



## Simulation and optimization of surface roughness and cutting force in dynamic ploughing process of single crystal copper using molecular dynamics method

Hojjatollah Tavari, Mohammad Mahdi Jalili\*

Department of Mechanical Engineering, University of Yazd, Yazd, Iran

**ABSTRACT:** Surface roughness is one of the most important characteristics in nano machining products. In this paper, using molecular dynamics simulation in LAMMPS software, the process of dynamic nano ploughing of the single-crystal copper workpiece is investigated by a diamond tool, and the quality of the production surface and cutting forces were investigated as two target parameters. The effect of parameters of the dynamic nano-ploughing process such as depth of cut (DOC), amplitude (R), and frequency ( $\omega$ ) of cutting tool vibration on cutting force and surface roughness has been investigated by calculating average roughness (Ra). Also, in order to more closely examine the effect of parameters and their interaction with each other, the Taguchi method has been used to design experiments. The simulation results show that the characteristics of cutting depth, amplitude, and frequency of cutting tool vibration have the greatest effect on surface smoothness and cutting forces, respectively. 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 check their conditions together well before selecting these parameters. Also, finally, by using the Taguchi method, the optimal values of dynamic ploughing parameters were obtained to achieve the best surface smoothness and the lowest cutting force in certain dimensions as described by  $DOC=2.5 \text{ \AA}$ ,  $R=0.1 \text{ \AA}$ , and  $\omega=50 \text{ KHz}$ .

### Review History:

Received: Sep. 11, 2023

Revised: Mar. 09, 2024

Accepted: Mar. 19, 2024

Available Online: Apr. 05, 2024

### Keywords:

Dynamic Ploughing

Molecular Dynamic Method

Surface Roughness

Taguchi Method

Single Crystal Copper

### 1- Introduction

Copper nano machining has wide applications in the field of laser optics, linear accelerator cavity, and semiconductor technology. In addition, single-crystal copper also acts as a substrate material for the growth of graphene, which has exceptional electronic properties. Since nanomachining involves the interaction of atomic groups and the behavior of materials has a discrete nature, continuum mechanics analysis does not work well for it. Therefore, molecular dynamics simulation becomes an essential tool in investigating the nanoscale cutting process [1]. In the nano machining process, the shear forces are the interparticle forces that are the result of the interaction between the tool and the workpiece particles [2]. Due to the high requirements of ultra-precise machine tools, testing methods, and machining conditions, it is very difficult to investigate the mechanism of nano machining using experimental methods [3]. The best way to gain a proper insight into these processes is to use atomic simulation methods for modeling at the nanometer scale. Molecular dynamics is a comprehensive physical model that includes intrinsic information such as geometry, velocity, and forces that are effective in atomic behavior at this scale [4].

Dynamic plowing refers to the use of tooltip vibration to scratch the surface and machining nanostructures [5].

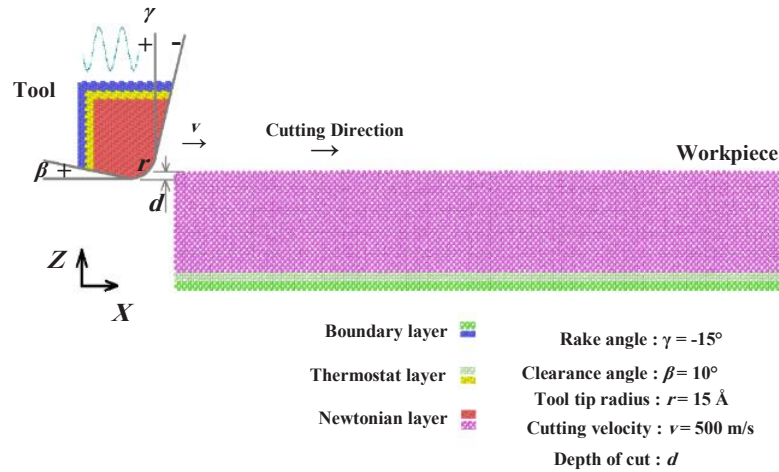
Based on the literature review, it was determined that the effect of the machining parameters such as depth of cut and the amplitude and frequency of the cutting tool vibration on reducing the cutting forces and surface roughness in the dynamic nano ploughing of the single-crystal copper workpiece has not been studied. Therefore, in this research, the effect of these parameters on the surface roughness of the workpiece is simultaneously investigated. Also, using Taguchi's optimization method and test design, initial optimal parameters are obtained to achieve the maximum signal to noise ratio.

### 2- Methodology

In this research, the three-dimensional simulation of the nano machining process was performed using Lamps molecular dynamics software, and the outputs were analyzed using Ovito software. In the molecular dynamics model developed in this article, the workpiece is made of single-crystal copper, and the tool is made of diamond. According to Figure 1, to match the results with reality, three Newtonian layers, the boundary layer and the thermostat layer have been considered for tools and workpieces. The size of the workpiece is considered  $[400 \text{ \AA} \times 165 \text{ \AA} \times 70 \text{ \AA}]$  where contain 412425 atoms.

\*Corresponding author's email: jalili@yazd.ac.ir





**Fig. 1. Specifications of the molecular dynamics model**

In this research, the geometrical characteristics of the cutting tool and the nano machining process are selected from reference [6]. Further, considering the requirement to express interatomic forces based on experimental potentials in molecular dynamics, for the three atomic interactions copper-copper, carbon-carbon, and carbon-copper, respectively, the potential functions of the embedded atom method [7], Tersoff [8] and Morse [9] were used. Also, the initial temperature of the system is considered to be 300<sup>0</sup> k. Then, with the passage of time, the model reaches stability and dynamic equilibrium based on the initial conditions of temperature, force, boundary, potential, and dimensions. Finally, the cutting tool starts cutting at a constant speed of 500 m/s in the direction of the longitudinal axis X and oscillates according to the vibration function  $R\sin(\omega t)$ , and the simulation is completed.

In molecular dynamics simulations, in order to prepare the thermodynamic conditions of the model at the beginning of the simulation and during the process, the concept of thermodynamic ensembles is used. In this research, in order to balance the model as much as possible before the cutting process, the system was placed in the state of minimum total energy, and then, in order to balance and remove the residual stresses, the NPT ensemble was used. Also, for the simulation of the thermostat layer, in order to keep the temperature constant, the NVT ensemble, and for the Newtonian layer, for the purpose of cutting, the NVE ensemble has been used.

The target parameters in this research are surface roughness and chipping force. In order to analyze the surface roughness, the average roughness characteristic was used.

### 3- Discussion and Results

In this section, using the Taguchi method, three parameters in three levels (according to Table 1) are investigated and the effects of changing these input parameters on the surface roughness and cutting force outputs are studied. For this purpose, in the first stage,

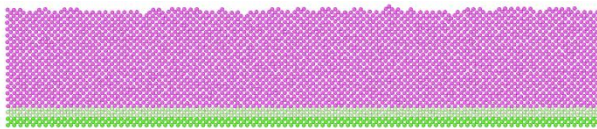
**Table 1. Levels of input parameters**

Input parameters			
	$R$ (Å)	$\omega$ (KHz)	$DOC$ (Å)
	0.1	10	2.5
Levels	0.2	20	5
	0.5	50	10

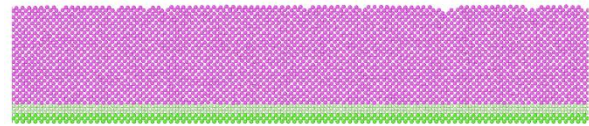
the optimal values of the input parameters are obtained with the minimum test and with 9 runs with different specifications, and then, in order to analyze the interaction of the input parameters, with the maximum test and with 27 runs, in addition to the optimal values, the interaction of the input parameters is also examined.

According to the simulation results, for the fixed depth of cut and tool oscillation amplitude, the cutting force is reduced at higher tool oscillation frequencies. This is due to the increase in the kinetic energy of the tool at higher frequencies, which increases the kinetic energy of the workpiece particles at the moment of contact and causes easier separation of the particles from the workpiece. Also, increasing the depth of the cut and the tool oscillation amplitude has also increased the cutting force. In both cases, with the increase of the relevant parameter, the number of atom bonds of the workpiece that must be broken in order for the cutting process to take place increases, which has increased the cutting force.

The optimal values of dynamic ploughing parameters are obtained to achieve the best surface smoothness and the lowest cutting force as described by  $DOC=2.5 \text{ \AA}$ ,  $R=0.1 \text{ \AA}$ , and  $\omega=50 \text{ KHz}$ . The simulation results for a sample with unfavorable surface smoothness and an optimized sample are presented in Figures 2 and 3.



**Fig. 2. Nano ploughing surface using input parameters  
DOC=2.5 Å , ω=50 KHz, R=0.2 Å**



**Fig. 3. Nano ploughing surface using input parameters  
DOC=2.5 Å , ω=50 KHz, R=0.1 Å**

#### 4- Conclusions

In this paper, molecular dynamics simulation has been used to investigate the effect of depth of cut (DOC), amplitude (R), and frequency ( $\omega$ ) of the tool oscillation on the dynamic nano ploughing process of a diamond tool on a single crystal copper workpiece.

