

تاثیر هندسه و سرعت ابزار بر تولید حرارت در فرایند برش نانومتری تک‌بلور مسی با استفاده

از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

سید وحید حسینی^{۱*} و مهرداد وحدتی^۲

چکیده

تولید حرارت در طول فرایند ماشین‌کاری نانومتری یکی از پیامدهایی است که سعی می‌شود به کمترین حد رسانده شود. این پژوهش به بررسی تاثیر شعاع انحنای نوک ابزار و سرعت برش بر تولید حرارت و بالانس انرژی در قطعه‌کار می‌پردازد. در این راستا، فرایند برش نانومتری بر قطعه‌کار تک بلور مس، با روش دینامیک مولکولی و تابع پتانسیل فلزی EAM شبیه‌سازی شده و با ارایه مدل توزیع انرژی، تاثیر عوامل یاد شده مورد بررسی قرار می‌گیرد. بر اساس نتایج، با نفوذ ابزار به داخل قطعه‌کار، سرعت اتم‌هایی که در همسایگی ابزار قرار دارند، به شدت افزایش می‌یابد. این افزایش موضعی سرعت و تغییر شکل زیاد باعث می‌شود که دما در قطعه‌کار به صورت موضعی در اطراف ابزار و براده زیاد شود. افزایش چهار برابری سرعت برش، تنها باعث افزایش حدود 21-27٪ نیروهای برشی می‌شود. سرعت برش، اما تاثیر قابل توجهی در تغییرات انرژی پتانسیل، جنبشی و انتقال حرارت در قطعه‌کار دارد. به گونه ای که در سرعت‌های برش بالا با کاهش مقدار انتقال حرارت، انرژی جنبشی و پتانسیل زیادی در قطعه‌کار باقی می‌ماند که باعث افزایش شدید دما و گرادیان درجه حرارت در قطعه‌کار می‌شود. افزایش چهار برابری سرعت برش، از 50m/s به 200 m/s، باعث افزایش دما در نواحی ماشین‌کاری از 300°C به 700 °C می‌شود که می‌تواند در کیفیت سطح ماشین‌کاری تاثیرگذار باشد. افزون بر این، با افزایش شعاع انحنا ابزار، میزان فشردگی اتم‌ها در جلوی ابزار افزایش می‌یابد و باعث افزایش نیروهای ابزار بویژه در جهت عمودی می‌شود که در نهایت، باعث افزایش گرادیان درجه حرارت در قطعه‌کار بویژه در ناحیه براده می‌شود.

واژه‌های کلیدی: ماشین‌کاری نانومتری، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تولید حرارت، بالانس انرژی.

1- دانشجوی دکتری، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی.

2- استادیار، گروه ساخت و تولید دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی.

*- نویسنده مسئول مقاله: Mscmechanic@hotmail.com

پیشگفتار

امروزه فرایند ماشین کاری نانومتری در صنایع مکانیکی نوین، الکترونیک، مغناطیس و نوری کاربرد فراوانی پیدا کرده است. هدف از ماشین کاری نانومتری، رسیدن به کیفیت سطح بسیار بالا (در حد چند نانومتر) و دقت فرم بالا با حداقل خرابی در سطح ماشین کاری شده و ریزساختار قطعه است. عملیات ماشین کاری نانومتری به وسیله ماشین ابزارهای فرا دقیق^۱ با استفاده از ابزار الماس تک بلور بر بدنه‌ای که دارای دقت بسیار بالا و صلبیت مناسب است، با عمق براده برداری چند نانومتر انجام می‌پذیرد [1]. با کم شدن عمق براده برداری تا حدود چند لایه اتمی، امکان فهم تجربی و آزمایشگاهی مکانیزم براده برداری و بررسی تاثیر پارامترهای ماشین کاری در ابعاد نانو بسیار سخت و هزینه‌بر است. روش‌های المان محدود نیز اگر چه در فرایندهای میکرو ماشین کاری کاربرد قابل قبولی دارند، به دلیل انجام فرایند برش در ابعاد چند نانومتر و وابستگی شدید مکانیزم براده برداری به ویژگی های اتمی و جهات بلوری، قابل استفاده نمی‌باشند. امروزه روش جایگزین دینامیک مولکولی برای فهم بهتر پدیده براده برداری در ابعاد نانومتر کاربرد زیادی پیدا کرده است [2-7].

میکاوا و ایتو^۲ فرایند ماشین کاری نانومتری تک بلور مس را با استفاده از ابزار الماس با نوک گرد مطالعه کردند [2]. انرژی ویژه در نسبت عمق برش به شعاع انحنای ابزار مشخص که با استفاده از روش دینامیک مولکولی بدست آمده بود، با نتایج تجربی مطابقت داشت. ایشان در این پژوهش در زمینه سایش ابزار، مطالعاتی انجام دادند که با نتایج تجربی همخوانی قابل قبولی داشت. کاندرس کاران و کامندوری^۳ با در دست داشتن تجهیزات پیشرفته آزمایشگاهی و محاسباتی در دانشگاه اوکلاهما امریکا، در زمینه ماشین کاری نانومتری پژوهش‌های ارزشمندی را انجام داده‌اند. آنها در این مجموعه پژوهش‌ها، تاثیر شعاع انحنای ابزار، زاویه حمله ابزار و جهات بلوری را بر نیروی وارد بر ابزار با استفاده از

پتانسیل جفتی مورس^۴ مطالعه کردند [3-5]. افزون بر این، در پژوهشی دیگر فرایند شکستگی و تولید لبه تیز^۵ را در انتهای فرایند ماشین کاری نانومتری روی مواد نرم و ترد در عمق‌های برش گوناگون و با استفاده از زوایای حمله گوناگون بررسی کردند [6]. در پژوهشی دیگر، فانگ و ونگ^۶ با استفاده از شبیه‌سازی تک بلور مس با تابع پتانسیل مورس، فرایند ماشین کاری نانومتری به وسیله ابزار پین شکل الماس را مطالعه کرده و توانستند ضرایب اصطکاک را در فرایند براده برداری بدست آورند. همچنین، ایشان با محاسبه نیروی وارد بر ابزار، افزون بر مشاهده پدیده چسبش و لغزش^۷، به این نتیجه رسیدند که نیروهای ابزار بصورت لگاریتمی به زاویه ابزار ارتباط دارند [7].

