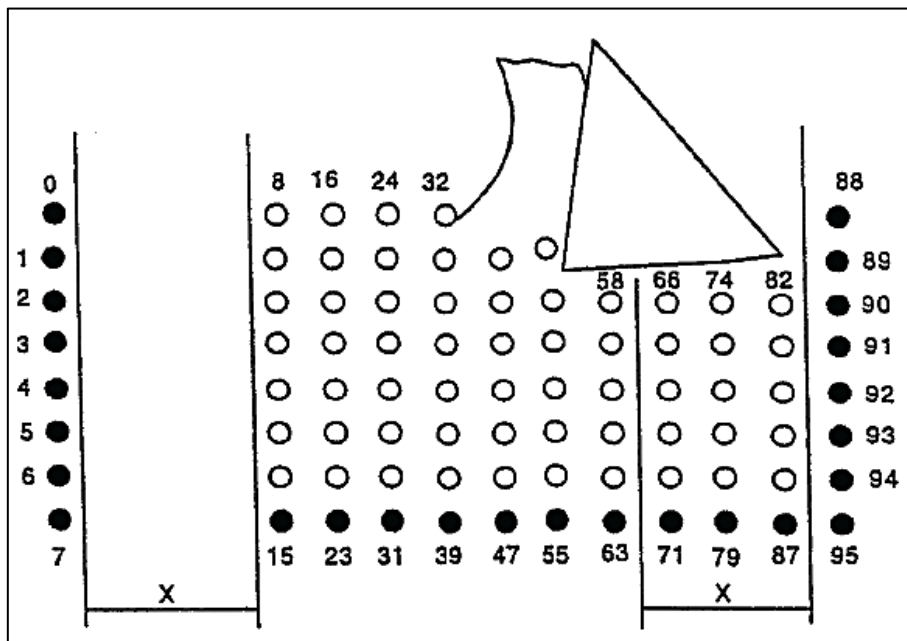
## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: Παραδείγματα Προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής σε Κατεργασίες

### 4.1 Μηχανική της νανοκοπής σε μη-σιδηρούχα υλικά

Οι Stowers *et al.* [2] πραγματοποίησαν προσομοίωση ΜΔ στο χαλκό με χρήση δισδιάστατου δυναμικού πολλών ατόμων. Για πρώτη φορά, συγκρίθηκαν τα αποτελέσματα της προσομοίωσης με πειραματικά αποτελέσματα κατεργασιών υπερακριβείας και η συμφωνία μεταξύ τους ήταν αξιοσημείωτη. Οι Belak *et al.* [3] πραγματοποίησαν προσομοιώσεις πάνω στην παραμόρφωση δύο μετάλλων σε επίπεδο νανοκλίμακας (αργίλιο και χαλκός) και του πυριτίου. Για το χαλκό και τον άργυρο, χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό πολλών σωμάτων και ένα μοντέλο της τάξης του δεσμού χρησιμοποιήθηκε για να αναπαραστήσει τις ομοιοπολικές δυνάμεις μεταξύ των ατόμων του πυριτίου και μεταξύ του εργαλείου διαμαντιού και του εργαζόμενου τεμαχίου από πυρίτιο. Οι προσομοιώσεις έγιναν σε ταχύτητα 100m/s. Αναφέρθηκε ότι για την περίπτωση των μετάλλων, το απόβλιττο παρέμεινε κρυσταλλικό, με περιοχές αναδιάταξης μπροστά από το άκρο του εργαλείου και στην επιφάνεια του αποβλίττου μπροστά από το εργαλείο, μέσω μιας ζώνης έντονης διάτμησης στην πρωτεύουσα περιοχή παραμόρφωσης. Στην περίπτωση του πυριτίου, βρέθηκε ότι ένα στρώμα πυριτίου μεταφέρθηκε στο εργαλείο, τόσο στην επιφάνεια κοπής όσο και στην επιφάνεια ελευθερίας. Αναφέρθηκε επίσης ότι τα άτομα του πυριτίου στο απόβλιττο και στα πρώτα στρώματα της νέας επιφάνειας εμφανίσθηκαν άμορφα.

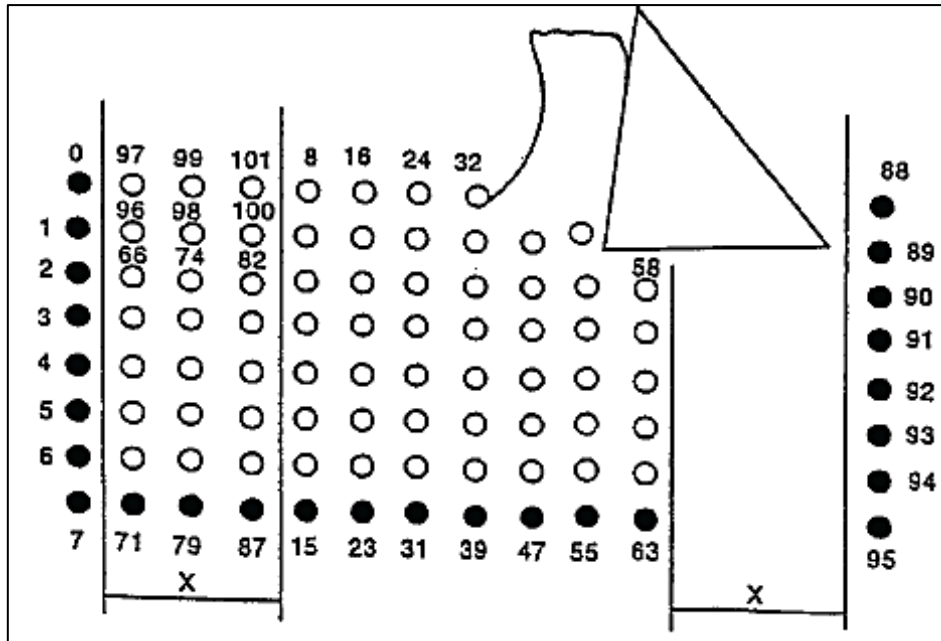


**Εικόνα 4.1:** Απεικόνιση του υλικού κατεργασίας και του εργαλείου, όταν το εργαλείο έχει διανύσει μια δεδομένη απόσταση μέσα στο υλικό [76]

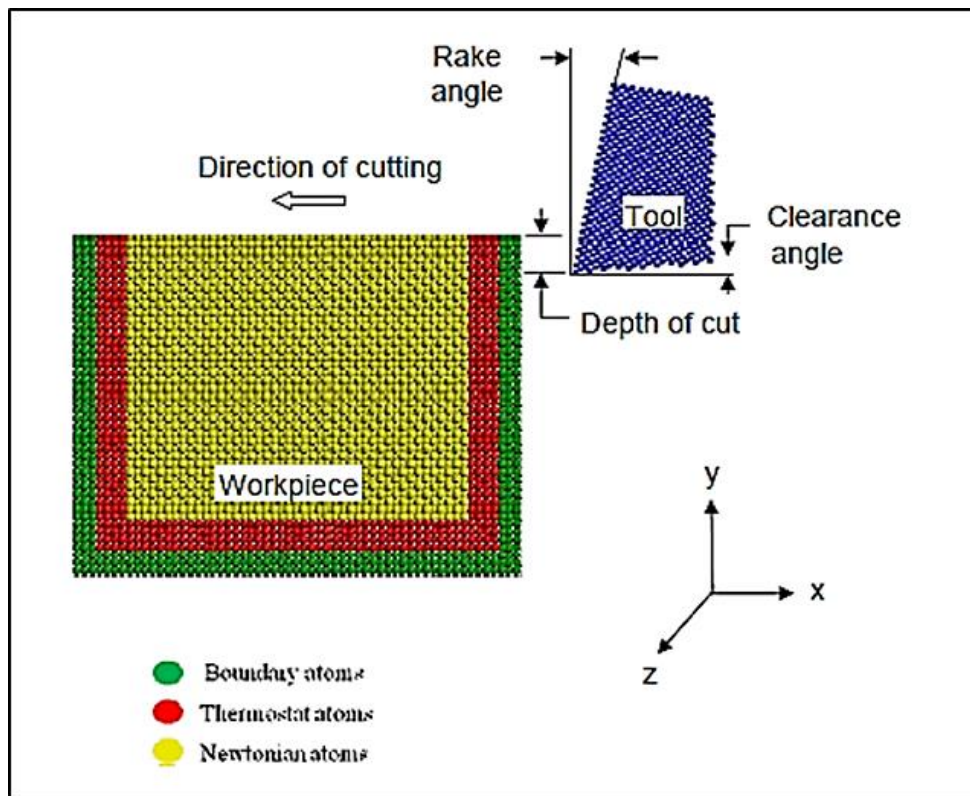


**Εικόνα 4.2:** Απεικόνιση του υλικού κατεργασίας μετά την απομάκρυνση των οριακών στρωμάτων κατά μήκος της ακμής προσβολής σε μια απόσταση  $x$  ίση με τον αριθμό των στρωμάτων που αντικαθίστανται από την ακμή εκφυγής [76]





Εικόνα 4.3: Απεικόνιση του υλικού κατεργασίας μετά την αντικατάσταση νέων ατόμων στον ακμή προσβολής [76]

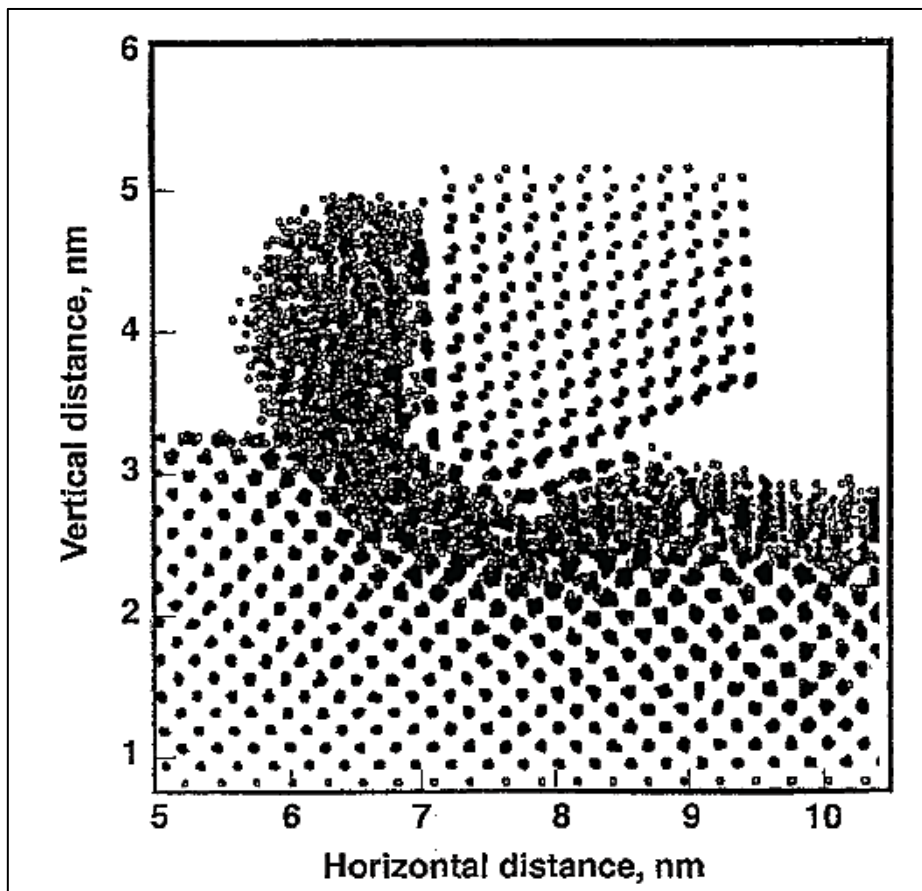


Εικόνα 4.4: Απεικόνιση της νανοκοπής σε προσομοίωση ΜΔ [34]

Οι Ikawa *et al.* [5] πραγματοποίησαν ατομιστικές αναλύσεις σε κοπές νανοκλίμακας ώστε να διερευνήσουν το ελάχιστο πάχος αποβλίττου κοπής για

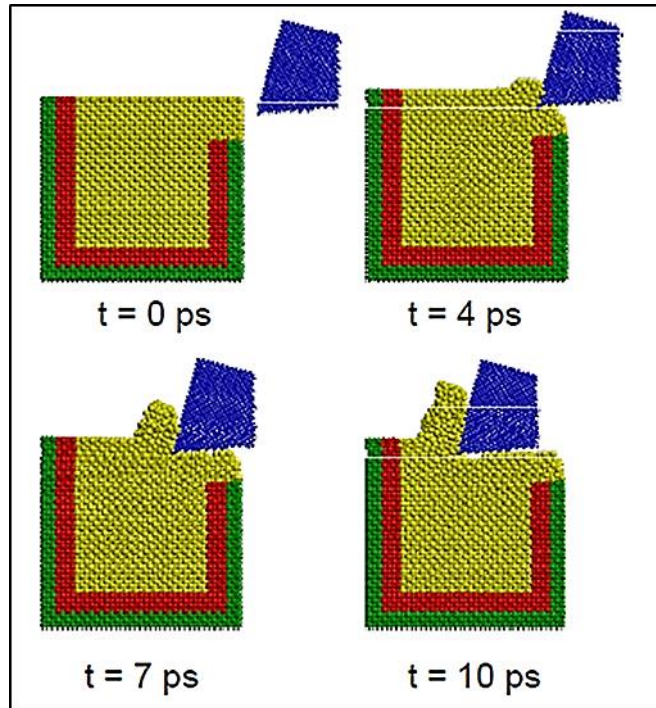
δεδομένη ακτίνα ακμής υπό βέλτιστη απόδοση του εργαλείου κατεργασίας. Εξήχθη το συμπέρασμα ότι το ελάχιστο πάχος επηρεάζεται από την αλληλεπίδραση εργαλείου- τεμαχίου σε ένα βαθμό, αλλά επηρεάζεται ισχυρότερα από την οξύτητα της κοπτικής ακμής και ότι το ελάχιστο πάχος κοπής ήταν της τάξης του 0.1 της ακτίνας της κοπτικής ακμής. Οι Shimada *et al.* [6] διεξήγαν προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής και μοριακής στατικής στο χαλκό με χρήση του δυναμικού Morse ως συνάρτηση δυναμικού. Συγκρίνοντας τη μορφολογία του αποβλίττου, τις δυνάμεις κοπής και την ειδική ενέργεια τόσο στην προσομοίωση ΜΔ όσο και στα πειράματα, βρέθηκε ικανοποιητική συμφωνία. Αναφέρθηκε επίσης μια επίδραση μεγέθους, δηλαδή γρήγορη αύξηση στην ειδική ενέργεια κοπής ως προς το λόγο του πάχους του άκοπου αποβλίττου ως προς την ακτίνα ακμής. Στη συνέχεια επέκτειναν τη συγκεκριμένη εργασία [7], ώστε να διερευνήσουν τη μέγιστη ακρίβεια που μπορεί να επιτευχθεί στη μικροκοπή των υλικών κατεργασίας από αλουμίνιο και χαλκό, μέσω της προσομοίωσης ΜΔ ενός υποθετικά τέλει εργαλείου. Αναμενόταν ότι το ελάχιστο πάχος κοπής ήταν 1 nm ή λιγότερο. Η ελάχιστη τραχύτητα και το βάθος του παραμορφωμένου στρώματος στην κατεργασμένη επιφάνεια ήταν ~ 0.5 και ~ 5nm αντίστοιχα. Οι Shimada *et al.* [8] επέκτειναν τη μελέτη αυτή για να συγκρίνουν μονοκρυσταλλικά και πολυκρυσταλλικά υλικά κατεργασίας χαλκού. Κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι στην κοπή του μονοκρυσταλλικού χαλκού, η επιφάνεια κατεργασίας ήταν ελεύθερη από παραμένουσες τάσεις λόγω ελαστικής επαναφοράς, αλλά στην περίπτωση του πολυκρυσταλλικού υλικού υπήρχε ένα παραμορφωμένο στρώμα λόγω μετατοπίσεων στα όρια των κόκκων.

Οι Inamura *et al.* [12] διεξήγαν δισδιάστατη επίπεδη κοπή του χαλκού ( $6a \times 34a \times 2a$ , όπου  $a$  είναι η σταθερά του πλέγματος) με χρήση ψευδοστατικής ατομικής προσομοίωσης (δυναμικό Morse), κατά την οποία υπολογίζεται μόνο η θέση ελάχιστης ενέργειας σε κάθε βήμα της θέσης του εργαλείου. Ανέφεραν ότι ο ρυθμός αποβολή ενέργειας στην πλαστική παραμόρφωση κάτω από το υλικό στη νανοκοπή είναι μεγάλος σε σύγκριση με την κοπή μακροκλίμακας. Απέδειξαν ότι 52% της ολικής ενέργειας αποβάλλεται ως πλαστική παραμόρφωση στην πρωτεύουσα ζώνη, 42% στη διεπιφάνεια αποβλίττου – εργαλείου και μόνο 6% για την παραγωγή της επιφάνειας. Οι Inamura *et al.* [13] προχώρησαν περαιτέρω την εργασία αυτή ώστε να συσχετίσουν τη νανοκοπή με την κοπή σε μακροκλίμακα. Ανέπτυξαν μια μέθοδο μετασχηματισμού από ένα ατομικό μοντέλο σε συνεχές, διακριτοποιώντας πρώτα το συνεχές μοντέλο μέσω της μεθόδου των Πεπερασμένων Στοιχείων και αντιστοιχίζοντας μια συνάρτηση βαρύτητας, που να προσαρμόζεται στο διακριτοποιημένο πεδίο. Μελέτησαν το επίπεδο τάσεων τόσο στην πρωτεύουσα όσο και στη δευτερεύουσα ζώνη παραμόρφωσης.

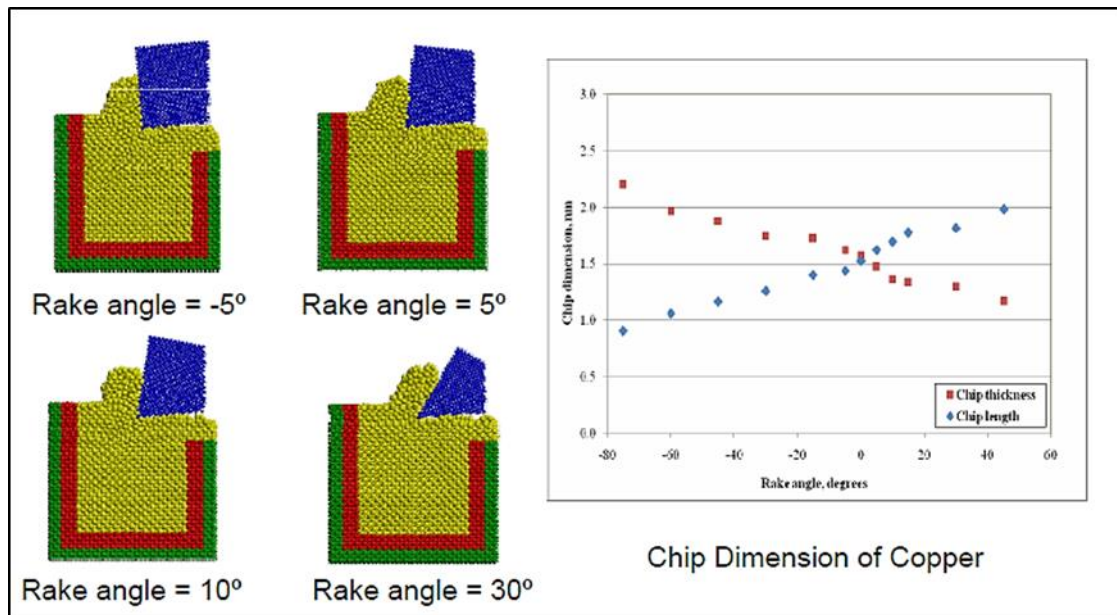


Εικόνα 4.5: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής του πυριτίου, η οποία δείχνει την πιθανότητα το υλικό του πυριτίου στο απόβλιτο και στα πρώτα στρώματα της νέας επιφάνειας να είναι άμορφο [3]

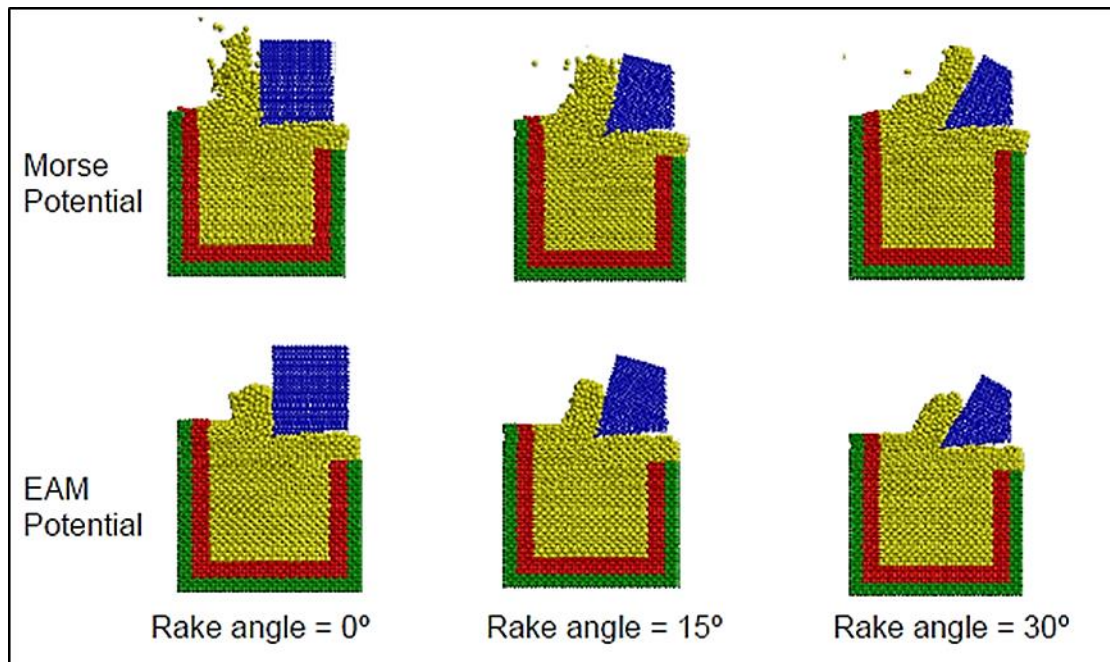
Στο σημείο αυτό θα παρουσιαστούν αποτελέσματα από τη βιβλιογραφία [34] από προσομοίωσης Μοριακής Δυναμικής σε χαλκό και αλουμίνιο.