In order to determine the optimal input conditions to achieve the best surface smoothness and the lowest cutting force, the Taguchi method has been used. Using this method, by designing the experiments and with the least number of runs, the optimal parameters were predicted with proper accuracy, and in addition, the effect of these parameters on the output was investigated. The simulation results show that by using these optimal input parameters, the average surface roughness  $R_a=0.91$  Å and the chip removal force  $F=22.4$  nN can be achieved.

#### References

- [1] A. Sharma, D. Datta, R. Balasubramaniam, Molecular dynamics simulation to investigate the orientation effects on nanoscale cutting of single crystal copper, *Computational Materials Science*, 153 (2018) 241-250.
- [2] A.O. Oluwajobi, *Nanomachining technology development*, University of Huddersfield, 2012.
- [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*, 12 (2017) 89-98.
- [4] L.N. Abdulkadir, K. Abou-El-Hossein, A.I. Jumare, M.M. Liman, T.A. Olaniyan, P.B. Odedeyi, Review of molecular dynamics/experimental study of diamond-silicon behavior in nanoscale machining, *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 98 (2018) 317-371.
- [5] Y.D. Yan, W.T. Liu, Z.J. Hu, X.S. Zhao, J.C. Yan, Effect of Sample Materials on the AFM Tip-Based Dynamic Ploughing Process, *Advanced Materials Research*, 314 (2011) 492-496.
- [6] M.M. Jalili, H. Tavari, Investigation and optimization of parameters affecting surface roughness in single crystal copper nanomachining process using molecular dynamics method, *IJME journal*, 8(10) (2021) 49-60, in Persian.
- [7] J.C. Wang, J.M. Zhang, N. Li, Y.P. Kou, Effect of potential function on molecular dynamics simulation of copper processing, *Key Engineering Materials*, 407 (2009) 368-371.
- [8] S. Foiles, M. Baskes, M.S. Daw, Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, *Physical review B*, 33(12) (1986) 7983.
- [9] 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*, 10 (2015) 168-175.

#### HOW TO CITE THIS ARTICLE

H. Tavari, M. M. Jalili, *Simulation and optimization of surface roughness and cutting force in dynamic ploughing process of single crystal copper using molecular dynamics method*, *Amirkabir J. Mech. Eng.*, 55(12) (2024) 305-308.

DOI: [10.22060/mej.2024.22666.7657](https://doi.org/10.22060/mej.2024.22666.7657)







## شبیه‌سازی و بهینه‌سازی کیفیت سطح و نیروهای براده‌برداری فرایند نانو‌شخم زنی دینامیکی مس تک بلوری با استفاده از روش دینامیک مولکولی

حجت‌اله طواری، محمد مهدی جلیلی\*

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران.

### تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۴۰۲/۰۶/۲۰  
بازنگری: ۱۴۰۲/۱۲/۱۹  
پذیرش: ۱۴۰۲/۱۲/۲۹  
ارائه آنلاین: ۱۴۰۳/۰۱/۱۷

### کلمات کلیدی:

شخم‌زنی دینامیکی  
روش دینامیک مولکولی  
زبری سطح  
روش تاگوچی  
مس تک بلوری

**خلاصه:** زبری سطح از جمله مشخصه‌های بسیار مهم در محصولات نانوبراده‌برداری می‌باشد. یکی از پارامترهایی که همواره تأثیر زیادی بر کیفیت سطح داشته، نیروهای ناشی از فرایند نانوبراده‌برداری می‌باشد. در این پژوهش، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در نرم‌افزار لمپس، فرایند نانو‌شخم‌زنی دینامیکی قطعه کاری از جنس مس تک بلوری به وسیله ابزاری از جنس الماس بررسی شده و کیفیت سطح تولیدی و نیروهای براده‌برداری به عنوان دو پارامتر هدف مورد بررسی قرار گرفته است. اثر پارامترهای فرایند نانو‌شخم‌زنی دینامیکی همچون عمق براده‌برداری، دامنه و فرکانس نوسان ابزار براده‌برداری بر روی نیروی براده‌برداری و زبری سطح با محاسبه زبری میانگین بررسی شده است. همچنین 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 به ترتیب مشخصه‌های عمق براده‌برداری، دامنه و فرکانس نوسان ابزار براده‌برداری بیشترین تأثیر بر روی زبری سطح و نیروهای براده‌برداری دارند. 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 شخم‌زنی دینامیکی برای دستیابی به بهترین صافی سطح و کمترین نیروی براده‌برداری در ابعاد مشخص به شرح عمق براده‌برداری ۲/۵ آنگستروم، دامنه نوسان ۰/۱ آنگستروم و فرکانس نوسان ۵۰ کیلوهرتز بدست آمد.

### ۱- مقدمه

ماشین‌کاری در ابعاد میکرو و نانو می‌باشد [۱]. فرایندهای ماشین‌کاری را می‌توان با توجه به دقت آنها طبقه‌بندی کرد. طبق نظر تانیکوچی<sup>۱</sup>، سه دسته برای فرایندهای ماشین‌کاری وجود دارد: فرایندهای عادی<sup>۲</sup>، دقیق<sup>۳</sup> و فوق دقیق<sup>۴</sup> [۲]. مرزهای بین هر دو دسته به عنوان تابعی از دقت فرایند نسبت به فرایندهای دیگر تعریف می‌شوند، به عنوان مثال، آنچه در دهه ۱۹۸۰ فوق‌العاده دقیق در نظر گرفته می‌شد، امروزه به دلیل پیشرفت‌های فناوری، تنها دقیق می‌باشد. بنابراین، هیچ تعریف واحدی از فرایندهای فوق دقیق وجود ندارد، به جز اینکه آنها دقیق‌ترین فرایندهای دوران خود هستند [۱]. پیشرفت در فناوری فرایندهای فوق دقیق نیازمند توسعه فناوری نانو ساختار می‌باشد که از میکروسکوپ کاوشگر روبشی<sup>۵</sup>، میکروسکوپ تونل زنی

در دوره کنونی به عنوان چهارمین انقلاب صنعتی، تمام تمرکز تولیدکنندگان بر روی رضایت مشتری با صرف هزینه، زمان و کیفیت مطلوب است. با توجه به این سه متغیر، شرکت‌ها به طور مداوم در تلاش برای بهبود روش‌هایی برای رفع نیازهای مصرف‌کننده می‌باشند تا به نوبه خود سهم و سود خود را در بازار افزایش دهند. بخش‌های تولیدی تا دهه‌های گذشته، برای کسب سود و ماندگاری در بازار، انرژی و تخصص خود را به طور کامل برای تولید انبوه کالاهای خود اختصاص می‌دادند. اما با تکامل عصر جدید دیجیتالی‌سازی و سفارشی‌سازی، صنایع در حال تغییر تمرکز خود از تولید انبوه به تولید سفارشی هستند و در این تحول، یک جنبه مهم،

- 1 Nario Taniguchi
- 2 Normal Processes
- 3 Precision Processes
- 4 Ultra-Precision Processes
- 5 Scanning probe microscope

\* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: jalili@yazd.ac.ir

حقوق مؤلفین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیرکبیر داده شده است. این مقاله تحت لایسنس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) در دسترس شما قرار گرفته است. برای جزئیات این لایسنس، از آدرس <https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode> دیدن فرمایید.



رویشی<sup>۱</sup> و میکروسکوپ نیروی اتمی<sup>۲</sup> استفاده می‌کند [۳].

نانوبراده‌برداری مس کاربردهای گسترده‌ای در حوزه اپتیک لیزر، حفرة شتاب دهنده خطی<sup>۳</sup> تا فناوری نیمه هادی دارد. علاوه بر این، مس تک بلوری نیز به عنوان یک ماده بستر برای رشد گرافن عمل کرده که دارای خواص الکترونیکی استثنایی است. مس دارای شبکه بلوری مکعبی وجوه پر یا ساختار مکعبی مرکز سطحی<sup>۴</sup> است و براساس منابع علمی در صورتی که فرایند نانوبراده‌برداری روی آن در صفحه بلوری (۱۰۰) انجام گردد بهترین صافی سطح حاصل می‌گردد [۴].

از آنجایی که نانوبراده‌برداری شامل برهمکنش گروه‌های اتمی است و رفتار مواد دارای طبیعت گسسته می‌باشد، تحلیل مکانیک پیوسته برای آن به خوبی جواب نمی‌دهد. بنابراین، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به یک ابزار ضروری در بررسی فرآیند برش نانومتری تبدیل می‌شود [۴]. در این نوع مدل‌ها، برای محاسبه نیروهای بین اتمی، از پتانسیل‌های بین اتمی استفاده می‌شود به طوری که با استفاده از مشتق پتانسیل‌های بین اتمی نسبت به فاصله اتمی، نیروی بین اتمی بدست می‌آید. در روش دینامیک مولکولی، بر پایه مکان، سرعت و شتاب ذرات و مولکول‌ها، می‌توان وضعیت سیستم را تخمین زد. این مدل‌سازی از قانون دوم نیوتن پیروی کرده و نیروهای بین اتمی بر پایه تابع گرادیان انرژی پتانسیل محاسبه می‌شوند. در فرایند نانوبراده‌برداری، نیروهای برشی همان نیروهای بین ذره‌ای هستند که نتیجه تعامل بین ذرات ابزار و قطعه کار می‌باشند. با کاهش این نیروها، ارتعاشات براده‌برداری کمتر شده و صافی سطح بهتر می‌شود [۵]. در فرایندهای نانو و میکروماشین‌کاری، حذف واقعی مواد می‌تواند به سطح قطعه کار یعنی فقط چند اتم یا لایه اتم محدود شود. در این محدوده، مشکلات اندازه‌گیری ذاتی و فقدان داده‌های تجربی دقیق، امکان توسعه مدل‌های تحلیلی و تجربی را محدود می‌کند [۶]. به دلیل الزامات بسیار زیاد ماشین ابزارهای فوق دقیق، روش آزمایش و شرایط براده‌برداری، بررسی مکانیزم نانوبراده‌برداری با استفاده از روش تجربی بسیار دشوار است [۷]. بهترین روش در دستیابی به بینش مناسب در مورد این فرایندها، استفاده از روش‌های شبیه‌سازی اتمی برای مدل‌سازی در مقیاس نانومتر می‌باشد. دینامیک مولکولی یک مدل فیزیکی جامع شامل اطلاعات ذاتی نظیر هندسه، سرعت و نیروهایی است که در رفتارهای اتمی در این مقیاس مؤثر می‌باشند [۸].