در فرایند برش، ابزار باید بر استحکام برشی قطعه کار غلبه کند که این امر باعث آزاد شدن مقدار زیادی انرژی حرارتی در ناحیه‌ای نسبتاً کوچک می‌شود که در نهایت، باعث افزایش درجه حرارت در قطعه کار می‌شود. درجه حرارت بالا تاثیر قابل توجهی بر سایش ابزار، عمر ابزار، ویژگی‌های سطح ماشین کاری شده، مکانیزم براده برداری و تغییر شکل حرارتی که بزرگ‌ترین منبع تولید خطا در فرایند ماشین کاری است، می‌گذارد [8]. از سوی دیگر، افزایش درجه حرارت قطعه کار بویژه در نواحی برش، باعث کاهش سختی و استحکام ماده و در نهایت، نیروی وارد بر ابزار می‌شود. افزون بر این، افزایش درجه حرارت در ناحیه تماس ابزار و قطعه کار، باعث تغییر مشخصه‌های تماس و تغییر ضریب اصطکاک می‌شود که ارتباط زیادی با هندسه ابزار و عمق برش دارد [9]. از آنجا که افزایش حرارت و گرادیان دما در قطعه کار یکی از پیامدهای منفی فرایند ماشین کاری لحاظ می‌شود، عموماً سعی می‌شود که با شناخت منابع موثر بر حرارت، نرخ افزایش آن را به کمترین حد برسانند. عوامل گوناگونی در افزایش دما از جمله هندسه ابزار، جنس قطعه کار، سرعت و عمق برش، سیال خنک کننده و ... تاثیرگذارند. در این راستا، در ماشین کاری‌های متداول مدل‌های گوناگونی جهت تبدیل

⁴ - Pairwise Morse Potential

⁵ - Exit Failure

⁶ - Fang and Weng

⁷ - Stick-Slip Phenomena

¹ - Ultra Precision Machining (UPM)

² - Maekawa and Itoh

³ - Chandrasekaran and Komanduri

در نظر گرفتن مقدار تیزی نوک ابزار می‌تواند در افزایش ضریب اصطکاک و تولید دما تاثیرگذار باشد که در این مقاله به آن پرداخته می‌شود.

مواد و روش انجام پژوهش

روش دینامیک مولکولی که در آن از قوانین مکانیک کلاسیک جهت محاسبه مسیره‌های اتمی استفاده می‌شود، ابزاری ارزشمند برای مطالعه و درک فرایندهای میکروسکوپی می‌باشد. در این روش فرض می‌شود که انرژی کل موجود در هر مجموعه اتمی به شرط آنکه تغییری از خارج بر آن وارد نشود، ثابت می‌ماند. این انرژی شامل دو بخش کلی پتانسیل و جنبشی است. با فرض ثابت بودن جرم مولکول‌ها، انرژی پتانسیل تابع موقعیت و انرژی جنبشی تابع اندازه حرکت اتم‌ها است. در این روش نیروی وارد بر هم اتم از جمع برداری نیروی‌های جاذبه و دافعه ناشی از اتم‌های همسایه محاسبه می‌شود. این محاسبه برای تعداد زیادی از اتم‌ها بسیار حجیم و زمان‌بر است و از آنجا که بزرگی نیروهای بین اتمی با مجذور فاصله نسبت عکس دارد، برای هر اتم تنها اتم‌هایی که در کره‌ای به شعاع قطع R_{cut} قرار دارند، محاسبه می‌شود [17].

میدان‌های نیرو

از آنجا که سختی ابزار الماس در مقایسه با قطعه‌کار بسیار بالاتر است [18]، برای کاهش زمان تحلیل، ابزار صلب در نظر گرفته می‌شود و نیازی به تعریف میدان نیرویی بین دو اتم کربن داخل ابزار وجود ندارد. برای مدل سازی برهم‌کنش‌ها بین اتم‌های کربن موجود در ابزار و مس موجود در قطعه‌کار از تابع پتانسیل جفتی مورس استفاده شده است (رابطه 1). تابع پتانسیل جفتی مورس یکی از توابع بین اتمی جفتی می‌باشد که به دلیل سادگی، زمان محاسبات را کاهش می‌دهد. در این تابع E_0 انرژی پیوستگی، α مدول الاستیک، r_{ij} فاصله بین اتمی و r_0 فاصله تعادلی بین اتمی می‌باشد [17].

$$U(r_{ij}) = E_0 \left\{ e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \right\} \quad (1)$$

انرژی ناشی از برش به حرارت ارایه شده است [9-11]. اگر چه با کم بودن عمق برش، تولید حرارت در ماشین‌کاری نانومتری نسبت به ماشین‌کاری‌های متداول کمتر است، ولی با توجه به کیفیت بالای سطح مورد نیاز، در سالیان اخیر پژوهش‌هایی در راستای کاهش اثرات منفی افزایش دما انجام گرفته است. در این راستا، پی و بیسواز¹ با شبیه‌سازی فرایند ماشین‌کاری نانومتری تک بلور مس، تاثیر سرعت برش ابزار با زاویه حمله منفی را بررسی کردند [12]. آنها در این مطالعه با استفاده از تابع پتانسیل فلزی² EAM، به این نتیجه رسیدند که در سرعت‌های برش بالا، دمای قطعه‌کار، زبری سطح و هم-چنین، حجم براده‌برداری افزایش می‌یابد. رنج و ایناساکی³ در سال 2006 توانستند اثر سیال خنک‌کن را در فرایند ماشین‌کاری نانومتری با استفاده از روش‌های دینامیک مولکولی شبیه‌سازی کنند [13,14]. نتایج حاکی از این بود که وجود سیال، تاثیری در توزیع تنش در قطعه‌کار ندارد، ولی باعث تغییر در توزیع درجه حرارت در قطعه‌کار می‌شود. اگرچه که استفاده از سیال باعث کاهش میانگین درجه حرارت قطعه‌کار شده بود، ولی گرادیان درجه حرارت در حالتی که از سیال خنک‌کن استفاده می‌شد، زیادتر بود که اثرات نامطلوبی در پی داشت.

در این پژوهش در جهت شناخت بهتر عوامل موثر بر حرارت، تاثیر دو عامل سرعت برش و شعاع انحنا ابزار با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ارایه خواهد شد. در واقع در فرایندهای معمول ماشین‌کاری نانومتری سرعت برش در محدوده 10-20 m/s است [15]، ولی با توجه به ماشین‌کاری سرعت بالا، در برخی از این نوع ماشین‌کاری‌ها تا سرعت برش 1000 m/s هم استفاده می‌شود [16]. از سوی دیگر، به دلیل وجود تنگناهای زمانی در روش دینامیک مولکولی، عموماً نیاز است تا سرعت برش ابزار زیاد در نظر گرفته شود تا زمان تحلیل کوتاه‌تر شود. این امر خود می‌تواند باعث تغییر بر مقدار و توزیع دما در قطعه‌کار شود. افزون بر این، از آنجا که در ماشین‌کاری نانومتری نسبت عمق برش به شعاع انحنا ابزار کمتر از یک می‌باشد، صرف نظر از انحنا ابزار و عدم

¹ - Ye and Biswas

² - Embedded Atom Method

³ - Rentsch and Inasaki

مدل فرایند ماشین کاری نانومتری

شکل 1 مدل هندسی فرایند ماشین کاری نانومتری را نمایش می دهد. ابعاد قطعه کار برابر با $10a \times 40a \times 30a$ می باشد که در آن a برابر با ثابت شبکه مس با ساختار بلوری FCC می باشد. مقدار a برابر با $0/362$ نانومتر می باشد [18]. افزون بر این، برای مطالعه اثر شعاع نوک ابزار بر تولید درجه حرارت در قطعه کار، ابزار صلب با سه شعاع انحنای $3a$ ، $4a$ و $5a$ در نوک ابزار در نظر گرفته شده است. گفتنی است که در این ابزارها زاویه حمله¹ و لقی² ثابت و به ترتیب برابر با 15 و 10 درجه می باشد.

