



بررسی و بهینه‌سازی پارامترهای مؤثر بر زبری سطح در فرایند نانوماشین‌کاری مس تک کریستال با استفاده از روش دینامیک مولکولی

محمد مهدی جلیلی^{1*}، حجت‌اله طواری²

1- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه یزد

2- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه یزد

* یزد، صندوق پستی 8915818411، jalili@yazd.ac.ir

چکیده

اطلاعات مقاله

زبری سطح از مشخصه‌های بسیار مهم در ماشین‌کاری در ابعاد نانو می‌باشد. به دلیل استفاده از محصولات در ابعاد نانومتر جهت بکارگیری در مجموعه‌هایی که به دقت بالا در حد کسری از نانومتر نیاز دارند، باید در انتخاب پارامترهای ماشین‌کاری مؤثر بر زبری سطح دقت شود. در این پژوهش، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ماشین‌کاری قطعه کاری از جنس مس تک کریستال به وسیله ابزارهایی از جنس الماس با هندسه‌های مختلف بررسی شده و زبری سطح نهایی محاسبه شده است. اثر پارامترهای ماشین‌کاری همچون عمق براده‌برداری و سرعت برشی به همراه پارامترهای وابسته به هندسه ابزار از قبیل زاویه براده، زاویه آزاد اصلی و شعاع نوک آن بر روی زبری سطح با محاسبه زبری میانگین (R_a) و ریشه میانگین مربعات (RMS) مورد بررسی قرار گرفته‌اند. به منظور بررسی دقیق‌تر تأثیر پارامترها و اثر متقابل آنها بر یکدیگر از روش تاگوچی برای طراحی آزمایش‌ها استفاده شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان داده است که هر دو پارامتر زبری میانگین و ریشه میانگین مربعات، بیشترین تأثیر بر زبری سطح قطعه‌کار را ناشی از عمق براده‌برداری پیش‌بینی می‌کنند. براساس نتایج ارائه گردیده، مشخص شده است که زبری سطح در شرایط ماشین‌کاری مختلف بر اساس انتخاب پارامترها می‌تواند بهبود یابد و لازم است قبل از انتخاب این پارامترها، شرایط آنها در کنار یکدیگر به خوبی بررسی گردند. همچنین، در نهایت با استفاده از روش تاگوچی، مقادیر بهینه پارامترهای براده‌برداری برای دستیابی به بهترین صافی سطح در ابعاد مشخص به شرح $v = 500$ m/s، $d = 10$ Å، $r = 15$ Å، $\beta = 10^\circ$ ، $\gamma = -15^\circ$ بدست آمد.

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 6 آبان 1400
داوری اولیه: 3 آذر 1400
پذیرش: 5 دی 1400

کلیدواژگان:

نانوماشین‌کاری
مس تک کریستال
روش دینامیک مولکولی
زبری سطح، روش تاگوچی

Investigation and optimization of parameters affecting surface roughness in single crystal copper nanomachining process using molecular dynamics method

Mohammad Mahdi Jalili*, Hojjatollah Tavari

Department of Mechanical Engineering, Yazd University, Yazd, Iran

* P.O.B. 8915818411 Yazd, Iran, jalili@yazd.ac.ir

Article Information

Original Research Paper
Received: 28 October 2021
First Decision: 24 November 2021
Accepted: 26 December 2021

Keywords:

Nanomachining
Single crystal copper
Molecular dynamic method
Surface roughness
Taguchi Method

Abstract

Surface roughness is one of the most important features in nanoscale machining. Due to the use of nanometer-sized products for use in assemblies that require extremely high accuracy at a fraction of a nanometer, care must be taken in selecting machining parameters that affect the surface roughness. In this study, using molecular dynamics simulations, the machining of a single-crystal copper workpiece by diamond tools with different geometries has been investigated and the final surface roughness has been calculated. The effect of machining parameters such as cutting depth and cutting speed along with parameters related to tool geometry such as rake angle, relief angle and tip radius on surface roughness have been investigated with average roughness (R_a) and root mean square (RMS) measuring instruments. In order to study more precisely the effect of parameters and their interaction with each other, Taguchi method has been used to design experiments. The simulation results show that both the average roughness and root mean square parameters predict the greatest effect on the surface roughness of the workpiece due to the depth of cutting. Based on the presented results, it has been determined that the surface roughness can be improved in different machining conditions based on the selection of parameters, and it is necessary to carefully examine their conditions together before selecting these parameters. Using the Taguchi method, the optimal values of cutting parameters to achieve the best surface roughness in specified dimensions are described as $v = 500$ m/s, $d = 10$ Å, $\gamma = -15^\circ$, $\beta = 10^\circ$, $r = 15$ Å was obtained.

1- مقدمه

مانند هوافضا، انرژی، الکترونیک، اپتیک و زیست پزشکی، مقیاس تولید از ماکرو به نانو (مقیاس حذف اتمی) تغییر کرده است. در سالیان گذشته، به دلیل تقاضای زیاد در حوزه‌های مختلف

Please cite this article using:

M. M. Jalili, H. Tavari, Investigation and optimization of parameters affecting surface roughness in single crystal copper nanomachining process using molecular dynamics method, Iranian Journal of Manufacturing Engineering, Vol. 8, No. 10, pp. 49-60, 2022 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

گسسته برای مدل‌سازی فرایندهای ماشین‌کاری در ابعاد نانو مناسب می‌باشند. در این مدل‌ها به منظور دستیابی به نیروهای بین اتمی، از پتانسیل‌های بین اتمی استفاده شده به گونه‌ای که از مشتق پتانسیل بین اتمی نسبت به فاصله اتمی، نیروی بین اتمی بدست می‌آید. در روش دینامیک مولکولی، بر اساس موقعیت، سرعت و شتاب اتم‌ها و مولکول‌ها می‌توان حالت سیستم را پیش‌بینی نمود. این شبیه‌سازی بر اساس قانون دوم نیوتن می‌باشد. همان‌طور که اشاره گردید، نیروهای اتمی با استفاده از قانون دوم نیوتن بر اساس تابع گرادیان انرژی پتانسیل بدست می‌آیند. در فرایند نانوماشین‌کاری، نیروهای براده‌برداری همان نیروهای بین اتمی هستند که حاصل برهمکنش بین اتم‌های ابزار و قطعه‌کار می‌باشند. در صورتی که این نیروها کمتر شوند باعث کاهش ارتعاشات براده‌برداری و در نتیجه صافی سطح بهتر می‌شوند [4].

به دلایل زیر، شبیه‌سازی به روش دینامیک مولکولی یک ابزار قدرتمند برای کشف فرایند نانوماشین‌کاری می‌باشد: (1) وضوح مکانی و زمانی بسیار بالا؛ کوچکترین مقیاس طولی دینامیک مولکولی در مرتبه آنگستروم است، که وضوح مکانی خوبی را برای بدست آوردن دقت نهایی ماشین‌کاری ارائه می‌دهد. همچنین گام زمانی شبیه‌سازی در مرتبه فمتو ثانیه می‌باشد. (2) قابلیت عالی برای مدل‌سازی؛ پیکربندی اتمی انواع مواد که حاوی ریزساختارهای داخلی مختلف هستند می‌تواند به راحتی و با هزینه کم ساخته شوند. علاوه بر این، می‌توان پارامترهای ماشین‌کاری را به صورت اختیاری تنظیم کرد. (3) نظارت بر فرایند ماشین‌کاری در زمان واقعی⁶؛ با ردیابی مسیرهای اتمی، می‌توان جزئیات دینامیک اتمی برهمکنش‌های بین قطعه‌کار و ابزار براده‌برداری، رفتار تغییر شکل مواد و نیروهای ماشین‌کاری را در طول فرایند نانوماشین‌کاری زیر نظر گرفت [5].

با این حال، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی محدودیت‌هایی دارد. به طور کلی، مدل ایجاد شده در این شبیه‌سازی در مقایسه با قطعات کار واقعی کوچکتر است. علاوه بر این، مدل‌های مورد استفاده در شبیه‌سازی ایده آل هستند، در حالی که قطعات کار واقعی دارای نقص‌های زیادی مانند نابجایی و ترک هستند. نکته مهم این است که توصیف برهمکنش اتم‌ها با استفاده از توابعی نسبتاً ساده، دشوار است. بنابراین، نتایج شبیه‌سازی نمی‌تواند عملکرد واقعی مواد را به طور کامل مشخص کند [3].