در طول فرایند ماشین‌کاری، ابزار برش با سطح قطعه کار تعامل می‌کند و در نتیجه ویژگی‌های سطحی در مقیاس میکرو و نانو روی سطح ماشین‌کاری شده

- 1 Scanning Tunneling Microscope (STM)
- 2 Atomic Force Microscope (AFM)
- 3 Linear accelerator cavity
- 4 Face-centered cubic (FCC)

ایجاد می‌شود. این ویژگی‌ها می‌تواند شامل برآمدگی‌ها، فرورفتگی‌ها، ناهمواری‌ها و سایر بی‌نظمی‌ها باشد. زبری سطح یک معیار مهم برای توصیف کیفیت سطح در عملیات نانوبراده‌برداری است [۹]. زبری سطح قطعه کار ماشین‌کاری شده به چهار عامل اصلی وابسته است: ویژگی‌های دینامیکی و سینماتیکی ماشین ابزار، مشخصات هندسی ابزار براده‌برداری، مشخصات قطعه کار و شرایط محیطی [۱۰]. زبری سطح یک عامل مهم در تعیین ویژگی‌های عملکردی اجزای ماشین‌کاری شده است که بر جنبه‌های مختلف همچون اصطکاک و سایش (بین قطعه ماشین‌کاری شده و محیط اطراف آن و همچنین مقاومت در برابر سایش)، خواص نوری (در بازتاب، پراکنده‌گی و جذب نور برای کاربردهایی که وضوح یا دقت نوری آنها مهم است) و تماس و چسبندگی (در مونتاژ و عملکرد قطعاتی مثل سیستم‌های میکروالکترومکانیکی<sup>۵</sup>) تأثیر می‌گذارد. برای کنترل زبری سطح در فرایند نانوبراده‌برداری، می‌توان از روش‌های مختلفی همچون بهینه‌سازی پارامترهای ماشین‌کاری (سرعت و عمق برش)، انتخاب ابزارهای برش (هندسه، جنس و پوشش) و ماشین‌کاری پیشرفته (اولتراسونیک، ماشین‌کاری با کمک لیزر یا ماشین‌کاری الکتروشیمیایی) استفاده کرد. به طور کلی، دستیابی به زبری سطح پایین در نانوبراده‌برداری برای تولید قطعات با دقت بالا، به ویژه در کاربردهایی مانند نیمه هادی‌ها، میکروالکترونیک یا دستگاه‌های پزشکی بسیار مهم است.

نیروهای براده‌برداری بر اساس نیروهای بین اتمی بین اتم‌های برهمکنش به وجود می‌آیند که به نوبه خود براساس پتانسیل‌های بین اتمی مدل‌سازی می‌شوند. نیروهای براده‌برداری از برهمکنش اتم‌ها در قطعه کار، ابزار و تعامل ابزار و قطعه کار به وجود می‌آیند [۱۱]. در تولید در مقیاس نانو، نیروی براده‌برداری از جمله پارامترهای فیزیکی مهم برای درک پدیده‌های براده‌برداری می‌باشد. در این زمینه ایکاوا و همکاران [۱۲] نیروها و انرژی براده‌برداری را با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی<sup>۶</sup> بدست آورده‌اند. موریواکی و لوکا [۱۳] آزمایش‌هایی را برای اندازه‌گیری نیروهای براده‌برداری در نانوبراده‌برداری انجام داده‌اند. آنها نشان دادند که نیروهای براده‌برداری در هر عرض با افزایش عمق براده‌برداری افزایش می‌یابد. نیروهای براده‌برداری در نانوبراده‌برداری به نیروهایی گفته می‌شود که در طی فرایند حذف مواد در مقیاس نانو به ابزار برش وارد می‌شود. این نیروها تحت تأثیر عوامل مختلفی از جمله خواص مواد، سرعت برش، عمق برش، هندسه ابزار و تعامل بین ابزار و قطعه کار قرار دارند. سه نوع نیروی براده‌برداری در نانوبراده‌برداری وجود دارد: (۱) نیروی برشی: نیرویی است که به موازات جهت برش اعمال می‌شود. (۲) نیروی متعامد: نیرویی است که عمود بر جهت برش اعمال می‌شود. این نیرو ابزار را در تماس با قطعه کار نگه می‌دارد و عمق برش را تعیین می‌کند. (۳) نیروی اصطکاک: این نیرو به عنوان نیروی مقاوم در برابر حرکت بین ابزار و قطعه کار است. به حداقل رساندن نیروهای اصطکاک برای کاهش نیروهای

- 5 Microelectromechanical systems (MEMS)
- 6 Molecular dynamics (MD)

براده برداری و بهبود دقت ماشین کاری بسیار مهم است. برای بهینه‌سازی فرآیندهای نانوبراده‌برداری، می‌توان از چندین تکنیک استفاده کرد. از جمله این روش‌ها می‌توان به استفاده از ابزارهای الماس تک بلوری برای کاهش سایز ابزار، کنترل سرعت و عمق برش برای به حداقل رساندن نیروها، استفاده از روان‌کننده‌ها یا خنک‌کننده‌ها برای کاهش اصطکاک و استفاده از پوشش‌های مناسب ابزار برای تقویت کارایی ابزار اشاره کرد. درک و کنترل نیروهای براده‌برداری در نانوبراده‌برداری برای دستیابی به دقت بالا، به حداقل رساندن سایز ابزار و اطمینان از کیفیت اجزای ماشین کاری ضروری است.

به منظور دستیابی به بهترین شرایط مورد نیاز برای تولید سطح با زبری سطح کم و نیروی براده‌برداری اندک، باید از روش‌های بهینه‌سازی استفاده نمود که لازمه آن طراحی آزمایش می‌باشد. روش تاگوچی<sup>۱</sup> یک رویکرد سیستماتیک برای طراحی آزمایش‌ها و بهینه‌سازی فرایندها است. این روش از آرایه‌های متعامد استفاده کرده که به کمک ماتریس‌هایی نمایش یکسانی از تمام ترکیبات ممکن سطوح پارامتر را تضمین نموده و باعث کاهش تعداد آزمایش‌ها و در عین حال ثبت تأثیر و تعامل عوامل می‌گردد. روش تاگوچی از نسبت‌های سیگنال به نویز<sup>۲</sup> برای ارزیابی عملکرد یک فرایند یا محصول در شرایط آزمایشی مختلف استفاده می‌کند. تاگوچی سه نوع نسبت سیگنال به نویز کوچکتر-بهبتر، بزرگتر-بهبتر و اسمی-بهبتر را بنابر ماهیت پاسخ را پیشنهاد کرد [۱۳]. سیگنال نماینده خروجی مطلوب و نویز نماینده خروجی نامطلوب است. بنابر این، بزرگترین نسبت سیگنال به نویز، بهینه‌ترین پارامترها را برای بهترین پاسخ ارائه می‌دهد [۱۴].

روش ارتعاش نوک با فرکانس بالا در حالت ضربه زدن<sup>۳</sup> میکروسکوپ نیروی اتمی به عنوان یک روش دقیق برای تصویربرداری از سطح نمونه استفاده می‌شود. شخم دینامیکی به عنوان استفاده از این روش برای خراش دادن سطح و ماشین کاری نانو ساختارها تعریف می‌شود. فرایند نانو شخم دینامیکی برای نانوبراده‌برداری مواد نرم مناسب است [۱۵]. لازم به ذکر است که در حالت ضربه زدن میکروسکوپ نیروی اتمی، نوک، عمود بر سطح نمونه نوسان می‌کند و به طور متناوب با سطح تماس برقرار می‌کند و در نتیجه حرکت ضربه‌ای ایجاد می‌شود [۱۶].