بر اساس شکل 1، اتم های آبی و سبز رنگ³ به عنوان شرایط مرزی تعریف شده اند. تغییر مکان این اتم ها صفر می باشد. در این مدل از شرط مرزی متناوب⁴ برای دو صفحه موجود در راستای X (عمود بر صفحه) استفاده شده است که این امکان را فراهم می کند که اتم های مرزی در صفحات ذکر شده حالت مرزی نداشته باشند و حرکتها و انرژی های آنها همانند ذرات میانی در نظر گرفته شود تا عوامل تاثیرگذار بر خطای محاسباتی به کمترین حد برسد. صفحه بالایی هم صفحه ماشین کاری است و شرط مرزی برای آن در نظر گرفته نشده است تا رفتار آن با اعمال بار از راه ابزار شبیه سازی شود. همچنین، این مدل از شرط مرزی دما ثابت استفاده می کند تا در آن امکان انتقال حرارت از قطعه کار بوجود آید (لایه اتمی زرد رنگ). برای اعمال این شرط مرزی، دمای این لایه در $300 \text{ }^\circ\text{K}$ با استفاده از الگوریتم نوز ثابت نگه داشته می شود. سرعت اولیه بر اساس رابطه ماکسول- بولتزمن در دمای $300 \text{ }^\circ\text{K}$ توزیع شده است [17]. جدول 1 ویژگی های محیط محاسباتی شبیه سازی دینامیک مولکولی فرایند ماشین کاری نانومتری را نشان می دهد. از آنجا که در شبیه سازی های دینامیک مولکولی اتم ها بر اساس ساختار شبکه بلوری چیدمان می شوند، ویژگی های ناهمسانگردی به صورت خودکار در ابعاد نانومتری در نظر گرفته می شود. این ویژگی روش دینامیک مولکولی، از

همچنین، برای افزایش دقت محاسبات در قطعه کار تک بلور مسی، از تابع پتانسیل فلزی EAM استفاده شده است که دارای دقت بالاتری است و قابلیت محاسبه ویژگی های الاستیک، تولید انرژی عیوب، مکانیزم شکست و محاسبه دقیق تر ویژگی های انرژی های سطحی را فراهم می کند [19]، ولی چون ماهیت برهم کنش چند ذره ای دارند، حجم محاسبات آنها سنگین تر است. تابع پتانسیل EAM از دو بخش انرژی ناشی از مجاورت با هسته ها و مجاورت با الکترون های آزاد در فلزات بدست می آید (رابطه 2). در واقع این تابع پتانسیل از جمع انرژی پتانسیل جفتی یون های مثبت $V_{ij}(r_{ij})$ (جمله دفعی) و انرژی ناشی از چگالی الکترونی پس زمینه $F(\rho_i)$ (بدست آمده است (جذبی)). N تعداد یون های مثبت است [19].

$$U_{metal} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i}^N V_{ij}(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F(\rho_i) \quad (2)$$

محاسبه درجه حرارت

در روش دینامیک مولکولی عموماً موقعیت و سرعت اتم ها به صورت مشخص محاسبه می شود و بسیاری از کمیت های مورد نظر پس از اتمام هر مرحله گام زمانی، قابل محاسبه است. برای محاسبه دما ابتدا نیاز است تا انرژی جنبشی هر اتم بر اساس سرعت آن محاسبه شود (رابطه 3). در این رابطه k_i ، v_i ، m به ترتیب جرم، سرعت و انرژی جنبشی هر اتم است. در مرحله بعد، می توان با توجه به رابطه دما و انرژی جنبشی، دما را در حجم محاسباتی قطعه کار محاسبه کرد (رابطه 4). در این رابطه N تعداد اتم های مورد نظر جهت محاسبه دما، T دمای ناحیه مدنظر می باشد. همچنین k_B ضریب بولتزمن و

$$\text{برابر با } \frac{m^2 kg}{s^2 K} \text{ می باشد [17].} \quad 0/00008617343$$

$$k_i = \frac{1}{2} m v_i^2 \quad (3)$$

$$T = \frac{2}{3} \frac{\sum_i k_i}{N k_B} \quad (4)$$

¹ - Rate Angle

² - Clearance Angle

³ - برای دیدن شکل رنگی به سایت مجله مراجعه شود.

⁴ - Periodic boundary condition

ای که در ابزار با شعاع نوک $1/08$ نانومتر، نیروی عمود بر ابزار پس از مدتی به علت انباشت براده روی لبه حمله ابزار (با زاویه مثبت) در جهت مثبت، کاهش می‌یابد. در صورتی که با افزایش شعاع انحنا نیروی عمود وارد بر ابزار افزایش می‌یابد که نشان‌دهنده این است که با افزایش شعاع انحنا نوک ابزار، حجم بیش‌تری از اتم‌ها در ناحیه زیر ابزار فشرده می‌شوند. جدول 2 میانگین نیروهای وارد بر ابزار را در فرایند ماشین‌کاری نانومتری برای تمامی هندسه‌های ابزار و سرعت برش نشان می‌دهد. افزون بر هندسه ابزار، افزایش سرعت نیز باعث افزایش نیروهای وارد بر ابزار می‌شود. علت این پدیده این است که با افزایش سرعت، ابزار باید در زمان کوتاه‌تری یک طول برش مشخص را طی کند و نرخ کرنش افزایش می‌یابد. در نتیجه، با افزایش استحکام ماده در سرعت‌های تغییرشکل زیاد، به نیروی بیش‌تری به وسیله ابزار برای برش نیاز است. اگرچه نیروهای وارد بر ابزار با افزایش سرعت، افزایش می‌یابد، ولی مقدار این افزایش در مقایسه با افزایش سرعت زیاد نیست. به گونه‌ای که با افزایش 4 برابری سرعت ابزار، نیروهای وارد بر ابزار با شعاع‌های انحنای گوناگون حدود 27% - 21% افزایش می‌یابد. این افزایش می‌تواند در تولید حرارت در قطعه‌کار نیز تاثیرگذار باشد. شکل 4 مقایسه بین نتایج محاسبه انرژی ویژه شبیه‌سازی اتمی اخیر و نتایج تجربی پژوهشگران [2,21] در ماشین‌کاری فرا دقیق را نشان می‌دهد. در این شکل نتایج عددی این پژوهش با سمبل‌های دایروی شکل نشان داده شده است که تطابق قابل قبولی را با نتایج تجربی نشان می‌دهد و می‌تواند دلیلی بر درستی نتایج محاسبات باشد. انرژی ویژه ماشین‌کاری در واقع از تقسیم انرژی مورد نیاز برش (سطح آبی رنگ در شکل 3) بر حجم براده‌برداری بدست آمده است.

تولید حرارت در فرایند برش نانومتری

برای انجام فرایند برش نانومتری، ابزار باید انرژی مورد نیاز سه قسمت را تامین کند (شکل 5). قسمت نخست تامین انرژی مورد نیاز برش در ناحیه جلوی لبه انحنا دار ابزار است. در این ناحیه، انرژی بسیار زیادی نیاز است تا با ایجاد کرنش برشی، جریان اتمی را به دو بخش تقسیم

مزایای این روش نسبت به روش ماکروسکوپی المان محدود است [20]. البته، در روش‌های المان محدود نیز امکان تعریف ویژگی‌های ناهمسانگردی وجود دارد، ولی باید این ویژگی‌ها در جهت‌های گوناگون برای هر المان تعریف شود. بر اساس جدول 1 در این پژوهش ماشین‌کاری در جهت [010] و روی صفحه (001) انجام می‌پذیرد.