به منظور دستیابی به بهترین نتیجه با صرف کمترین زمان و

یکی از روش‌های توانمند در نانو براده‌برداری از قطعه‌کار، فرایندهای تولید با دقت بسیار بالا¹ می‌باشد. نیاز به سفارشی‌سازی²، کوچک‌سازی³ و عامل‌داری⁴، استفاده از این فرایندهای تولید را افزایش داده و آن را برای تولید اجزای نوری مختلف مانند اپتیک، ارتباطات، دارویی، الکترونیک و بیوتکنولوژی مناسب می‌سازد. لازم به ذکر است ابزارهای مورد استفاده در این فرایندها، ابزارهای الماسی با مقاومت به سایش بالا می‌باشند. استفاده از این ابزارها موجب افزایش دقت و صافی سطح در تولید قطعات پلاستیکی، غیرآهنی و کریستالی می‌شوند. به عنوان نمونه از این ابزارها در تولید لنزهای دوربین گوشی‌های هوشمند، آینه‌های بازتابش لیزر، لنزهای روشنایی ال ای دی، قالب‌های دی وی دی و سایر قطعات نوری استفاده می‌شوند [1]. مواد قطعه‌کار در فرایندهای ماشین‌کاری فوق دقیق شامل فلزات غیرآهنی، کریستال‌ها و پلیمرها می‌شوند. موادی مانند آلومینیوم، مس و نیکل دارای قابلیت ماشین‌کاری خوبی برای ماشین‌کاری فوق دقیق می‌باشند. البته ماشین‌کاری برخی از مواد همچون فلزات آهنی کربن‌دار موجب ایجاد واکنش با ابزار الماسی شده و عمر آن را کاهش می‌دهند [2].

به دلیل الزامات بسیار زیاد ماشین‌ابزارهای فوق دقیق، روش آزمایش و شرایط براده‌برداری، بررسی مکانیزم نانوماشین‌کاری با استفاده از روش تجربی بسیار دشوار است [3]. بهترین روش در دستیابی به بینش مناسب در مورد این فرایندها، استفاده از روش‌های شبیه‌سازی اتمی برای مدل‌سازی در مقیاس نانومتر می‌باشد. دینامیک مولکولی⁵ یک مدل فیزیکی جامع شامل اطلاعات ذاتی نظیر هندسه، سرعت و نیروهایی است که در رفتارهای اتمی در این مقیاس مؤثر می‌باشند [1].

به منظور بررسی فرایندهای ماشین‌کاری، مدل‌های مختلفی بدست آمده‌اند و عموماً روش‌های المان محدود برای مدل‌سازی فرایندهای ماشین‌کاری مورد استفاده قرار گرفته‌اند. این روش‌ها برای تحلیل اطلاعات تشکیل براده، توزیع دما، نیروهای براده‌برداری و توزیع تنش بسیار مفید هستند. البته این روش‌ها قادر می‌باشند تا از مدل‌های بزرگ تا مدل‌های کوچک در مقیاس میکرومتر را پشتیبانی کنند؛ اما زمانی که ابعاد تا مقیاس نانومتر کاهش می‌یابد این روش‌ها قابل اطمینان نمی‌باشند. به این معنا که در مقیاس نانومتر، مواد می‌توانند پیوسته نبوده و به صورت گسسته در طبیعت باشند. بنابراین مدل‌های اتمی

¹ Ultra High Precision Manufacturing (UHPM)

² Specialization

³ Miniaturization

⁴ Functionalization

⁵ Molecular Dynamics (MD)

⁶ Real time

بازیابی⁸، ناهمسانگردی⁹ و جهت کریستالی¹⁰ ماده قطعه‌کار می‌شود [11]. داوودی و تازه‌کندی، تأثیر پارامترهای ماشین‌کاری در ابعاد ماکرو (سرعت برشی، سرعت تغذیه و عمق براده‌برداری) را بر نیروهای ماشین‌کاری و زبری سطح در ماشین‌کاری آلیاژ اینکونل 738 با استفاده از ابزار کاربید روکش‌دار و مایع خنک‌کننده بررسی کردند [12]. هی و همکاران، مروری سیستماتیک بر روی عوامل مؤثر و روش‌های مدل‌سازی نظری زبری سطح در فرایند تراشکاری انجام داده و راه حل‌های نظری و تجربی ارائه کرده‌اند [13]. ژو و همکاران، به منظور بررسی فرایند نانو براده‌برداری مس مبتنی بر میکروسکوپ نیروی اتمی¹¹ با استفاده از ابزار الماس، یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سه بعدی¹² انجام داده و اثرات هندسه ابزار، عمق براده‌برداری، سرعت برشی و دمای قطعه‌کار را بر نیروهای براده‌برداری و تشکیل براده بررسی کردند [14]. لی و همکاران، با استفاده از دینامیک مولکولی، فرایند سنگ‌زنی را در شرایط براده‌برداری مس با استفاده از ابزار از جنس الماس مورد مطالعه قرار داده و اثرات تراکم بافت، جهت بافت، شکل بافت و ابزار با سطح ناهموار یا صاف را به طور کامل از نظر مسیرهای اتمی، توزیع دما، تابع توزیع شعاعی و ضریب اصطکاک و زبری سطح مورد بررسی قرار دادند [15]. دیلباج و راثو، یک تحقیق تجربی برای تعیین اثرات شرایط براده‌برداری و هندسه ابزار بر روی زبری سطح در فولاد یاتاقان (AISI 52100) انجام داده و یک مدل ریاضی برای آن ارائه کردند [16]. ژو و همکاران، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، اثرات طبیعت ناهمسانگرد آلومینیوم تک کریستالی را در نانو براده‌برداری مورد بررسی قرار دادند. آنها دریافتند که کیفیت سطح قطعه‌کار به جهت کریستالوگرافی و حداقل ضخامت براده برش نخورده¹³ مربوط می‌شود [17]. ژو و همکاران، با استفاده از دینامیک مولکولی، تأثیر ذرات سخت را بر روی فرایند براده‌برداری، تغییر شکل پلاستیک و نیروهای فرایند در نانو براده‌برداری آلومینیوم مورد بررسی قرار دادند. آنها به این نتیجه رسیدند که بهینه‌سازی پارامترهای براده‌برداری و خواص مواد برای بدست آوردن کیفیت سطح بهتر در نانو براده‌برداری کامپوزیت‌ها و یا سایر مواد با ذرات سخت در مقیاس میکرو/نانو بسیار ضروری است [18]. شی و همکاران، در پژوهشی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک

هزینه، استفاده از روش طراحی آزمایش‌ها مبتنی بر رویکرد آماری سیستماتیک همچون آرایه متعامد تاگوچی¹ پیشنهاد می‌شود [6]. روش تاگوچی از آرایه‌های متعامد آزمایش‌های طراحی شده برای بدست آوردن بهترین نتایج با حداقل تعداد آزمایش استفاده می‌کند، بنابراین زمان و هزینه آزمایش را کاهش می‌دهد. همچنین در این روش از نسبت سیگنال به نویز (S/N) برای تعیین ویژگی‌های کیفی استفاده می‌شود. با توجه به نتایج، نسبت سیگنال به نویز را می‌توان با استفاده از شاخصه‌های بزرگتر-بهتر، کوچکتر-بهتر و اسمی-بهتر بیان کرد [7]. لازم به ذکر است که سیگنال نشان دهنده مقادیر مطلوب و نویز نشان دهنده مقادیر نامطلوب است. بنابراین، بالاترین نسبت سیگنال به نویز، ترکیب پارامتری بهینه را برای پاسخ‌ها ارائه می‌دهد [8].

زبری سطح پارامتر مؤثری در تکنولوژی‌های جدید از جمله فلزات، تکنولوژی‌های نوری، نیمه هادی‌ها و قطعات مبتنی بر سرامیک‌ها می‌باشد. علاوه بر اثرات فیزیکی مرتبط با زبری سطح، این مشخصه بر روی برهمکنش‌های شیمیایی نیز مؤثر است. از این رو، درک دقیق عوامل مؤثر بر زبری سطح و اهمیت فیزیکی آن‌ها برای توسعه فناوری‌های آینده و شناخت بهتر علوم طبیعی مهم است [9]. عوامل مختلف بر روی کیفیت سطح تولید شده تأثیر مستقیم و یا غیر مستقیم دارند. پژوهش‌های مختلفی به منظور بررسی اثر این عوامل روی فرایند ماشین‌کاری انجام شده است. بر این اساس زبری سطح قطعه‌کار ماشین‌کاری شده به چهار عامل اصلی وابسته است: ویژگی‌های دینامیکی و سینماتیکی ماشین ابزار، مشخصات هندسی ابزار براده‌برداری، مواد و مشخصات قطعه کار و شرایط محیطی [10].