بر اساس توضیحات ارائه شده در زمینه بررسی فرایند شخم‌زنی دینامیکی، زبری سطح و عوامل مرتبط با آنها در نانوبراده‌برداری پژوهش‌های مختلفی انجام شده‌اند که در ادامه برخی از آنها مورد بررسی قرار می‌گیرند. لای و همکاران [۱۷] به منظور بررسی فرایند نانوبراده‌برداری ژرمانیوم از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سه بعدی استفاده کردند. آنها پدیده‌های اکستروژن، شخم<sup>۴</sup> و منطقه ایستایی<sup>۵</sup> را در جریان مواد

مشاهده کردند. آنها همچنین تغییر فاز را در طول فرایند براده‌برداری مورد مطالعه قرار دادند. ژو و همکاران [۱۸]، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سه بعدی<sup>۶</sup>، فرایند نانوبراده‌برداری مس به وسیله ابزار الماس به کمک میکروسکوپ نیروی اتمی<sup>۷</sup> را بررسی کرده و اثرات هندسه ابزار، عمق برش، سرعت برش و دمای قطعه کار را بر نیروهای براده‌برداری و تشکیل براده تحلیل کردند. به منظور کاهش سایز نوک و انحراف آن در ماشین کاری میکروسکوپ نیروی اتمی، از حالت ضربه‌ای<sup>۸</sup> استفاده می‌شود. در این روش به منظور محافظت از سطح قطعه کار، دامنه تحریک انتهای ثابت کنسول<sup>۹</sup> نوک را معمولاً با فعال کردن کنسول در فرکانس تشدید آن تنظیم می‌کنند. هنگامی که دامنه تحریک به مقدار معینی افزایش می‌یابد، تغییر شکل پلاستیک مواد قطعه کار نیز ممکن است رخ دهد که به آن لیتوگرافی شخم دینامیکی<sup>۱۰</sup> می‌گویند. تماس متناوب بین نوک و نمونه در این روش می‌تواند نیروی تعامل را کاهش داده و منجر به کاهش ساییدگی نوک میکروسکوپ نیروی اتمی شود [۱۹]. لیتوگرافی شخم دینامیکی را می‌توان به عنوان یک فرایند چکش کاری<sup>۱۱</sup> یا نفوذ با فرکانس بالا در نظر گرفت [۲۰]. ژیاو و همکاران [۲۱] مکانیزم حذف مواد و تولید سطح در شخم دینامیکی مس تک بلوری را با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و آزمایش‌های تجربی بررسی کرده و آن را با لیتوگرافی شخم استاتیکی<sup>۱۲</sup> مقایسه کردند. نتایج نشان دادند که براده کمی در شخم دینامیکی تشکیل می‌شود در حالی که براده قابل توجهی در فرایند شخم استاتیکی در شبیه‌سازی و آزمایش به وجود می‌آید. علاوه بر این عمق و عرض شیار در فرایند شخم دینامیکی کوچکتر می‌شود و امکان ساخت نانو ساختارها با ویژگی‌های کوچکتر را فراهم می‌آورد. همچنین مشخص گردید با استفاده از لیتوگرافی شخم دینامیکی، سایز نوک میکروسکوپ نیروی اتمی کاهش می‌یابد. لیو و همکاران [۲۲] به منظور پیش‌بینی ضخامت براده و عرض براده‌برداری در فرایند نانوبراده‌برداری مواد بلوری مکعبی و جوه پر<sup>۱۳</sup> تحت جهت‌های بلوری دلخواه با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و آزمایش‌های نانو خراشی<sup>۱۴</sup> یک مدل تحلیلی پیشنهاد کردند. یان و همکاران [۲۳] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و آزمایش‌های تجربی، تأثیر جهت نوک ابزار بر عمق ماشین کاری، انباشتگی<sup>۱۵</sup> ماده و نیروی براده‌برداری متوسط را در فرایند شخم‌زنی دینامیکی سطح مس تک بلوری مورد بررسی قرار دادند. در این پژوهش از یک نوک هر می الماسی برای میکروسکوپ

- 6 Molecular Dynamic (MD)
- 7 Atomic Force Microscopy (AFM)
- 8 Tapping mode
- 9 Cantilever
- 10 Dynamic Ploughing Lithography
- 11 Hammering
- 12 Static ploughing lithography
- 13 Face Centered Cubic (FCC)
- 14 Nanoscratching experiments
- 15 Pile-up

- 1 Taguchi
- 2 Signal to noise ratio (S/N)
- 3 AFM tapping mode
- 4 Ploughing
- 5 Stagnation Region

براساس بررسی‌های انجام شده مشخص گردید که تاکنون فرایند شخم‌زنی دینامیکی مس تک بلوری به کمک ابزار براده‌برداری الماس در مقیاس نانومتر با توجه به پارامترهای عمق براده‌برداری و دامنه و فرکانس ارتعاش تیر کنسول میکروسکوپ نیروی اتمی با هدف کاهش نیروهای براده‌برداری و افزایش صافی سطح مورد مطالعه قرار نگرفته است. بنابراین در این پژوهش، در فرایند نانوشخم‌زنی دینامیکی مس تک بلوری اثر پارامتر عمق براده‌برداری و پارامترهای ارتعاش کنسول ابزار میکروسکوپ نیروی اتمی همچون دامنه و فرکانس ارتعاش ابزار بر روی زبری سطح قطعه‌کار به صورت همزمان مورد بررسی قرار می‌گیرد. لازم به ذکر است نوک ابزار براده‌برداری برخلاف سایر پژوهش‌های پیشین که ابزار به صورت صلب فرض شده است، در این پژوهش به صورت انعطاف‌پذیر در نظر گرفته شده است. همچنین با استفاده از روش تاگوچی، علاوه بر طراحی آزمایش‌ها و کاهش زمان و هزینه آنها، مقادیر بهینه پارامترها به منظور دستیابی به کمترین زبری سطح و نیروی براده‌برداری در ابعاد مشخص بدست می‌آید. در این پژوهش سعی گردیده است که به کمک روش بهینه‌سازی و طراحی آزمایش تاگوچی، پارامترهای بهینه اولیه به منظور دستیابی به حداکثر نسبت سیگنال به نویز به دست آیند.

## ۲- روش تحقیق

با توجه به محدودیت‌های اشاره گردیده در بررسی رفتار فرایند نانوبراده‌برداری، بهترین روش دستیابی به بینشی عمیق از این فرایند، استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است. در این پژوهش، شبیه‌سازی سه بعدی فرایند نانوبراده‌برداری با استفاده از نرم‌افزار دینامیک مولکولی لمپس<sup>۴</sup> (شبیه‌ساز انبوه موازی اتمی/مولکولی در مقیاس بزرگ) انجام شده و خروجی‌ها با استفاده از نرم‌افزار اُویتو<sup>۵</sup> مورد تحلیل قرار گرفته‌اند (مطابق شکل ۱). به عنوان یک معرفی کوتاه از نرم‌افزار لمپس لازم به ذکر است، این نرم‌افزار یک بسته نرم‌افزاری پر کاربرد برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کلاسیک، با تمرکز بر مدل سازی مواد جامد (فلزات، نیمه‌رساناها)، مواد نرم (مولکول‌های زیستی، پلیمرها) و سیستم‌های درشت دانه یا مزوسکوپی<sup>۶</sup> است [۳۰]. این نرم‌افزار برای اجرای کارآمد در رایانه‌های موازی طراحی شده است و به راحتی قابل گسترش و تغییر است و روی پلتفرم‌های مختلفی از پردازنده‌های منفرد گرفته تا رایانه‌های موازی گسترده، از جمله معماری‌های پیشرفته چند هسته‌ای و واحد پردازنده مرکزی/واحد پردازنده

نیروی اتمی استفاده شده و سه جهت نوک مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که جهت نوک تأثیر قابل توجهی بر عمق ماشین کاری و توده ماده در کناره‌های شکاف دارد. بکین [۲۴] در پژوهشی تولید در مقیاس نانومتر با استفاده از نوک میکروسکوپ نیروی اتمی به کمک ارتعاشات بر روی مس تک بلوری را به صورت تئوری و تجربی بررسی کرد. وی به بهینه‌سازی و بهبود فرایند نانوبراده‌برداری بر اساس نوک میکروسکوپ نیروی اتمی بر روی مس پرداخت و علاوه بر بررسی شکل نوک میکروسکوپ نیروی اتمی و تأثیر آن بر نانوبراده‌برداری، فرایند سنتی را با فرایند نانوبراده‌برداری مبتنی بر ارتعاش<sup>۱</sup> با فرکانس‌ها و دامنه‌های متفاوت مقایسه کرد. ژانگ و همکاران [۲۵] در مقاله‌ای، رفتار نانو کششی مس تک بلوری را بر اساس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار داده و ویژگی‌های مقاومت و شکنندگی مس در دماهای مختلف را تحلیل کردند. سپس با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانوبراده‌برداری آن، ساختار بلوری، نیروی برش، توزیع تنش-کرنش، ویژگی‌های حرکت اتمی و مکانیزم تشکیل نانو براده را نشان دادند. لی و همکاران [۲۶] در پژوهشی، فرایند نانوبراده‌برداری قطعه کارهای نیکل-فسفر را با سرعت‌های خنک کاری مختلف به کمک دینامیک مولکولی شبیه‌سازی کردند. آنها به منظور بررسی مکانیزم حذف مواد و شکل دهی سطح، تأثیر عمق‌های برش مختلف بر ترتیب اتمی، نیروی برش، دمای برش، کرنش برش، انباشت ماده و شکل سطح را تحلیل کردند. آسیب زیر سطحی<sup>۲</sup> که توسط ماشین کاری مکانیکی ایجاد می‌شود، مانعی بزرگ برای استفاده گسترده از مواد سخت و شکننده است. ماشین کاری ماکرو یا میکرو با ارتعاش فرکانس بالا می‌تواند آسیب زیر سطحی کمتری نسبت به ماشین کاری سنتی فراهم کند. بنابراین وانگ و همکاران [۲۷] در مطالعه‌ای برای ماشین کاری نانو کانال‌ها بر روی سیلیکون تک بلوری از روش نانوخرایش با ارتعاش فرکانس بالا<sup>۳</sup> استفاده کردند تا مکانیزم آسیب زیر سطحی ماده سخت و شکننده را بررسی کنند. نوروزی و طهماسبی‌پور [۲۸]، تأثیر هندسه تیر میکروسکوپ نیروی اتمی را بر ضریب سختی، فرکانس تشدید، پایداری تیر و حداکثر تنش ایجاد شده در ساختار تیر برای ۱۲ شکل مختلف با استفاده از روش المان محدود بررسی کردند و نشان دادند غشای دایره‌ای و مربعی هندسه‌های مطلوب‌تری برای تیر میکروسکوپ نیروی اتمی هستند. موتالانا و آدالی [۲۹] در پژوهشی، تولید در مقیاس نانومتر به کمک حالت ضربه‌ای میکروسکوپ نیروی اتمی را با مدل تیر یک سر گیر دار که اتصالش با فنر پیچشی جایگزین شده، مورد بررسی قرار دادند. آنها از نظریه اویلر-برنولی و تئوری پیوستار غیر محلی ارینگن برای مدلسازی سیستم استفاده کردند. نظریه ارینگن در مقیاس نانو کاربرد دارد و اثرات مقیاس کوچک را در نظر می‌گیرد.