نتایج و بحث

تغییر مکان اتمی

شکل 2 چگونگی تغییر شکل اتمی را در قطعه‌کار تک بلور مسی با استفاده از هندسه‌های گوناگون ابزار نشان می‌دهد. بر اساس شکل 2، با کاهش شعاع انحنای ابزار تغییر شکل پلاستیک قطعه‌کار بیش‌تر در ناحیه نوک ابزار بوجود می‌آید و تغییر شکل اتمی قطعه‌کار در نواحی دورتر از نوک ابزار تغییر چندانی نمی‌کند. در نتیجه، طول براده در این حالت بیش‌تر است و در نواحی دورتر از نوک ابزار تغییر شکل زیادی مشاهده نمی‌شود، ولی با افزایش شعاع انحنا، میزان تنش فشاری اتم‌ها در ناحیه نوک ابزار افزایش می‌یابد و ناحیه بزرگ‌تری تحت تغییر شکل زیاد قرار می‌گیرد. بطوریه گونه‌ای که بر اساس شکل 2، طول براده که از ضلع حمله ابزار بالا می‌رود کوتاه‌تر است، ولی در عوض ناحیه تغییر شکل زیاد در جلوی ابزار ناحیه‌ای بزرگ‌تر است.

نیروهای وارد بر ابزار

شکل 3 روند نیروهای برش¹ و نیروهای عمود² ابزار را برای سه شعاع انحنای گوناگون در سرعت برش 100 متر بر ثانیه نمایش می‌دهد. بر اساس نتایج بدست آمده، با افزایش شعاع انحنا از $1/08$ به $1/81$ نانومتر، هم نیروی برشی و هم نیروی عمودی وارد بر ابزار افزایش می‌یابد. این بدین معنی است که تند بودن نوک ابزار، تاثیری قابل توجه در کاهش نیروهای وارد بر ابزار می‌گذارد. با دقت بیش‌تر در نتایج، سهم کاهش نیروهای عمودی وارد بر ابزار در مقایسه با نیروهای برشی، بزرگ‌تر است. به گونه

¹ - Cutting Force

² - Thrust Force

شکل 7 بالانس انرژی در فرایند ماشین‌کاری در سرعت‌های گوناگون برای شعاع انحناهای گوناگون ابزار را مقایسه می‌کند. بر اساس نتایج، اگر چه انرژی مورد نیاز برش (سطح آبی زیر نمودار نیروی برش شکل 3) در سرعت‌های 50 و 100 متر بر ثانیه تغییر زیادی نکرده است، ولی این مقدار در سرعت برش 200 متر بر ثانیه اندکی افزایش یافته است. نکته قابل توجه تغییرات چشمگیر انرژی پتانسیل، جنبشی و انتقال حرارت در قطعه‌کار بر حسب سرعت برش است. بر اساس شکل 7، از آنجایی که در سرعت‌های پایین زمان کافی برای انتقال حرارت در قطعه‌کار وجود دارد، درصد زیادی از انرژی تولید شده (بیش از 60٪) به صورت حرارت از قطعه‌کار خارج می‌شود و بقیه تبدیل به انرژی جنبشی (افزایش دما) و پتانسیل (افزایش تنش) در قطعه‌کار می‌شود. با افزایش سرعت برش و کاهش زمان انتقال حرارت، درصد کمتری از انرژی تولید شده می‌تواند از قطعه‌کار خارج شود (کمتر از 25٪) که این امر باعث بوجود آمدن گرادیان دما و تنش در قطعه‌کار می‌شود. افزون بر این، با افزایش شعاع انحنا ابزار، انرژی مورد نیاز ابزار افزایش می‌یابد که این موضوع در پی آن باعث افزایش انرژی جنبشی در قطعه‌کار می‌شود.

دما در قطعه‌کار

شکل 8 میانگین درجه حرارت قطعه‌کار را در سرعت‌های گوناگون برای شعاع انحناهای گوناگون ابزار نشان می‌دهد. میانگین دمای قطعه‌کار در حالتی که سرعت ابزار کمتر از 50 متر بر ثانیه است، کمتر از 50 درجه کلویین افزایش می‌یابد. این بدین معنی است که در حالاتی که ماشین‌کاری با سرعت پایین انجام می‌گیرد، هم سرعت آزاد سازی انرژی پایین‌تر است و هم زمان کافی جهت انتقال حرارت وجود دارد، ولی با افزایش سرعت قطعه‌کار و کاهش زمان واکنش، افزون بر این که نرخ انرژی آزاد شده افزایش یافته و زمان انتقال حرارت کاهش می‌یابد، به دلیل افزایش استحکام ماده در سرعت‌های تغییر شکل بالا، نیروی لازم برای تغییر شکل افزایش می‌یابد. این موضوع نیز به نوبه خود در افزایش دما تأثیر قابل توجهی دارد.

کند. قسمت دوم انرژی مورد نیاز جهت غلبه بر تنش هیدرواستاتیکی بالا در لبه حمله ابزار است. افزون بر این به دلیل وجود اصطکاک بسیار زیاد براده و ابزار، انرژی زیادی در غالب انرژی حرارتی آزاد خواهد شد. قسمت سوم تامین انرژی مورد نیاز جهت غلبه بر تنش هیدرواستاتیکی و اصطکاک در زاویه لقی ابزار است. بنابراین، انرژی کل تولید شده به وسیله ابزار W_C ، در محیط محاسباتی به انرژی کل ذخیره شده در قطعه‌کار ΔE و انتقال حرارت کل Q_t بر اساس رابطه (5-7) تبدیل می‌شود.

$$W_c = \int F_c dx = \Delta E + Q_t \quad (5)$$

$$\Delta E = \Delta K + \Delta P \quad (6)$$

$$Q_t = Q_{cond} + Q_{conv} \quad (7)$$

بر اساس این روابط، انرژی کل قطعه‌کار از جمع انرژی جنبشی ΔK و پتانسیل ΔP تشکیل شده است. همچنین، انتقال حرارت از دو بخش هدایت Q_{cond} (به داخل حجم قطعه‌کار) و همرفتی Q_{conv} (به محیط بیرون) تشکیل شده است. از آنجا که در ماشین‌کاری‌های نانومتری متداول از سیال خنک‌کن استفاده نمی‌شود، بخش انتقال حرارت همرفتی کوچک و قابل صرف‌نظر است [13].