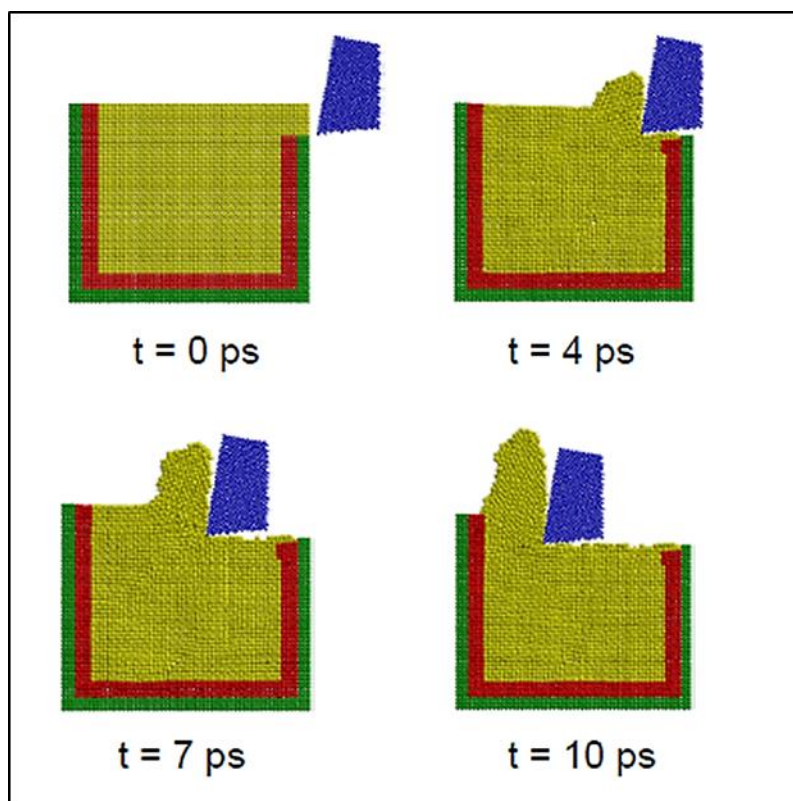
Εικόνα 4.6: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής χαλκού [34]



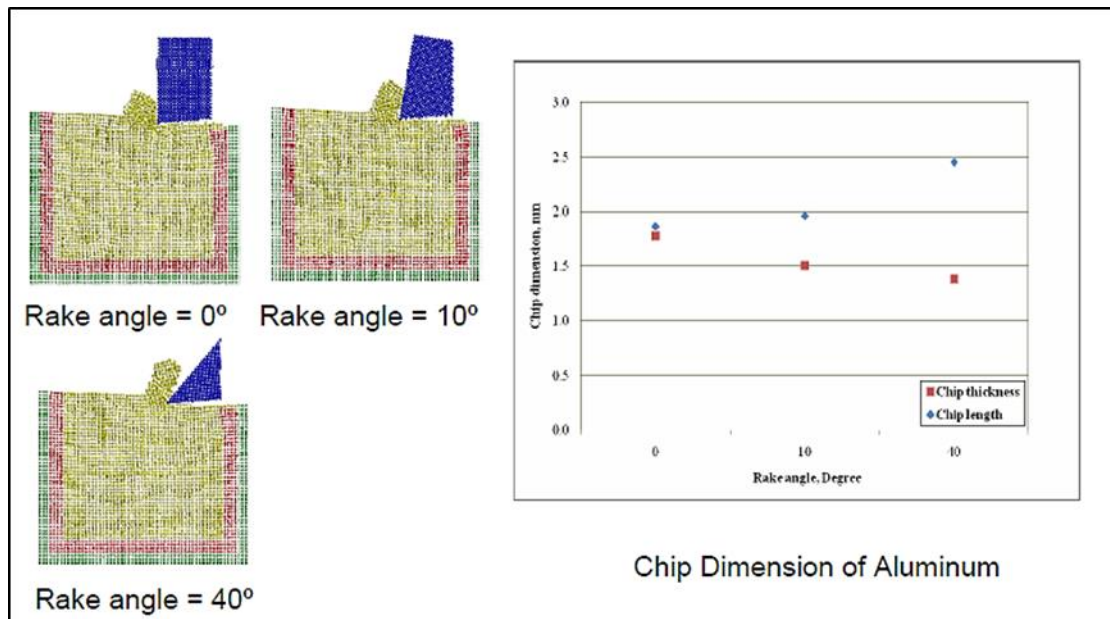
Εικόνα 4.7: Επίδραση της γωνίας κλίσης του εργαλείου στο σχηματισμό αποβλίττου (χαλκός) [34]



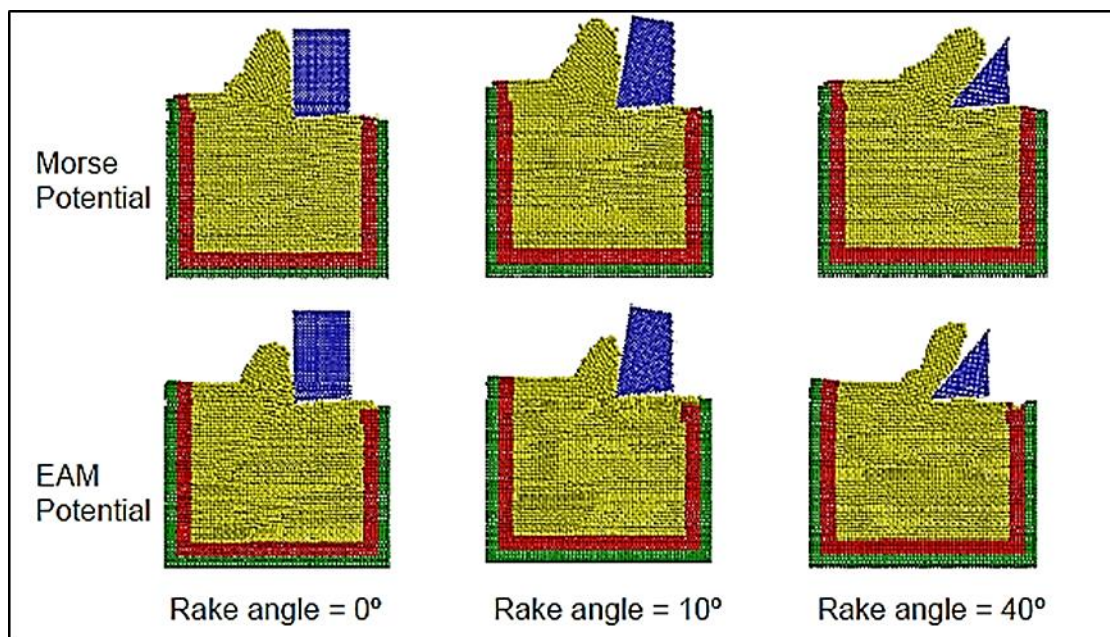
Εικόνα 4.8: Επίδραση της συνάρτησης δυναμικής ενέργειας (χαλκός) [34]



Εικόνα 4.9: Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής αλουμινίου ) [34]



Εικόνα 4.10: Επίδραση της γωνίας κλίσης του εργαλείου στο σχηματισμό αποβλίττου (αλουμίνιο) [34]

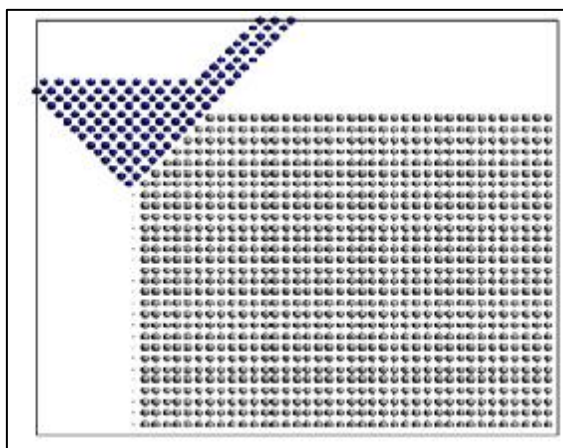


Εικόνα 4.11: Επίδραση της συνάρτησης δυναμικής ενέργειας (αλουμίνιο) [34]

## 4.2 Προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής Νανοκατεργασίας Χαλκού

Το υλικό κατεργασίας που μελετήθηκε, από τους Y Y Ye, R Biswas, J R Morris, A Bastawros και A Chandra [77], ήταν ο χαλκός. Ο χαλκός επιλέχθηκε λόγω της σημασίας του στις εφαρμογές επεξεργασίας νανοκλίμακας και επειδή είναι διασυνδεδετικό σε τεχνολογίες ημιαγωγών. Για την προσομοίωση

νανοκατεργασιών του επιπέδου (001) του χαλκού, χρησιμοποιήθηκε πλάκα χαλκού, διαστάσεων  $20\text{a} \times 4\text{a} \times 20\text{a}$ , αποτελούμενο από 6350 άτομα (Εικόνα 4.12), όπου το  $\text{a}$  είναι η σταθερά του πλέγματος του χαλκού ( $3.61 \text{ \AA}$ ), παρόμοιο με το υλικό σε προηγούμενες προσομοιώσεις που διεξήχθησαν σε επιφάνειες αλουμινίου από τους Komanduri et al το 2000 [81]. Προσομοιώσεις διεξήχθησαν και σε μεγαλύτερα συστήματα 15000 ατόμων με παρόμοια αποτελέσματα. Αρχικά ερευνήθηκε η στίλβωση κατά την κατεύθυνση  $[100]$  της επιφάνειας (001) του χαλκού. Οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες διατηρούνται κατά την κατεύθυνση  $y$ , όχι όμως και προς τις κατευθύνσεις  $x$  και  $z$ . Τα άτομα στην όψη  $xz$  και στο κατώτερο επίπεδο  $xy$  (κάτω μέρος του υλικού κατεργασίας) διατηρούνται σταθερά. Όλα τα υπόλοιπα άτομα επιτρέπεται να κινούνται κατά τον αλγόριθμο ΜΔ. Ο αλγόριθμος πρόβλεψης-διόρθωσης Gear για τη χρονική ολοκλήρωση των ατομικών συντεταγμένων. Η θερμοκρασία ολόκληρου του συστήματος διατηρήθηκε σταθερή με ένα πρότυπο θερμοστάτη Nose.



**Εικόνα 4.12:** Αρχική διάταξη του υλικού κατεργασίας και του εργαλείου με γωνία αποβλίττου  $-45^\circ$ , πριν την νανοκοπή επιφάνειας (001) χαλκού. Το βάθος κοπής είναι  $0.9 \text{ nm}$ . Τα στρώματα στις πλευρές και στο κάτω μέρος του κελιού είναι άκαμπτα. Στο σχήμα φαίνεται το επίπεδο  $x-z$  των ατόμων (σταθερό επίπεδο  $y$ ) [77]

Το απλό σχέδιο για την προσομοίωση του εργαλείου αποτελείται, με την αρχική τοποθέτηση του εργαλείου στο αριστερό άκρο του υλικού κατεργασίας (Εικόνα 4.12), προεξέχοντας πάνω από την επιφάνεια. Το εργαλείο κινείται άκαμπτα κατά μήκος του υλικού κατεργασίας, προσομοιώνοντας ικανοποιητικά τη διαδικασία απόξεσης σταθερής κατάστασης νανοκλίμακας. Αυτό μοντελοποιεί τη μηχανική απόξεση και ομαλοποίηση μιας ανομοιομορφίας μιας μεταλλικής επιφάνειας.

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

Το εργαλείο αποτελείται από 500-700 άτομα χαλκού, ανάλογα τη γωνία αποβλίττου. Ο άξονας (001) του εργαλείου είναι παράλληλος με τον άξονα (001) του υποστρώματος. Χρησιμοποιήθηκαν εργαλεία που μοιάζουν με εγκοπές με αρνητικές γωνίες αποβλίττου. Μιας και το πλάτος του εργαλείου κατά την κατεύθυνση  $y$  (3α) είναι δυο στρώματα ατόμων μικρότερο από το υλικό κατεργασίας. Το άτομα του εργαλείου τρίβουν τα σταθερά όρια των τοιχωμάτων των ατόμων του υλικού κατεργασίας. Στο υλικό δεν επιτρέπεται να συσσωρευθεί στις πλευρές του χαραγμένου καναλιού, όπως θα αναμενόταν σε μια τρισδιάστατη προσομοίωση. Εξάλλου η προσομοίωση τρισδιάστατης νανοκατεργασίας είναι πολύ απαιτητική υπολογιστικά, απαιτώντας σημαντικά μεγαλύτερες μοναδιαίες κυψελίδες, και είναι αντικείμενο περαιτέρω μελέτης. Τα σημεία κλειδιά της νανοκοπής μπορούν να περιγραφούν από την δισδιάστατη προσομοίωση γεωμετρίας. Το εργαλείο/λειαντικό μέσο είναι άκαμπτο και κρατείται με καθοδική δύναμη ώθησης, παρόμοια με το ρόλο του μπλοκ κατά την πίεση τραχιών σωματιδίων της επιφάνειας στη χημική – μηχανική στίλβωση (ΧΜΣ).

Το εργαλείο μετατοπίζεται κατά μήκος της επιφάνειας κοπής, κατά την κατεύθυνση [001], με μικρό βήμα ( $\Delta x$ ). Για κάθε θέση του εργαλείου, το σύστημα εξελίσσεται με τον αλγόριθμο της ΜΔ για ~50 χρονικά βήματα. Στη συνέχεια οι συντεταγμένες του εργαλείου προσαυξάνονται κατά την κατεύθυνση [100] κατά  $\Delta x$ , και η προσομοίωση της ΜΔ επαναλαμβάνεται. Καθώς η μετατόπιση γίνεται πρακτικά όσο μικρότερη γίνεται, η προσομοίωση προσεγγίζει σχεδόν συνεχείς διεργασίες.

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

Η θερμοκρασία ελέγχεται διατηρώντας τα 8 κατώτατα στρώματα (1.2 nm) του υλικού στους 300 K. Αν η θερμοκρασία αποκλίνει περισσότερο από 10 K από



την προσδιορισθείσα θερμοκρασία, γίνεται επαναπροσδιορισμός των ταχυτήτων των ατόμων στα οκτώ αυτά κατώτερα στρώματα. Αυτός ο αλγόριθμος επιτρέπει τη μεταφορά θερμότητας από την περιοχή κατεργασίας της επιφάνειας στον κύριο όγκο του υλικού, όμοια με το πείραμα. Είναι σημαντικό να μην μεταβληθούν οι ταχύτητες των ατόμων ή τα δυναμικά τους μέσα στην ενεργή περιοχή κατεργασίας. Επίσης ο έλεγχος θερμοκρασίας δεν είναι ευαίσθητος σε μικρές μεταβολές όσον αφορά την ανοχή θερμοκρασίας. [77]

Η πειραματική κατεργασία του χαλκού διεξάγεται με εργαλεία περιστροφής με ταχύτητες κατεργασίας της τάξεως 1-10 m/s (Shaw 1984) [85]. Στις διεργασίες ημιαγωγών, η περιστροφή της βάσης είναι 20-50 rpm στο βήμα της ΧΜΣ παράγει ακόμη χαμηλότερες ταχύτητες κατεργασίας, της τάξεως 0.5-1 m/s (Steigerwald et al 1997) [86]. Για να μπορέσει να γίνει σύγκριση με αυτές τις ταχύτητες περιστροφής, προσομοιώθηκαν ιδιαίτερα χαμηλές ταχύτητες κατεργασίας 1.8 m/s, με πολύ μικρό βήμα προσαύξησης  $\Delta x = 0.0004$  nm. Έτσι αυτή η ταχύτητα κατεργασίας είναι σημαντικά χαμηλότερη σε σχέση με προηγούμενες προσομοιώσεις. Προσεγγιστικά χρησιμοποιήθηκαν 1000 προσαυξήσεις μετατόπισης, όταν το εργαλείο διέσχισε απόσταση  $\sim 0.4$  nm. Για τη μεγαλύτερη ταχύτητα κοπής 18 m/s, χρησιμοποιήθηκε  $\Delta x = 0.004$  nm.

Μετά τη μηχανική κατεργασία, το υλικό αφέθηκε σε ηρεμία, κρατώντας το εργαλείο σε σταθερή φορτισμένη θέση και το υλικό κατεργασίας αφέθηκε για  $\sim 150000$  χρονικά βήματα (120 ps). Αυτή η χαλάρωση προκαλεί αναδιοργάνωση του υποστρώματος μετά το ταχύ βήμα κατεργασίας, και είναι σημαντική για τη δημιουργία υλικού με ελάχιστες ατέλειες.

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

- (1) Ο προσανατολισμός της επιφάνειας του κρυστάλλου και η κατεύθυνση της κοπής
- (2) Η ταχύτητα κοπής  $v_s$
- (3) Το βάθος κοπής  $d_c$
- (4) Η γωνία αποβλίπτου του εργαλείου  $\alpha$
- (5) Ο προσανατολισμός του κρυστάλλου του εργαλείου και η γωνία μεταξύ του εργαλείου και των αξόνων των κρυστάλλων του υλικού κατεργασίας
- (6) Η θερμοκρασία  $T$  του υποστρώματος

- (7) Η ακαμψία του εργαλείου, η οποία μπορεί να είναι απείρως άκαμπτο ή παραμορφώσιμο
- (8) Η χρονική κλίμακα για χαλάρωση και αναδιοργάνωση του υλικού μετά τη διαδικασία κατεργασίας

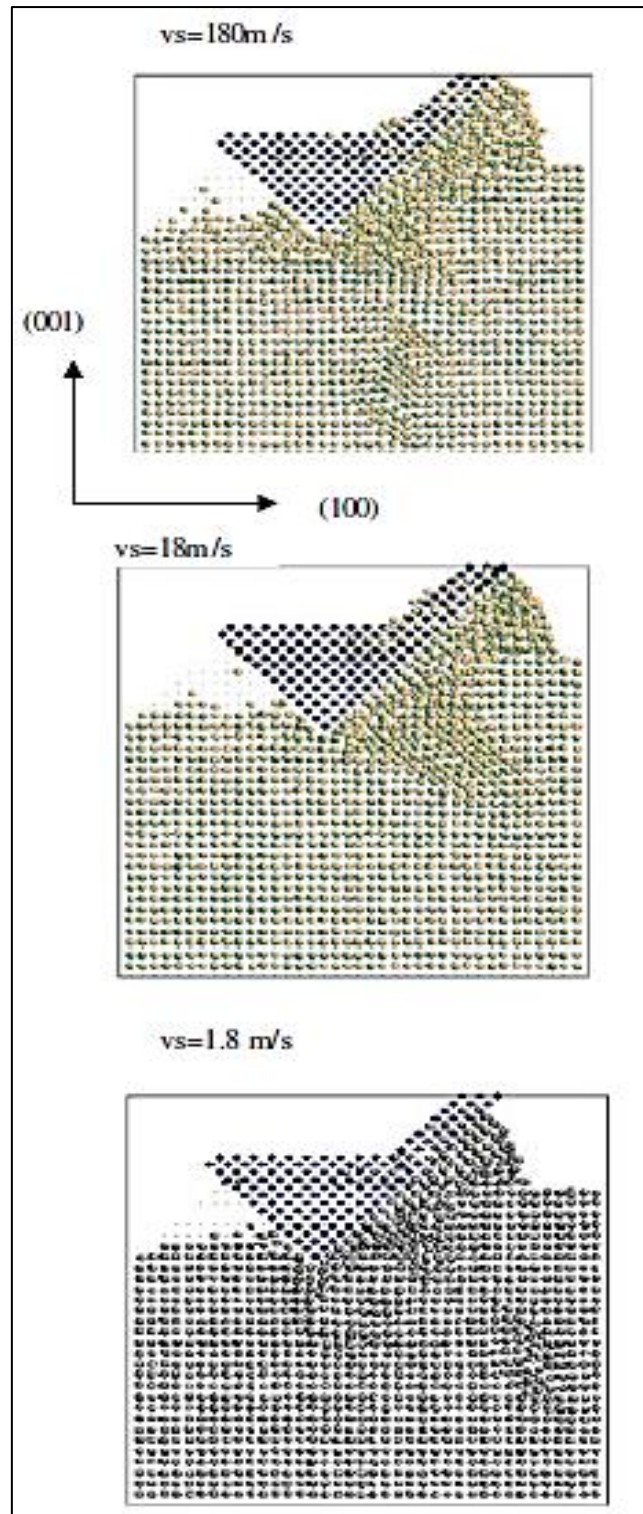
### **Αποτελέσματα κατεργασίας της επιφάνειας (001)**

Αρχικά προσομοιώθηκε η νανοκατεργασία της επιφάνειας (001) του χαλκού, ως συνάρτηση της ταχύτητας κοπής  $v_s$ , η οποία κυμάνθηκε από 1.8-180 m/s. Ο προσανατολισμός της κοπής ήταν κατά την κατεύθυνση (001). Οι παράμετροι της διαδικασίας και τα χαρακτηριστικά του υλικού κατεργασίας φαίνονται στον Πίνακα 4.1.

Το πρώτο σετ των προσομοιώσεων, που έγινε με εργαλείο με γωνία αποβλίττου  $-45^\circ$ , έδειξε σημαντική αλληλεπίδραση της ταχύτητας  $v_s$  και της φύσης της κατεργαζόμενης επιφάνειας. Η Εικόνα 4.13 δείχνει τη σύγκριση των αποτελεσμάτων για διάφορες ταχύτητες κατεργασίας, αφού η κοπή έχει προχωρήσει κατά  $\sim 2.7$  nm.