کیفیت سطح ماشین‌کاری شده از نظر زبری سطح تأثیر مهمی بر عملکرد قطعات دارد. پژوهش‌های زیادی در زمینه بررسی کیفیت سطح ماشین‌کاری شده در فرایند براده‌برداری (در ابعاد ماکرو و نانو) با ابزار از جنس الماس انجام شده است. چونگ و لی عوامل فرایندی و مادی مؤثر بر زبری سطح در تراشکاری الماس بسیار دقیق² را مورد بررسی قرار دادند. عوامل فرایندی شامل سرعت اسپیندل³، نرخ تغذیه⁴، شعاع نوک ابزار⁵، عمق برش⁶ و تغییر فاز⁷ و عوامل مادی شامل تورم و

¹ Taguchi

² Ultra-Precision Diamond Turning

³ Spindle Speed

⁴ Feed Rate

⁵ Tool Nose Radius

⁶ Depth of Cut

⁷ Phase Shift

⁸ Swelling and Recovery

⁹ Anisotropy

¹⁰ Crystallographic Orientation

¹¹ Atomic Force Microscopy (AFM)

¹² Molecular Dynamic (MD)

¹³ Minimum Uncut Chip Thickness

با توجه به توضیحات ارائه شده در بخش مقدمه، اثر همزمان پارامترهای فرایند نانو ماشین‌کاری و ابزار براده‌برداری بر زبری سطح قطعه‌کار مورد بررسی قرار نگرفته است. همچنین پارامترهای بهینه برای رسیدن به بهترین صافی سطح در این فرایند تعیین نشده است. بنابراین در این مقاله به منظور بررسی دقیق‌تر تأثیر برخی از پارامترهای ماشین‌کاری روی زبری سطح قطعه‌کار ماشین‌کاری شده و همچنین بررسی برهمکنش همزمان پارامترهای مختلف، با استفاده از ابزار قدرتمند دینامیک مولکولی، اثر پارامترهای ماشین‌کاری عمق و سرعت برشی و پارامترهای هندسی ابزار براده‌برداری همچون زاویه براده، زاویه آزاد اصلی و شعاع نوک ابزار روی مشخصه زبری سطح در نانوبراده‌برداری ابزار الماس روی مس تک کریستال مورد پژوهش قرار گرفته است. همچنین به منظور ارزیابی داده‌های خروجی از مشخصه‌های میانگین زبری سطح و ریشه میانگین مربعات کمک گرفته شده است. لازم به ذکر است که آزمایش‌ها با استفاده از روش تاگوچی، طراحی شده و با استفاده از کمترین آزمایش، پارامترهای بهینه در ابعاد مشخص بدست آمده‌اند.

3- روش تحقیق

همان‌طور که قبلاً توضیح داده شد، به دلیل خصوصیات گسستگی مواد در براده‌برداری در ابعاد نانومتر، نمی‌توان از تئوری‌های مرسوم مکانیک محیط‌های پیوسته در تحلیل فرایند نانوبراده‌برداری استفاده نمود.

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ابزاری قدرتمند برای مطالعه فرایندهای مختلف تولید در مقیاس نانومتر می‌باشد. در دینامیک مولکولی برای بیان نیروهای بین اتمی یا مولکولی از پتانسیل‌های تجربی استفاده می‌گردد [4]. گام‌های شبیه‌سازی در دینامیک مولکولی به این صورت است که ابتدا مدل، پتانسیل و الگوریتم محاسبه مناسب انتخاب شده و سپس شرایط اولیه به سیستم اعمال گردیده و با فرصت دادن به آن، مدل براساس این شرایط به پایداری رسیده و به تعادل دینامیکی می‌رسد. در نهایت با اجرای شبیه‌سازی، نتایج بدست می‌آیند.

در این مقاله، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سه بعدی با استفاده از نرم‌افزار لمپس³ انجام شده و نتایج با استفاده از نرم‌افزار اویتو⁴ مورد تحلیل قرار گرفته‌اند (شکل 1). مدل دینامیک مولکولی شامل یک ابزار از جنس الماس و یک قطعه‌کار از جنس مس تک کریستال می‌باشد. مشخصات

مولکولی، فرایند نانوماشین‌کاری ساختارهای مس پلی‌کریستالی را بررسی کردند. آنها تأثیرات اندازه دانه و پارامترهای مختلف ماشین‌کاری را برای شش ساختار مس پلی‌کریستالی و سه سطح عمق براده‌برداری، سرعت برشی و زاویه براده¹ ابزار مورد بررسی قرار داده و به این نتیجه رسیدند که در نانوماشین‌کاری پلی‌کریستالی با افزایش عمق براده‌برداری، سرعت برشی و استفاده از زاویه‌های براده منفی در ابزار، نیروهای برش بیشتری مورد نیاز است [19]. آبابی و همکاران، مطالعه‌ای براساس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سه بعدی با استفاده از روش سطح پاسخ برای بررسی تأثیر پارامترهای هندسی ابزار مانند زاویه آزاد اصلی²، زاویه براده و شعاع نوک ابزار در فرایند براده‌برداری مس تک کریستال انجام دادند. علاوه بر این، با مدلسازی ریاضی با استفاده از معادله رگرسیون خطی مرتبه دوم که براساس خروجی‌های فرایند می‌باشند، بهینه‌سازی تک و چند هدفی از فرایند براده‌برداری را دنبال کردند [20].

بر اساس بررسی‌های انجام شده، تأثیر انواع پارامترهای فرایند براده‌برداری و پارامترهای وابسته به هندسه ابزار در پژوهش‌های پیشین به صورت جداگانه مورد بررسی قرار گرفته‌اند ولی بهینه‌سازی و بررسی تأثیر برهمکنش این پارامترها روی یکدیگر با هدف بررسی زبری سطح صورت نگرفته است. در این پژوهش، تحلیل همزمان اثر پارامترهای ماشین‌کاری عمق براده‌برداری و سرعت برشی و پارامترهای هندسی ابزار براده‌برداری همچون زاویه براده ابزار، زاویه آزاد اصلی ابزار و شعاع نوک ابزار بر روی زبری سطح قطعه‌کار از جنس مس تک کریستال در عملیات نانوماشین‌کاری مورد بررسی قرار می‌گیرد. در این مقاله، همچنین با استفاده از روش طراحی آزمایش تاگوچی، علاوه بر هدفمند کردن آزمایش‌ها و کاهش زمان و هزینه آنها، مقادیر بهینه پارامترهای ورودی به منظور دستیابی به بهترین صافی سطح در ابعاد مشخص بدست می‌آید.

2- بیان مسئله، نوآوری و ذکر اهداف

همان‌طور که اشاره گردید، بررسی تجربی یک فرایند نانوماشین‌کاری به دلیل عمق براده‌برداری فوق‌العاده کوچک، براساس دقت ابزار و دستگاه اندازه‌گیری محدود می‌باشد. بنابراین تحقیقات تئوری مبتنی بر شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌تواند جزئیات دینامیکی میکروسکوپی یک فرایند نانوماشین‌کاری را به خوبی ارائه دهد.

³ LAMMPS

⁴ Ovito

¹ Rake Angle

² Clearance Angle

صورت رابطه (1) بیان کرد [4].

$$F_i = m_i a_i, \quad a_i = \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (1)$$

که در آن جرم اتم m_i ، شتاب اتم a_i و نیروی برآیند بر اتم i می‌باشد. این نیروها باید با استفاده از انرژی پتانسیل بین اتم‌ها، که معمولاً به عنوان گرادیان تابع پتانسیل شناخته می‌شود طبق رابطه (2)، محاسبه شوند [4]. نکته بسیار مهم در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، انتخاب صحیح پتانسیل‌های حاکم بر مسأله می‌باشد؛ چون در صورت انتخاب نادرست، پاسخ شبیه‌سازی به اشتباه بدست می‌آید.

$$F_i = -\frac{\partial}{\partial r_i} V(r_1, \dots, r_N) \quad (2)$$

در رابطه (2)، $V(r_1, \dots, r_N)$ نشان دهنده تابع پتانسیل براساس موقعیت N ذره می‌باشد. در این پژوهش، تابع پتانسیل برای سه برهمکنش اتمی مس-مس (برای اتم‌های قطعه کار)، کربن-کربن (برای اتم‌های ابزار براده‌برداری) و کربن-مس (برای برهمکنش فرایند براده‌برداری) اهمیت دارد.

در این تحقیق، به منظور تعریف برهمکنش مس-مس در حالیکه می‌توان هم از پتانسیل مورس² و هم از پتانسیل روش اتم جاسازی شده³ (EAM) استفاده کرد، به دلیل توصیف بهتر پیوند فلزی، کمترین نوسان در نیروهای براده‌برداری و بیشترین پایداری انرژی پتانسیل در قطعه کار از پتانسیل EAM استفاده شده است. [21، 22]. رابطه کلی این پتانسیل در رابطه (3) آورده شده است [23].