شکل 6 تغییرات انرژی جنبشی و پتانسیل در قطعه‌کار مسی با شعاع $1/48$ نانومتر و سرعت برش 100 متر بر ثانیه را بر حسب طول برش نشان می‌دهد. برای این حالت ویژه در طول فرایند نانومشین‌کاری، انرژی جنبشی 312 eV و انرژی پتانسیل 496 eV افزایش یافته است که در نهایت، باعث افزایش 708 eV انرژی کل قطعه‌کار شده است. اگر نمودارهای انرژی پتانسیل و جنبشی با دقت مورد ملاحظه قرار گیرد، در طول فرایند افزایشی انرژی، هم نمودار انرژی جنبشی و هم نمودار انرژی پتانسیل دارای نوسان‌هایی با دامنه کوچک و با فرکانس بالا هستند. در حالی که این نوسان‌ها فرکانس بالا در طول روند افزایشی نمودار انرژی کل دیده نمی‌شود. این موضوع نشان‌دهنده تبدیل انرژی جنبشی و پتانسیل به یکدیگر در طول فرایند ماشین‌کاری است.

واکنش‌های شیمیایی سطوح مانند اکسایش سطحی و یا جذب هیدروژن را بیش‌تر می‌کند.

نتیجه‌گیری

1. با افزایش شعاع انحنا نوک ابزار (کند شدن ابزار)، فشردگی اتم‌ها در جلوی ابزار افزایش می‌یابد و ناحیه بزرگ‌تری تحت تغییر شکل پلاستیک قرار می‌گیرد. در نتیجه، نیروهای ابزار بویژه نیروهای عمودی افزایش می‌یابد. لذا، با افزایش انرژی برش، سهم انرژی جنبشی قطعه‌کار هم افزوده می‌شود که باعث افزایش گرادیان درجه حرارت در قطعه‌کار بویژه در ناحیه تولید براده می‌شود.

2. افزایش 400٪ سرعت برش، تنها باعث افزایش حدود 27-21٪ نیروهای برشی می‌شود. در واقع، به دلیل افزایش استحکام ماده در سرعت‌های تغییر شکل بالا، نیروی لازم برای تغییر شکل افزایش می‌یابد. سرعت برش تاثیر قابل توجهی در تغییرات انرژی پتانسیل، جنبشی و انتقال حرارت در قطعه‌کار دارد. به گونه‌ای که در سرعت‌های پایین که زمان کافی برای انتقال حرارت در قطعه‌کار وجود دارد، درصد زیادی از انرژی برش به صورت حرارت از قطعه‌کار خارج می‌شود. در نتیجه، دما در نواحی اطراف ابزار کمتر از 300 درجه کلوین افزایش می‌یابد که با توجه به شیب خفیف حرارتی، سطح تنش‌های پس‌ماند در قطعه‌کار کاهش می‌یابد. در سرعت‌های برش بالا با کاهش مقدار انتقال حرارت، انرژی جنبشی و پتانسیل زیادی در قطعه‌کار باقی می‌ماند که باعث افزایش شدید دما و گرادیان درجه حرارت در قطعه‌کار می‌شود و در نهایت، می‌تواند در کیفیت نهایی سطح ماشین‌کاری شده تاثیرگذار باشد.

شکل 9 میانگین درجه حرارت قطعه‌کار را برای سه نوع هندسه ابزار در سرعت برش 100 متر بر ثانیه نشان می‌دهد. بر اساس نتایج موجود، با افزایش شعاع انحنای نوک ابزار، همان‌گونه که انرژی مورد نیاز برش افزایش می‌یابد، درجه حرارت هم که به گونه‌ای نشان دهنده انرژی جنبشی قطعه‌کار است، افزایش می‌یابد. برای مشاهده توزیع درجه حرارت در قطعه‌کار، نیاز است که دما در نواحی کوچک‌تر و محدودتر محاسبه شود. بر این اساس، با انتخاب نواحی کوچک‌تر حول هر اتم، بر اساس رابطه 4 توزیع دما در قطعه‌کار بدست آمد. شکل 10 توزیع دما در قطعه‌کار را برای هندسه و سرعت گوناگون ابزار نشان می‌دهد. بر اساس این نتایج، مشخص است که در سرعت برش 50 متر بر ثانیه درجه حرارت خیلی افزایش نیافته است و بیش‌تر افزایش درجه حرارت مربوط به براده و نواحی اطراف نوک ابزار است که کمتر از 600 درجه کلوین می‌باشد. با افزایش سرعت ماشین‌کاری، تولید حرارت و افزایش دما در قطعه‌کار بویژه در نواحی براده و اطراف ابزار تغییر محسوسی می‌یابد. در این حالت، با وجود اینکه دما در قطعه‌کار بویژه در قسمت‌هایی که از ابزار دور هستند، تغییر چندانی نکرده است، ولی در براده و نواحی اطراف ابزار به بیش از 600 درجه کلوین رسیده است. با افزایش شعاع انحنای ابزار، افزون بر پیشانی ابزار (ناحیه براده تولید شده)، ناحیه زیر ابزار (سطح ماشین‌کاری شده) نیز دچار افزایش دما شده است. با افزایش بیش‌تر سرعت برش تا 200 متر بر ثانیه، دمای قطعه‌کار بویژه در نواحی اطراف ابزار بسیار شدید افزایش می‌یابد و تا بیش از 1000 درجه کلوین می‌رسد. در این حالت دما به صورت شعاعی با دور شدن از ابزار به شدت کاهش می‌یابد به گونه‌ای که شیب شدید حرارتی، باعث افزایش تنش‌های حرارتی در سطح قطعه شده و تاثیر بسزایی در کاهش کیفیت سطح ماشین‌کاری دارد. افزون بر این، افزایش دما تا 1000 درجه کلوین، امکان افزایش

3- R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L.M. Raff, "Effect of tool geometry in nanometric cutting: an MD simulation approach", Wear 219, p.84-97, 1998.

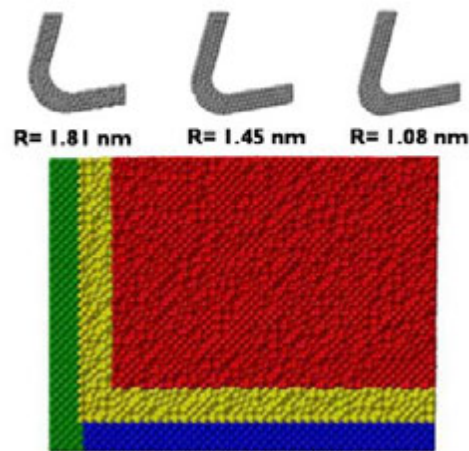
4- R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L.M. Raff, "Some aspects of machining with negative rake tools simulating grinding: an

References

- 1- D. Dornfeld, D. Lee, "Precision Manufacturing", Springer Pub., 2008.
- 2- K. Maekawa, A. Itoh, "Friction and tool wear in nano-scale machining-a molecular dynamics approach", Wear 188, p.115-122, 1995.