**Πίνακας 4.1: Παράμετροι υλικού κατεργασίας και προσομοίωσης [77]**

|                                |   |                      |
|--------------------------------|---|----------------------|
| Δυναμικό για προσομοιώσεις     | EAM   |                      |
| Υλικό κατεργασίας              | Χαλκός  |                      |
| Κρυσταλλική δομή υποστρώματος  | FCC   |                      |
| Διαστάσεις υποστρώματος [100]  | $20a \times 4a \times 20a$<br>επιφάνεια (001)                       | 6350 άτομα           |
|                                | $a=3.61 \text{ \AA}$  | (1452 σταθερά άτομα) |
| Διαστάσεις εργαλείου           | $(x) \times 4a \times 11a$ (001)<br>$x$ εξαρτάται από το $\alpha_r$ | 304 άτομα            |
| Γωνία ελευθερίας $\alpha_r$    | $45^\circ$  |                      |
| Γωνία αποβλίττου               | $45^\circ$ έως $-63^\circ$  |                      |
| Κατευθύνσεις κοπής             | [100] σε επιφάνεια (001)  |                      |
| Βάθος κοπής                    | $6a = 2.1 \text{ nm}$ σε<br>επιφάνεια (001)                         |                      |
| Ταχύτητα κοπής                 | 1.8-180 m/s   |                      |
| Θερμοκρασία υποστρώματος       | 300 K   |                      |
| Βήμα χρόνου Μοριακής Δυναμικής | 0.814 fs  |                      |



**Εικόνα 4.13:** Τελικές διαμορφώσεις μετά την προσομοίωση μοριακής δυναμικής κατά την νανοκοπή επιφάνειας (001) χαλκού με άκαμπτο εργαλείο γωνίας αποβλίττου  $-45^\circ$ , για ταχύτητες κοπής 180, 18 και 1.8 m/s. Το βάθος κοπής σε κάθε περίπτωση είναι 1 nm [77]

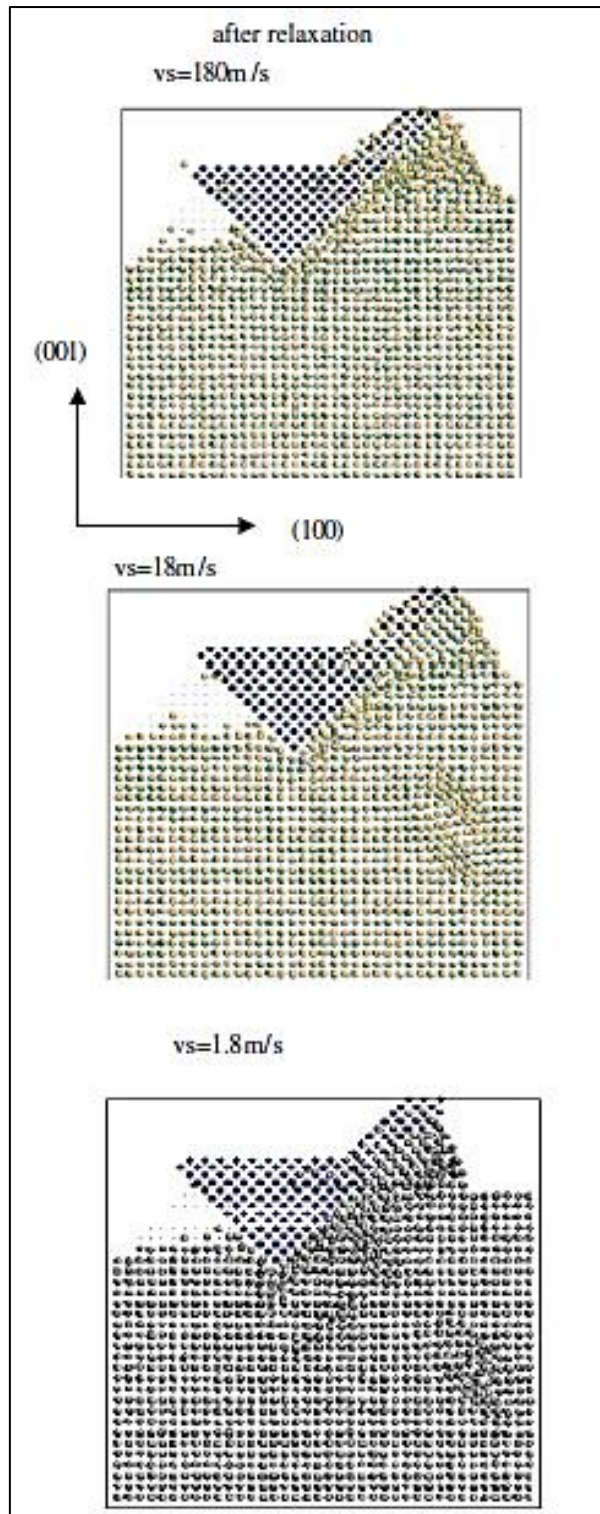
Στην υψηλότερη ταχύτητα (180 m/s), η κατεργαζόμενη επιφάνεια πίσω από το εργαλείο είναι τραχιά σε ατομικό επίπεδο, αλλά ομαλοποιείται καθώς μειώνεται η ταχύτητα. Μπροστά από το εργαλείο, υπάρχει σημαντική αταξία

και συμπίεση του υλικού κατεργασίας, για τις μεγαλύτερες ταχύτητες (180 και 18 m/s), που μειώνεται για  $v_s = 1.8$  m/s. Ένα ευμέγεθες απόβλιττο διαμορφώνεται μπροστά από το εργαλείο για τις μεγαλύτερες ταχύτητες (180 και 18 m/s), αλλά είναι σημαντικά μικρότερο στη χαμηλότερη ταχύτητα, μιας και τα μετατοπιζόμενα άτομα έχουν περισσότερο χρόνο να αναδιαταχθούν στη χαμηλότερη ταχύτητα. Οι μετατοπίσεις παράγονται και για τις τρεις ταχύτητες και εμφανίζονται βαθύτερα στο υπόστρωμα (180 και 18 m/s, Σχήμα 2). Οι βρόγχοι μετατοπίσεων αποτελούνται από ζεύγη ελλειπόντων σειρών ατόμων.

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

Η χαλάρωση του υλικού κατεργασίας για 150000 χρονικά βήματα ΜΔ (120 ps) συγκρίνεται για τις τρεις ταχύτητες κατεργασίας, με το εργαλείο σε θέση φόρτισης (Εικόνα 4.14). Για  $v_s = 180$  m/s, η συμπίεση κάτω από το εργαλείο και οι βαθείς βρόγχοι μετατόπισης έχουν επαναφερθεί σημαντικά, αφήνοντας το υλικό σχεδόν χωρίς παραμορφώσεις. Παρόλα αυτά, παρόμοιες μετατοπίσεις παραμένουν μετά την επαναφορά και από τις ταχύτητες 18 και 1.8 m/s. Στην πραγματικότητα, οι μετατοπίσεις βαθαίνουν ελαφρώς κατά την επαναφορά του δείγματος για  $v_s = 18$  m/s. Σε κάθε περίπτωση η αταξία μπροστά από το εργαλείο μειώθηκε. Πίσω από το εργαλείο, η επιφάνεια παραμένει τραχιά για ταχύτητα 180 m/s, αλλά ομαλοποιείται όσο η ταχύτητα μειώνεται σε 1.8 m/s.

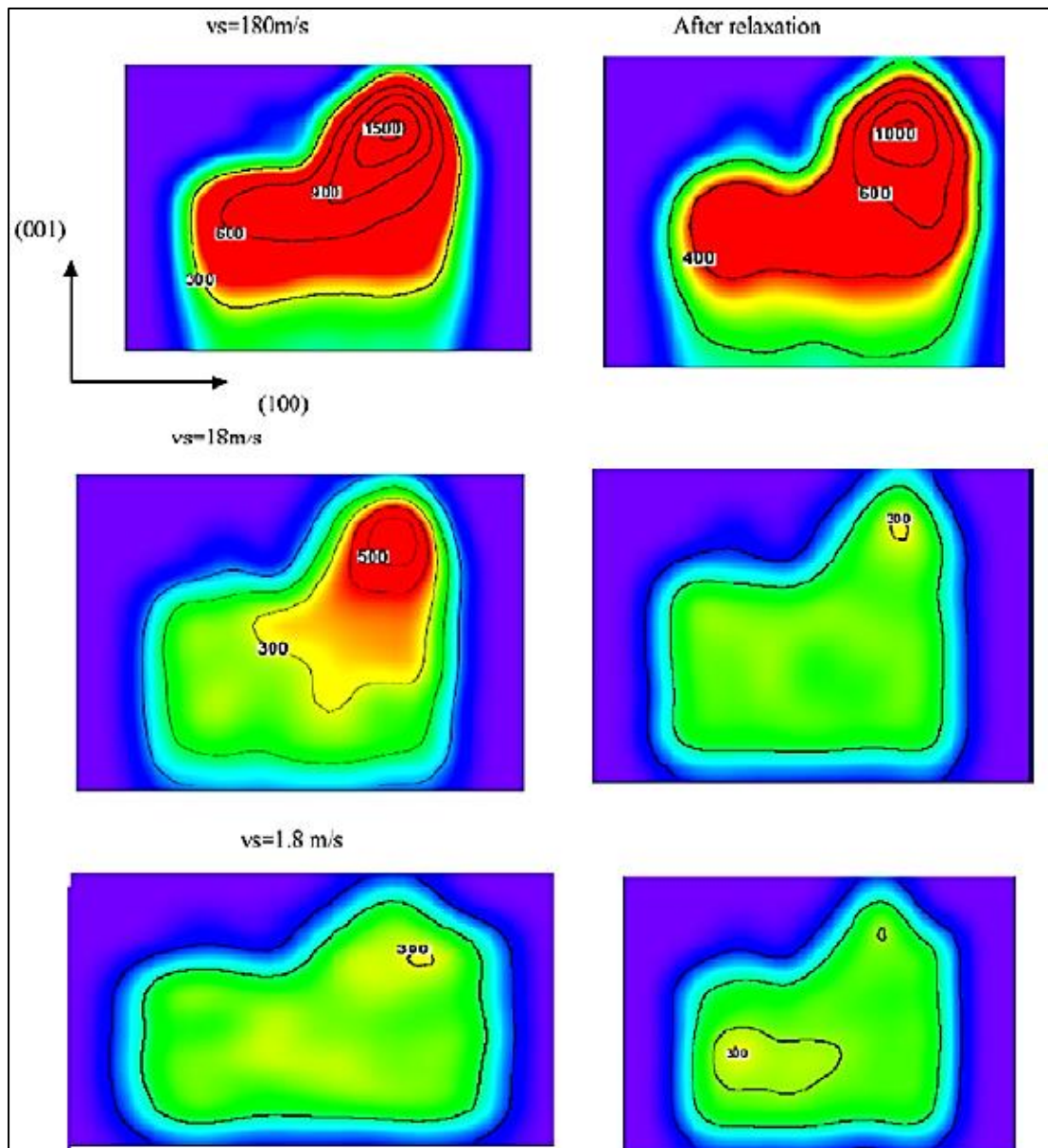
[77]



**Εικόνα 4.14:** Διαμόρφωση του υλικού κατεργασίας μετά τη χαλάρωση του, με το εργαλείο σε θέση φόρτισης, με χρόνο προσομοίωσης ΜΔ 120 ps (150000 βήματα), για ταχύτητες κοπής 180, 18 και 1.8 m/s. Οι τελικές διαμορφώσεις που φαίνονται στο Σχήμα 4.7 είχαν αφαιρεθεί σε ηρεμία [77]

Η αξιοσημείωτη χαλάρωση συμβαίνει για  $v_s = 180 \text{ m/s}$ , λόγω της δημιουργίας μιας περιοχής υψηλής θερμοκρασίας (θερμό σημείο) κάτω από το εργαλείο, η οποία εκτείνεται και στο απόβλιττο μετά την κοπή (Εικόνα 4.15). Οι τοπικές

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



**Εικόνα 4.15:** Χωρική κατανομή της τοπικής θερμοκρασίας (K) στο υλικό κατεργασίας, μετά την προσομοίωση κοπής (διαμορφώσεις στο Σχήμα 2), συγκρινόμενη με τις θερμοκρασίες του υλικού αφού αφέθηκε σε ηρεμία για 120 ps (διαμόρφωση από την Εικόνα 4.14). Φαίνονται τα ζεύγη αποτελεσμάτων για ταχύτητες κοπής 180, 18 και 1.8 m/s. Σε κάθε φωτογραφία η κλίμακα διαφέρει, ενώ φαίνονται και οι τιμές σταθερής θερμοκρασίας για κάθε περίγραμμα [77]

Μιας και η θερμοκρασία είναι αρκετά υψηλή για 180 m/s, η περίσσεια ενέργειας δεν έχει πλήρως διαχυθεί, μετά τα 120 ps, αν και υφίσταται σημαντική επαναφορά και η θερμοκρασία μειώνεται σε 600-1000 K, μπροστά από το εργαλείο (Εικόνα 4.15). Περαιτέρω επαναφορά για επιπρόσθετα 80 ps (δεν φαίνεται) μειώνει τη θερμοκρασία σε λιγότερο από 600 K σε όλο το υλικό κατεργασίας. Συγκριτικά, υπάρχει πολύ μικρότερη αύξηση θερμοκρασίας 200 K, μετά την κατεργασία για  $v_s = 18$  m/s (Εικόνα 4.15), το οποίο είναι ανεπαρκές για την επαναφορά των μετατοπίσεων. Κατά την προσομοίωση των 1.8 m/s, δεν υπάρχει καθόλου τοπική θέρμανση καθώς και αμελητέα επαναφορά.

Η δυναμική ενέργεια του υλικού κατεργασίας μειώνεται σημαντικά του υλικού κατεργασίας μειώνεται κατά 0.1 eV/άτομο, κατά την επαναφορά, λόγω της μεγάλης δομικής χαλάρωσης (Πίνακας 4.2).

**Πίνακας 4.2:** Δυναμικές ενέργειες του υλικού κατεργασίας μετά την κοπή, αλλά και μετά τη χαλάρωση [77]

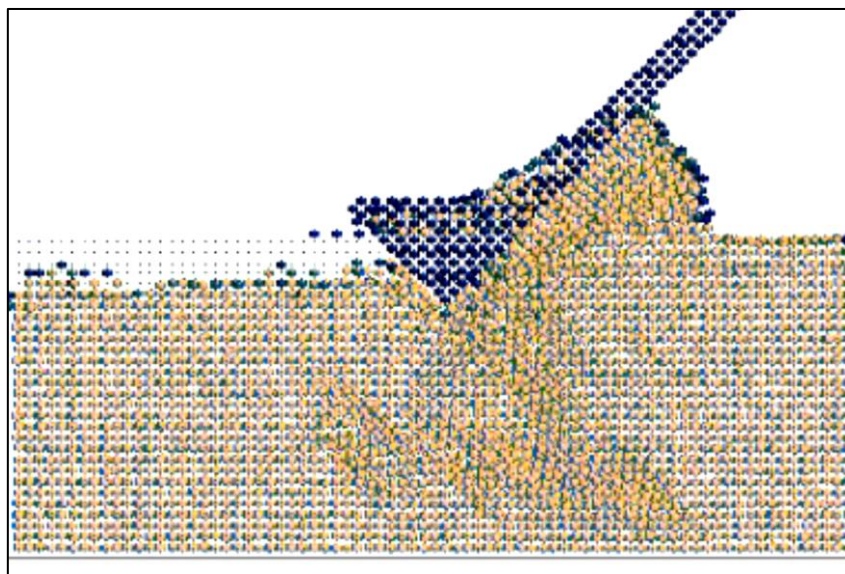
| Ταχύτητα $v_s$ (m/s) | Δυναμική Ενέργεια μετά την κοπή (eV/άτομο) | Δυναμική Ενέργεια μετά και τη χαλάρωση (eV/άτομο) |
|----------------------|--|---|
| 180                  | -3.1296                                    | -3.2358   |
| 18                   | -3.2019                                    | -3.2140   |
| 1.8                  | -3.2164                                    | -3.2170   |

Οι δυναμικές ενέργειες για τις ταχύτητες 1.8 και 18 m/s, μειώνεται ανεπαίσθητα κατά τη χαλάρωση, σύμφωνα και με την μικρότερη επαναφορά για αυτές τις ταχύτητες κατεργασίας.

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

Επίσης διεξήχθησαν νανοκατεργασίες αρκετά μεγαλύτερων συστημάτων της τάξεως 12000 ατομών (Εικόνα 4.16) με τους ίδιους προσανατολισμούς υποστρώματος και εργαλείου, ενώ και η νανοκατεργασία πραγματοποιήθηκε

σε αρκετά μεγαλύτερη απόσταση των 6.8 nm. Στο σχήμα φαίνεται η δημιουργία ζευγών μετατόπισης κάτω από το εργαλείο, μια άτακτη περιοχή κοντά στο εργαλείο και σημαντική δημιουργία αποβλήτου μπροστά από το εργαλείο. Τα αρχικά αποτελέσματα είναι παρόμοια με αυτά του μικρότερου συστήματος και καταδεικνύουν ότι τα μικρότερα συστήματα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την περιγραφή των βασικών φυσικών διαδικασιών κατά την νανοκατεργασία.



**Εικόνα 4.16:** Προσομοίωση νανοκατεργασίας ενός σημαντικά μεγαλύτερου συστήματος με 12000 άτομα, με επιφάνεια κατεύθυνσης (001). Η διάταξη που φαίνεται είναι μετά την νανοκατεργασία απόστασης 6.8 nm με ταχύτητα 18 m/s [77]

### ***Δυνάμεις στο εργαλείο και Τριβή***

Για τον υπολογισμό της κάθετης δύναμης (ή δύναμης ώσης)  $F_z$  και της δύναμης κοπής  $F_x$ , αθροίστηκαν οι δυνάμεις από τα εσωτερικά στρώματα του εργαλείου. Αμελώντας τη συνεισφορά δύναμης των εξωτερικών στρωμάτων του εργαλείου, τα οποία τρίβουν το υλικό, και είναι αντικείμενο της δισδιάστατης γεωμετρίας κοπής. Η σύσταση του πλέγματος μεταξύ του υλικού και του εργαλείου μπορεί να προκαλέσει μεγάλες περιοδικές διακυμάνσεις των δυνάμεων, το οποίο αποφεύγεται σε αυτή την προσομοίωση. Ο λόγος της δύναμης κοπής προς της δύναμη ώσης παρέχει το συντελεστή τριβής ( $\mu = \frac{F_x}{F_z}$ ). Η διακύμανση αυτών των δυνάμεων σε σχέση με την απόσταση κατεργασίας φαίνεται για το εργαλείο των  $45^\circ$ , βάθους 0.9 nm και  $v_s = 18$  m/s. Από τις μέσες χρονικά δυνάμεις, βρέθηκε  $\mu \cong 0.64$ . Παρόμοιες διακυμάνσεις



δυνάμεων και  $\mu$  βρέθηκαν για το μεγαλύτερο σύστημα του Σχήματος 5. Μεγαλύτερες τιμές του  $\mu$  αναμένονται για ξηρή κατεργασία μετάλλου – μετάλλου, όπου παράγονται μεγαλύτερες δυνάμεις κοπής. Όσο αυξάνεται το βάθος κοπής, και οι δυνάμεις ώσης και κοπής αυξάνονται σε μέγεθος, με παρόμοια ποιοτικά συμπεριφορά, όπως φαίνεται στο Σχήμα 6, άλλα το  $\mu$  παραμένει κοντά σε αυτή την τιμή.

Η υπολογισθείσα τιμή του  $\mu$  συμφωνεί με τις πειραματικά μετρούμενους συντελεστές τριβής (Reese 2000) [83], για ξηρή χάλυβα σε χάλυβα 0.6 (στατικός συντελεστής) και 0.5 (κινητικός συντελεστής). Αναμένεται η τιμή του χαλκού να είναι παρόμοια με αυτή του χάλυβα. Δεν αποτελεί έκπληξη ότι η υπολογισθείσα τιμή του  $\mu$  είναι μεγαλύτερη από το μετρούμενο συντελεστής κινητικής τριβής, μιας και η προσομοίωση περιλαμβάνει κατεργασία κάτω από την επιφάνεια. Η τιμή του  $\mu$  εξαρτάται από την ομαλότητα της επιφάνειας.

### **Σύγκριση με προηγούμενες προσομοιώσεις**

Ένα κρίσιμο χαρακτηριστικό, το οποίο προσομοιώθηκε από τους Y Y Ye, R Biswas, J R Morris, A Bastawros και A Chandra [87], και δεν είχε ληφθεί υπόψη σε προηγούμενες προσομοιώσεις (Inamura *et al* 1993, 1994, Komanduri *et al* 2000a, 2000b, 2000c, Fang and Weng 2000) [78-82], ήταν η χαλάρωση του υλικού κατεργασίας μετά την πάροδο της κοπής. Αυτό επιτρέπει στην περισσευούμενη ενέργεια που παράγεται στην κατεργασμένη περιοχή να διαχυθεί μέσω αγωγής στον κύριο όγκο του υλικού και είναι κρίσιμο για την επαναφορά των παραμορφώσεων και των ζημιών. Οι υπερβολικές θερμοκρασίες στο υλικό κατεργασίας βρέθηκαν επίσης από τον Rentsch (2000) [84].

Οι τυχαίες διακυμάνσεις στις δυνάμεις, όταν το εργαλείο και το υλικό είναι χωρίς σωστό προσανατολισμό (Σχήμα 6) , τα αποτελέσματα μοιάζουν με αυτά του KCR. Η εξάρτηση του συντελεστή τριβής  $\mu$  με την κρυσταλλική γεωμετρία βρέθηκε επίσης από τους KCR (Komanduri, Chandrasekaran και Raff) [82]. Συγκεκριμένα βρήκαν τιμές  $\mu > 1$  για εργαλεία με θετικές γωνίες αποβλίττου, και  $\mu < 1$  για εργαλείο με αρνητική γωνία αποβλίττου  $-45^\circ$  (Komanduri *et al* 2000a, 2000b) [81].

Οι υπολογισθείσες δυνάμεις και το  $\mu < 1$  συμφωνούν με τα αποτελέσματα των Zhang και Tanaka (1997) [88] για ένα ολισθαίνον τραχύ διαμάντι σε επιφάνεια χαλκού (001). Οι Fang και Weng (2000) [78] βρήκαν μείωση του  $\mu$  με τη

γωνία του αποβλίττου για σημειακό εργαλείο σε τρισδιάστατες προσομοιώσεις ΜΔ, αποτέλεσμα αναμενόμενο με βάση τη μηχανική συνεχούς μέσου.

Η συμπίεση του υλικού κάτω από το εργαλείο κοπής και η δημιουργία αποβλίττου στις προσομοιώσεις, συμφωνούν με τα αποτελέσματα των KCR (Komanduri et al 2000a) [81]. Επίσης η διεξαγωγή προσομοίωσης κοπής στην επιφάνεια χαλκού (111), δείχνει απουσία μετατοπίσεων στο υπόστρωμα, όπως και στους KCR (Komanduri et al 2000a) [81]. Μιας και η επιφάνεια 111 είναι ένα φυσικό επίπεδο αποκοπής, η επιφάνεια κοπής είναι αρκετά επίπεδη και χωρίς παραμορφώσεις.

Εξάλλου με τη βοήθεια της μεθόδου πολλών σωματιδίων (EAM), μπορούν να αναπαραχθούν αποτελέσματα σε συμφωνία με τις προηγούμενες προσεγγίσεις δυναμικού Morse. (Komanduri et al 2000a, 2000b, Fang and Weng 2000, Zhang and Tanaka 1997) [78, 81, 82, 88]. Αυτό καταδεικνύει ότι τα αποτελέσματα των μελετητών είναι σχετικά ανεπηρέαστα στη συνάρτηση διατομικής δυναμικής ενέργειας που χρησιμοποιήθηκε.