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(\neq i)} \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (3)$$

که در آن $\rho_{h,i}$ چگالی الکترونی میزبان در اتم i به دلیل اتم‌های باقیمانده در سیستم، $F_i(\rho_{h,i})$ انرژی جاسازی اتم i در چگالی الکترونی پس زمینه ρ و $\phi_{ij}(R_{ij})$ دافعه جفت هسته بین اتم‌های i و j که با فاصله R_{ij} از یکدیگر قرار دارند می‌باشد. چگالی الکترونی، با برهم‌نهی چگالی‌های اتمی به صورت رابطه (4) تقریب زده می‌شود [23].

$$\rho_{h,i} = \sum_{j(\neq i)} \rho_j^a(R_{ij}) \quad (4)$$

که در آن $\rho_j^a(R)$ چگالی الکترونی با مشارکت اتم j می‌باشد. پارامترهای مرتبط با تابع پتانسیل EAM مس در جدول 1 فهرست شده‌اند [23].

به منظور شبیه‌سازی ابزار براده‌برداری با جنس الماس از پتانسیل ترسوف⁴ استفاده شده است. عموماً برای مواد با

هندسی ابزار براده‌برداری شامل زاویه براده، زاویه آزاد اصلی و شعاع نوک ابزار در پنج سطح در نظر گرفته شده‌اند که در ادامه معرفی می‌گردند.

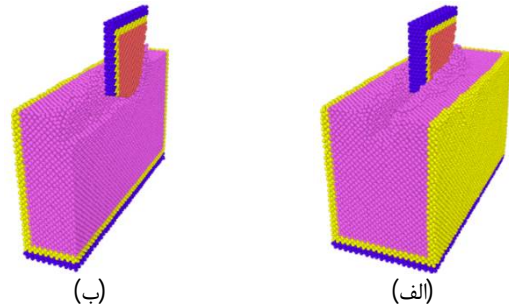


Fig. 1 The molecular dynamics model of nano-cutting; A) 3D view; B) Section view

شکل 1 مدل دینامیک مولکولی نانوبراده‌برداری؛ الف) نمای سه بعدی کامل؛ ب) نمای برش خورده

در ماشین کاری در ابعاد نانومتر، نیروهای براده‌برداری همان نیروهای بین اتمی هستند. این نیروها در اثر برهم نهی نیروهای برهمکنش بین ابزار براده‌برداری و قطعه کار به وجود می‌آیند و بر اساس پتانسیل‌های بین اتمی مدل‌سازی می‌شوند. نیروی براده‌برداری معمولاً در ابتدای فرایند منفی می‌باشد، زیرا ابزار در فاصله‌ای از قطعه کار قرار دارد و در این حالت، نیروی جاذبه‌ای بین اتم‌های ابزار و اتم‌های قطعه کار وجود خواهد داشت. سپس هنگامی که ابزار شروع به براده‌برداری قطعه کار می‌کند، نیروی دافعه‌ای بین ابزار و اتم‌های قطعه کار ایجاد می‌شود که در نهایت به مقادیر نیروی مثبت منجر می‌شود. پیش‌بینی دقیق همبستگی بین نانوساختارها و خواص مواد، به حل معادله موج شرودینگر¹ وابسته به زمان برای هسته‌ها و الکترون‌ها نیاز دارد. این حل به محاسبات بسیار زیادی احتیاج دارد که به این منظور روش‌های شبیه‌سازی اتمی مختلفی وجود دارند که روش دینامیک مولکولی از محبوب‌ترین و قدرتمندترین این روش‌ها می‌باشد. البته این روش محدودیت‌های خاص خود همچون محدودیت اندازه و زمان شبیه‌سازی را دارد، ولی ثابت شده است که یک ابزار توانمند در بررسی فرایندهای نانوماشین کاری می‌باشد. روش دینامیک مولکولی از پتانسیل‌های تجربی برای تعیین نیروهای بین اتمی یا مولکولی استفاده می‌کند و در آن براساس موقعیت، سرعت و شتاب ذرات، می‌توان حالت سیستم را پیش‌بینی کرد. این شبیه‌سازی براساس قانون دوم حرکت نیوتن و شامل حل عددی گام به گام معادلات حرکت کلاسیک می‌باشد. این قانون را برای مجموعه‌ای از N اتم می‌توان به

² Morse Potential

³ Embedded Atom Method Potential

⁴ Tersoff Potential

¹ Schrödinger Wave Equation

$$\eta_{ij} = \sum_{k(j \neq i)} f_C(r_{ik}) e^{[\lambda_3^3(r_{ij}-r_{ik})^3]} \quad (13)$$

جدول 2 مقادیر ثابت پتانسیل ترسوف [24]

Table 1 Tersoff potential constant values [24]

پارامتر ثابت	مقدار
A (eV)	$1/3936 \times 10^3$
B (eV)	$3/467 \times 10^2$
λ_1 (nm ⁻¹)	34/879
$\lambda_2 = \lambda_3$ (nm ⁻¹)	22/119
α	0
β	$1/5724 \times 10^{-7}$
n	$7/2751 \times 10^{-1}$
p	$3/8049 \times 10^4$
q	4/384
h	$-5/7058 \times 10^{-1}$
R (nm)	0/18
D (nm)	0/02

در نهایت به منظور شبیه‌سازی برهمکنش اتم‌های مس و کربن در حین براده‌برداری از تابع پتانسیل مورس استفاده شده است. این تابع یک تابع پتانسیل دو جسمی بوده و طبق شکل 2 در فواصل کوچک دارای نیروی دافعه، در فواصل میانی دارای نیروی جاذبه و برای فواصل زیاد بین دو اتم درگیر به آرامی به صفر می‌رسد. این پتانسیل طبق رابطه (14) بیان می‌شود [25]:

$$V_{ij} = D_e [e^{-2\alpha(r_{ij}-r_e)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_e)}] \quad (14)$$

در رابطه (14)، r_{ij} فاصله بین اتم‌های i و j ، $r_e = 2.05 \text{ \AA}$ فاصله پیوندی تعادل¹؛ $D_e = 0.087 \text{ eV}$ عمق چاه² و $\alpha = 5.14 \text{ \AA}^{-1}$ عرض تابع پتانسیل می‌باشد [26].

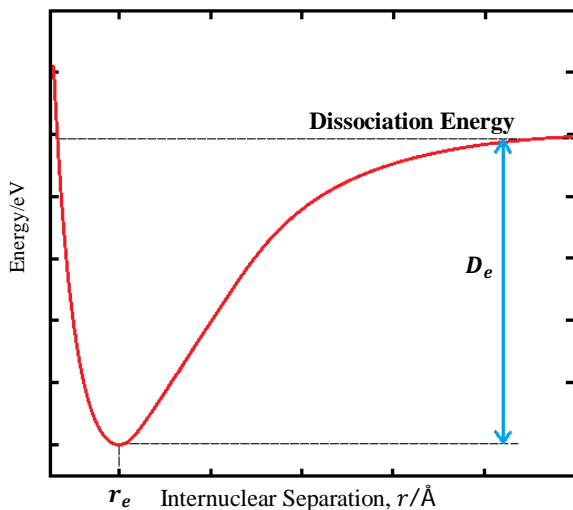


Fig. 2 Morse potential function curve [25]

¹ Equilibrium Bond Distance

² Well depth

پیوندهای کووالانسی شبیه به کربن و سیلیکون از پتانسیل ترسوف استفاده می‌شود [3، 24]. رابطه کلی این پتانسیل در رابطه (5) آورده شده است [4]:

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V_{ij}$$

$$V_{ij} = V_r(r_{ij}) - B_{ij} V_a(r_{ij}) = f_c(r_{ij}) [a_{ij} f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \quad (5)$$

که در آن V_r و V_a پتانسیل‌های ناشی از نیروهای دافعه و جاذبه بین اتم‌های i و j و پارامتر اطلاعات جهت و طول پیوند می‌باشد.