4 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)

5 Ovito

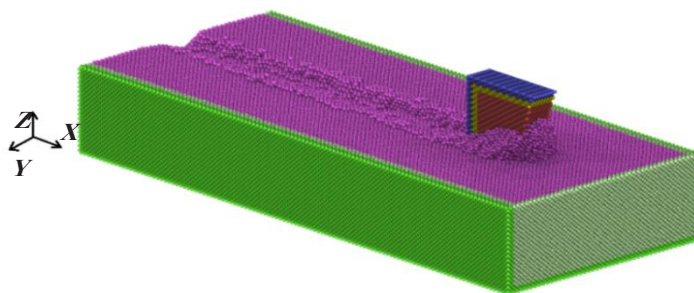
6 Mesoscopic

1 Vibration-Assisted Nanomachining (VANM)

2 Subsurface damage

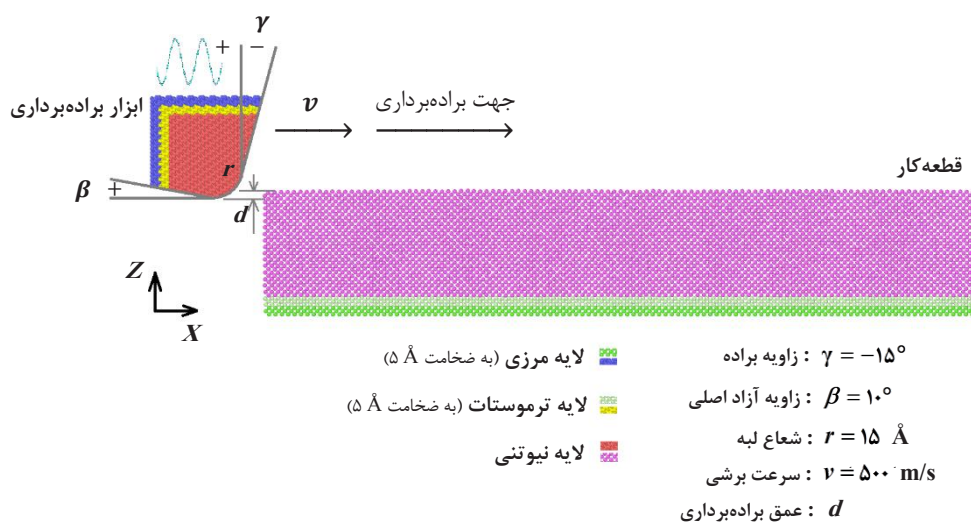
3 Tip-based ultrasonic vibration-assisted nanoscratch





شکل ۱. مدل دینامیک مولکولی نانوبراده‌برداری

Fig. 1. Molecular dynamics model of nano machining



شکل ۲. مشخصات مدل دینامیک مولکولی

Fig. 2. Specifications of the molecular dynamics model

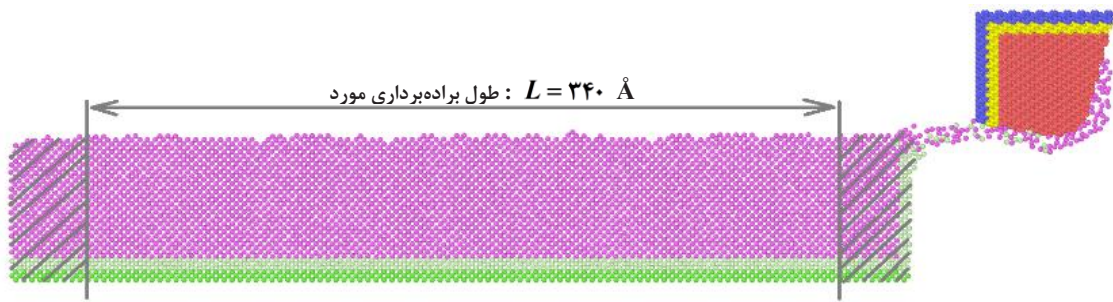
صفر کردن نیروی اتم‌ها) و لایه ترموستات (لایه میانی بین لایه اصلی و مرزی برای جلوگیری از تأثیر دمای صفر مطلق لایه مرزی روی لایه اصلی) در نظر گرفته شده است. ابعاد قطعه کار  $[400 \text{ \AA} \times 165 \text{ \AA} \times 70 \text{ \AA}]$  بوده و شامل ۴۱۲۴۲۵ اتم است و لایه‌ها و ضخامت آنها در شکل‌های ۱ و ۲ نشان داده شده‌اند. لازم به ذکر است که ابعاد قطعه کار براساس بررسی تأثیر اندازه<sup>۴</sup> مدل بر نتایج با در نظر گرفتن ضریب اطمینانی بهینه شده است. این به این معنی است که شبیه‌سازی با ابعادی مشخص انجام شده است و با نتایج حاصل از قطعه کار با ابعاد کوچکتر و بزرگتر مقایسه شده تا بهترین ابعادی بدست آید که هم نتایج از دقت کافی برخوردار باشد و هم با جلوگیری از زیاد شدن تعداد اتم‌ها، از زمانبر شدن شبیه‌سازی جلوگیری شود [۳۲].

به منظور بررسی بهتر پارامتر زبری سطح، ۱۵ درصد از کل طول قطعه کار از لحظه ورود ابزار براده‌برداری به قطعه کار و انتهای قطعه کار در

گرافیکی<sup>۱</sup> می‌تواند اجرا شود. لمپس در درجه اول بر شبیه‌سازی تمرکز دارد و قابلیت تجسم و تجزیه و تحلیل داخلی نداشته ولی می‌تواند داده‌ها را در قالب‌های مختلف خروجی دهد تا با ابزارهای نرم‌افزاری دیگر، مانند اویتو یا وی ام دی<sup>۲</sup> تجسم و تجزیه و تحلیل شوند [۳۱]. لازم به ذکر است نتایج این پژوهش براساس نسخه پایدار لمپس ۳۳ ژوئن ۲۰۲۲ و به کمک پردازنده گرافیکی انویدیا جیفورس آر تی ایکس ۳۰۶۰ تی آی<sup>۳</sup> بدست آمده‌اند. به منظور استفاده از روش دینامیک مولکولی، ابتدا باید مدل که شامل قطعه کار و ابزار براده‌برداری می‌باشد در لمپس ایجاد شود. قطعه کار از جنس مس تک بلوری و ابزار از جنس الماس است. در این مدل برای تطبیق نتایج با واقعیت، برای ابزار و قطعه کار سه لایه نیوتنی (لایه اصلی)، لایه مرزی (ثابت کردن موقعیت با

- 1 CPU/GPU
- 2 Visual Molecular Dynamics (VMD)
- 3 NVIDIA GeForce RTX 3060 Ti

4 Size study



شکل ۳. طول براده‌برداری مورد ارزیابی (نمای برش خورده میانی)

Fig. 3. Evaluated cutting length (median section view)

قانون حاکم برای مجموعه‌ای از  $N$  اتم به صورت معادله (۱) بیان می‌شود [۳۴].

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

که در آن جرم اتم  $m_i$ ، شتاب اتم  $a_i$  و نیروی برابری  $F_i$  برای اتم  $i$  می‌باشد. این نیروها با گرادینان تابع پتانسیل طبق معادله (۲)، محاسبه می‌شوند [۳۴].

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

که در آن  $V(r_1, \dots, r_N)$  تابع پتانسیل براساس موقعیت  $N$  ذره می‌باشد.

همانطور که اشاره شد برای تعریف برهمکنش مس-مس از پتانسیل روش اتم جاسازی شده مطابق معادله کلی (۳) آورده شده است [۳۷].