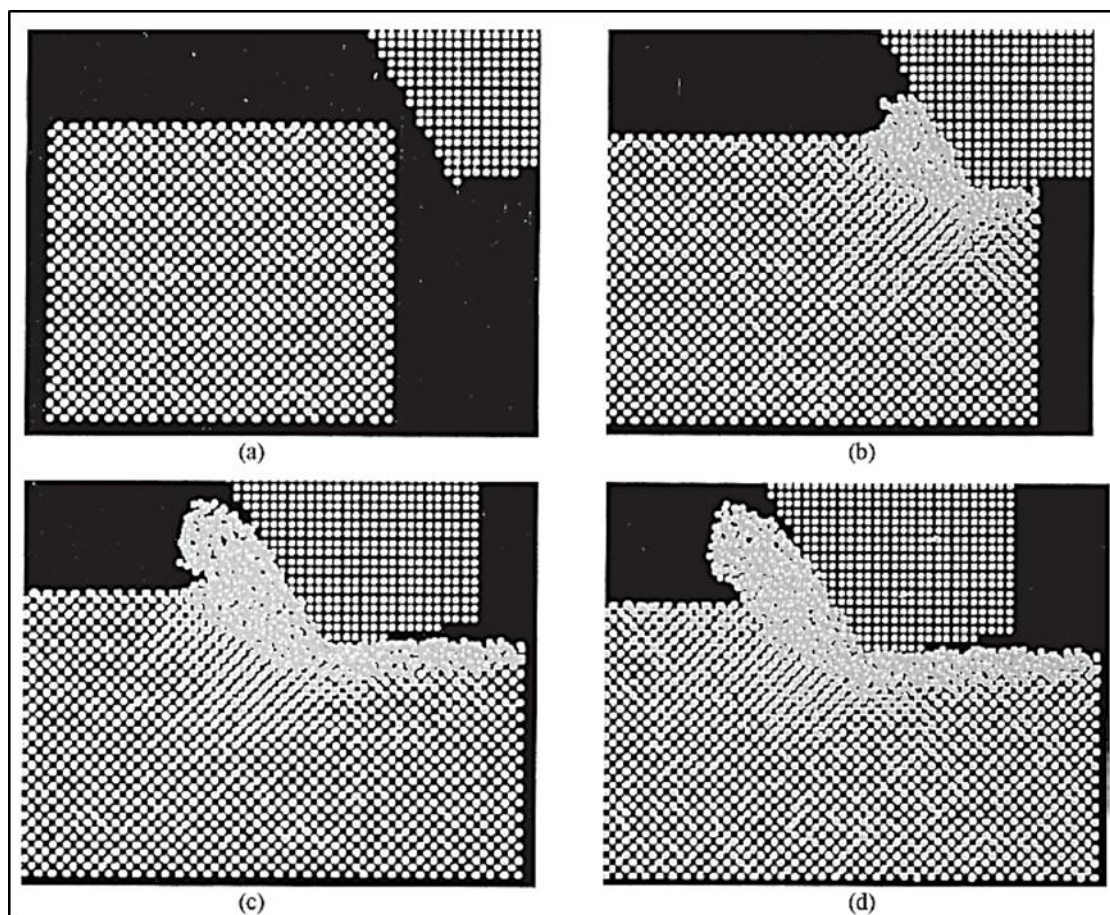
Τέλος, στις πρόσφατες προσομοιώσεις νανοκατεργασίας χαλκού, συμπεριλήφθηκαν και οι διαδικασίες χάραξης επιφανειών, ως αποτέλεσμα της χημικής σύνθεσης της ύλης CMP (Ye et al 2002) [87]. Εξάλλου, η διαδικασία χημικής χάραξης είναι σημαντική για την επίτευξη επίπεδης επιφάνειας.

### **4.3 Μηχανική της νανοκοπής σε ημιαγωγικά υλικά**

Σε αυτό τον τομέα ΜΔ έχει πραγματοποιηθεί περιορισμένη έρευνα. Αυτό οφείλεται στις πολύπλοκες εκφράσεις δυναμικού που απαιτούνται για το πυρίτιο και τον απαιτούμενο χρόνο για την προσομοίωση. Για τη μελέτη του πυριτίου προτάθηκαν το τροποποιημένο δυναμικό πολλών σωμάτων (MEAM) [17,19] και το δυναμικό Bolding-Anderson [21]. Το δεύτερο προτιμάται, καθώς αναπαράγει τα βασικά χαρακτηριστικά του πυριτίου. Καθώς πολλά ημιαγωγικά υλικά χρησιμοποιούνται ως υποστρώματα για ανάπτυξη κρυστάλλων, τα χαρακτηριστικά της επιφάνειας και των γειτονικών στρωμάτων είναι πολύ κρίσιμα. Επίσης, στη βιομηχανία αναφέρεται μεγαλύτερη επιτυχία στην κατεργασία των υλικών αυτών με αρνητική γωνία κοπής εργαλείου από ότι με θετική γωνία κοπής. Είναι γνωστό το πώς η αρνητική γωνία κοπής επηρεάζει την παραμόρφωση του υποστρώματος. Οι Belak *et al.* [3] διερεύνησαν την κατεργασία του πυριτίου με χρήση εργαλείου από διαμάντι σε ταχύτητα κοπής 540m/s, όπου το εργαλείο είχε τη δυνατότητα να παραμορφώνεται και να αλληλεπιδρά με το υλικό κατεργασίας. Βρέθηκε ότι

ένα στρώμα ατόμων μεταφέρθηκε στο εργαλείο από διαμάντι. Το πυρίτιο στο απόβλιττο και στα πρώτα στρώματα της νέας επιφάνειας εμφανιζόταν άμορφο. Οι Belak *et al.* κατέδειξαν επίσης ότι απαιτείται λιγότερη ενέργεια για να μετασχηματισθεί ο κρύσταλλος σε άμορφο στερεό από εκείνη που απαιτείται για να διατμηθεί ο κρύσταλλος. Οι προσπάθειες αυτές είναι πολύ σημαντικές για την κατανόηση του μηχανισμού αποβολής υλικού στα ημιαγωγικά υλικά.

Πιο πρόσφατα διεξήχθησαν προσομοιώσεις ΜΔ σε νανοκοπές μονοκρυστάλλου πυριτίου με χρήση του δυναμικού Tersoff σε ένα μεγάλο εύρος γωνιών κοπής ( $-60$  ως  $+60^\circ$ ), γωνίες ελευθερίας ( $+10$  ως  $+30^\circ$ ), πλάτη κοπής (1.1 – 4.34 nm) και βάθη κοπής (0.01 – 2.72 nm) [89]. Σε αντίθεση με την κατεργασία συμβατικών μετάλλων, όπου δεν υπάρχει μεταβολή όγκου ή αλλαγή φάσης, στη νανοκοπή του πυριτίου, παρατηρείται σημαντική μεταβολή του όγκου ( $\sim 22.8\%$ ) Αυτό οφείλεται στο δομικό μετασχηματισμό από κυβική δομή διαμαντιού (ή δομή πυριτίου -  $\alpha$ ) σε χωροκεντρωμένο τετραγωνικό (ή δομή πυριτίου -  $\beta$ ) υπό υψηλή υδροστατική πίεση κάτω από το εργαλείο, κατά τη διάρκεια της κατεργασίας. Στις Εικόνες 4.17 a-d παρουσιάζονται οι προσομοιώσεις ΜΔ της νανοκοπής πυριτίου σε διάφορες φάσεις σχηματισμού του αποβλίττου με γωνία κοπής εργαλείου  $-30^\circ$ .



**Εικόνα 4.17:** Προσομοίωση ΜΔ της νανοκοπής πυριτίου σε διάφορα στάδια σχηματισμού αποβλίττου με γωνία κοπής εργαλείου  $-30^\circ$  [89]

Το παράδειγμα της γωνίας κοπής των  $-30^\circ$  επιλέγεται εδώ καθώς αναπαριστά τυπική βιομηχανική πρακτική. Βάσει των Εικόνων , ο μηχανισμός αποβολής υλικού στη νανοκοπή του πυριτίου μπορεί να διαιρεθεί σε τέσσερις συνιστώσες: τη συμπίεση του υλικού κατεργασίας μπροστά από το εργαλείο, τη δημιουργία αποβλίττου όπως σε μια διαδικασία εξώθησης, πλευρική ροή και παραμόρφωση του υποστρώματος στην κατεργασμένη επιφάνεια κάτω από το εργαλείο. Είναι επίσης εμφανές ότι το υλικό μπροστά από το εργαλείο στην πρωτεύουσα ζώνη, το απόβλιττο και η παραμόρφωση υποστρώματος στην κατεργασμένη επιφάνεια κάτω από το εργαλείο υπόκεινται σε σημαντική συμπίεση, πράγμα το οποίο υποδεικνύει το δομικό μετασχηματισμό από κυβική δομή διαμαντιού( ή δομή πυριτίου -  $\alpha$  ) σε χωροκεντρωμένο τετραγωνικό (ή δομή πυριτίου -  $\beta$ ). Προσδιορίζοντας την κατανομή των ατόμων σε διάφορες διατομικές αποστάσεις και τη δομή συντονισμού του πυριτίου, καθώς και τη διαφορά στο πλήθος των ατομικών δεσμών πριν και μετά την κοπή, είναι εφικτός ο υπολογισμός της πύκνωσης λόγω του μετασχηματισμού [89].

#### **4.4 Προσέγγιση ΜΔ κατά τη νανοκοπή μονοκρυσταλλικού πυριτίου**

Το μονοκρυσταλλικό πυρίτιο χρησιμοποιείται ευρύτατα σε εφαρμογές οπτικής υπερύθρων και σε ηλεκτρονικές εφαρμογές, οι οποίες απαιτούν οπτικά ποιοτικές επιφάνειες και έχουν εν γένει πολύπλοκα χαρακτηριστικά (De Chiffrea et al., 2003) [91]. Οι κατεργασίες υπερ – υψηλής ακρίβειας με εργαλεία διαμαντιού μπορούν να παράγουν νανο – επιφάνειες και πιθανή μορφή ακρίβειας σε επίπεδο μικροκλίμακας (Fang and Venkatesh, 1998) [92]. Για τη δημιουργία καλοφτιαγμένων τμημάτων, είναι απαραίτητη η μελέτη το μηχανισμού νανοκοπής μονοκρυσταλλικού πυριτίου, ειδικά η δύναμη κοπής, η οποία παίζει σημαντικό ρόλο στη φθορά του εργαλείου, στο φινίρισμα της επιφάνειας και στην ακρίβεια της μορφής του.

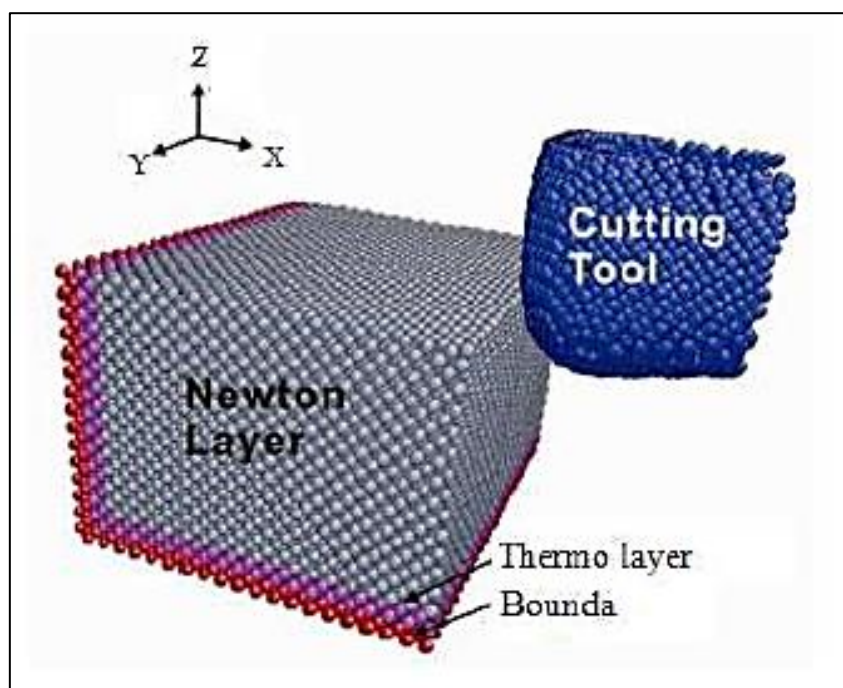
Στις νανοκατεργασίες μονοκρυσταλλικών υλικών, η δύναμη κοπής μπορεί να προβλεφθεί, αν η μεταβολή του κρυσταλλογραφικού προσανατολισμού του υποστρώματος του υλικού σε σχέση με την κατεύθυνση κοπής είναι γνωστή (Lee, 1990) [94]. Παρόλα αυτά λίγα είναι γνωστά για τον πραγματικό ρόλο της δόνησης της δύναμης κοπής, η οποία είναι ένας βασικός παράγοντας στη φθορά του εργαλείου, ενώ λίγες μελέτες έχουν διεξαχθεί για την εύρεση του μηχανισμού δημιουργίας αποβλίττου, από την πλευρά της δύναμης κοπής.

Σε αυτή τη μελέτη παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων ΜΔ στις δυνάμεις κοπής κατά τη νανοκοπή μονοκρυσταλλικού πυριτίου. Η

προσομοιωμένη διαδικασία κοπής εξηγήθηκε από την πλευρά της ολίσθησης και της παραμόρφωσης του πλέγματος και ερευνήθηκε ο λόγος της δόνησης της δύναμης κοπής. Διεξήχθησαν προσομοιώσεις διαφόρων ακμών κοπής για διάφορα βάθη κοπής και δόθηκε το κατώφλι του βάθους κοπής για τη δημιουργία αποβλίττου.

### ***Υλικά και Μέθοδοι***

Το μοντέλο προσομοίωσης, το οποίο αποτελείται από ένα τρισδιάστατο εργαλείο διαμαντιού και μονοκρυσταλλικό υλικό κατεργασίας, τα οποία φαίνονται στην Εικόνα 4.12. Το υλικό κατεργασίας έχει χωρισθεί σε τρία διαφορετικά στρώματα, το οριακό, το θερμοστατικό και το στρώμα Newton. Το οριακό στρώμα χρησιμοποιείται για τη διατήρηση σταθερότητας του υλικού και για την αποφυγή μετακίνησης κατά την κοπή. Το θερμοστατικό στρώμα διατηρούν σταθερή θερμοκρασία στους 300 K, άγοντας την υψηλή παραγόμενη θερμότητα μακριά από την περιοχή κοπής. Τα άτομα στο στρώμα Newton αλληλεπιδρούν με το εργαλείο ακολουθώντας το νόμο του Νεύτωνα. Το τρισδιάστατο εργαλείο κοπής της προσομοίωσης μοντελοποιήθηκε με γωνία αποβλίττου  $0^\circ$  και γωνία ελευθερίας  $12^\circ$ .



**Εικόνα 4.18:** Σχέδιο του μοντέλο προσομοίωσης ΜΔ [90]

## Συνθήκες προσομοίωσης ΜΔ

Οι λεπτομέρειες για το υλικό κατεργασίας και τις συνθήκες προσομοίωσης συνοψίζονται στον Πίνακα 4.3.

**Πίνακας 4.3:** Υλικό κατεργασίας και συνθήκες προσομοίωσης [90]

| Υλικό κατεργασίας και παράμετροι προσομοίωσης |                              |                  |                      |
|---|------------------------------|------------------|----------------------|
| Υλικό κατεργασίας                             | Μονοκρυσταλλικού πυριτίου    | Ακτίνα εργαλείου | 1, 1.5, 2 και 2.5 nm |
| Δομή υλικού                                   | Κυβικό διαμαντιού            | Δυναμικό         | Morse και Tersoff    |
| Διαστάσεις υλικού                             | 20a x 15a x 24a, a = 5.413 Å | Κατεύθυνση κοπής | [100] σε (100)       |
| Διαστάσεις εργαλείου                          | Ακτίνα εργαλείου = 4 nm      | Ταχύτητα κοπής   | 400 m/s              |

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

### Διατομικό δυναμικό

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

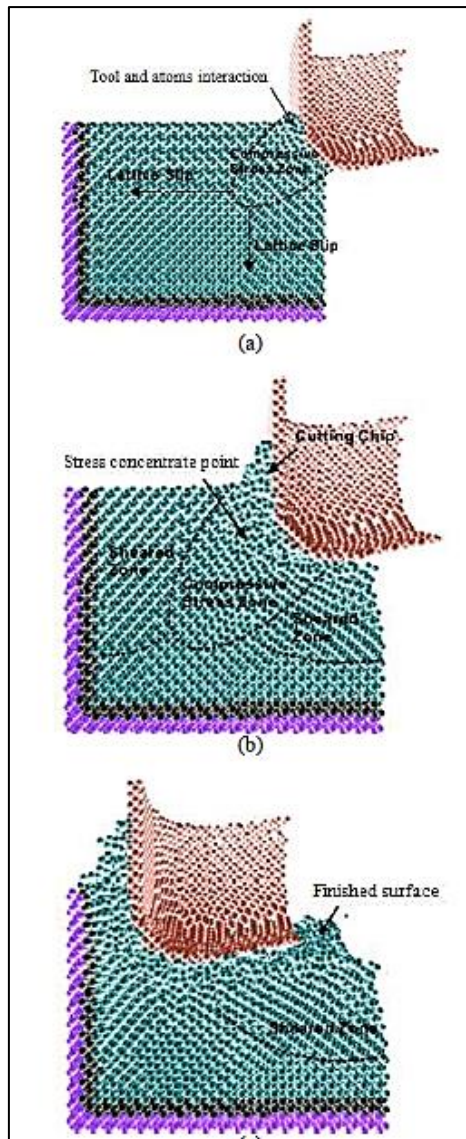
Στις προσομοιώσεις, εφαρμόστηκαν τα δυναμικά Tersoff για την αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων των Si στο υλικό κατεργασίας και δυναμικό Morse για την αλληλεπίδραση μεταξύ του εργαλείου διαμαντιού και του πυριτίου. Το εργαλείο θεωρείται ως άκαμπτο σώμα, ώστε τα άτομα στο εργαλείο αν είναι σταθερά και χωρίς αλληλεπιδράσεις μεταξύ τους. Οι παράμετροι που χρησιμοποιήθηκαν για τη δυναμική ενέργεια φαίνονται στον Πίνακα 4.4.

**Πίνακας 4.4:** Παράμετροι δυναμικού [90]

| Παράμετροι δυναμικού Tersoff |             |               |                          |            |                            |
|------------------------------|-------------|---------------|--------------------------|------------|----------------------------|
| A (eV)                       | 1.8308 x 10 | $\beta$       | 1.1 x 10                 | H          | -5.9825 x 10 <sup>-1</sup> |
| B (eV)                       | 4.7118 x 10 | n             | 7.834 x 10 <sup>-1</sup> | R (nm)     | 0.27                       |
| $\lambda$ (nm)               | 24.799      | c             | 1.0039 x 10 <sup>5</sup> | S (nm)     | 0.30                       |
| $\mu$ (nm)                   | 17.322      | d             | 1.6217 x 10 <sup>1</sup> |            |                            |
| Παράμετροι δυναμικού Morse   |             |               |                          |            |                            |
| D (eV)                       |             | $\alpha$ (nm) |                          | $r_0$ (nm) |                            |
| 0.423                        |             | 4.6487        |                          | 1.9475     |                            |

### *Αποτελέσματα και συζήτηση*

Οι προσομοιωθείσες διαδικασίες κοπής φαίνονται στην Εικόνα 4.19. Υπάρχει εμφανής ολίσθηση και παραμόρφωση πλέγματος για κάθε βήμα του εργαλείου και αλληλεπίδρασή του με το υλικό (Εικόνα 4.13a-c). Φαίνεται ότι η ενεργή γωνία αποβλίττου, η οποία είναι πάντα αρνητική (Fang et al., 2007) [93], παράγει υδροστατική πίεση, η οποία έχει σημαντική επίδραση στη δημιουργία αποβλίττου, στην παραμόρφωση κάτω από την επιφάνεια και στην παραγωγή κατεργασμένης επιφάνειας.



**Εικόνα 4.19:** Τομή τρισδιάστατης διαδικασίας κοπής: (a) Αρχική αλληλεπίδραση μεταξύ εργαλείου και υλικού, (b) Δημιουργία αποβλίττου, (c) Κατεργασμένη επιφάνεια [90]

Η Εικόνα 4.19a δείχνει την αρχική αλληλεπίδραση μεταξύ του εργαλείου και του υλικού κατεργασίας. Το εργαλείο κοπής αρχικά εισήγαγε την υδροστατική πίεση κάτω από την ακμή του εργαλείου. Λόγω της εξώθησης αποβλίττου, συμβαίνει παραμόρφωση του πλέγματος στην περιοχή επαφής. Εν τω μεταξύ, η ζώνη της συμπίεσης οδηγεί σε ολίσθηση πλέγματος ισοδύναμης κλίμακας σε όλο το υλικό κατεργασίας. Όσο το εργαλείο κινείται, η ζώνη συμπίεσης κινείται προς τα εμπρός, το οποίο φαίνεται Στην Εικόνα 4.19b. Το σημείο συγκέντρωσης τάσης διαχωρίζει τα παραμορφωμένα άτομα πυριτίου να ρέουν προς διαφορετικές κατευθύνσεις και διαμορφώνει απόβλιττα κοπής και κατεργασμένη επιφάνεια, αντίστοιχα. Η κατεργασμένη επιφάνεια παράγεται μετά την κοπή, η οποία είναι λεία και επαναφέρεται λόγω της χαλάρωσης του υλικού, όπως φαίνεται στην Εικόνα 4.19c.



## Δόνηση δύναμης κοπής

Η δύναμη που δρα σε ένα ανεξάρτητο άτομο υπολογίζεται, αθροίζοντας τις δυνάμεις που συμβάλλουν τα γειτονικά άτομα. Οι δυνάμεις βρίσκονται από τα διατομικά δυναμικά Morse. Η δύναμη κοπής εκφράζεται ως το άθροισμα της συνολικής δύναμης όλων των ατόμων του εργαλείου.

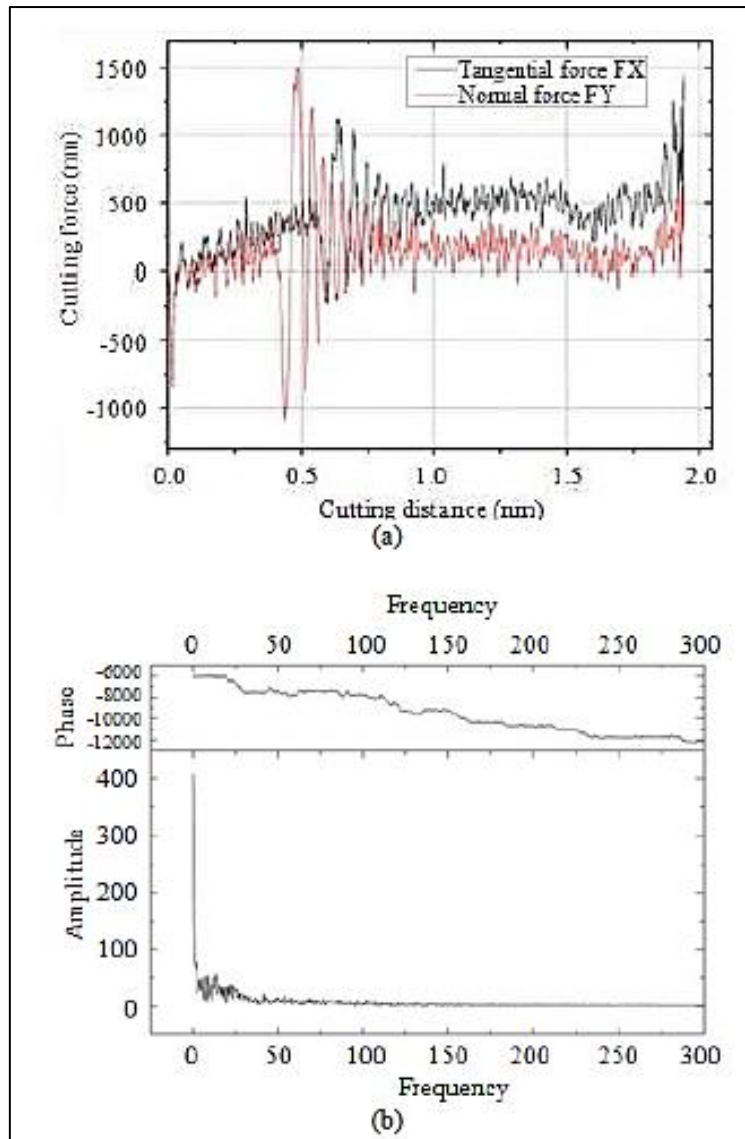
Η Εικόνα 4.20 δείχνει τη δόνηση της δύναμης κοπής κατά τη διαδικασία κοπής. η Εικόνα 4.20a είναι οι τυπικές καμπύλες της εφαπτομενικής και της κάθετης δύναμης βάθους κοπής 2 nm, με ακμή κοπής του εργαλείου 2 nm. Το η Εικόνα 4.20b δείχνει τη συχνότητα δόνησης της δύναμης κοπής, όπου φαίνονται δυο κύριες συχνότητες, οι οποίες αντιπροσωπεύουν δόνηση μικρής κλίμακας και κωνική ημιτονοειδή ταλάντωση, αντίστοιχα.