جدول 1 مقادیر ثابت پتانسیل EAM [23]

Table 1 EAM potential constant values [23]

پارامتر ثابت	مقدار
Z_0	11/0
α	1/7227
β	0/1609
ν	2
n_s	1/000
a_0 (Å)	3/615
E_{sub} (eV)	3/54
B (ergs/cm ³)	1/38
C_{11} (ergs/cm ³)	1/67
C_{12} (ergs/cm ³)	1/24
C_{44} (ergs/cm ³)	0/76
E_v^f (eV)	1/28
ساختار اتمی	$3d^{10}4s^1$

روابط تکمیلی برای محاسبه پتانسیل ترسوف در روابط (6) تا (13) آمده‌اند [4]. به منظور استفاده از این رابطه، مقادیر ثابت پتانسیل ترسوف در جدول 2 بیان شده‌اند [24].

$$f_R(r) = Ae^{-\lambda_1 r} \quad (6)$$

$$f_A(r) = -Be^{-\lambda_2 r} \quad (7)$$

$$f_C(r) = \begin{cases} 1, & r < R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin\left[\frac{\pi}{2}(r - R)/D\right], & R - D < r < R + D \\ 0, & r > R + D \end{cases} \quad (8)$$

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \xi_{ij}^n)^{-1/2n} \quad (9)$$

$$\xi_{ij} = \sum_{k(j \neq i)} f_C(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) e^{[\lambda_3^3(r_{ij}-r_{ik})^3]} \quad (10)$$

$$g(\theta) = 1 + \frac{p^2}{q^2} - \frac{p^2}{[q^2 + (h - \cos \theta)^2]} \quad (11)$$

$$a_{ij} = (1 + \alpha^n \eta_{ij}^n)^{-1/2n} \quad (12)$$

وظیفه این لایه ایجاد دمای ثابت و جلوگیری از اثرگذاری دمای صفر مطلق لایه مرزی روی لایه نیوتنی می‌باشد. ابعاد قطعه‌کار $[95 \text{ \AA} \times 70 \text{ \AA} \times 165 \text{ \AA}]$ بوده و شامل 96,115 اتم می‌باشد و نحوه لایه‌بندی و ضخامت لایه‌های مرزی و ترموستات در شکل‌های 1 و 3 نشان داده شده‌اند.

در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، آماده‌سازی شرایط ترمودینامیکی مدل در شروع شبیه‌سازی و در حین عملیات دارای اهمیت زیادی می‌باشد. بنابراین مفهوم هنگردهای ترمودینامیکی¹ مورد استفاده قرار می‌گیرد. به یک گروه بزرگ از اتم‌ها که از نظر میکروسکوپی متفاوتند ولی از نظر میکروسکوپی و ترمودینامیک مشابه باشند، هنگرد گفته می‌شود. برای یک سیستم با N اتم و با کمیت‌های ترمودینامیکی فشار (P)، دما (T)، حجم (V)، آنترپی (S) و غیره؛ می‌توان پیکره‌بندی‌های متعددی با ویژگی‌های میکروسکوپی یکسان تعریف کرد. در این پژوهش از سه هنگرد NVE، NVT و NPT استفاده شده است. هنگرد NVE به هنگرد میکروکانونی² معروف بوده و بیان‌کننده سیستمی ایزوله با تعداد N اتم در یک حجم ثابت و با انرژی کل ثابت E می‌باشد. هنگرد NVT به هنگرد کانونی³ شهرت داشته و بیانگر یک سیستم با N اتم در حجم ثابت V و دمای ثابت T می‌باشد. لازم به ذکر است که از این هنگرد برای مدلسازی یک فعل و انفعال دمایی به کمک یک مخزن گرما به منظور ثابت نگه داشتن دما استفاده می‌شود. هنگرد NPT نیز بیانگر هنگرد هم‌دما-هم‌فشار⁴ بوده و بیانگر سیستمی با N اتم با فشار (P) و دمای (T) ثابت می‌باشد [4]. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام شده، ابتدا به منظور تعادل هرچه بیشتر مدل قبل از فرایند براده‌برداری، با استفاده از دستور minimize سیستم در حالت انرژی کل حداقلی قرار گرفته و سپس به منظور تعادل و حذف تنش‌های پسماند از هنگرد NPT در مدت 30,000 گام زمانی (0.002 ps) استفاده شد. البته برای شبیه‌سازی لایه ترموستات، به منظور ثابت نگه داشتن دما، از هنگرد NVT و برای لایه نیوتنی، به منظور براده‌برداری، از هنگرد NVE استفاده شده است.

پارامتر هدف در این پژوهش، زبری سطح می‌باشد. به منظور بررسی این پارامتر از دو مشخصه زبری متوسط $(R_a)^5$ و زبری ریشه میانگین مربعات $(RMS)^6$ استفاده شد [27].

شکل 2 نمودار تابع پتانسیل مورس [25]

در این پژوهش، دمای اولیه سیستم، 300 درجه کلوین در نظر گرفته شد و همچنین ابزار براده‌برداری در ابتدا با فاصله 2 نانومتری از قطعه‌کار قرار گرفته و با سرعت ثابت شروع به حرکت و براده‌برداری کرده و پس از طی مسیر طولی قطعه‌کار از سمت مقابل آن خارج می‌شود. البته به منظور بررسی دقیق‌تر پارامتر زبری سطح، فاصله 3 نانومتر ابتدایی در لحظه ورود ابزار براده‌برداری به قطعه‌کار و فاصله 3 نانومتری انتهایی قطعه‌کار در محل خروج ابزار از قطعه‌کار از مسیر مورد بررسی برای محاسبه پارامترهای زبری سطح به دلیل بررسی بهتر در محاسبه زبری سطح حذف گردید. این فاصله تحت عنوان طول براده‌برداری مورد ارزیابی در شکل 3 نشان داده شده است.

مطابق شکل 3، در این مدل به منظور انطباق هرچه بیشتر نتایج با واقعیت، برای مدل ابزار و قطعه‌کار سه لایه در نظر گرفته شده است. لایه اصلی که بیشترین تعداد اتم را شامل می‌شود، لایه نیوتنی در نظر گرفته شده است. در این لایه قانون دوم نیوتن حاکم است. لایه مرزی، لایه‌ای می‌باشد که به دلیل ثابت کردن قطعه‌کار در جای خود و یا کنترل موقعیت و سرعت ابزار براده‌برداری، به صورت لایه‌ای از اتم‌ها با نیروی صفر فرض می‌شود. با ثابت نمودن لایه مرزی و صفر شدن نیروهای اتمی آن، دمای آن به صفر مطلق کاهش می‌یابد، بنابراین به منظور جلوگیری از اثرگذاری این لایه روی لایه نیوتنی از لایه ترموستات به عنوان لایه واسط استفاده شده است.

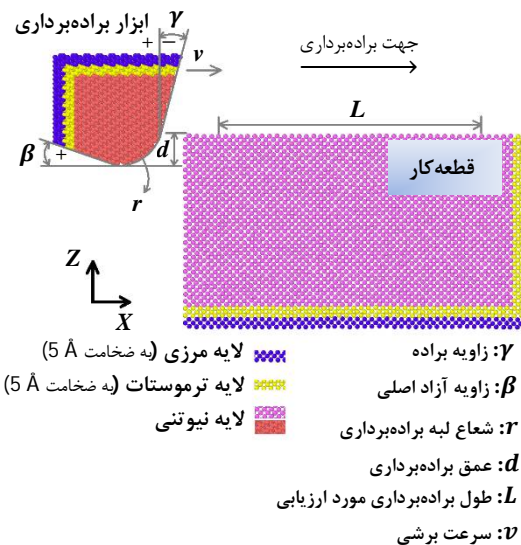


Fig. 3 The molecular dynamic model specifications (lateral view)

شکل 3 مشخصات مدل دینامیک مولکولی (نمای جانبی)

¹ Thermodynamic Ensembles

² Microcanonical Ensemble

³ Canonical Ensemble

⁴ Isobaric Isothermal Ensemble

⁵ Average Roughness

⁶ Root Mean Squared

می‌گردد. در واقع، طراحی آماری جهت آزمایش‌های تجربی یک اصل اساسی در انجام تحقیقات آزمایشگاهی و صنعتی محسوب می‌شود. این طراحی‌ها باعث دستیابی به نتایج مطمئن‌تر، صرفه جویی در زمان و کاهش قابل ملاحظه در تعداد آزمایش‌ها شده و در نهایت منجر به بهینه‌سازی فرایند می‌گردد.

روش تاگوچی بیشترین کاربرد را در طراحی آزمایش دارد، به نحوی که بیشترین و مهمترین اثرات متقابل پارامترها را با کمترین اجرای آزمایش در نظر می‌گیرد [28]. مزیت استفاده از آرایه‌های متعامد تاگوچی، تعداد کم اجرای آزمایش‌ها می‌باشد [29].