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

که در آن چگالی الکترونی میزبان  $\rho_{h,i}$  در اتم  $i$  ناشی از اتم‌های باقیمانده در سیستم،  $F_i(\rho_{h,i})$  انرژی جاسازی اتم  $i$  در چگالی الکترونی

محل خروج ابزار از آن از سطح مورد بررسی برای محاسبه زبری سطح حذف شده است (مطابق شکل ۳).

در این پژوهش مشخصات هندسی ابزار براده‌برداری و فرایند نانوبراده‌برداری از مرجع [۳۳] استفاده شده است. در ادامه با توجه به الزام بیان نیروهای بین اتمی بر اساس پتانسیل‌های تجربی در دینامیک مولکولی [۳۴]، برای سه برهمکنش اتمی مس-مس (اتم‌های قطعه‌کار)، کربن-کربن (اتم‌های ابزار برش) و کربن-مس (تعامل ابزار و قطعه‌کار) به ترتیب از توابع پتانسیل روش اتم جاسازی شده [۳۵، ۳۶]، ترسوف<sup>۲</sup> و مورس<sup>۳</sup> استفاده گردید. با تکمیل بستر شبیه‌سازی، نوبت به اعمال شرایط اولیه به سیستم می‌رسد. در اینجا، دمای اولیه سیستم، ۳۰۰ درجه کلوین در نظر گرفته می‌شود. سپس با فرصت دادن به سیستم، مدل براساس شرایط اولیه دمایی، نیرویی، مرزی، پتانسیل و ابعادی به پایداری رسیده و به تعادل دینامیکی می‌رسد. در نهایت ابزار برش با سرعت ثابت ۵۰۰ متر بر ثانیه در جهت محور طولی  $X$  شروع به براده‌برداری کرده و طبق تابع ارتعاشی  $(R \sin(\omega t))$  نوسان می‌کند و شبیه‌سازی به اتمام می‌رسد.

نیروهای براده‌برداری در فرایندهای نانوبراده‌برداری همان نیروهای بین اتمی هستند. در اثر برابری نیروهای تعامل بین ابزار و قطعه‌کار نیروهای براده‌برداری به وجود می‌آیند. به دلیل فاصله اندک ابزار از قطعه‌کار، این نیروها در آغاز منفی (جاذبه) بوده و با شروع فرایند، نیروی دافعه بین اتم‌های ابزار و قطعه‌کار ایجاد شده که نشانگر نیروی مثبت هستند. در روش دینامیک مولکولی به کمک قانون دوم حرکت نیوتن براساس موقعیت، سرعت و شتاب ذرات، حالت سیستم پیش‌بینی می‌شود.

- 1 Embedded Atom Method Potential (EAM)
- 2 Tersoff Potential
- 3 Morse Potential

4 Host electron density

جدول ۱. مقادیر ثابت پتانسیل روش اتم جاسازی شده [۳۷]

Table 1. Constant values of EAM potential [37]

مقدار	پارامتر ثابت
۱۱	$Z$ .
۱/۷۲۲۷	$\alpha$
۰/۱۶۰۹	$\beta$
۲	$\nu$
۱	$n_s$
۳/۶۱۵	$a$ . (Å)
۳/۵۴	$E_{sub}$ (eV)
۱/۳۸	$B$ (ergs/cm <sup>3</sup> )
۱/۶۷	$C_{11}$ (ergs/cm <sup>3</sup> )
۱/۲۴	$C_{12}$ (ergs/cm <sup>3</sup> )
۰/۷۶	$C_{44}$ (ergs/cm <sup>3</sup> )
۱/۲۸	$E_v^f$ (eV)
۳d <sup>۱۰۴</sup> s <sup>۱</sup>	ساختار اتمی

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

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

که در آن  $V_a$  و  $V_r$  به ترتیب پتانسیل‌های ناشی از نیروهای دافعه و جاذبه بین اتم‌های  $i$  و  $j$  و پارامتر مربوط به مشخصات جهت و طول پیوند می‌باشد. روابط تکمیلی مورد نیاز برای محاسبه پتانسیل ترسوف در معادلات (۶) تا (۱۳) آمده‌اند [۳۴]. به منظور استفاده از این معادله، مقادیر ثابت پتانسیل ترسوف در جدول ۲ بیان شده‌اند [۳۷].

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

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

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

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

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

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

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

پس زمینه  $\rho$  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 معادله (۴) تقریب زده می‌شود [۳۷].

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

که در آن  $\rho_j^a(R)$  چگالی الکترونی با مشارکت اتم  $j$  می‌باشد. پارامترهای مرتبط با تابع پتانسیل روش اتم جاسازی شده مس در جدول ۱ فهرست شده‌اند [۳۷].

همچنین به منظور شبیه‌سازی ابزار براده‌برداری با جنس الماس از پتانسیل ترسوف<sup>۱</sup> استفاده شده است که رابطه کلی این پتانسیل در معادله (۵) آورده شده است [۳۴]:

1 Tersoff Potential

جدول ۲. مقادیر ثابت پتانسیل ترسوف [۳۷]

Table 2. Constant values of the Tersoff potential [37]

مقدار	پارامتر ثابت
$1/3936 \times 10^3$	$A$ (eV)
$3/467 \times 10^2$	$B$ (eV)
۳۴/۸۷۹	$\lambda_1$ (nm <sup>-1</sup> )
۲۲/۱۱۹	$\lambda_\eta = \lambda_\nu$ (nm <sup>-1</sup> )
۰	$\alpha$
$1/5724 \times 10^{-7}$	$\beta$
$7/2751 \times 10^{-1}$	$n$
$3/8049 \times 10^4$	$p$
۴/۳۸۴	$q$
$-5/7058 \times 10^{-1}$	$h$
۰/۱۸	$R$ (nm)
۰/۰۲	$D$ (nm)

ترمودینامیکی مدل در شروع شبیه‌سازی و در حین فرایند از مفهوم هنگردهای ترمودینامیکی<sup>۳</sup> استفاده می‌گردد. به یک گروه بزرگ از اتم‌ها که از نظر میکروسکوپی متفاوتند ولی از نظر ماکروسکوپی یک و ترمودینامیک مشابه باشند، هنگرد گفته می‌شود. برای یک سیستم با تعداد مشخص اتم و با کمیت‌های ترمودینامیکی فشار<sup>۴</sup>، دما<sup>۵</sup>، حجم<sup>۶</sup>، آنتروپی<sup>۷</sup> و غیره؛ می‌توان پیکره‌بندی‌های متعددی با ویژگی‌های ماکروسکوپی یکسان تعریف کرد. در این پژوهش از سه هنگرد ان وی ای<sup>۸</sup>، ان وی تی<sup>۹</sup> و ان پی تی<sup>۱۰</sup> استفاده شده است. هنگرد ان وی ای به هنگرد میکروکانونی<sup>۱۱</sup> معروف بوده و بیان کننده سیستمی ایزوله با تعداد  $N$  اتم در یک حجم ثابت و با انرژی کل ثابت می‌باشد. هنگرد ان وی تی به هنگرد کانونی<sup>۱۲</sup> شهرت داشته و بیانگر یک سیستم با تعداد مشخص اتم در حجم ثابت و دمای ثابت می‌باشد. لازم به ذکر است که از این هنگرد برای مدل‌سازی

$$\eta_{ij} = \sum_{k(j \neq i)} f_C(r_{ik}) e^{\left[ \lambda_1^3 (r_{ij} - r_{ik})^3 \right]} \quad (13)$$

در نهایت همانطور که اشاره گردید به منظور شبیه‌سازی تعامل بین اتم‌های مس و کربن در حین فرایند براده‌برداری از تابع پتانسیل مورس (شکل ۴) استفاده شده است. این پتانسیل طبق معادله (۱۴) بیان می‌شود [۳۸]:

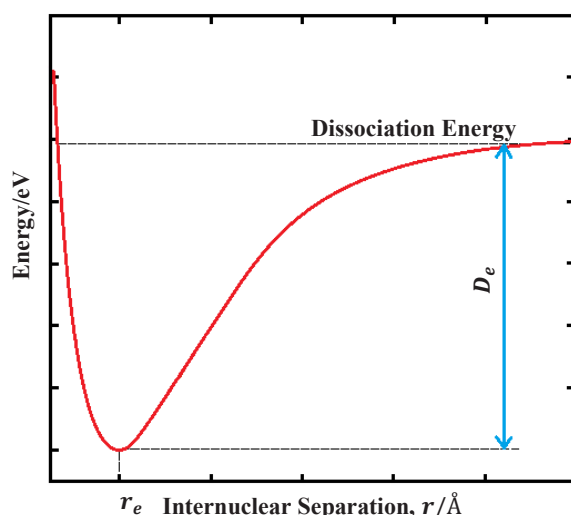
$$V_{ij} = D_e \left[ e^{-2\alpha(r_{ij} - r_e)} - 2e^{-\alpha(r_{ij} - r_e)} \right] \quad (14)$$

در معادله (۱۴)،  $r_{ij}$  فاصله بین اتم‌های  $i$  و  $j$  و  $r_e = 2/0.5 \text{ \AA}$  فاصله پیوندی تعادل؛  $D_e = 0.07 \text{ eV}$  عمق چاه<sup>۲</sup> و  $\alpha = 5/14 \text{ \AA}^{-1}$  عرض تابع پتانسیل می‌باشد [۳۹].