- MD simulation approach", *Phil. Mag. B* 79, p.955-968, 1999.
- 5- R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L.M. Raff, "Orientation Effects in Nanometric Cutting of Single Crystal Materials: An MD Simulation Approach", *CIRP Annals-Manufacturing Technology* 48, p. 67-72, 1999.
- 6- R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L.M. Raff, "MD simulation of exit failure in nanometric cutting", *Materials Science and Engineering A* 311, p.1-12, 2001.
- 7- T.H. Fang, Ch. I. Weng, "Three-dimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale", *Nanotechnology* 11, p.148-53, 2000.
- 8- Y. Takeuchi, M. Sakamoto, T. Sa ta, "Improvement in the working accuracy of an NC lathe by compensating for thermal expansion", *Precision Eng.* 4 1, p.19-24, 1982.
- 9- N.A. Abukhshim, P.T. M ativenga, M.A. Sheikh, "Heat generation and temperature prediction in metal cutting: A review and implications for high speed machining", *International Journal of Machine Tools & Manufacture* 46, p.782-800, 2006.
- 10- G. Barrow, "A review of experimental and theoretical techniques for assessing cutting temperatures", *CIRP Annals-Manufacturing Technology* 22 2, p.203-211, 1973.
- 11- A.O. Schmidt, O.W. Gilbert, A. Boston, "Thermal balance method and mechanical investigation for evaluating machinability", *Trans. ASME* 67, p.84-97, 1945.
- 12- Y.Y. Ye, R. Biswas, et al., "Molecular dynamics simulation of nanoscale machining of copper", *Nanotechnology* 14, p.390-396, 2003.
- 13- R. Rentsch, I. Inasaki, "Effects of fluids on the surface generation in material removal processes - molecular dynamics simulation", *CIRP Annals-Manufacturing Technology* 55, p.601-604, 2006.
- 14- R. Rentsch, I. Inasaki, "Molecular dynamics simulation of the nanometer scale cutting process", *Int. J. Manufacturing Research* 1 1, p.83 - 100, 2006.
- 15- H. Chen, I. Hagiwara, "Parallel molecular dynamics simulation of nanometric grinding", *Transactions of the Japan Society for Computational Engineering and Science* 7, p. 207-213, 2005.
- 16- J. Shimizu, L.B. Zhou, H. Eda, "Simulation and experimental analysis of super high-speed grinding of ductile material", *J. of Materials Processing Technology* 129, p.19-24, 2002.
- 17- D.C. Rapaport, "The Art of Molecular Dynamics Simulation", Cambridge University Press, 1995.
- 18- D. R. Lide, "Handbook of Chemistry and Physics", CRC Press, 2002.
- 19- S.M. Foiles, M.S. Daw, M.I. Baskes, "Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys", *Physical Review B* 33 12, p.7983-7991, 1986.
- 20- R. Komanduri, 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* 215, p.1639-1672, 2001.
- 21- I.F. Stowers et al., "Molecular dynamics simulation of the chip forming process in single crystal copper and comparison with experimental data", *Proc. ASPE Annu. Meet.*, p.13-18, 1991.

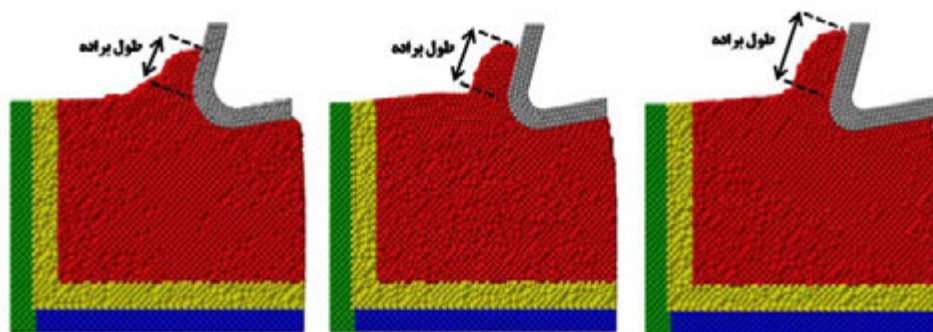
پیوست‌ها



شکل 1- قطعه کار و ابزار با شعاع‌های انحنای گوناگون.

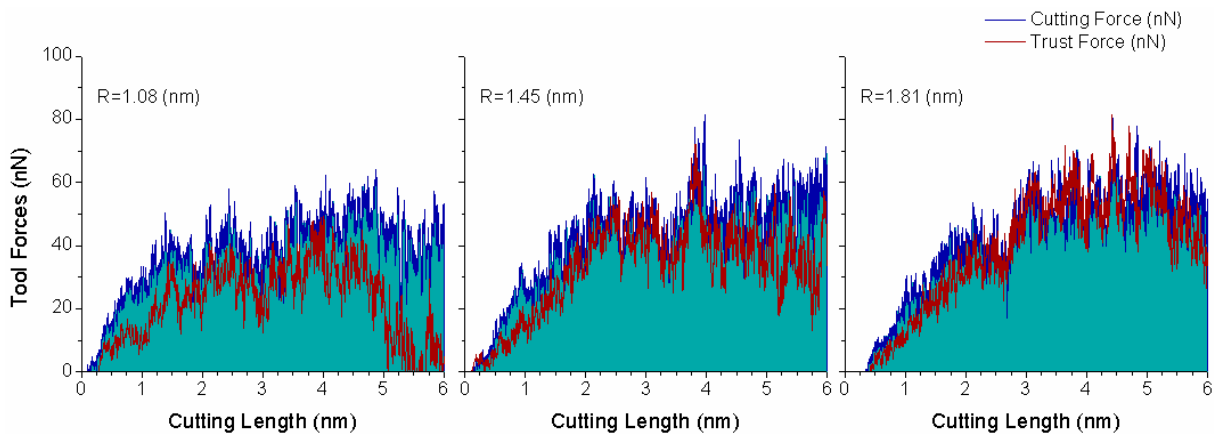
جدول 1- ویژگی‌های محیط محاسباتی.

1/08 nm	عمق برش
50-100-200 m/s	سرعت برش
1/08-1/45-1/81 nm	شعاع انحنای نوک ابزار
[010]	جهت برش
(001)	صفحه ماشینکاری
300 K	شرایط مرزی دمایی
1 fs	گام‌های زمانی
کربن- مس: پتانسیل جفتی مورس	توابع پتانسیل
مس- مس: پتانسیل فلزی EAM	
تعداد اتم‌های ابزار: 2485-2496-2523	
تعداد اتم‌های شرط مرزی: 9450	
تعداد اتم‌های دما ثابت: 5250	ویژگی‌های مدل
تعداد کل اتم‌های قطعه کار: 54660	



الف- شعاع انحنای 1/08 نانومتری ب- شعاع انحنای 1/45 نانومتری ج- شعاع انحنای 1/81 نانومتری

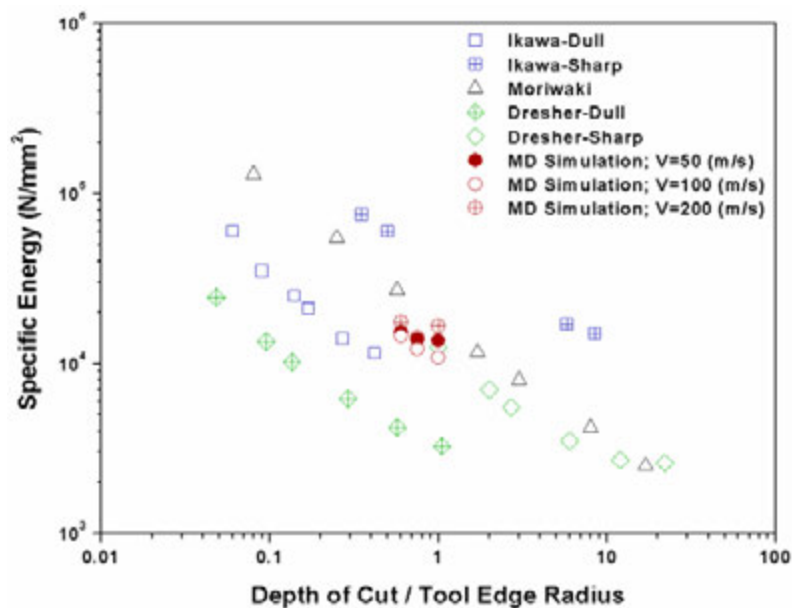
شکل 2- چگونگی تغییر مکان اتمی در قطعه کار با هندسه های گوناگون ابزار.