در این مقاله، به منظور تشخیص و بدست آوردن شرایط بهینه از بین آزمایش‌ها از تحلیل نسبت S/N استفاده شده است. روابط نسبت S/N به گونه‌ای طراحی شده‌اند که یک آزمایشگر همیشه می‌تواند بزرگترین سطح عامل را برای بهینه‌سازی ویژگی‌های کیفی یک آزمایش انتخاب کند. بنابراین، روش محاسبه نسبت S/N بستگی به این دارد که آیا ویژگی کیفی کوچکتر-بهتر، بزرگتر-بهتر یا اسمی-بهتر است. در مورد زبری سطح، مقادیر کوچکتر همیشه ترجیح داده می‌شوند. پارامتر نسبت S/N برای تمامی زبری سطح‌های بدست آمده حاصل از انجام آزمایش‌ها از رابطه 17 برای ویژگی کوچکتر-بهتر بدست آمده است [30]:

$$S/N = -10 \log_{10} \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n R_i^2 \right] \quad (17)$$

که در آن R_i مقدار زبری سطح برای آزمون i ام در آن آزمایش است. در آزمایش تاگوچی همیشه نسبت S/N بالاتر به معنای شرایط بهتر می‌باشد.

4- ارائه نتایج و بحث

همان‌طور که اشاره گردید، به منظور هدفمند کردن آزمایش‌ها و کاهش زمان و هزینه آنها در این مقاله از روش طراحی آزمایش تاگوچی استفاده گردید. در این پژوهش به منظور استفاده از روش تاگوچی از نرم‌افزار مینی‌تب استفاده شده است. در اینجا پنج پارامتر در پنج سطح (مطابق جدول 3) مورد بررسی قرار گرفته و اثر تغییر این پارامترهای ورودی روی دو خروجی R_a و RMS مورد بررسی قرار گرفته‌اند. در صورتی که اثر تغییر پارامترهای ورودی به صورت کامل مورد بررسی قرار گیرند باید $5^5 = 3125$ آزمایش انجام شود که زمان زیادی طول می‌کشد، در حالی‌که با استفاده از روش تاگوچی (L_{25})، با انجام 25 آزمایش، فرایند براده‌برداری با دقت بسیار خوبی مورد بررسی

مطابق رابطه (15)، زبری متوسط، میانگین عددی ارتفاع قله‌ها و عمق دره‌های مشاهده شده در سطح نیم‌رخ است. اما زبری ریشه میانگین مربعات با محاسبه ریشه میانگین مربعات انحراف ارتفاع از سطح متوسط ارتفاع به صورت رابطه (16) تعریف شده است [27].

$$R_a = \frac{1}{L} \int_0^L |Z_i| dx \quad (15)$$

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{L} \int_0^L Z_i^2} \quad (16)$$

در رابطه‌های (15) و (16) مطابق شکل 4، Z_i برابر با انحراف ارتفاع از صفحه ارتفاع میانگین برای تک تک اتم‌ها و L برابر با طول براده‌برداری مورد ارزیابی مشخص شده در شکل 3 می‌باشد. ارتفاع صفحه میانگین بر اساس محل قرارگیری نوک ابزار براده‌برداری و شعاع برشی¹ بین اتم‌های ابزار و قطعه‌کار تعیین شده است. یک نمونه از فرایند براده‌برداری در شکل 5 نشان داده شده است.

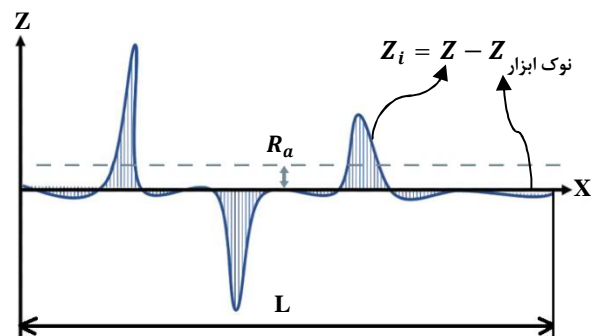


Fig. 4 The defined parameters in equations (15) and (16)

شکل 4 پارامترهای رابطه‌های (15) و (16)

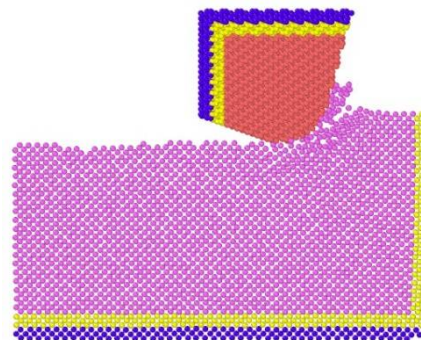


Fig. 5 Middle plate of the cutting process

شکل 5 صفحه میانی فرایند براده‌برداری

طراحی آزمایش‌ها یکی از مهمترین مباحثی است که امروزه در صنایع مختلف به ویژه فعالیت‌های آزمایشگاهی مطرح

¹ Cut-off Radius

4 نمونه از سطح‌های تولید شده براساس پارامترهای ورودی جدول 4 (ردیف‌های 2، 8، 14 و 21) در شکل 6 نشان داده شده‌اند. نمودار مقدار میانگین و نسبت سیگنال به نویز پارامتر R_a به ترتیب در شکل‌های 7 و 8 نشان داده شده‌اند. همچنین این نمودارها برای پارامتر RMS به ترتیب در شکل‌های 9 و 10 ارائه گردیده‌اند. لازم به ذکر است مقادیر بهینه در شکل‌های 7 تا 10 با دایره‌های قرمز رنگ مشخص شده‌اند.

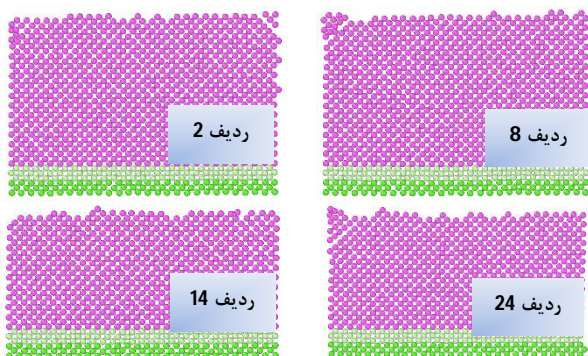


Fig. 6 Generated surfaces based on the parameters of Table 4

شکل 6 سطح‌های تولید شده براساس پارامترهای جدول 4

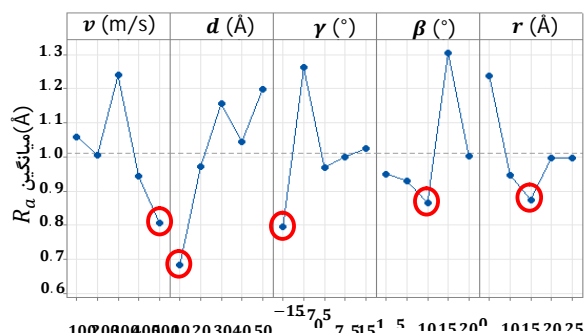


Fig. 7 Graph the mean value of the parameter R_a

شکل 7 نمودار مقدار میانگین پارامتر R_a

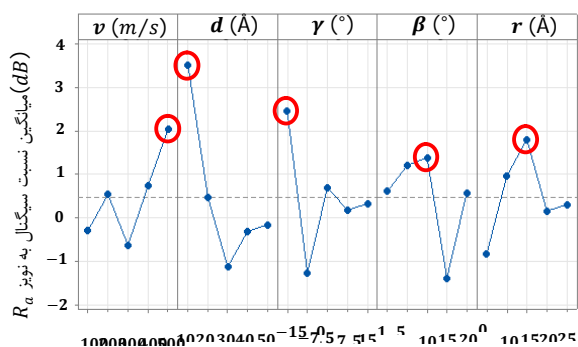


Fig. 8 Graph the mean value of the S/N of the R_a

شکل 8 نمودار مقدار میانگین نسبت سیگنال به نویز پارامتر R_a

براساس شبیه‌سازی‌های انجام شده مشخص گردید براساس

قرار می‌گیرد.

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بر اساس شرایط مختلف براده‌برداری طبق جدول 3 انجام شده و نتایج آن در جدول 4 ارائه گردیده‌اند. البته لازم به ذکر است که چیدمان تغییر پارامترهای ورودی براساس روش تاگوچی انجام شده است.