Αρχικά, οι δυνάμεις κοπής είναι αρνητικές λόγω της έλξης που ασκεί η επιφάνεια του εργαλείου στα άτομα του υλικού, όταν το εργαλείο κοπής, αλλά χωρίς να έρχεται σε επαφή με το υλικό κατεργασίας. Όταν η ακμή του εργαλείου ασκεί υδροστατική πίεση στο υλικό, δημιουργείται θλιπτική τάση και ολίσθηση του πλέγματος. Επίσης αρχικά μπορεί να εμφανιστεί μικρή δόνηση. Η δύναμη κοπής αυξάνεται βαθμιαία, καθώς η διεπιφάνεια μεταξύ του εργαλείου και του υλικού μεγαλώνει, έως ότου η όψη του εργαλείου να εφάπτεται πλήρως με το υλικό. Όπως φαίνεται στο Σχήμα 4, η μικρή δόνηση οφείλεται στην αταξία του πλέγματος και στη ροή ατόμων στην παρακείμενη περιοχή του εργαλείου με το υλικό.

Η Εικόνα 4.21a είναι το σχέδιο για την αταξία του πλέγματος χρησιμοποιώντας Κεντρο Συμμετρικές Παραμέτρους (CSP) (Tsuzuki et al., 2007) [95]. Οι CSP για κάθε άτομο καθορίζονται ακολούθως:

$$P = \sum_{i=1,n} |R_i + R_{i+n}|^2 \quad (4.1)$$

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



Εικόνα 4.20: Δόνηση δύναμης κοπής: (a) Δύναμη κοπής (b) Συχνότητα της δύναμης κοπής [90]

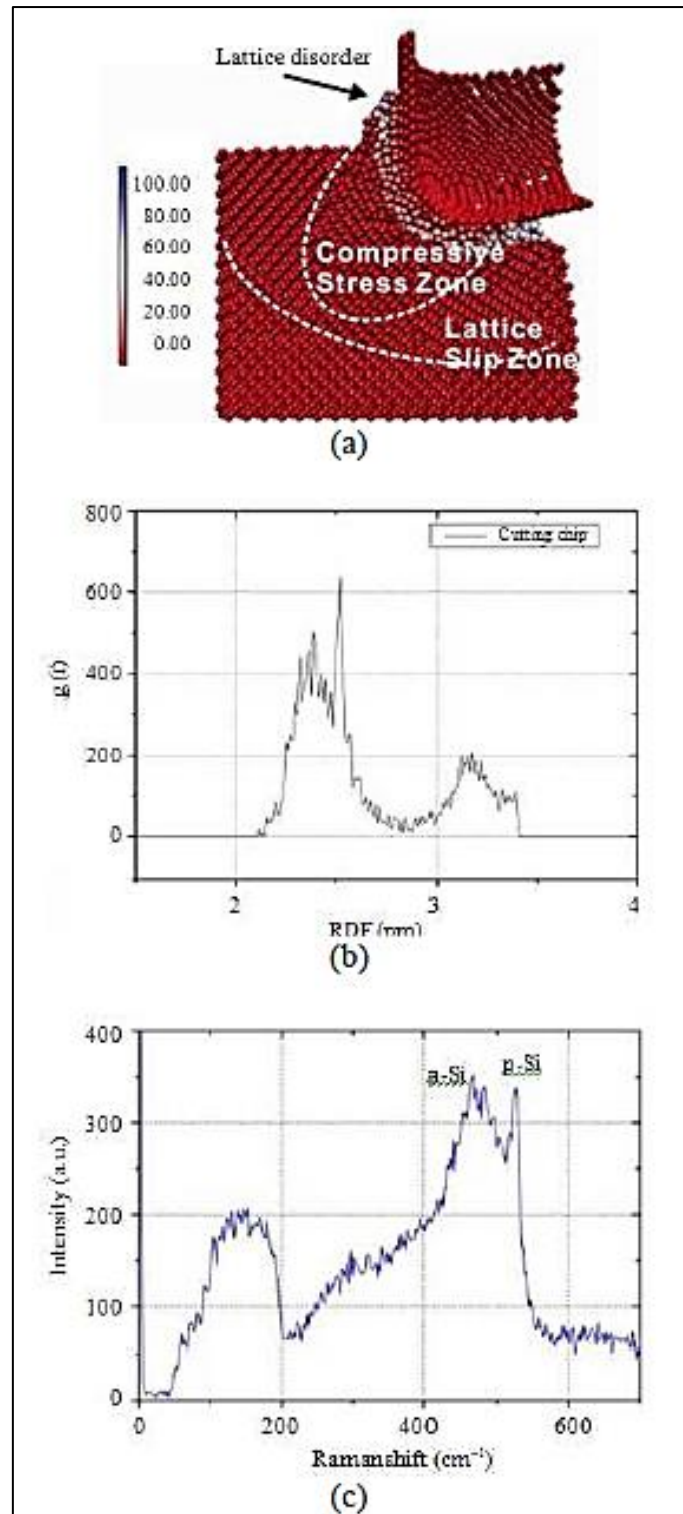
Τα απόβλιττα κοπής είναι σχεδόν άμορφα, λόγω της εξώθησης του εργαλείου που προκαλείται από την παραμόρφωση και την ολίσθηση του πλέγματος, τα οποία φαίνονται στην Εικόνα 4.21b, χρησιμοποιώντας μετρήσεις συνάρτησης ακτινικής κατανομής (RDF):

$$g(r,r') = \rho(r,r') / \rho(r) \quad (4.2)$$

όπου,  $\rho(r, r')$  είναι ο αριθμός των ατόμων σε  $r \rightarrow r + \Delta r$ ,  $\rho(r)$  είναι ο μέσος όρος της συνολικής παραμέτρου. Η RDF ποσοτικά αναλύει τις δομικές αλλαγές στο υλικό κατεργασίας σε μορφή ιστογράμματος, εκτιμώντας το τις στατιστικές πληροφορίες της διακύμανσης του μήκους του δεσμού. Τα

αποτελέσματα της RDF είναι σε συμφωνία με τη φασματοτοσκοπία laser micro-Raman του πραγματικού αποβλίττου κοπής του πυριτίου, όπως φαίνονται στην Εικόνα 4.21c.

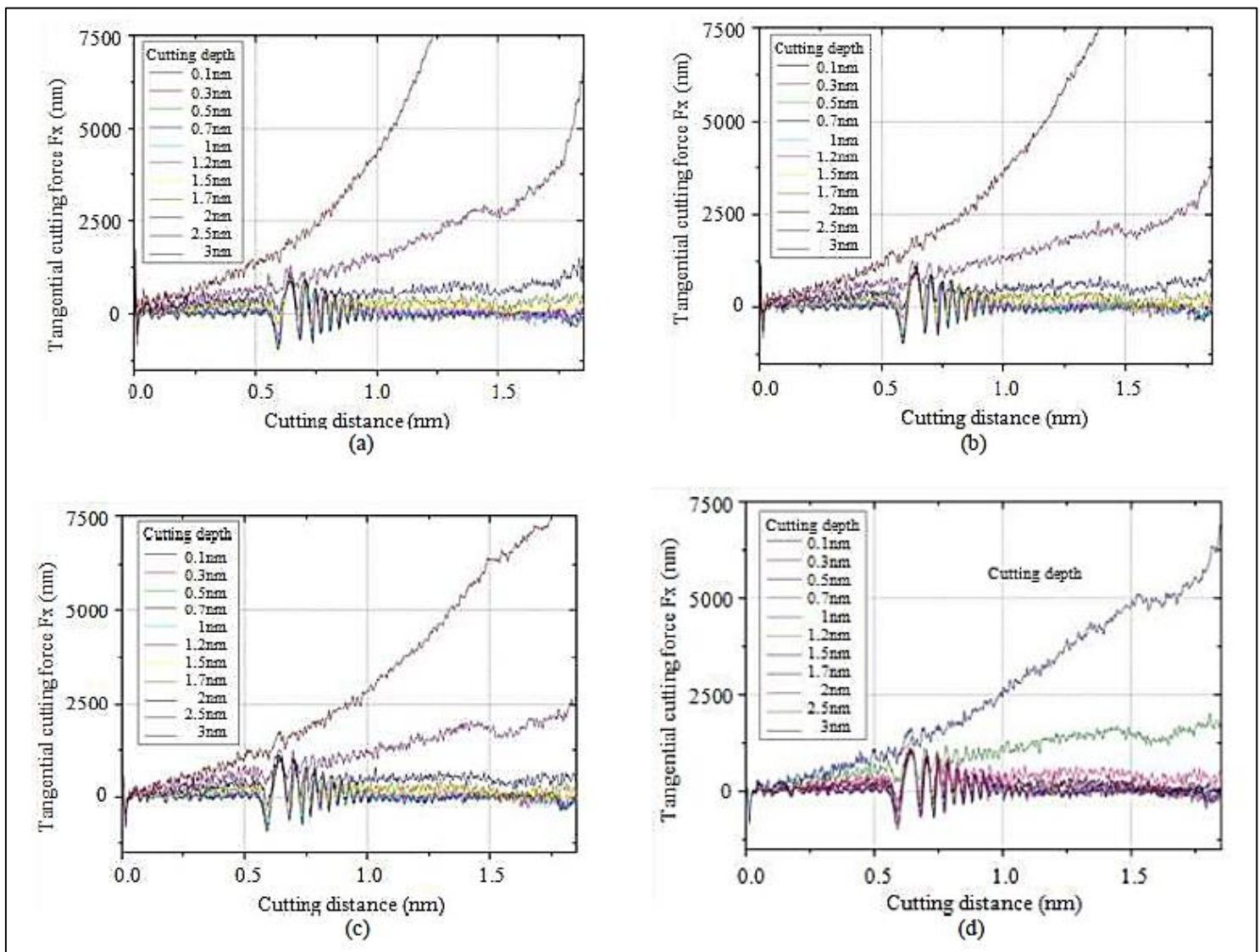
Η κωνική ημιτονοειδής ταλάντωση εμφανίζεται όταν η εξώθηση που προκαλείται από την ολίσθηση του πλέγματος εκτείνεται μέχρι το κατώφλι και το υλικό διατμείται στο στρώμα ολίσθησης του πλέγματος. Η ταλάντωση είναι ο κύριος λόγος για τη φθορά του εργαλείου και της θραύσης της επιφάνειας. Στη συνέχεια, επιτυγχάνεται νέα ισορροπία, μετά τη διάτμηση και μικρή ταλάντωση συμβαίνει, καθώς το εργαλείο κινείται μέσω εξώθησης που προκαλεί παραμόρφωση του υλικού και παραγωγή φινιρισμένης επιφάνειας.  
[90]



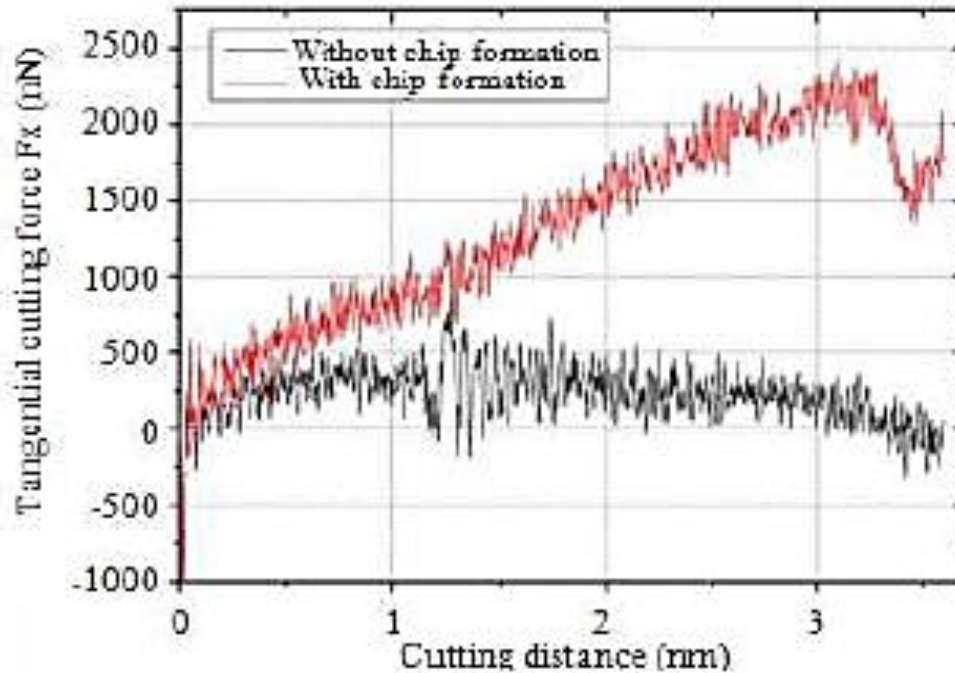
**Εικόνα 4.21:** Παραμόρφωση πλέγματος: (a) Σχέδιο για την παραμόρφωση πλέγματος, (b) RDF του αποβλίττου κοπής, (c) Φάσμα Raman του πραγματικού αποβλίττου κοπής [90]

### Διακύμανση δύναμης κοπής

Στην Εικόνα 4.22 φαίνονται οι προσομοιώσεις για διάφορα βάθη κοπής, χρησιμοποιώντας δυνάμεις κοπής για διάφορες ακμές κοπής του εργαλείου. Φαίνεται ότι όταν το βάθος κοπής είναι κάτω από μια συγκεκριμένη τιμή, όλες οι δυνάμεις είναι ομογενείς και χωρίς εμφανή αύξηση, δείχνοντας μηδενική διαμόρφωση αποβλίττου κοπής. Όσο το βάθος κοπής είναι πάνω από μια κρίσιμη τιμή, οι δυνάμεις κοπής αυξάνονται, φαίνεται η συσσώρευση αποβλίττων κοπής στην όψη του εργαλείου. Στην Εικόνα 4.23 είναι οι τυπικές καμπύλες δυνάμεων κοπής με και χωρίς δημιουργία αποβλίττου.



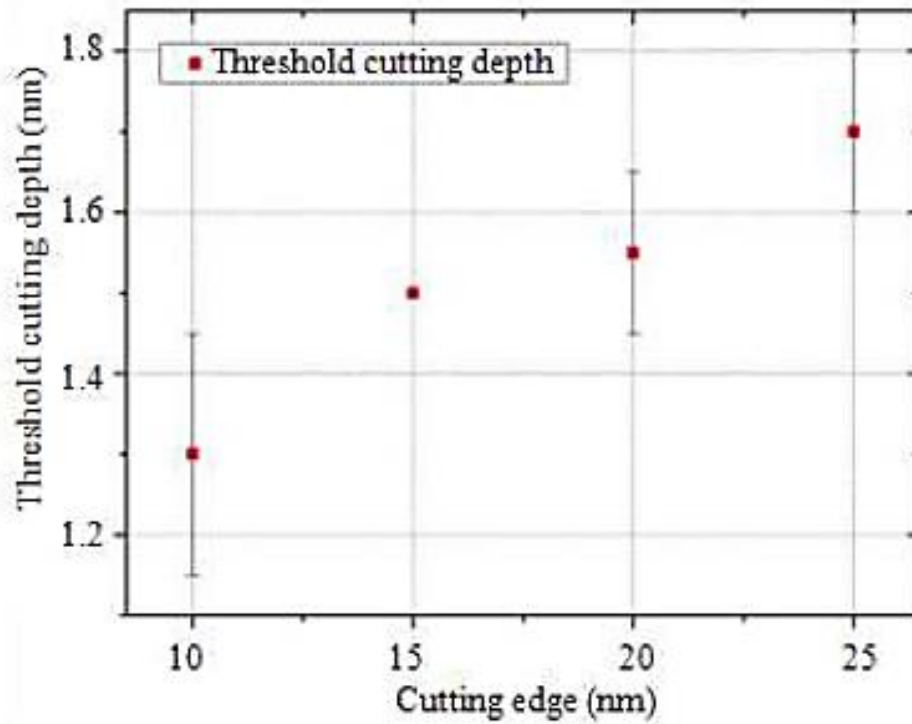
**Εικόνα 4.22:** Δυνάμεις κοπής για διάφορα βάθη, (a) ακμή κοπής 1 nm, (b) ακμή κοπής 1.5 nm, (c) ακμή κοπής 2 nm, (d) ακμή κοπής 2.5 nm [90]



Εικόνα 4.23: Δύναμη κοπής για δημιουργία αποβλίττου [90]

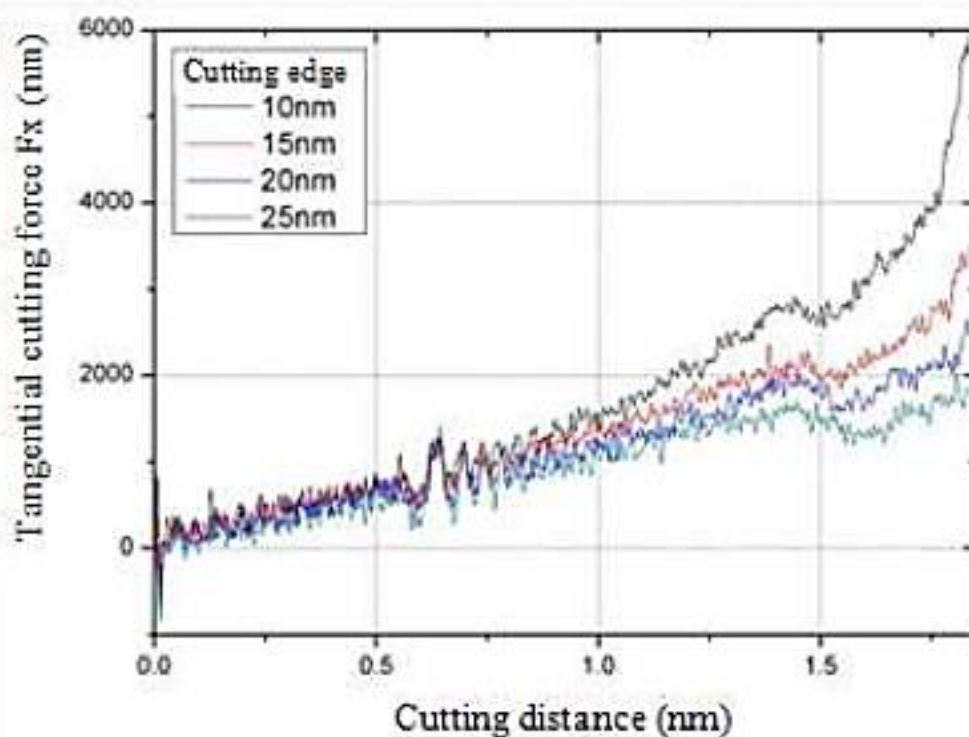
Όταν το βάθος κοπής είναι μεγαλύτερο από το κατώφλι δημιουργίας αποβλίττου, η δύναμη κοπής αυξάνεται βαθμιαία, όσο το απόβλιττο συσσωρεύεται στην όψη του εργαλείου και στη συνέχεια εμφανίζει μικρή μείωση για την απομάκρυνση αποβλίττου. Παρόλα αυτά, όταν το βάθος κοπής είναι κάτω από το κατώφλι, τα παραμορφωμένα άτομα πυριτίου μπορούν να ρέουν μόνο κατά μήκος της ακμής κοπής, έτσι, η δύναμη κοπής δεν εμφανίζει αύξηση.

Η Εικόνα 4.24 δείχνει ότι το κατώφλι δημιουργίας αποβλίττου για διάφορες ακμές εργαλείου. Η τιμή αυξάνεται σε ένα μικρό εύρος, όσο η τιμή της ακμής του εργαλείου αυξάνεται.



Εικόνα 4.24: Κατώφλι βάθους κοπής για δημιουργία αποβλίττου [90]

Η Εικόνα 4.25 είναι η διακύμανση της δύναμης κοπής λόγω μεταβολής της ακμής κοπής του εργαλείου. Το βάθος κοπής που χρησιμοποιήθηκε είναι 2.5 nm, το οποίο είναι πάνω από το κατώφλι δημιουργίας αποβλίττου. Οι δυνάμεις κοπής μειώνονται όσο η τιμή της ακμής κοπής μειώνεται. Όσο το κατώφλι για τη δημιουργία αποβλίττου κοπής αυξάνεται, η συσσώρευση αποβλίττου γίνεται μικρότερη και η δύναμη κοπής μειώνεται ανάλογα.



Εικόνα 4.25: Δύναμη κοπής για διάφορες ακμές κοπής [90]

#### 4.5 Φθορά εργαλείου διαμαντιού κατά την νανοκοπή σιδήρου

Οι Maekawa και Itoh [96] ερεύνησαν το ρόλο της τριβής στις νανοκοπές χρησιμοποιώντας προσομοίωση ΜΔ με βάση τη μέθοδο Nose-Hoover [97]. Οι προσομοιώσεις ΜΔ διεξήχθησαν με εργαλείο που προσομοιάζει το διαμάντι και χαλκό ως υλικό κατεργασίας. Χρησιμοποιήθηκαν συναρτήσεις δυναμικού Morse με διάφορα μεγέθη ενέργειας συνοχής ώστε να προσεγγισθεί κατάλληλα η τριβή στη διεπιφάνεια αποβλίττου-εργαλείου καθώς και στα υλικά του εργαλείου και της κατεργασίας. Η χρήση εργαλείου παρόμοιου με διαμάντι (αντί κανονικού διαμαντιού), η επιλογή του χαλκού ως υλικό κατεργασίας και του εργαλείου διαμαντιού, όπου η φθορά του εργαλείου είναι αμελητέα, και η επιλογή δυναμικών τύπου Morse είναι μερικά από τα μειονεκτήματα της έρευνας σε αυτό τον τομέα.