شکل 3- نیروهای وارد بر ابزار با شعاع انحنای گوناگون (سرعت برش برابر 100 متر بر ثانیه).

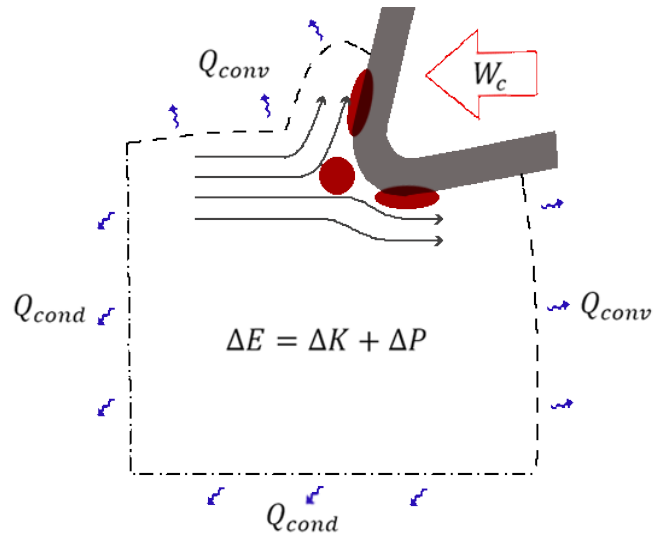
جدول 2- میانگین نیروهای وارد بر ابزار در فرایند ماشین کاری نانومتری.

نیروی عمودی (nN)	نیروی برشی (nN)	سرعت ابزار (m/s)	شعاع انحنای ابزار (nm)	نیروی کل (nN)
21/1	36/8	50	1/08	44/5
15/1	34/8	100		40/0
27/4	47/3	200		56/2
32/2	41/4	50	1/48	54/1
38/2	39/8	100		57/0
43/0	48/1	200		66/5
37/0	40/2	50	1/81	57/0
41/5	41/8	100		61/3
45/8	49/2	200		69/8

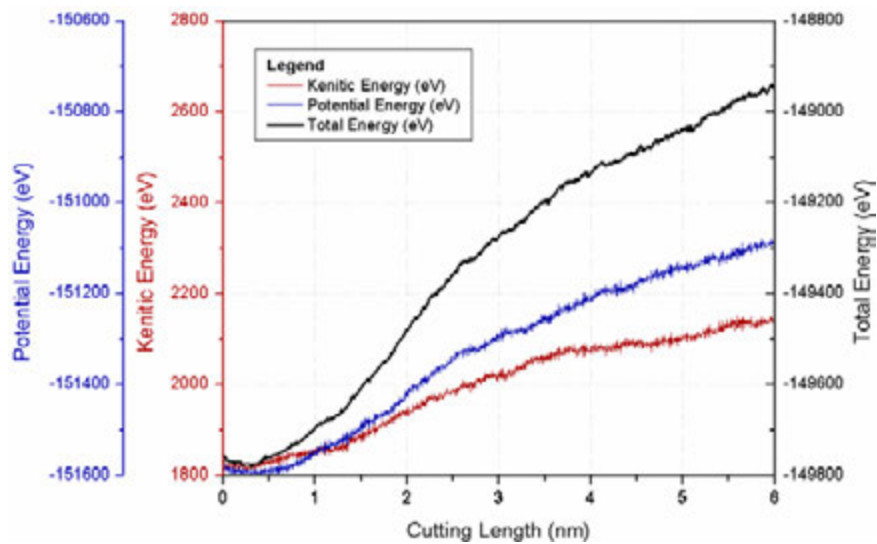


شکل 4- مقایسه نتایج محاسبه انرژی ویژه برش در شبیه سازی دینامیک مولکولی اخیر (سمبل های دایره ای) و نتایج

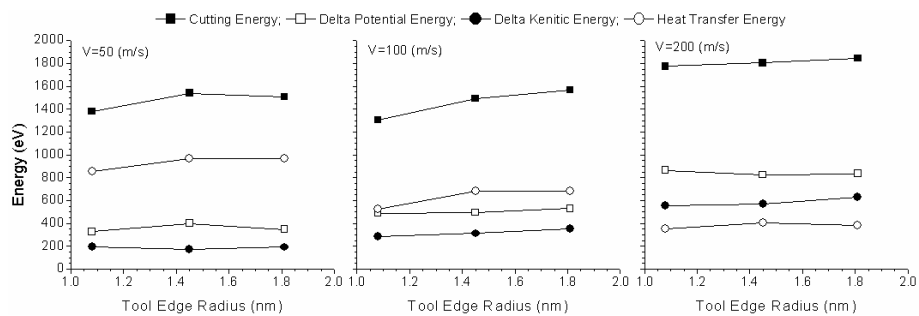
تجربی دیگران [21,2].



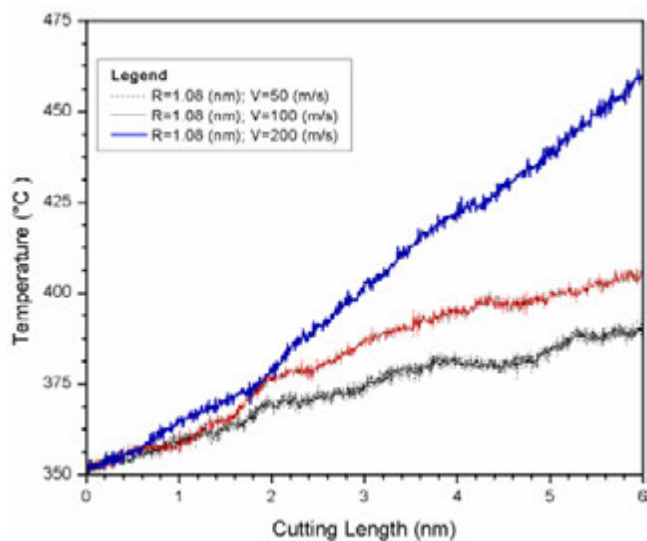
شکل 5- مدل انرژی در ماشین کاری نانومتری.