جدول 3 سطح‌های پارامترهای ورودی

Table 3 Input parameter levels

پارامترهای ورودی (مطابق شکل 3)				
r (Å)	β (°)	γ (°)	d (Å)	v (m/s)
0	1	-15	10	100
10	5	-7/5	20	200
15	10	0	30	300
20	15	7/5	40	400
25	20	15	50	500

جدول 4 نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

Table 4 Molecular dynamics simulation results

پارامترهای ورودی (مطابق شکل 3)							زبری سطح
RMS (Å)	R_a (Å)	r (Å)	β (°)	γ (°)	d (Å)	v (m/s)	ردیف
0/716	0/701	0	1	-15	10	100	1
1/288	1/047	10	5	-7/5	20	100	2
1/401	1/123	15	10	0	30	100	3
1/075	1/043	20	15	7/5	40	100	4
1/712	1/386	25	20	15	50	100	5
0/949	0/920	20	10	-15	10	200	6
1/377	1/219	25	15	-7/5	20	200	7
1/437	1/279	0	20	0	30	200	8
1/556	1/169	10	1	7/5	40	200	9
0/804	0/540	15	5	15	50	200	10
0/633	0/579	10	20	-15	10	300	11
1/319	1/141	15	1	-7/5	20	300	12
1/493	1/320	20	5	0	30	300	13
1/168	0/820	25	10	7/5	40	300	14
2/263	2/439	0	15	15	50	300	15
0/913	0/753	25	5	-15	10	400	16
1/076	0/678	0	10	-7/5	20	400	17
1/363	1/254	10	15	0	30	400	18
1/388	1/098	15	20	7/5	40	400	19
1/251	0/937	20	1	15	50	400	20
0/785	0/574	15	15	-15	10	500	21
0/807	0/773	20	20	-7/5	20	500	22
1/118	0/808	25	1	0	30	500	23
1/229	1/093	0	5	7/5	40	500	24
0/837	0/789	10	10	15	50	500	25

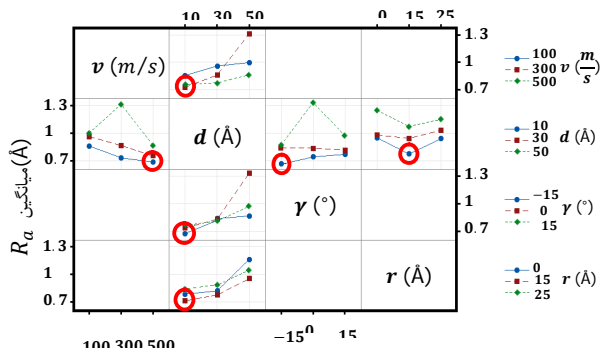


Fig. 11 Graph the mean value of the parameter R_a For interacting machining parameters

شکل 11 نمودار مقدار میانگین پارامتر R_a برای برهمکنش پارامترهای ماشین کاری

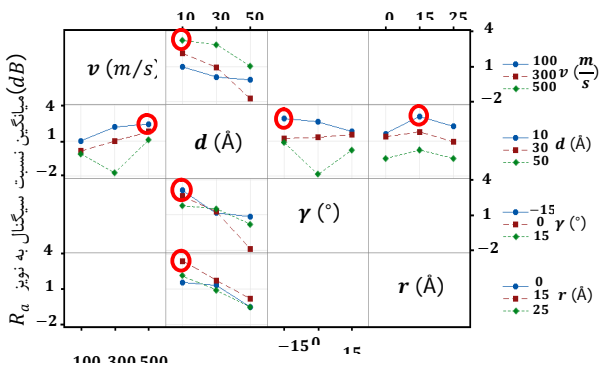


Fig. 12 Graph the mean value of the S/N of the R_a For interacting machining parameters

شکل 12 نمودار مقدار میانگین نسبت سیگنال به نویز برای برهمکنش پارامترهای ماشین کاری

با توجه به نتایج ارائه شده در شکل‌های 7 تا 10 برای تک پارامترها و شکل‌های 11 و 12 برای برهمکنش پارامترها (مشخص شده با دایره‌های قرمز رنگ)، پارامترهای بهینه نانوماشین کاری در این ابعاد مشخص به ترتیب براساس خروجی‌های R_a و RMS در جدول 6 ارائه شده‌اند. همچنین در این جدول نتایج زبری سطح بدست آمده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی براساس پارامترهای ورودی بهینه در این پژوهش مشخص شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌گردد نتایج براساس خروجی R_a نسبت به RMS نشان دهنده صافی سطح بهتری (مقدار کوچکتر) می‌باشد. شکل‌های 13 و 14 به ترتیب نمای برش خورده سطح نانوماشین کاری تولیدی با استفاده از پارامترهای ورودی جدول 6 می‌باشند. بنابراین مقادیر بهینه پارامترهای ورودی نانوماشین کاری در این پژوهش، مطابق ردیف نخست جدول 6 بدست می‌آید.

پارامتر خروجی R_a به ترتیب پارامترهای عمق براده‌برداری، زاویه شیب، زاویه آزاد اصلی، سرعت برشی و شعاع نوک ابزار براده‌برداری دارای بیشترین تأثیر بر روی زبری سطح می‌باشند ولی براساس پارامتر خروجی RMS در رده‌بندی تأثیر پارامترها، جای پارامترهای سرعت برشی و زاویه آزاد اصلی جابجا می‌گردد. همچنین الگوی رفتاری تغییر پارامترها برای دو متغیر خروجی RMS و R_a تقریباً شبیه به یکدیگر می‌باشند. نتایج ارائه شده در شکل‌های 7 و 9 به اینصورت می‌باشند که هر اندازه مقدار میانگین کمتر باشد بیانگر بهتر بودن صافی سطح بوده و برعکس براساس شکل‌های 8 و 10 هرچه مقدار سیگنال به نویز بزرگتر باشد بیان کننده صافی سطح بهتر می‌باشد.

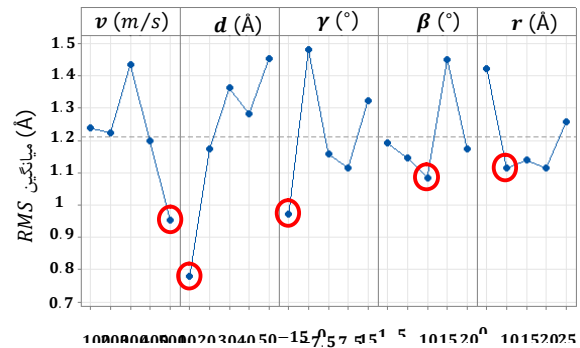


Fig. 9 Graph the mean value of the parameter RMS

شکل 9 نمودار مقدار میانگین پارامتر RMS

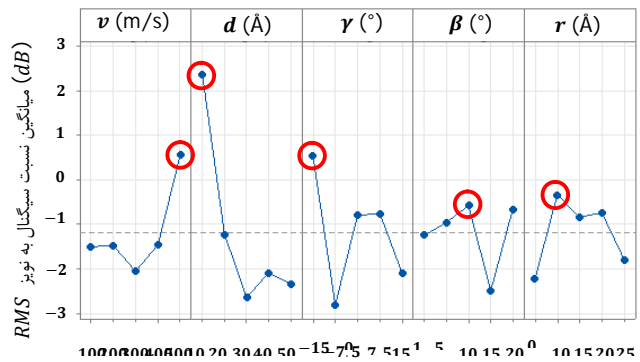


Fig. 10 Graph the mean value of the S/N of the RMS

شکل 10 نمودار مقدار میانگین نسبت سیگنال به نویز پارامتر RMS

در ادامه به عنوان نمونه، نمودارهای برهمکنش پارامترهای ماشین کاری و ابزار براده‌برداری در شکل‌های 11 و 12 ارائه شده‌اند. در این نتایج به ترتیب، برهمکنش تغییرات پارامترهای ماشین کاری به صورت دو به دو بر روی نتایج میانگین پارامتر R_a و نسبت سیگنال به نویز آن نشان داده شده‌اند.

ماشین کاری شامل سرعت برشی و عمق براده برداری و پارامترهای ابزار براده برداری شامل زاویه براده، زاویه آزاد اصلی و شعاع لبه ابزار بر مشخصه‌های زبری سطح میانگین (R_a) و ریشه میانگین مربعات (RMS) مورد بررسی قرار گرفته است. در این مقاله به منظور هدفمند کردن بررسی تغییرات ورودی‌ها بر روی خروجی، از روش طراحی آزمایش تاگوچی استفاده شده است. مطابق نتایج این پژوهش عمق براده برداری بیشترین تأثیر را بر زبری سطح قطعه ماشین کاری شده دارا می‌باشد. در نهایت مقادیر بهینه پارامترهای براده برداری برای دستیابی به بهترین صافی سطح به شرح $\gamma = -15^\circ$, $d = 10 \text{ \AA}$, $v = 500 \text{ m/s}$ و $\beta = 10^\circ$ و $r = 15 \text{ \AA}$ بدست آمد.