Είναι γνωστό ότι το διαμάντι φθείρεται με την εκτριβή (χημική και διάχυση) κατά την κατεργασία ή τη λείανση χάλυβα που περιέχει χαμηλά επίπεδα άνθρακα [98,99]. Υπό συνθήκες κοπής, η θερμοκρασία μπορεί να είναι αρκετά υψηλή ώστε η άκρη του διαμαντιού να γραφητοποιηθεί καθώς και η παρουσία του σιδήρου επιταχύνει τη διάχυση του άνθρακα στο σίδηρο και διαμορφώνει καρβίδιο του σιδήρου. Ο Loladze [100] επιβεβαίωσε το φαινόμενο διεξάγοντας

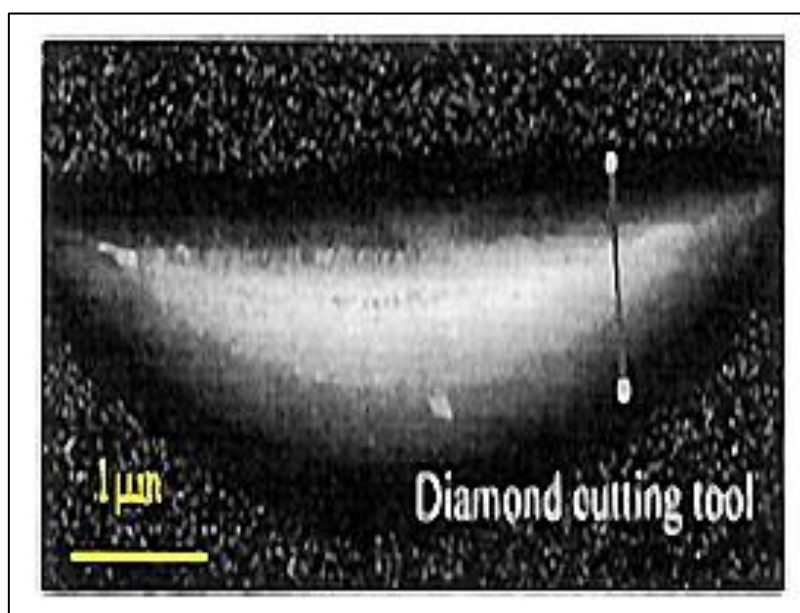


ελέγχους του ζεύγους διάχυσης (καθαρός σίδηρος και διαμάντι) σε διαφορετικές θερμοκρασίες. Η μελέτη του φαινομένου μέσω προσομοίωση ΜΔ επιτρέποντας αλληλεπιδράσεις μεταξύ του υλικού κατεργασίας σιδήρου και του εργαλείου διαμαντιού στη διεπιφάνεια αποβλίττου – εργαλείου, και χρησιμοποιώντας το πραγματικό δυναμικό του διαμαντιού, βοηθάνε στην κατανόηση της διαδικασίας της φθοράς. Μια τέτοια έρευνα προϋποθέτει την αντιμετώπιση σύνθετων δυναμικών διαμαντιού, να ληφθεί υπόψη η φάση μετασχηματισμού από κυβικό διαμάντι σε εξαγωνικό γραφίτη και η αντίδρασή ή η διάχυση του στο υλικό κατεργασίας που τελικά διαμορφώνει  $Fe_3C$ . [21]

#### 4.6 Τρισδιάστατη προσομοίωση Μοριακής Δυναμικής της νανοκοπής

##### *Δημιουργία του μοντέλου προσομοίωσης ΜΔ*

Καθώς οι δυνατότητες των υπολογιστών βελτιώνονται, είναι εφικτή η εκτέλεση προσομοιώσεων ΜΔ μεγάλης κλίμακας σε λογικό χρόνο. Ένα κοπτικό εργαλείο με 3Δ σχήμα για την προσομοίωση ΜΔ φαίνεται στην Εικόνα 4.20.

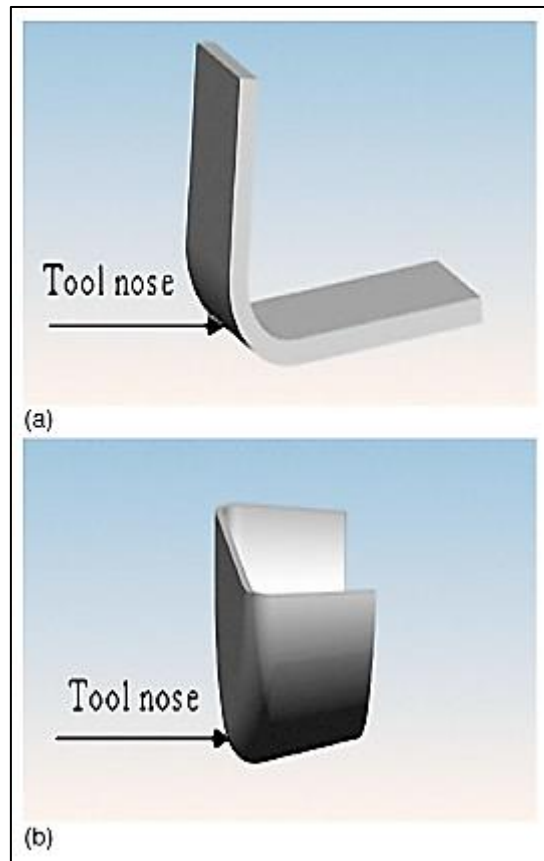


**Εικόνα 4.26:** Απεικόνιση κοπτικής ακμής με ομοεστιακό laser μικροσκόπιο σάρωσης [101]

Με χρήση του κοπτικού εργαλείου, τα αποτελέσματα της προσομοίωσης ΜΔ βρίσκονται κοντά στην πραγματική κατεργασία κοπής. Στη μελέτη αυτή,

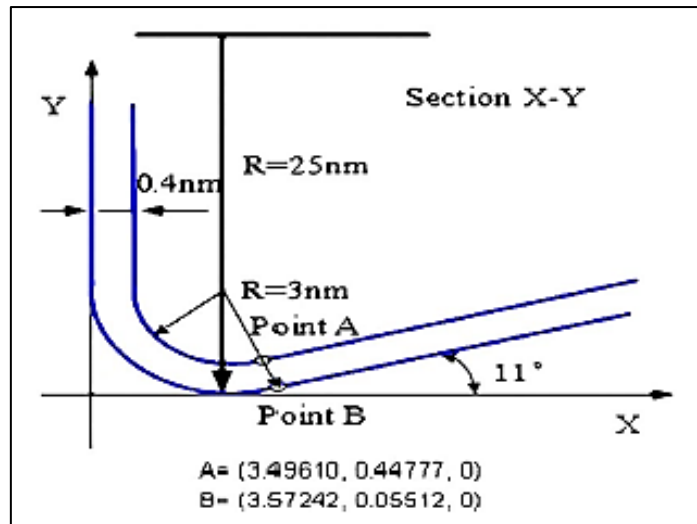
χρησιμοποιούνται η μύτη της ακτίνας των 25 nm και η ακτίνα της κοπτικής ακμής των 3 nm για να μειωθεί ο υπολογιστικός χρόνος.

Το κάθετο κοπτικό εργαλείο 2.5Δ που χρησιμοποιείται στα μοντέλα προσομοίωσης ΜΔ φαίνονται στην Εικόνα 4.27a : το μοντέλο του κοπτικού εργαλείου σχηματίζεται με διέλαση του προφίλ του 2Δ εργαλείου. Το τρισδιάστατο εργαλείο που σχηματίζεται φαίνεται στην Εικόνα 4.27b. Οι λεπτομέρειες του κοπτικού εργαλείου περιγράφονται ακολούθως.



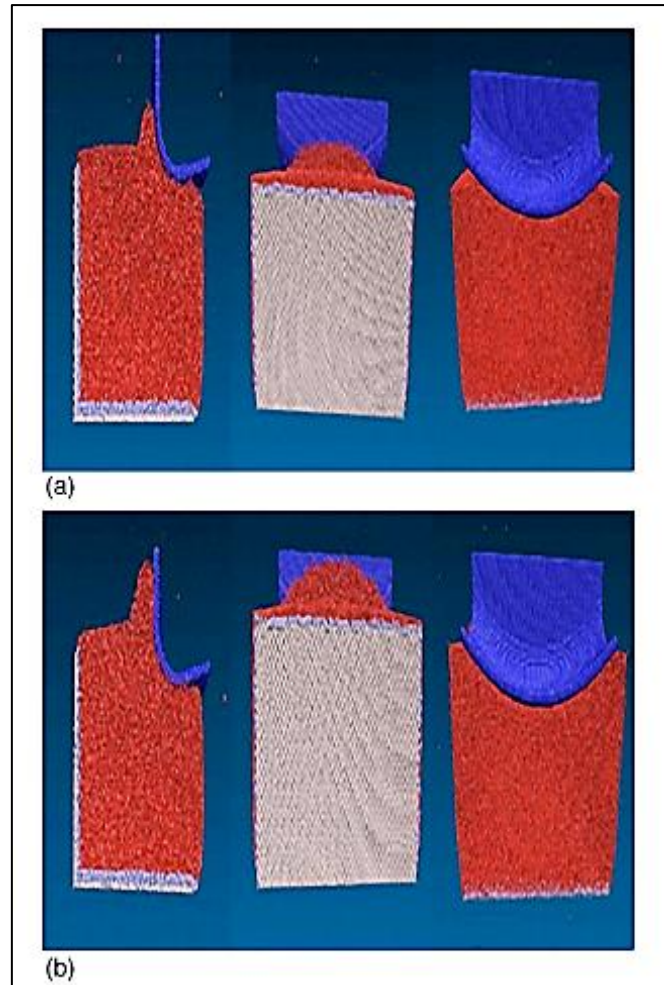
**Εικόνα 4.27:** Σχηματική απεικόνιση μοντέλου κοπτικού εργαλείου 2.5 Δ και 3Δ (a) μοντέλο κοπτικού εργαλείου 2.5 Δ (b) μοντέλο κοπτικού εργαλείου 3Δ [101]

Το σκιασμένο τμήμα στο διδιάστατο επίπεδο προκύπτει όπως φαίνεται στην Εικόνα 4.28.



Εικόνα 4.28: Σχηματική αναπαράσταση της δημιουργίας του μοντέλου ΜΔ κοπτικού εργαλείου [101]

Με περιστροφή ως προς τον  $y$  άξονα, παράγεται ένα κομμάτι όμοιο με δακτυλίδι γύρω από το σώμα. Το μέρος αυτό ονομάζεται μέρος 1. Από την άλλη πλευρά, τα άτομα μονοκρυσταλλικού διαμαντιού βρίσκονται στις περιοχές  $0 < x < 40$ ,  $0 < y < 40$ , και  $-100 < z < 100$  των απαραμόρφωτων περιοχών των αποβλίττων πάχους 1 και 3 nm, τα οποία ονομάζονται τμήμα 2. Το μοντέλο ΜΔ του τρισδιάστατου εργαλείου διαμαντιού λαμβάνεται με λειτουργία τομής μεταξύ των τμημάτων 1 και 2. Η γωνία κλίσης και η γωνία ελευθερίας είναι  $0^\circ$  και  $11^\circ$  αντίστοιχα. Η συνοριακή συνθήκη που επιλέγεται είναι στη βάση και στην πλευρά εκτομής του τεμαχίου, όπως φαίνεται στην Εικόνα 4.23.



Εικόνα 4.29: Αποτελέσματα της τρισδιάστατης προσομοίωσης ΜΔ (α) 1nm και (β) 3nm [101]

### *Προσεγγίσεις προσομοίωσης και αποτελέσματα*

#### α. Προσομοίωση ΜΔ ορθογωνικής κοπής

Το τρισδιάστατο μοντέλο προσομοίωσης για τη νανομετρική κοπή μονοκρυσταλλικού πυριτίου πραγματοποιείται μέσω της μεθόδου που συζητήθηκε. Μεταξύ οποιουδήποτε ζεύγους πυριτίου και διαμαντιού θεωρούμε ότι ισχύει η συνάρτηση δυναμικού Tersoff. Τα πάχη του απαραμόρφωτου αποβλίττου επιλέγονται 1 και 3 nm, αντίστοιχα. Κατά συνέπεια, ο λόγος του πάχους του απαραμόρφωτου αποβλίττου προς την ακτίνα της κοπτικής ακμής είναι 1/3 και 1. Το μέγεθος του τεμαχίου είναι 35α x55α x75α (LxHxW) (Πίνακας 4.5)

**Πίνακας 4.5 :** Χαρακτηριστικά τεμαχίου και παράμετροι προσομοίωσης [101]

|                                |   |
|--------------------------------|---|
| δυναμικό προσομοίωσης          | μοντέλο Tersoff                                     |
| υλικό κατεργασίας              | μονοκρυσταλλικό πυρίτιο                             |
| δομή υλικού κατεργασίας        | δομή διαμαντιού                                     |
| διαστάσεις τεμαχίου            | 35α x 55α x 75α, α=0.453nm                          |
| διαστάσεις εργαλείου           | εργαλείο με ακτίνα ακμής 25nm και μύτη ακτίνας 3 nm |
| κατεύθυνση κοπής               | <100> στην επιφάνεια(100)                           |
| πάχος απαραμόρφωτου αποβλίττου | 3 nm  |
| ταχύτητα κοπής                 | 400 m/s   |
| χρονικό βήμα                   | 5 fs  |

Η αρχική θερμοκρασία του τεμαχίου είναι 293K προσαρμόζοντας την ταχύτητα των ατόμων του στρώματος θερμοκρασίας σε κάθε χρονικό βήμα. Στην προσομοίωση χρησιμοποιείται ταχύτητα κοπής 400 m/s. Υπάρχει μικρή επίδραση λόγω της ταχύτητας κοπής στη διαδικασία προσομοίωσης ΜΔ.

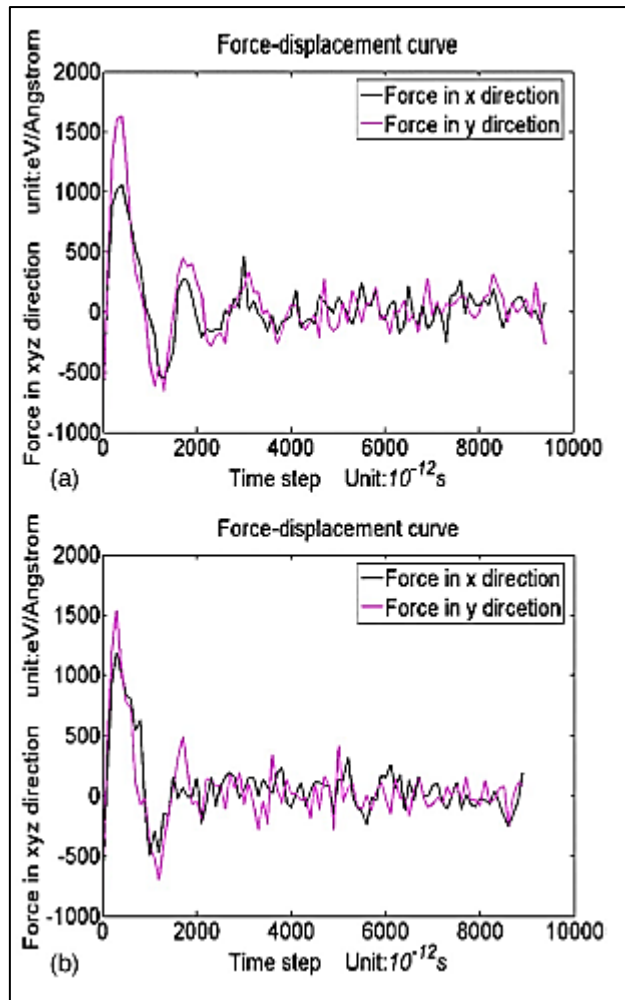
Όταν το πάχος του απαραμόρφωτου αποβλίττου είναι 1 nm, η επιφάνεια επαφής μεταξύ του υλικού και του κοπτικού εργαλείου είναι πολύ μικρή. Δεν υπήρχαν ρωγμές, αλλά παρατηρήθηκαν πλαστικές και ελαστικές παραμορφώσεις στην επιφάνεια του τεμαχίου, όπως φαίνεται στην Εικόνα 4.29(a). Με το κοπτικό εργαλείο να κινείται προς τα εμπρός, το κρυσταλλικό πλέγμα του πυριτίου σπάει ή ανακατατάσσεται όταν η ενέργεια παραμόρφωσης στο κρυσταλλικό πλέγμα πλησιάζει μια ορισμένη τιμή. Όταν η παραμορφωμένη περιοχή γίνεται σταδιακά μεγαλύτερη, παρατηρούνται μετατοπίσεις στην περιοχή κοπής. Κάποιες από αυτές μετακινούνται στην παραμορφωμένη ζώνη όταν πλησιάσουν το υπόστρωμα. Το απόβλιττο σχηματίζεται ως αποτέλεσμα της εξαφάνισης των μετατοπίσεων. Οι υπόλοιπες μετατοπίσεις μετακινούνται προς τα κάτω και συμπιέζονται εντός του τεμαχίου κάτω από την κοπτική ακμή. Μόλις ξεπεραστεί η κοπτική ακμή, σχεδόν όλες οι μετατοπίσεις που έχουν διεισδύσει αρχίζουν να κινούνται προς τα πίσω και τελικά εξαφανίζονται από το υπόστρωμα λόγω της επαναφοράς του τεμαχίου. Όταν το κοπτικό εργαλείο ξεπεράσει το τεμάχιο, δεν σχηματίζονται απόβλιττα σε οποιαδήποτε πλευρά του κοπτικού εργαλείου, αλλά εμφανίζονται απόβλιττα μπροστά από το εργαλείο. Πολλά άτομα μετακινούνται από τη θέση τους κατά τη διαδικασία κοπής.

Όταν το πάχος του απαραμόρφωτου αποβλίττου αυξηθεί σε 3 nm, περισσότερα άτομα συμπιέζονται στο ίδιο χρονικό βήμα από το κοπτικό εργαλείο, όπως φαίνεται στην Εικόνα 4.29 (b). Με το κοπτικό εργαλείο να κινείται προς τα

εμπρός, προκύπτουν πάλι οι πλαστικές και ελαστικές παραμορφώσεις, όπως εξηγήθηκε παραπάνω. Το ελαστικό τμήμα των του παραμένοντος τμήματος επαναφέρεται και το πλαστικό τμήμα οδηγεί σε μόνιμη παραμόρφωση. Υπάρχουν απόβλιττα που εξωθούνται από την επιφάνεια κλίσης του κοπτικού εργαλείου.

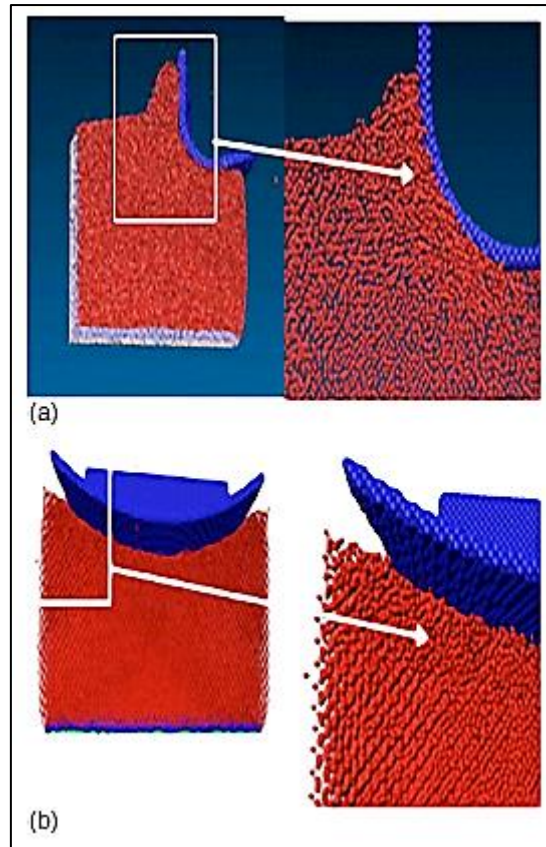
Στις προσομοιώσεις ΜΔ, παρακολουθούνται οι δυνάμεις κοπής κατά τη διάρκεια της διαδικασίας κοπής. Είναι σημαντικό για την πρόβλεψη των δυνάμεων κοπής, διότι η δύναμη κοπής συνδέεται στενά με το μηχανισμό κοπής και τη διάρκεια ζωής του εργαλείου. Η δύναμη κοπής είναι η διατομική δύναμη μεταξύ του τεμαχίου και του εργαλείου, η οποία υπολογίζεται ως το άθροισμα όλων των δυνάμεων αλληλεπίδρασης που παράγουν τα άτομα του τεμαχίου στα άτομα του εργαλείου.

Οι πιο ενδιαφέρουσες δυνάμεις κοπής είναι η εφαπτομενική δύναμη  $F_x$  και η κάθετη δύναμη  $F_y$ . Οι Tanaka και Shimada[102] πρότειναν ότι είναι απαραίτητη μια σταθερή διαδικασία κοπής για την άμορφη δομή για την κοπή όλκιμων υλικών. Κατά συνέπεια, στην άμορφη περιοχή, η διαδικασία κοπής είναι σταθερή και συνεχής ώστε η διακύμανση της δύναμης κοπής να είναι σταθερή. Η Εικόνα 4.30 παρουσιάζει τη διακύμανση των δυνάμεων αυτών σε δύο κατευθύνσεις ακολουθώντας τη διακύμανση των χρονικών βημάτων σε συνθήκες πάχους απαραμόρφωτου αποβλίττου 1 και 3 nm, αντίστοιχα. Οι δυνάμεις στις δύο κατευθύνσεις είναι σταθερές λόγω της εμφάνισης της πλαστικής παραμόρφωσης στην περιοχή κοπής.



**Εικόνα 4.30:** Διακύμανση της δύναμης κοπής ως προς το χρονικό βήμα: (a) πάχος απαραμόρφωτου αποβλίττου 1 nm και (b) πάχος απαραμόρφωτου αποβλίττου 3 nm [101]

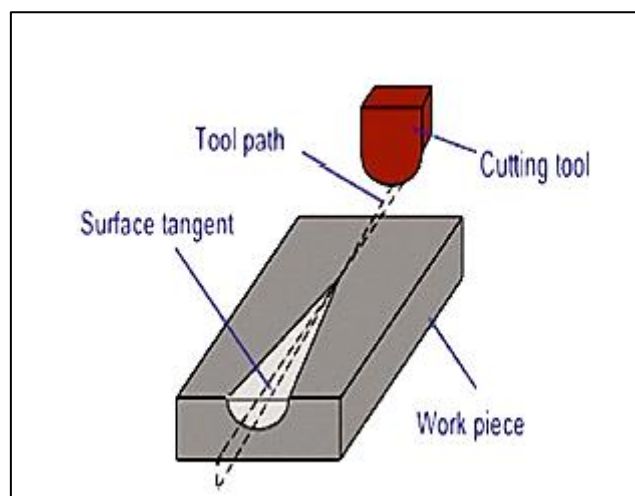
Παρατηρήθηκε άμορφος μετασχηματισμός σε όλο το μήκος της κοπτικής ακμής, όπως φαίνεται στην Εικόνα 4.31.