در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، به منظور آماده‌سازی شرایط

- 1 Equilibrium Bond Distance
- 2 Well depth

- 3 Thermodynamic Ensembles
- 4 Pressure (P)
- 5 Temperature (T)
- 6 Volume (V)
- 7 Entropy (S)
- 8 NVE Ensemble
- 9 NVT Ensemble
- 10 NPT Ensemble
- 11 Microcanonical Ensemble
- 12 Canonical Ensemble



شکل ۴. نمودار تابع پتانسیل مورس [۳۸]

Fig. 4. Morse potential function diagram [38]

در معادله (۱۵) مطابق شکل ۵،  $Z_i$  برابر با انحراف ارتفاع از صفحه ارتفاع میانگین برای تک تک اتم‌ها و  $L$  برابر با طول براده‌برداری مورد ارزیابی مشخص شده در شکل ۳ می‌باشد.

در این پژوهش منظور از نیروی براده‌برداری، نیروی برابند وارد بر ابزار براده‌برداری می‌باشد. لازم به ذکر است نیروی براده‌برداری شامل سه مؤلفه نیروی برشی<sup>۴</sup>، نیروی عمودی<sup>۵</sup> و نیروی اصطکاک<sup>۶</sup> می‌شود. سطح تولید شده در فرایند براده‌برداری یک نمونه در شکل ۶ نشان داده شده است.

همانطور که اشاره گردید، به منظور تشخیص و بدست آوردن شرایط بهینه از بین آزمایش‌ها از روش تاگوچی و از تحلیل نسبت سیگنال به نویز استفاده شده است. در مورد زبری سطح، مقادیر کوچکتر به عنوان مقادیر بهتر شناخته می‌شوند. پارامتر نسبت سیگنال به نویز برای تمامی زبری سطح‌های بدست آمده حاصل از انجام آزمایش‌ها از معادله (۱۶) برای ویژگی کوچکتر-بهرتر بدست آمده است [۴۱]:

$$S/N = -10 \times \log_{10} \left[ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n R_i^2 \right] \quad (16)$$

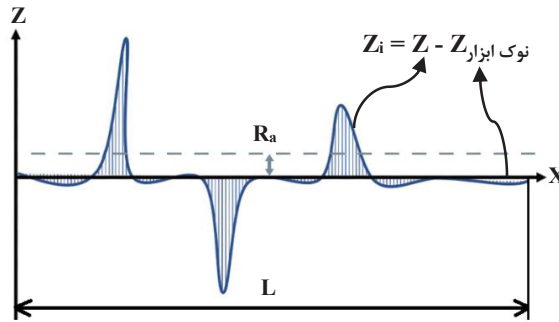
یک فعل و انفعال دمایی به کمک یک مخزن گرما به منظور ثابت نگه داشتن دما استفاده می‌شود. هنگرد ان پی تی نیز بیانگر هنگرد هم‌دم-هم‌فشار<sup>۱</sup> بوده و بیانگر سیستمی با تعداد مشخص اتم با فشار و دمای ثابت می‌باشد [۳۴]. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام شده در این پژوهش، ابتدا به منظور تعادل هرچه بیشتر مدل قبل از فرایند براده‌برداری، با استفاده از دستور مینیمایز<sup>۲</sup>، سیستم در حالت انرژی کل حداقلی قرار گرفته و سپس به منظور تعادل و حذف تنش‌های پسماند از هنگرد ان پی تی در مدت ۷۰۰۰۰ گام زمانی (۰/۰۰۲ پیکو ثانیه) یعنی ۱۴۰ پیکو ثانیه استفاده شد. البته برای شبیه‌سازی لایه ترموستات، به منظور ثابت نگه داشتن دما، از هنگرد ان وی تی و برای لایه نیوتنی، به منظور براده‌برداری، از هنگرد ان وی ای استفاده شده است.

پارامترهای هدف در این پژوهش، زبری سطح و نیروی براده‌برداری می‌باشند. به منظور تحلیل زبری سطح، از مشخصه زبری متوسط<sup>۳</sup> به عنوان میانگین عددی ارتفاع قله‌ها و عمق دره‌های مشاهده شده در سطح نیمرخ مطابق معادله (۱۵) کمک گرفته شد [۴۰].

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

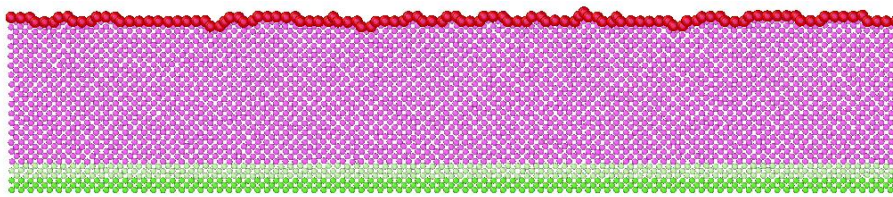
- 4 Cutting Force
- 5 Normal Force
- 6 Frictional Force

- 1 Isobaric Isothermal Ensemble
- 2 Minimize
- 3 Average Roughness ( $R_a$ )



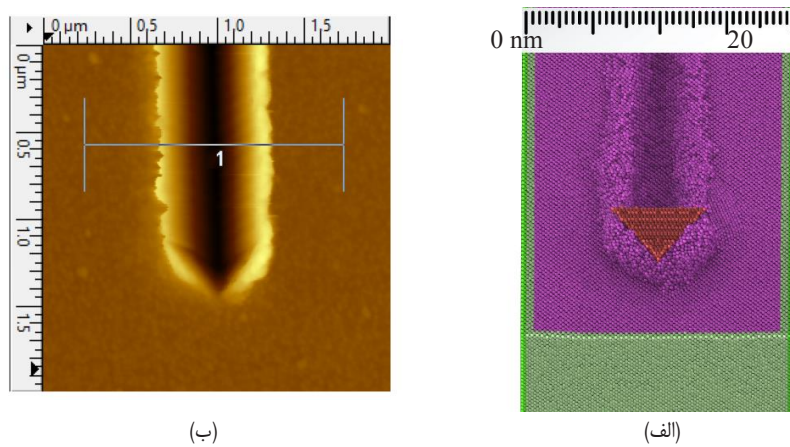
شکل ۵. پارامترهای معادله (۱۵)

Fig. 5. Parameters of equation (15)



شکل ۶. سطح تولید شده در فرایند براده برداری یک نمونه (اتم‌های قرمز رنگ)

Fig. 6. The surface produced in the machining process of a sample (red atoms)



شکل ۷. سطح قطعه کار پس از نانو براده برداری؛ الف) شبیه‌سازی، ب) آزمایشگاهی [۲۴]

Fig. 7. The surface of the workpiece after nano machining; a) simulation, b) experiment [24]

که به صورت تجربی انجام شده است [۲۴] تطبیق داده شد. تمام پارامترهای هندسی مربوط به ابزار و قطعه کار مطابق مرجع انتخاب شده‌اند. شکل ۷، سطح تولید شده در شبیه‌سازی که با استفاده از مدل ارائه شده در این مقاله تولید شده است را با سطح تولید شده آزمایشگاهی در کنار یکدیگر نشان می‌دهد که مطابقت خوبی دارند. به منظور بررسی دقیق‌تر، پارامتر زبری سطح میانگین محاسبه شده از طریق شبیه‌سازی با زبری سطح ارائه شده در مرجع [۲۴]

که در آن  $R_i$  مقدار زبری سطح برای آزمون نام است.

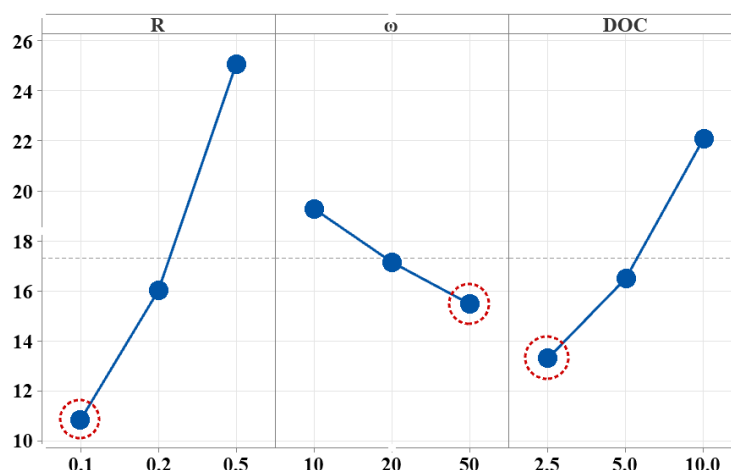
### ۳- صحنه‌گذاری نتایج

به منظور بررسی صحت عملکرد مدل ارائه شده در این پژوهش، روند شبیه‌سازی مورد استفاده در پژوهش حاضر با نتایج مربوط به فرایند نانوبراده‌برداری یک ابزار هرمی شکل بر روی قطعه کار مس تک کریستال

جدول ۳. سطوحی پارامترهای ورودی

Table 3. Levels of input parameters

پارامترهای ورودی		
عمق براده‌برداری (DOC)	فرکانس نوسان ابزار ( $\omega$ )	دامنه نوسان ابزار (R)
(Å)	(KHz)	(Å)
۲/۵	۱۰	۰/۱
۵	۲۰	۰/۲
۱۰	۵۰	۰/۵



شکل ۸. مقدار میانگین پاسخ

Fig. 8. Average response value

می‌توان تعامل پارامترها را مورد تحلیل قرار داد. بنابراین در این پژوهش در مرحله نخست با حداقل آزمایش و با ۹ اجرا ( $L_9: 3^2=9$ ) با مشخصات مختلف، مقادیر بهینه پارامترهای ورودی بدست آمدند و در ادامه به منظور تحلیل تعامل پارامترهای ورودی، با حداکثر آزمایش و با ۲۷ اجرا ( $3^3=27$ ):  $L_{27}$ )، علاوه بر مقادیر بهینه (کاملاً مطابق حالت اول) تعامل پارامترهای ورودی نیز مورد بررسی قرار گرفتند.