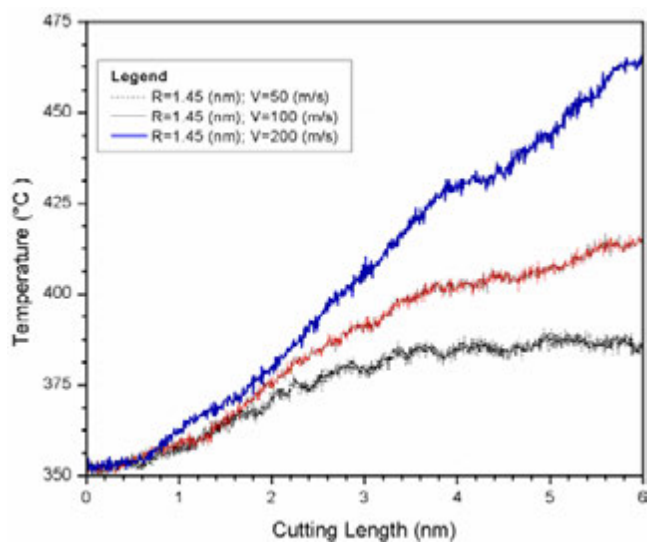
شکل 6- انرژی پتانسیل، جنبشی و انرژی کل قطعه کار در طول فرایند ماشین کاری (ابزار با شعاع انحنای 1/45 نانومتر با سرعت 100 متر بر ثانیه).



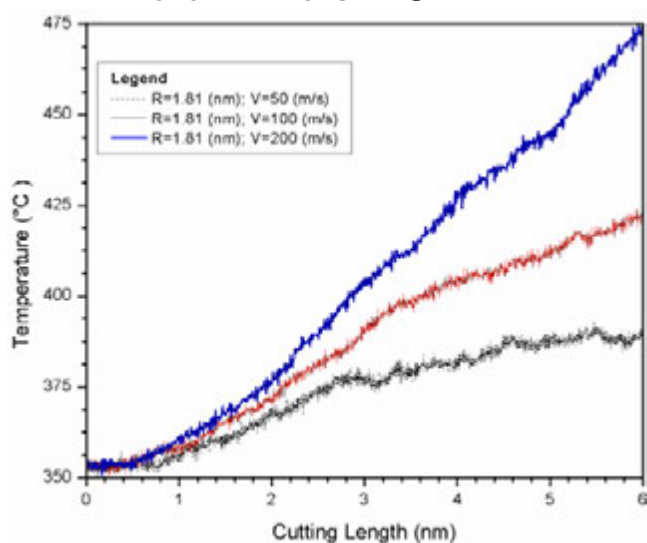
شکل 7- مقایسه بالانس انرژی در قطعه کار در سرعت‌های گوناگون ابزار (شعاع 1/45 نانومتری انحنای ابزار).



الف- شعاع انحنای ابزار 1/08 نانومتر

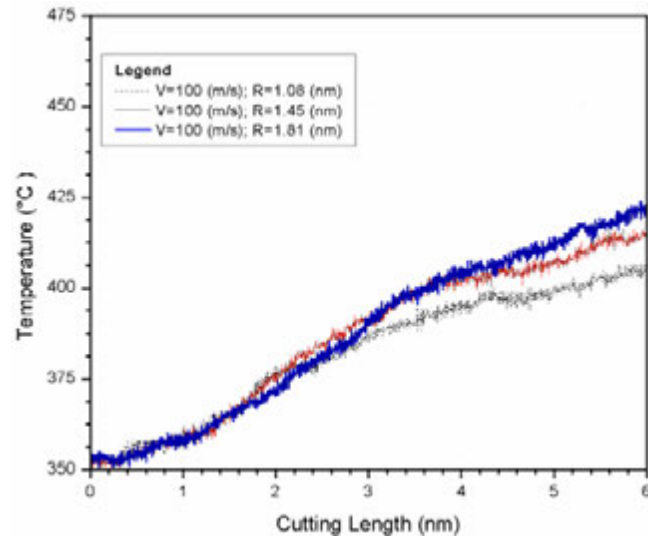


ب- شعاع انحنای ابزار 1/45 نانومتر

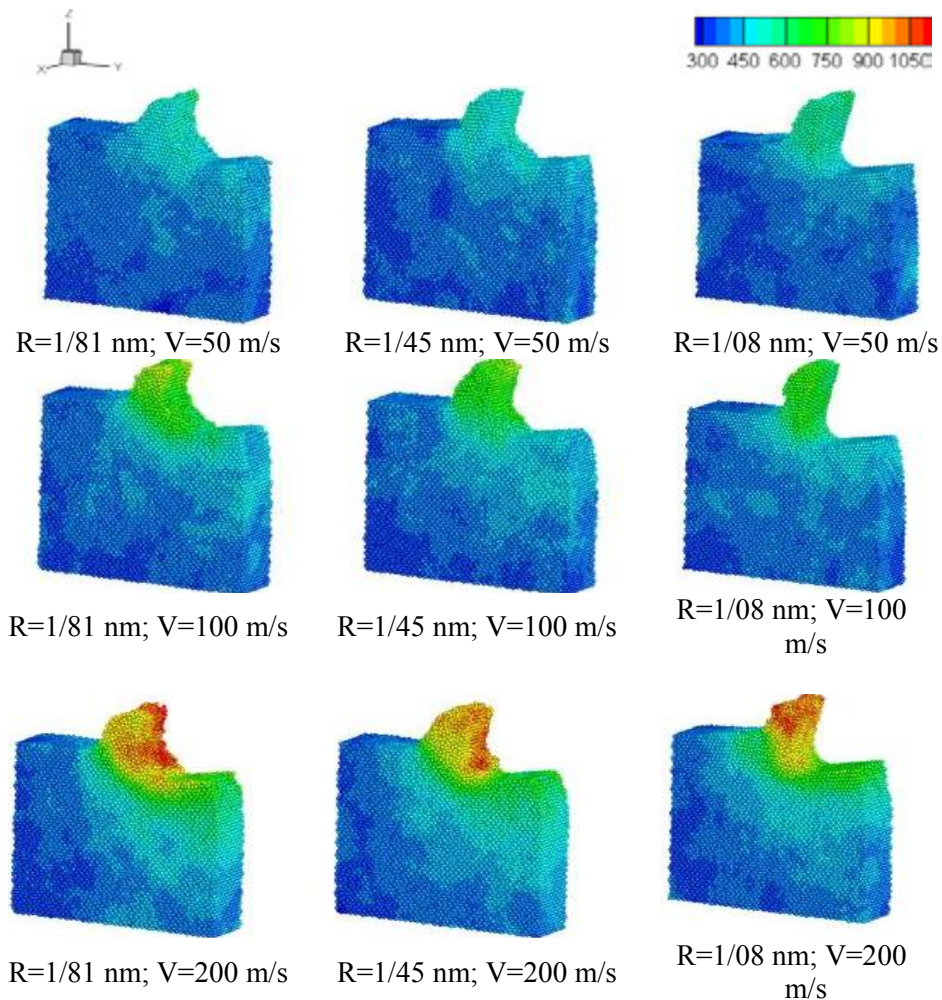


ج- شعاع انحنای ابزار 1/81 نانومتر

شکل 8- تأثیر سرعت برش در میانگین درجه حرارت قطعه کار در شعاع‌های گوناگون نوک ابزار.



شکل 9- تاثیر شعاع انحنای نوک ابزار بر میانگین درجه حرارت قطعه کار (سرعت ابزار برابر 100 متر بر ثانیه).



شکل 10- توزیع دما در قطعه کار در شعاع های گوناگون لبه ابزار و سرعت های برش مختلف.