Εικόνα 4.31: Μετασχηματισμοί φάσης γύρω από την κοπτική ακμή [101]

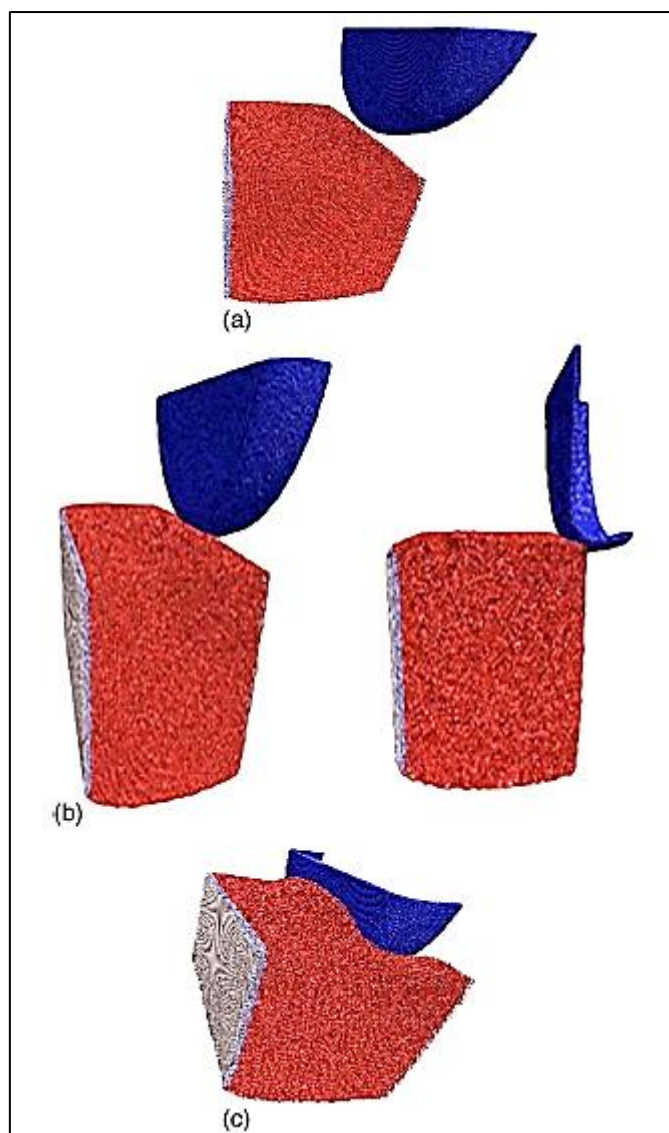
### *Προσομοίωση ΜΔ κοπής με κωνικότητα*

Διεξάχθησαν πειράματα προσομοίωσης ΜΔ κοπής με κωνικότητα με αυξανόμενο βάθος κοπής σε μονοκρυσταλλικό πυρίτιο ώστε να επαληθευτεί το προτεινόμενο μοντέλο [105]. Στην Εικόνα 4.32 παρουσιάζεται μια σχηματική αναπαράσταση της πειραματικής διάταξης.



Εικόνα 4.32: Σχηματική απεικόνιση του πειράματος κωνικής τομής με λόγο κλίσης 1:10000 [101]

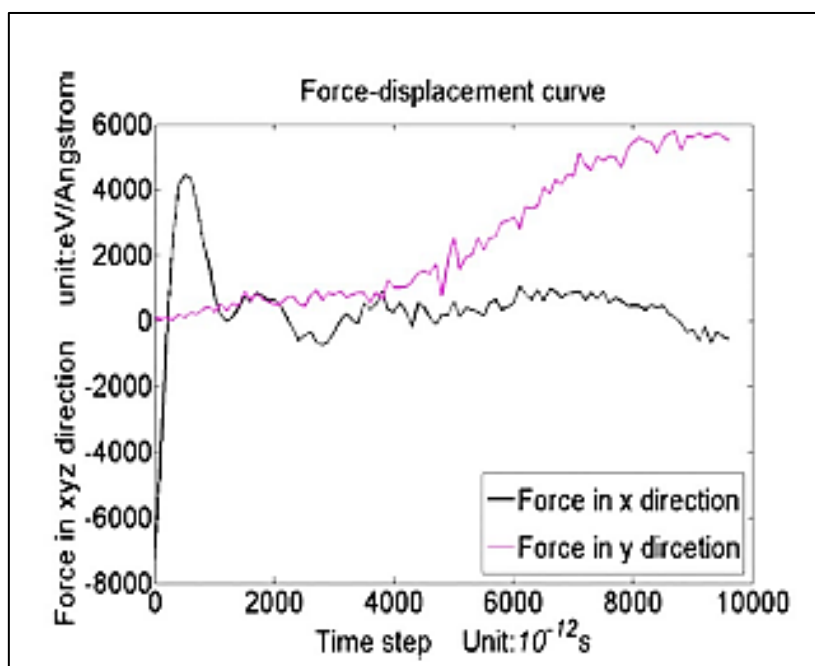




**Εικόνα 4.33:** Αποτελέσματα προσομοίωσης ΜΔ κωνικής κοπής (a) βήμα 0, (b)βήμα 500 και (c) βήμα 4500 [101]

Όπως φαίνεται από τα αποτελέσματα προσομοίωσης ΜΔ της Εικόνας 4.33(b), δεν υπάρχει σχηματισμός αποβλίττου στην έναρξη της διαδικασίας κοπής ούτε ελαστική παραμόρφωση. Η Εικόνα 4.33(c) δείχνει ότι οι πλαστικές και ελαστικές παραμορφώσεις καθώς και ο σχηματισμός αποβλίττου προκύπτουν καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται. Για να εξοικονομηθεί πολύτιμος χρόνος από την προσομοίωση ΜΔ, το πλήθος των ατόμων της προσομοίωσης αυτής είναι 1376013. Το μοντέλο αυτό προορίζεται μόνο για μελέτη της πλαστικής παραμόρφωσης στην έναρξη της διαδικασίας κοπής. Όμως, για να παρατηρηθεί ολόκληρη η διαδικασία κοπής από την ελαστική παραμόρφωση ως την εμφάνιση ρωγμών ή θραύσεων, πρέπει να δημιουργηθεί ένα μεγαλύτερο μοντέλο.

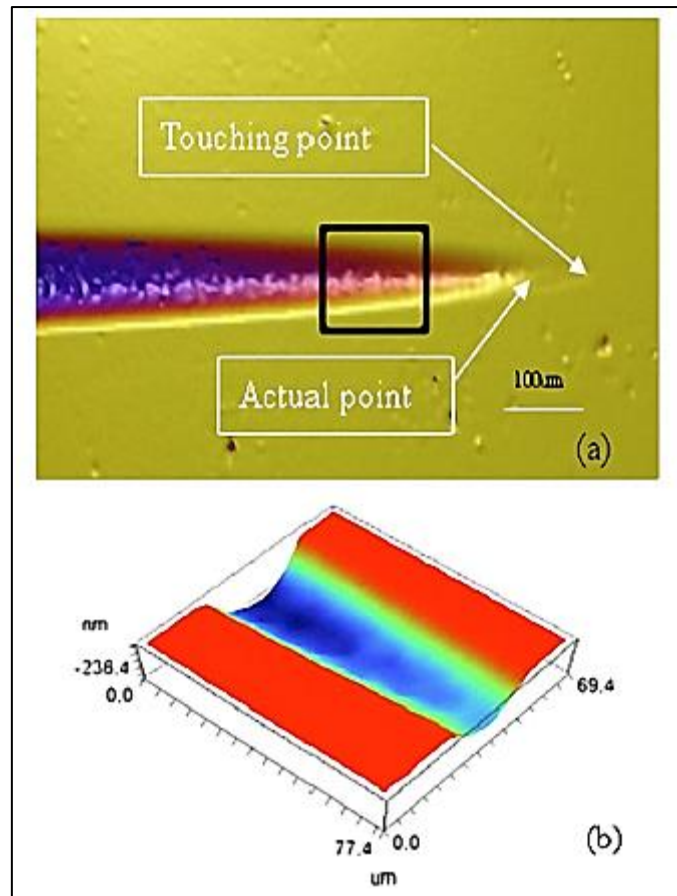
Στην προσομοίωση ΜΔ κοπής με κωνικότητα η κύρια διακύμανση δυνάμεων συμβαίνει στην κάθετη δύναμη  $F_y$ . Σε σύγκριση με τη διακύμανση στη δύναμη ώσης στην ορθογωνική κοπή, η διακύμανση της δύναμης ώσης στην κωνική κοπή είναι πολύ μεγαλύτερη. Στην κωνική κοπή, καθώς το βάθος κοπής αυξάνεται, απαιτείται περισσότερη ισχύς από το εργαλείο, πράγμα το οποίο συμφωνεί με τα αποτελέσματα της ανάλυσης δυνάμεων που παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.34.



Εικόνα 4.34: Διακύμανση της δύναμης κοπής της προσομοίωσης ΜΔ κωνικής κοπής [101]

### Πειραματική επαλήθευση και σχολιασμός

Ύστερα από την προσομοίωση ΜΔ κωνικής κοπής, διεξήχθησαν πειράματα κωνικής κοπής σε μηχανή τόννευσης υπερακριβείας, ώστε να επαληθευτεί το μοντέλο. Στο πείραμα κοπής χρησιμοποιείται εργαλείο μονοκρυσταλλού διαμαντιού με μύτη ακτίνας 0.502 mm, γωνία κλίσης  $0^\circ$  και γωνία ελευθερίας  $12^\circ$ . Η ταχύτητα κοπής είναι 50mm/min. Οι αυλακώσεις της κωνικής κοπής σαρώνονται πλήρως από συμβολόμετρο λευκού φωτός. Τα αποτελέσματα της κωνικής κοπής παρουσιάζονται στην Εικόνα 4.35(α).



**Εικόνα 4.35:** Τοπογραφικές απεικονίσεις κωνικής κοπής μονοκρυσταλλικού πυριτίου [101]

Είναι απίθανο να σχηματιστεί ρωγμή ή θραύση προτού το πάχος αποβλίττου φθάσει σε μια κρίσιμη τιμή. Κατά συνέπεια, προέκυψαν λείες επιφάνειες, όπως φαίνεται στην Εικόνα 4.35(b).

Το πείραμα δείχνει ότι δεν υπάρχει σχηματισμός αποβλίττου στην έναρξη της κοπής, αλλά μόνο πλαστική παραμόρφωση, όπως φαίνεται στην Εικόνα 4.35(α). Κάτω από ένα συγκεκριμένο βάθος κοπής, υπάρχει μια περιοχή όπου δε σχηματίζεται απόβλιττο και συμβαίνει μόνο πλαστική παραμόρφωση κατά τη διαδικασία κοπής. Καθώς το βάθος κοπής αυξάνει, το υλικό μπροστά από το εργαλείο αποτελεί το παραμορφωμένο απόβλιττο. Όμως, η επιφάνεια κοπής της αυλάκωσης είναι λεία χωρίς ρωγμές και η σχηματισμός αποβλίττου είναι συνεχής. Ο τρόπος αυτός αποβολής υλικού ονομάζεται εξώθηση και είναι ίδιος με τον τρόπο αποβολής υλικού στην προσομοίωση ΜΔ. Συμπεραίνεται ότι τα αποτελέσματα του πειράματος κωνικής τομής είναι τα ίδια με αυτά της προσομοίωσης ΜΔ της κωνικής κοπής. Όταν το βάθος κοπής πλησιάζει την κρίσιμη τιμή του, εμφανίζονται ρωγμές ή θραύσεις. Αυτό συμπίπτει με το συμβατικό μοντέλο αποβολής υλικού μονοκρυσταλλικού πυριτίου. [101, 104]

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: Συμπεράσματα

Η ΜΔ είναι μία αριθμητική μέθοδος με κλίμακα αναφοράς τη μικροκλίμακα. Το γεγονός αυτό μπορεί να αποτρέπει την χρήση της σε μεγάλα συστήματα αλλά της παρέχει την δυνατότητα λεπτομερούς και ακριβούς αναπαράστασης της συμπεριφοράς των μετάλλων, των κεραμικών κ.λπ. σε ατομικό επίπεδο. Η συνεισφορά της ΜΔ είναι σημαντική στη θεμελιώδη κατανόηση της μεταλλικής συμπεριφοράς σε ατομικό επίπεδο, σε διάφορες συνθήκες κατεργασίας. Η ΜΔ είναι ένα εξαιρετικά δυναμικό εργαλείο στην αποκάλυψη μηχανισμών και συσχετίσεων, που δεν είναι εμφανείς σε μακροσκοπικό επίπεδο. Οι προσομοιώσεις με την ΜΔ έχουν τη δυνατότητα να αντιληφθούν αλλαγές στην κρυσταλλική δομή του υλικού, φαινόμενο το οποίο είναι σχεδόν αδύνατο να παρακολουθηθεί με κάποια άλλη αριθμητική μέθοδο.

Η μαθηματική υλοποίηση της ΜΔ είναι ιδιαίτερα απλή και σαφής, αλλά η επίλυση ενός συστήματος με την μέθοδο ΜΔ συνεπάγεται μεγάλο υπολογιστικό κόστος. Η διαθεσιμότητα γρήγορων και όχι τόσο ακριβών υπολογιστών με σημαντικές χωρητικότητες μνήμης δίνει στους ερευνητές τη δυνατότητα, να εξερευνήσουν αυτά τα σύνθετα προβλήματα, χωρίς τη βοήθεια πειραμάτων. Η διαρκής ανάπτυξη όλο και πιο ρεαλιστικών δυναμικών για την αναπαράσταση των μετάλλων, από τα μέταλλα κυβικής δομής μέχρι τα μέταλλα εξαγωνικής δομής, τα ομοιοπολικά μέταλλα, όπως το διαμάντι και το πυρίτιο, τα μερικώς ιοντικά/ομοιοπολικά μέταλλα, όπως το καρβίδιο του πυριτίου, και τα άμορφα μέταλλα όπως το γυαλί, επιτρέπουν την επέκταση της προσέγγισης σε ένα μεγάλο εύρος υλικών. Ξεκινώντας από ένα απλό ατομικό μοντέλο, είναι σημαντικό το πώς μπορεί να υπολογιστεί αριθμητικά η συμπεριφορά του μοντέλου, ώστε να εξεταστεί ένα φαινόμενο τόσο σύνθετο, όσο η κατεργασία.

Βασικό σημείο για την επιτυχία αυτής προσέγγισης είναι η ενσωμάτωση μιας διατομικής συνάρτησης δυναμικής ενέργειας, η οποία αντιπροσωπεύει με ακρίβεια το χημικό δεσμό. Οι διατομικές δυνάμεις δεν είναι απλές, λόγω το ότι το άτομο δεν είναι ένα στοιχειώδες σωματίδιο αλλά ένα σύνθετο σώμα, το οποίο αποτελείται από τον πυρήνα και τα ηλεκτρόνια, τα οποία πρέπει να αντιμετωπισθούν σύμφωνα με την κβαντική μηχανική. Στην περίπτωση των μετάλλων, τα ηλεκτρόνια των μετάλλων μπορούν να χωριστούν σε δύο τύπους: τα ηλεκτρόνια του πυρήνα τα οποία είναι ισχυρά δεμένα στο άτομο και τα ηλεκτρόνια αγωγής τα οποία είναι χαλαρά συνδεδεμένα είναι υπεύθυνα για τα περισσότερα χαρακτηριστικά της κατάστασης των μετάλλων. Κατά συνέπεια, οποιοδήποτε μοντέλο διατομικών δυναμικών ή δυνάμεων πρέπει να αντιμετωπίσει το σύνθετο πρόβλημα των πολλών αλληλεπιδράσεων. Την ίδια

στιγμή, οι περιορισμοί στην υπολογιστική ταχύτητα ευνοούν τη χρήση απλών δυναμικών ζεύγους, τα οποία αναπαριστούν τα απλά μέταλλα με λογική ακρίβεια. Αν συμπεριληφθεί στον υπολογισμό της δυναμικής ενέργειας των ατόμων του συστήματος και η θερμοκρασία του σώματος, τότε η ΜΔ δύναται να επεξεργαστεί το συνδυασμένο θερμομηχανικό πρόβλημα.

Τα πραγματικά υλικά περιλαμβάνουν ατέλειες, όπως μετατοπίσεις, όρια κόκκων και ρωγμές. Οι ατέλειες αυτές είναι απαραίτητο να εισαχθούν κατά τη μοντελοποίηση της διαδικασίας. Λόγω της μοριακής θεώρησης η ΜΔ δύναται να αναπαραστήσει με επιτυχία διάδοση ρωγμών, θρυμματισμό, δημιουργία νέων επιφανειών, ετερογενή υλικά κ.α.. Συνολικά αποτελεί μία μέθοδο με μεγάλη αξιοπιστία και ευελιξία αφού στηρίζεται στις αναπτυσσόμενες μεταξύ των ατόμων δυνάμεις. Στον τομέα της προσομοίωσης πραγματικών υλικών, παρόλο που έχει σημειωθεί κάποια επιτυχία, απαιτείται περαιτέρω έρευνα. Επίσης η υπολογιστική ταχύτητα θέτει περιορισμούς στο πλήθος των ατόμων που μπορούν να ληφθούν υπόψη, καθώς και της ταχύτητας της κοπής. Σε μια ρεαλιστική προσομοίωση, είναι απαραίτητο να ληφθεί υπόψη ένα μεγάλο πλήθος ατόμων (εκατομμύρια έως ένα δισεκατομμύριο) και οι ταχύτητες κοπής κοντά στα 1-2 m/s, αντί για 100-500 m/s που χρησιμοποιούνται συνήθως. Η αύξηση της ταχύτητας επεξεργασίας, της χωρητικότητας μνήμης καθώς και η παράλληλη επεξεργασία θα προσφέρουν πολλά προς αυτή την κατεύθυνση.

Από τη μελέτη των παραδειγμάτων που παρουσιάστηκαν μπορούν να εξαχθούν τα ακόλουθα συμπεράσματα. Οι προσομοιώσεις ΜΔ με δυναμικό EAM δίνουν πληροφορίες σχετικά με τις ατομικές διαδικασίες όσον αφορά τη νανοκοπή μονοκρυσταλλικής επιφάνειας χαλκού (001). Η νανοκοπή γίνεται σε δύο βήματα: αφαίρεση υλικού καθώς το εργαλείο κατεργάζεται την ανώτερη επιφάνεια, ακολουθούμενη από χαλάρωση του υλικού κατεργασίας ώστε να διαμορφωθεί περιοχή με ελάχιστες προεξοχές. Κατά τη νανοκοπή υπάρχει μια τοπική περιοχή υψηλότερης θερμοκρασίας και τάσης κάτω από το εργαλείο.

Η διαδικασία χαλάρωσης αποβάλλει την περίσσεια ενέργειας και οδηγεί σε υλικό κατεργασίας χαμηλής μετατόπισης. Οι υψηλές ταχύτητες κατεργασίας (180 m/s) έχουν ως αποτέλεσμα μια τραχιά κατεργασμένη επιφάνεια με μεγάλη διαμόρφωση αποβλίττου, που συνοδεύεται από αύξηση της τοπικής κινητικής ενέργειας ή της θερμοκρασίας. Σε χαμηλότερες ταχύτητες κατεργασίας (1.8, 18 m/s) η κατεργαζόμενη επιφάνεια είναι πιο λεία με μικρότερη δημιουργία αποβλίττου, αλλά μετατοπίσεις υπάρχουν ακόμη στο υπόστρωμα. Η ανύψωση θερμοκρασίας κάτω από το εργαλείο είναι μικρότερη (<200 K) κατά την κατεργασία. Οι μετατοπίσεις συνήθως εμφανίζονται υπό 45ο σε σχέση με την επιφάνεια.

Ο συντελεστής τριβής ( $\mu$ ) εξαρτάται από τη γεωμετρία του εργαλείου, όπως  $\mu \sim 0,64$  για γωνία κοπής του εργαλείου  $45^\circ$ . Ο συντελεστής τριβής  $\mu$  είναι επίσης ευαίσθητος σε σχέση με το βαθμό προσανατολισμού μεταξύ των αξόνων του κρυστάλλου του εργαλείου και του υλικού κατεργασίας. Με αυτές τις μελέτες προσομοίωσης ΜΔ δίνεται η δυνατότητα ελέγχου της φθοράς του υλικού και σχεδιασμού νέας γενιάς δομών νανοκλίμακας.

Το δυναμικό EAM είναι το πιο κατάλληλο από τα υπόλοιπα δυναμικά που χρησιμοποιούνται συνήθως για τη μοντελοποίηση νανοκοπής χαλκού με εργαλείο διαμαντιού. Αυτό οφείλεται στο ότι το δυναμικό EAM περιγράφει καλύτερα τη μεταλλική σύνδεση στο υλικό κατεργασίας. Επιπροσθέτως, η διακύμανση των δυνάμεων κοπής είναι η μικρότερη, και η συνολική ενέργεια και η ενέργεια δυναμικού είναι πιο σταθερές για το εξεταζόμενο βάθος κοπής. Για αυτούς τους λόγους το δυναμικό EAM πρέπει να χρησιμοποιείται, αντί των δυναμικών LJ και Morse, για την μοντελοποίηση νανοκοπής του χαλκού αλλά και άλλων μετάλλων FCC σε προσομοιώσεις ΜΔ.

Από την άλλη πλευρά έχουν διεξαχθεί μελέτες για τη διερεύνηση των μηχανισμών κοπής και δημιουργίας αποβλίττου για μονοκρυσταλλικό πυρίτιο, κυρίως από την πλευρά της δύναμης κοπής. Παρατηρήθηκε ότι το μονοκρυσταλλικό πυρίτιο εμφάνισε ολίσθηση πλέγματος και παραμόρφωση λόγω της εξώθησης που επιβαλλόταν από την υδροστατική πίεση, που έρχεται σε συμφωνία με τις καμπύλες των δυνάμεων κοπής και είναι ο κύριος λόγος για τη φθορά του εργαλείου κοπής και τη θραύση της επιφάνειας. Επίσης δίνεται το κατώφλι του βάθους κοπής για τη δημιουργία αποβλίττου ανάλογα με τις διάφορες ακμές κοπής των εργαλείων. Δεν υπάρχει δημιουργία αποβλίττου, όταν οι δυνάμεις κοπής είναι ομογενείς και χωρίς εμφανή προσαύξηση. Από την άλλη, όταν εμφανίζονται απόβλιττα, οι δυνάμεις κοπής αυξάνονται βαθμιαία λόγω της συσσώρευσης αποβλίττου στην επιφάνεια κοπής του εργαλείου. Για το ίδιο βάθος κοπής, οι δυνάμεις κοπής μειώνονται όσο αυξάνεται η τιμή της ακμής κοπής.