7- مراجع

- [1] N. Lukman, Abdulkadir, A.H. Khaled, I. Abubakar, M. Liman, A. Tirimisiyu, Olaniyan, P. Babatunde. Review of molecular dynamics/experimental study of diamond-silicon behavior in nanoscale machining. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 98, June, pp. 317–371, 2018.
- [2] K. Kumar, D. Zindani, N. Kumari, J. P. Davim, *Micro and nano machining of engineering materials*, First Edition, pp. 67-70, Springer, 2019.
- [3] X. GUO, Q. LI, T. LIU, R. KANG, Z. JIN, D. GUO, Advances in molecular dynamics simulation of ultra-precision machining of hard and brittle materials, *Frontiers of Mechanical Engineering*, Vol. 12, pp. 89–98, 2017.
- [4] Oluwajobi, O. Akinjide, 2012, *Nanomachining Technology Development*, PhD Thesis, University of Huddersfield.
- [5] Z. Junjie, W. Zhanfeng, Y. Yongda, S. Tao, Concise Review: Recent Advances in Molecular Dynamics Simulation of Nanomachining of Metals, *Current Nanoscience*, Vol. 12, No. 6, pp. 653-665, 2016.
- [6] S. Sardar, S. K. Karmakar, D. Das, High-stress abrasive wear characteristics of Al 7075 alloy and 7075/Al₂O₃ composite, *Measurement*, Vol. 127, pp. 42-62, 2018.
- [7] A. Goyal, Investigation of Material removal rate and Surface roughness during Wire electrical discharge machining (WEDM) machining of Inconel 625 super alloy by cryogenic treated tool electrode, *Journal of King Saud University – Science*, Vol. 29, Issue 4, pp. 528-535 2017.
- [8] A. Panda, A. K. Sahoo. A. K. Rout, Investigations on surface quality characteristics with multi-response parametric optimization and correlations, *Alexandria Engineering Journal*, Vol. 55, Issue 2, pp. 1625-1633, 2016.
- [9] Y. Gong, J. Xu, and R. Buchanan. Surface roughness: A review of its measurement at micro-/nano-scale. *Physical Sciences Reviews*, 3(1),

جدول 6 نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

Table 6 Molecular dynamics simulation results

زبری سطح		پارامترهای ورودی بهینه					پارامتر زبری سطح
$RMS(\text{\AA})$	$R_a(\text{\AA})$	$r(\text{\AA})$	$\beta(^\circ)$	$\gamma(^\circ)$	$d(\text{\AA})$	$v(\text{m/s})$	
0/598	0/493	15	10	-15	10	500	R_a
0/725	0/675	10	10	-15	10	500	RMS

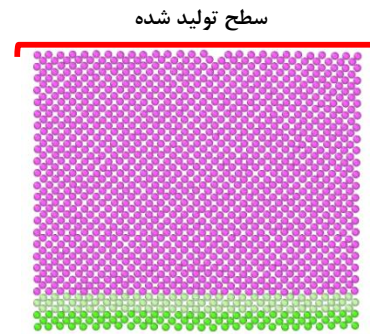


Fig. 13 Generated surface with optimal inputs based on R_a

شکل 13 سطح تولید شده با ورودی‌های بهینه براساس R_a

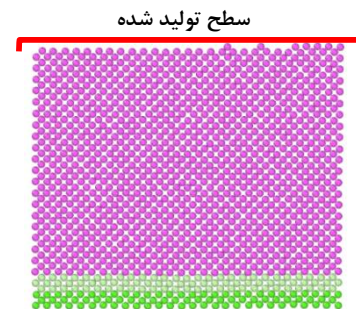


Fig. 14 Generated surface with optimal inputs based on RMS

شکل 14 سطح تولید شده با ورودی‌های بهینه براساس RMS

-5

6- نتیجه‌گیری

کیفیت سطح ماشین کاری شده از نظر زبری سطح تأثیر زیادی بر عملکرد قطعات تولیدی دارد. براساس دقت مد نظر در ماشین کاری فوق دقیق، اهمیت این موضوع در سطح نانومتر مطرح می‌شود. بنابراین در این مقاله براساس اهمیت زبری سطح در نانوماشین کاری و با توجه به محدودیت‌های اندازه‌گیری‌های تجربی در این ابعاد، با استفاده از توانمندی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، به بررسی تأثیر برخی از پارامترهای ماشین کاری مس تک کریستال با ابزار الماس در ابعاد نانومتر بر زبری سطح قطعه کار پرداخته است. ابتدا براساس گام‌های تعریف شده برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، شرایط مدل‌سازی، شرایط اولیه و پتانسیل‌ها تعریف شده و سپس تأثیر تغییر پارامترهای فرایند

- Optimization of Effective Parameters on the Nano-scale Cutting Process of Monocrystalline Copper Using Molecular Dynamic, *Journal of Stress Analysis*, Vol. 4, Issue 2, pp. 127-136, 2020.
- [21] J. Ch. Wang, J. M. Zhang, N. Li, Y. P. Kou, Effect of Potential Function on Molecular Dynamics Simulation of Copper Processing, *Key Engineering Materials*, Vol. 407-408, pp. 368-371, 2009.
- [22] A. Oluwajobi, X. Chen, The Effect of Interatomic Potentials on the Molecular Dynamics Simulation of Nanometric Machining, *International Journal of Automation and Computing*, Vol. 8, No. 326, 2011.
- [23] S.M. Foiles, M.I. Baskes, M.S. Daw. *Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys*. Physical Review B, 37, June, pp. 10378, 1986.
- [24] J. Tersoff. *Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems*. Physical Review B, 41, May, pp. 3248, 1989.
- [25] A. P. Markopoulos, I. K. Savvopoulos, N. E. Karkalos, D. E. Manolakos, Molecular dynamics modeling of a single diamond abrasive grain in grinding, *Frontiers of Mechanical Engineering*, Vol. 10, pp. 168-175, 2015.
- [26] Q. X. Pei, C. Lu, F. Z. Fang, H. Wu, Nanometric cutting of copper: A molecular dynamics study, *Computational Materials Science*, Vol. 37, Issue 4, pp. 434-441, 2006.
- [27] Y. Li, M. Shuai, J. Zhang, H. Zheng, T. Sun, Y. Yang. Molecular Dynamics Investigation of Residual Stress and Surface Roughness of Cerium under Diamond Cutting. *Micromachines*, 9(8): 386, August, 2018.
- [28] W. C. Parr, *Introduction to Quality Engineering: Designing Quality Into Products and Processes*, Asian productivity organization, Tokyo, 1990.
- [29] G. S. Peace, *Taguchi Methods: A Hands-On Approach*, Addison-Wesley Publishing Company, 1993.
- [30] K. Palanikumar, Cutting parameters optimization for surface roughness in machining of GFRP composites using Taguchi method, *Journal of reinforced plastics and composites*, Vol. 25, Issue 16, 2006.
- January, 2018.
- [10] Sh. Hatefi, Kh. Abou-El-Hossein, Review of single-point diamond turning process in terms of ultra-precision optical surface roughness, *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, Vol. 106, pp. 2167-2187, 2020.
- [11] C. F. Cheung, W. B. Lee, Study of Factors Affecting the Surface Quality in Ultra-Precision Diamond Turning, *Materials and Manufacturing Processes*, Vol. 15, Issue 4, pp. 481-502, 2000.
- [12] B. Davoodi, A.H. Tazehkandi. Cutting forces and surface roughness in wet machining of Inconel alloy 738 with coated carbide tool. Materials Science Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: *Journal of Engineering Manufacture*, 230(2), August, pp. 1-12, 2014.
- [13] C. L. He, W. J. Zong, J. J. Zhang, Influencing factors and theoretical modeling methods of surface roughness in turning process: State-of-the-art, *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, Vol. 129, pp. 15-26, 2018.
- [14] P.Z. Zhu, Y.Z. Hu, T.B. Ma, H. Wang. Study of AFM-based nanometric cutting process using molecular dynamics. *Applied Surface Science*, 256(23), September, pp. 7160-7165, 2010.
- [15] J. Li, Q. Fang, L. Zhang, Y. Liu. The effect of rough surface on nanoscale high speed grinding by a molecular dynamics simulation. *Computational Materials Science*, 98, February, pp. 252-262, 2015.
- [16] S. Dilbag, P.V. Rao. A surface roughness prediction model for hard turning process. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 32, March, pp. 1115-1124, 2007.
- [17] F. Xu, F. Fang, Y. Zhu, X. Zhang, Study on Crystallographic Orientation Effect on Surface Generation of Aluminum in Nano-cutting, *Nanoscale Research Letters*, Vol. 12, No. 289, 2017.
- [18] F. Xu, F. Fang, X. Zhang, Hard particle effect on surface generation in nano-cutting, *Applied Surface Science*, Vol. 425, pp. 1020-1027, 2017.
- [19] J. Shi, Y. Wang, X. Yang, Nano-scale machining of polycrystalline coppers - effects of grain size and machining parameters, *Nanoscale Research Letters*, Vol. 8, No. 500, 2013.
- [20] M. M. Abaie, M. Zolfaghari, V. Tahmasbi, P. Karimi,