Ολοκληρώνοντας τα συμπεράσματα όσον αφορά τις μελέτες που παρουσιάστηκαν, το τρισδιάστατο μοντέλο ΜΔ που μελετήθηκε διαφέρει από τα παραδοσιακά μοντέλα ΜΔ. Μελετήθηκε ο μηχανισμός νανοκοπής του μονοκρυσταλλικού πυριτίου, όταν το πάχος του αποβλίττου είναι 1 και 3nm, αντίστοιχα. Μπορούν να εξαχθούν τα ακόλουθα αποτελέσματα:

- Το τρισδιάστατο μοντέλο ΜΔ που δημιουργήθηκε χρησιμοποιήθηκε για να προσομοιώσει την πραγματική κατεργασία κοπής. Το κοπτικό εργαλείο που χρησιμοποιήθηκε στην προσομοίωση είναι κοντά στο πραγματικό εργαλείο.

- Κατά τη διαδικασία κοπής, κάποια άτομα μετακινήθηκαν από τις θέσεις τους. Με τη μετακίνηση του κοπτικού εργαλείου, πραγματοποιήθηκε άμορφος μετασχηματισμός γύρω από την κοπτική ακμή.
- Η μεταβολή της δύναμης κοπής είναι ομαλή και σταθερή στην άμορφη περιοχή για όλικμη κατεργασία. Το μοντέλο επαληθεύεται με τη βοήθεια πειραματικών διαδικασιών κωνικής κοπής.

## Βιβλιογραφία

1. Belak, J. and Stowers, I. F. A molecular dynamics model of the orthogonal cutting process. In Proceedings of the ASPE Annual Conference, Rochester, New York, 1990, p. 76.
2. Stowers, I. F., Belak, J., Lucca, D. A., Komanduri, R., Rhorer, R. L., Moriwaki, T., Okuda, K., Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H., Dow, T. A. and Drescher, J. D. Molecular dynamics simulation of the chip forming process in single crystal copper and comparison with experimental data. In Proceedings of the ASPE Annual Conference, 1991, pp. 100-103.
3. Belak, J., Boercker, D. B. and Stowers, I. F. Simulation of nanometer-scale deformation of metallic and ceramic surfaces. MRS Bull., May 1993, 21(2), 55-60.
4. Belak, J. Nanotribology: modeling atoms when surfaces collide. Energy and Technology Review, Lawrence Livermore National Laboratories (LLNL), August-September 1994, pp. 13-24.
5. Ikawa, N., Donaldson, R., Komanduri, R., Konig, W., McKeown, P. A., Moriwaki, T. and Stowers, I. Ultraprecision metal cutting—the past, the present, and the future. Ann. CIRP, 1991, 40(2), 587-594.
6. Ikawa, N., Shimada, S., Tanaka, H. and Ohmori, G. An atomistic analysis of nanometric chip removal as affected by tool-work interaction in diamond turning. Ann. CIRP, 1991, 40(1), 551-554.
7. Shimada, S., Ikawa, N., Ohmori, G. and Tanaka, H. Molecular dynamics analysis as compared with experimental results of micromachining. Ann. CIRP, 1992, 41(1), 117-120.
8. Shimada, S., Ikawa, N., Tanaka, H., Ohmori, G., Uchikoshi, J. and Yoshinaga, H. Feasibility study on ultimate accuracy in microcutting using molecular dynamics simulation. Ann. CIRP, 1993, 42(1), 91-94.
9. Shimada, S., Ikawa, N., Tanaka, H. and Uchikoshi, J. Structure of micromachined surface simulated by molecular dynamics analysis. Ann. CIRP, 1994, 43(1), 51-54.
10. Inamura, T., Suzuki, H. and Takezawa, N. Cutting experiments in a computer using atomic models of a copper crystal and a diamond tool. Int. J. Jap. Soc. Precision Engng, 1991, 25(4), 259-266.
11. Inamura, T., Takezawa, N. and Taniguchi, N. Atomic-scale cutting in a computer using crystal models of copper and diamond. Ann. CIRP, 1992, 41(1), 121-124.
12. Inamura, T., Takezawa, N. and Kumaki, Y. Mechanics and energy dissipation in nanoscale cutting. Ann. CIRP, 1993, 42(1), 79-82.



13. Inamura, T., Takezawa, N., Kumaki, Y. and Sata, T. On a possible mechanism of shear deformation in nanoscale cutting. *Ann. CIRP*, 1994, 43(1), 47-50.
14. Goldstein, H. *Classical Mechanics*, 1965 (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts).
15. D. C. Rapaport, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2nd edition, Cambridge University Press, 2004
16. R Komanduri and L M Raff, A review on the molecular dynamics simulation of machining at the atomic scale, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture*, School of Mechanical and Aerospace Engineering, Oklahoma State University, USA, 2001
17. . Torrens, I. M. *Interatomic Potentials*, 1972 (Academic Press, New York).
18. Brenner, D. W. and Garrison, B. J. Dissociative valence force field potential for silicon. *Phys. Rev. B*, July 1986, 34(2), 1304-1307.
19. Stillinger, F. H. and Weber, T. A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. *Phys. Rev. B*, April 1985, 31(8), 5262-5271.
20. Biswas, R. and Hamann, D. R. Interatomic potentials for silicon structural energies. *Phys. Rev. Lett.*, November 1985, 55(19), 2001-2004.
21. Bolding, B. C. and Anderson, H. C. Interatomic potential for silicon clusters, crystals, and surfaces. *Phys. Rev. B*, 1990, 41, 10 568-10 585.
22. Tersoff, J. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. *Phys. Rev. B*, April 1988, 37(12), 6991-6999.
23. Brenner, D. W. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. *Phys. Rev. B*, November 1990, 42(15), 9458-9471.
24. Voter, A. F. Interatomic potentials for atomic simulations. *MRS Bull.*, 1996, 21(2), 17-18.
25. Vitek, V. Pair potentials in atomistic computer simulations. *MRS Bull.*, 1996, 21(2), 20-23.
26. Morse, P. M. Diatomic molecules according to the wave mechanics II vibrational levels. *Phys. Rev.*, 1929, 34, 57-64.
27. Girifalco, L. A. and Weizer, V. G. Application of the Morse potential function to cubic materials. *Phys. Rev.*, 1959, 114, 687-690.
28. Molecular dynamics (MD) simulation of uniaxial tension of some single crystal cubic metals at nanolevel. *Int. J. Mech. Sci.*, 2001, 43, 2237-2260.
29. Lennard-Jones, J. E. Forces between atoms and ions. *Proc. R. Soc. (Lond.) A*, 1925, 109, 584.
30. Foiles, S. M. Embedded-atom and related methods for modeling metallic systems. *MRS Bull.*, 1996, 21(2), 24-28.

31. Daw, M. S. and Baskes, M. I. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Phys. Rev. B*, 1984, 29, 6443-6453.
32. Baskes, M. I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities. *Phys. Rev. B*, 1992, 46, 2727-2742.
33. Agrawal, P. M., Raff, L. M. and Thompson, D. L. *Surface Science*, 1988, 188, 402.
34. Rapeepan Promyoo, Dr. Hazim El-Mounayri, Molecular Dynamics Simulation of Nanometric Machining Under Realistic Cutting Conditions Using LAMMPS Department of Mechanical Engineering Purdue School of Engineering and Technology, IUPUI February 18th, 2008
35. Raff, L. M. and Thompson, D. L. The classical trajectory approach to reactive scattering. In *Theory of Chemical Reaction Dynamics* (Ed. M. Baer), 1985, Ch. 1, pp. 1-122 (CRC Press Inc., Boca Raton, Florida).
36. Allen, M. and Tildesley, D. *Computer Simulation of Liquids*, 1991 (Oxford University Press, Oxford).
37. Jezercak, M., Agarwal, P. M., Thompson, D. L. and Raff, L. A perturbation-trajectory method for the study of gas- surface collision. *J. Chem. Physics*, March 1989, 90(6), 3363-3372.
38. R. Rentsch, I. Inasaki. Molecular dynamics simulation for abrasive processes. *Annals of the CIRP*, vol. 43, no. 1, pp. 327-330, 1994.
39. R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L. M. Raf. Some aspects of machining with negative-rake tools simulating grinding: A molecular dynamics simulation approach. *Philosophical Magazine Part B*, vol. 79, no. 7, pp. 955-968, 1999.
40. Y. Ye, R. Biswas, J. R. Morris, A. Bastawros, A. Chandra. Simulation of nanoscale polishing of copper with molecular dynamics. In *Proceedings of Materials Research Society Symposium*, vol. 732E, pp. 1-6, 2002.
41. B. Lin, S. Y. Yu, S. X. Wang. An experimental study on molecular dynamics simulation in nanometer grinding, *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 138, no. 1{3, pp. 484-488, 2003.
42. E. Brinksmeier, J. C. Aurich, E. Govekar, C. Heinzl, H. W. Hofmeister, F. Klocke, J. Peters, R. Rentsch, D. J. Stephenson, E. Uhlmann, K. Weinert, M. Wittmann. Advances in modeling and simulation of grinding processes, *Annals of the CIRP*, vol. 55, no. 2, pp. 667-696, 2006.
43. Q. X. Pei, C. Lu, F. Z. Fang, H. Wu. Nanometric cutting of copper: A molecular dynamics study. *Computational Materials Science*, vol. 37, no. 4, pp. 434-441, 2006.
44. R. Promyoo, H. E. Mounayri, X. Yang. Molecular dynamics simulation of nanometric machining under realistic cutting conditions. In *Proceedings of*

- ASME International Conference on Manufacturing Science and Engineering, Evanston, IL, USA, pp. 235-243, 2008.
45. J. Tersof. New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. *Physical Review B*, vol. 37, no. 12, pp. 6991-7000, 1988.
  46. J. Tersof. Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties. *Physical Review B*, vol. 38, no. 14, pp. 9902-9905, 1988.
  47. M. Cai, X. Li, M. Rahman. Molecular dynamics modeling and simulation of nanoscale ductile cutting of silicon. *International Journal of Computer Applications in Technology*, vol. 28, no. 1, pp. 2-8, 2007.
  48. Y. Guo, Y. Liang, M. Chen, Q. Bai, L. Lu. Molecular dynamics simulations of thermal effects in nanometric cutting process. *Science China Technological Sciences*, vol. 53, no. 3, pp. 870-874, 2010.
  49. Akinjide Oluwajobi, Xun Chen, The Effect of Interatomic Potentials on the Molecular Dynamics Simulation of Nanometric Machining, *International Journal of Automation and Computing*, University of Huddersfield, UK, August 2011, 326-332.
  50. H. J. Hwang, O. K. Kwon, J. W. Kang. Copper nanocluster diffusion in carbon nanotube. *Solid State Communications*, vol. 129, no. 11, pp. 687-690, 2004.
  51. L. A. Girifalco, V. G. Weizer. Application of the morse potential function to cubic metals. *Physical Review*, vol. 114, no. 3, pp. 687-690, 1959.
  52. Hahn, R. S. The relation between grinding conditions and thermal damage in the workpiece. *Trans. ASME*, 1956, 78, 807-810.
  53. Marshall, E. R. and Shaw, M. C. Forces in dry surface grinding. *Trans. ASME*, 1952, 74, 51-59.
  54. Komanduri, R. Some aspects of machining with negative rake tools simulating grinding. *Int. J. Mach. Tool Des. Res.*, 1971, 11, 223-233.
  55. Crawford, J. H. and Merchant, M. E. The influence of higher rake angles on performance in milling. *Trans. ASME*, 1953, 75, 561-566.
  56. Moriwaki, T. and Okuda, K. Machinability of copper in ultraprecision micro diamond cutting. *Ann. CIRP*, 1989, 38(1), 115-118.
  57. Lucca, D. A., Rhorer, R. L. and Komanduri, R. Energy dissipation in ultra-precision machining. In *ASPE Annual Conference*, Rochester, New York, 1990, pp. 51-54.
  58. Lucca, D. A. and Seo, Y. Effect of tool edge geometry on energy dissipation in ultra precision machining. *Ann. CIRP*, 1993, 42(1), 83-86.
  59. Kustas, F. M., Fehrenbacher, L. L. and Komanduri, R. Nanocoatings on cutting tools for dry machining. *Ann. CIRP*, 1997, 46(1), 39-42.

60. Komanduri, R., Chandrasekaran, N. and Raff, L. M. Effect of tool geometry in nanometric cutting: a molecular dynamics simulation approach. *Wear*, 1998, 219, 84-97.
61. Pekelharing, A. The exit failure in interrupted cutting. *Ann. CIRP*, 1978, 27(1), 5-10.
62. Komanduri, R., Chandrasekaran, N. and Raff, L. M. MD simulation of exit failure in nanometric cutting. *Mater. Sci. Engng A*, 2001, 311(1-2), 1-12.
63. Lucca, F. L. An investigation on the transient effects in interrupted cutting by simulated orthogonal machining. MSc thesis, under Professor R. Komanduri, Rensselaer Polytechnic Institute, Troy, New York, 1982.
64. Wasaki, T., Sasaki, N., Yasukawa, A. and Chiba, N. Molecular dynamics study of impurity effects on grain boundary grooving. *JSME Int. J.*, 1997, 40, 15-22.
65. Phillpot, S. R., Wang, J., Wolf, D. and Gleiter, H. Computer simulation of the structure and dynamical properties of grain boundaries in a nanocrystalline model material. *Mater. Sci. Engng A*, 1995, 204, 76-82.
66. Van Swygenhoven, H. Plastic behavior of nanophase Ni: a molecular dynamics computer simulation. *Appl. Physics Lett.*, 1997, 71(12), 1652-1654.
67. Komanduri, R. and Stewart, R. MD simulation of the modelling of grain boundaries in nanometric cutting. 1998 (unpublished work).
68. Komanduri, R., Chandrasekaran, N. and Raff, L. M. MD simulation of nanometric cutting of single crystal aluminum: effect of crystal orientation and direction of cutting. *Wear*, 2000, 242, 60-88.
69. Ueda, K. and Iwata, K. Chip formation mechanism in single crystal cutting of brass. *Ann. CIRP*, 1980, 29(1), 41.
70. Moriwaki, T. A study of orthogonal micro machining of single crystal copper. *Trans. N. Am. Manufacturing Res. Conf. (NAMRC)*, 1991, 19, 177-182.
71. Mohs, F. *Treatise on Mineralogy* (translated by W. Haidinger), 1825 (Constable and Company, Edinburgh).
72. Tabor, D. Mohs' hardness scale—a physical interpretation. *Proc. Phys. Soc. (Lond.) B*, 1954, 67, 249-257.
73. Richardson, R. C. D. The wear of metals by relatively soft abrasives. *Wear*, 1968, 11, 245-275.
74. Tabor, D. The physical interpretation of indentation and scratch hardness. *Br. J. App. Physics*, May 1956, 7, 159-166.
75. *Metals Handbook, Properties and Selection: Nonferrous Alloys and Special-Purpose Materials*, Vol. 2, 10th edition, 1990, pp. 1099-1201 (ASM International, Metals Park, Ohio).

76. Chandrasekaran, N., Noori-Khajavi, A., Raff, L. M. and Komanduri, R. A new method for MD simulation of nano-metric cutting. *Phil. Mag. B*, 1998, 77(1), 7-26.
77. Y Y Ye, R Biswas, J R Morris, A Bastawros and A Chandra, Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper, Department of Physics and Microelectronics Research Center, Iowa State University, USA, *Nanotechnology* 14 (2003) 390–396.
78. Fang T and Weng C-I 2000 Three-dimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale *Nanotechnology* 11 148–53.
79. Inamura T, Takezawa N and Kumaki Y 1993 Mechanics and energy dissipation in nanoscale cutting *Ann. CIRP* 42 79–82
80. Inamura T, Takezawa N, Kumaki Y and Sata T 1994 On a possible mechanism of shear deformation in nanoscale cutting *Ann. CIRP* 43 47–50
81. Komanduri R, Chandrasekaran N and Raff L M 2000a Simulation of nanometric cutting of single crystal aluminum—effect of crystal orientation and direction of cutting *Wear* 242 60–8.
82. Komanduri R, Chandrasekaran N and Raff L M 2000b Simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum *Wear* 242 113–43
83. Reese R L 2000 *University Physics* (New York: Brooks–Cole).
84. Rentsch R 2000 *Atomistic Simulation and Experimental Investigation of Ultra Precision Cutting Processes* (MRS Proc. vol 578) (Pittsburgh, PA: Materials Research Society) pp 261–6.
85. Shaw M C (ed) 1984 *Metal Cutting Principles* (Oxford: Oxford University Press).
86. Steigerwald J M, Murarka S P and Gutmann R J 1997 *Chemical Mechanical Planarization of Microelectronic Materials* (New York: Wiley).
87. Ye Y, Biswas R, Bastawros A and Chandra A 2002 Simulation of chemical mechanical planarization of copper with molecular dynamics *Appl. Phys. Lett.* 81 1875.
88. Zhang L and Tanaka H 1997 Towards a deeper understanding of wear and friction on the atomic scale—a molecular dynamics analysis *Wear* 211 44–53.
89. Komanduri, R., Chandrasekaran, N. and Raff, L. M. MD simulation of nanometric cutting of silicon. *Phil. Mag. B*, 2001 (accepted).
90. Y.H. Chen, F.Z. Fang, X.D. Zhang and X.T. Hu, Molecular Dynamics Investigation of Cutting Force in Nanometric Cutting of Monocrystalline Silicon, State Key Laboratory of Precision Measuring Technology and Instruments, Tianjin University, China, *American Journal of Nanotechnology* 1 (2): 62-67, 2010.

91. De Chiffrea, L., H. Kunzmann, G.N. Pegg and D.A. Lucca, 2003. Surfaces in precision engineering, microengineering and nanotechnology. *CIRP Annals-Manuf. Technol.*, 52: 561-577.
92. Fang, F.Z. and V.C. Venkatesh, 1998. Diamond cutting of silicon with nanometric finish. *CIRP Ann. Manuf. Technol.*, 47: 45-49.
93. Fang, F.Z., H. Wu, W. Zhou and X.T. Hu, 2007. A study on mechanism of nano-cutting single crystal silicon. *J. Mater. Process. Technol.*, 184: 407-410.
94. Lee, W.B., 1990. Prediction of microcutting force variation in ultra-precision machining. *Precis. Eng.*, 12: 25-28.
95. Tsuzuki, H., P.S. Branicio and J.P. Rino, 2007. Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood. *Comput. Phys. Commun.*, 177: 518-523.
96. Maekawa, K. and Itoh, A. Friction and tool wear in nano- scale machining—a molecular dynamics approach. *Wear*, 1995, 188, 115-122.
97. Hoover, W. G. Canonical dynamics: equilibrium phase- space distributions. *Phys. Rev.*, 1985, A31, 1695-1697.
98. Komanduri, R. and Shaw, M. C. Wear of synthetic diamond in grinding ferrous metals. *Nature*, May 1975, 255, 211-213.
99. Komanduri, R. and Shaw, M. C. On the diffusion wear of diamond in grinding pure iron. *Phil. Mag.*, 1976, 34, 195-204.
100. Loladze, T. N. *Wear of Diamond in Grinding Steel*, 1972 (MIR Publications, Moscow).
101. Z. G. Zhang, F. Z. Fang, X. T. Hu, and C. K. Sun, Three-dimensional molecular dynamics modeling of nanocutting, State Key Laboratory of Precision Measuring Technology and Instruments Centre of MicroNano Manufacturing Technology, Tianjin University, China, American Vacuum Society, 2009.
102. H. Tanaka and S. Shimada, *CIRP Ann.* 56, 53 2007.
103. S. Shimada, N. Ikawa, and H. Tanaka, *CIRP Ann.* 43, 51 1994.
104. R. Rentsch and I. Inasaki, *Int. J. Manuf. Res.* 1, 83 (2006).
105. F. Z. Fang, H. Wu, and Y. C. Liu, *Int. J. Mach. Tools Manuf.* 45, 1681, 2005.
106. Chryssolouris, G., (2006), “Manufacturing Systems: Theory and Practice, 2nd Edition”, Springer, New York.
107. Meyer, M. and Pontikis, V., (1991), “Computer Simulation in Materials Science”, NATO ASI series, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, the Netherlands, Vol 205.

108. Allen, M. P. and Tildesley, D. J., (1993), "Computer Simulation in Chemical Physics", NATO ASI series, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, the Netherlands, Vol 3, p. 97.
109. Kirchnor, H O., Kubin, L P. and Pontikis, V., (1996), "Computer Simulation in Materials Science", NATO ASI series, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, the Netherlands, Vol 308.
110. Feynman, R. P., Leighton, R. B. and Sands, M., (1964), "Feynman Lectures on Physics", Addison-Wesley.
111. Adler, B. J. and Wainwright, T. E., (1957), "Phase Transition for a Hard Sphere System", Journal of Chemical Physics Vol. 27, p.1208.
112. Adler, B. J. and Wainwright, T. E., (1959), "Studies in Molecular Dynamics. General Method", Journal of Chemical Physics, Vol. 31, p. 459.
113. Frenkel, D. and Smit, B., (1996), "Understanding Molecular Simulation: from algorithms to applications", Academic Press: San Diego.
114. Rapaport, D.C., (1995), "The art of molecular dynamics", Cambridge University Press, Cambridge, UK.
115. Παναγιώτης Γ. Σταυρόπουλος, Πειραματική και θεωρητική ανάλυση με τη χρήση Μοριακής δυναμικής του μηχανισμού φωτοαποδόμησης μεταλλικών υλικών προκαλούμενης από ακτίνες laser, Πανεπιστήμιο Πατρών, Τμήμα Μηχανολόγων και Αεροναυπηγών Μηχανικών, Εργαστήριο συστημάτων παραγωγής & αυτοματισμού / δυναμικής & θεωρίας μηχανών, Πάτρα 2007.
116. Σπανίδης Δημήτρης, Ανάλυση βάσεων για την εφαρμογή της μεθόδου Monte Carlo, Α.Π.Θ., Φεβρουάριος 2005
117. Σπύρος Ι. Χατζησπύρος Σημειώσεις στην Υπολογιστική Στατιστική μέρος Α, Μέθοδοι Monte Carlo,
118. Ι. Κυρίκου, Α. Κάπου, Θ. Μαυρομούστακος, Κ. Πούλος, Μοριακά Μοντέλα: Ένα Ανεκτίμητο Εργαλείο στον Ορθολογιστικό Σχεδιασμό Φαρμάκων, Άρθρο Επισκόπηση Φαρμακευτική 14, III, 109-123, 2001, Ινστιτούτο Οργανικής και Φαρμακευτικής Χημείας, Εθνικό Ίδρυμα Ερευνών, Αθήνα.
119. Εργαστηριακή άσκηση Νο 6, Υπολογισμός στατικών και δυναμικών ιδιοτήτων ρευστών από ανάλυση δεδομένων Μοριακής Δυναμικής.
120. Η. Ηλιόπουλος, Εισαγωγή στη Μοριακή Προσομοίωση, Μοριακή Αναγνώριση, ΓΠΑ 2001.