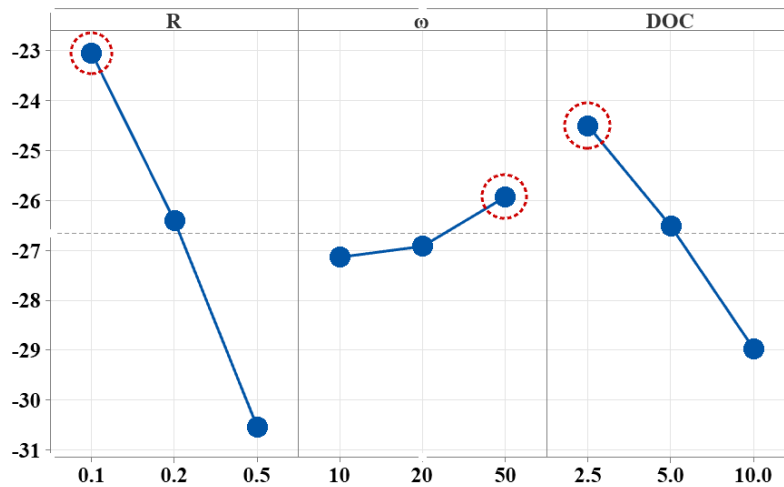
در حالت نخست، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بر اساس شرایط مختلف براده‌برداری برای ۹ حالت انجام شده و نتایج آن در جدول ۴ ارائه شده‌اند. البته لازم به ذکر است که چیدمان تغییر پارامترهای ورودی براساس روش تاگوچی انجام شده است.

نمودار مقدار میانگین پاسخ و نسبت سیگنال به نویز به ترتیب در شکل‌های ۸ و ۹ نشان داده شده‌اند. مقادیر بهینه پارامترهای ورودی در شکل‌های ۷ و ۸ با دایره قرمز رنگ مشخص شده است.

مقایسه شده است. صافی سطح بدست آمده در شبیه‌سازی  $R_a = 1/0.54$  nm بدست آمد درحالی‌که مقدار بدست آمده در نتیجه آزمایشگاهی [۲۴]  $R_a = 1/0.42$  nm می‌باشد. همانطور که مشاهده می‌شود، مدل حاضر با خطای حدود ۱/۱۵٪ زبری سطح تولیدی را در فرایند نانوبراده‌برداری پیش‌بینی کرده است.

#### ۴- نتایج و بحث

در این پژوهش به منظور استفاده از روش تاگوچی از نرم‌افزار مینیتب<sup>۱</sup> استفاده شده است. در اینجا سه پارامتر در سه سطح (مطابق جدول ۳) مورد بررسی قرار گرفته و اثر تغییر این پارامترهای ورودی روی خروجی زبری متوسط و نیروی براده‌برداری مورد بررسی قرار گرفته‌اند. براساس اصول روش تاگوچی، تنها برای تعداد پارامترهای مشخص و با تعداد سطوح معینی



شکل ۹. مقدار میانگین نسبت سیگنال به نویز

Fig. 9. The average value of the signal to noise ratio

جدول ۴. نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای حالت  $L_9$

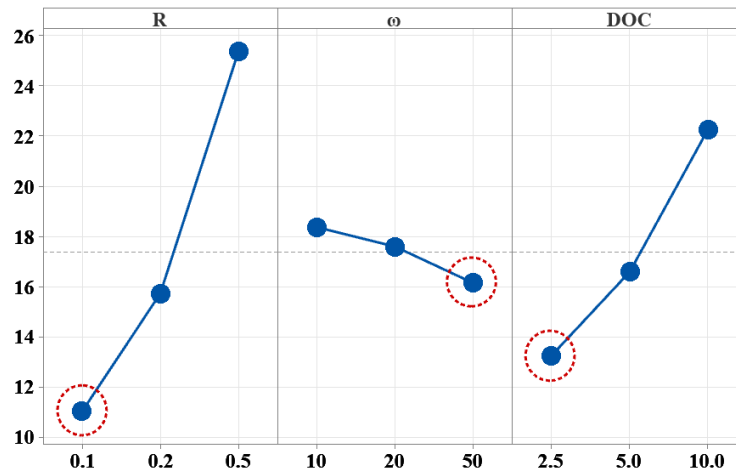
Table 4. Molecular dynamics simulation results for case  $L_9$

پارامترهای هدف		پارامترهای ورودی			ردیف
نیروی براده‌برداری ( $F$ ) (mN)	زبری متوسط ( $R_a$ ) (Å)	دامنه نوسان ابزار ( $R$ ) (Å)	فرکانس نوسان ابزار ( $\omega$ ) (KHz)	عمق براده‌برداری ( $DOC$ ) (Å)	
۲۷/۷	۱/۹۳	۰/۱	۱۰	۲/۵	۱
۳۱/۱	۱/۵۸	۰/۱	۲۰	۵	۲
۳۸/۳	۰/۹۹	۰/۱	۵۰	۱۰	۳
۴۸/۹	۱/۲۲	۰/۲	۱۰	۵	۴
۶۷	۱/۰۷	۰/۲	۲۰	۱۰	۵
۳۲/۴	۱/۳۲	۰/۲	۵۰	۲/۵	۶
۱۰۰/۳	۲/۱۷	۰/۵	۱۰	۱۰	۷
۶۰/۹	۱/۱۴	۰/۵	۲۰	۲/۵	۸
۷۲/۴	۱/۲	۰/۵	۵۰	۵	۹

در حالت دوم، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بر اساس شرایط مختلف براده‌برداری برای ۲۷ حالت انجام شده و نتایج آن در جدول ۵ ارائه شده‌اند. نمودار مقدار میانگین پاسخ و نسبت سیگنال به نویز به ترتیب در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ نشان داده شده‌اند. در این دو شکل، مقادیر بهینه پارامترهای ورودی با دایره قرمز رنگ مشخص شده است که سطوح پارامترهای ورودی بهینه را همچون حالت قبل پیش‌بینی کرده‌اند ( $DOC = 2/5 \text{ \AA}$ ،  $R = 0/1 \text{ \AA}$ ).

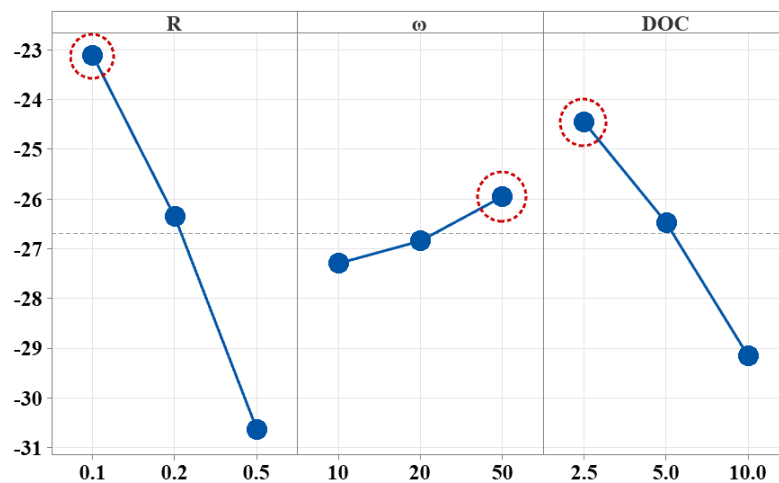
براساس خروجی‌های بدست آمده مشخص گردید پارامترهای دامنه ارتعاش ابزار، عمق براده‌برداری و فرکانس ارتعاش ابزار به ترتیب دارای بیشترین تأثیر بر روی پارامترهای هدف زبری سطح و نیروی براده‌برداری می‌باشند. در ادامه در تمام نمودارهای ارائه شده هر چه مقدار میانگین‌های پاسخ کمتر باشد و یا مقدار نسبت سیگنال به نویز بیشتر باشد در نتیجه صافی سطح بهتر و نیروی براده‌برداری کمتر است.





شکل ۱۰. مقدار میانگین پاسخ

Fig. 10. Average response value



شکل ۱۱. مقدار میانگین نسبت سیگنال به نویز

Fig. 11. The average value of the signal to noise ratio

عمق براده‌برداری و افزایش دامنه نوسان ابزار در صورت ثابت بودن دو پارامتر دیگر نیز موجب افزایش نیروی براده‌برداری شده است. در هر دو حالت با افزایش پارامتر مربوطه تعداد اتم‌هایی که باید پیوند آن‌ها با قطعه کار شکسته شود تا فرایند براده‌برداری صورت گیرد افزایش می‌یابد که این امر موجب افزایش نیروی براده‌برداری شده است. براساس خروجی‌های بدست آمده در جدول ۵، نمودارهای برهمکنش

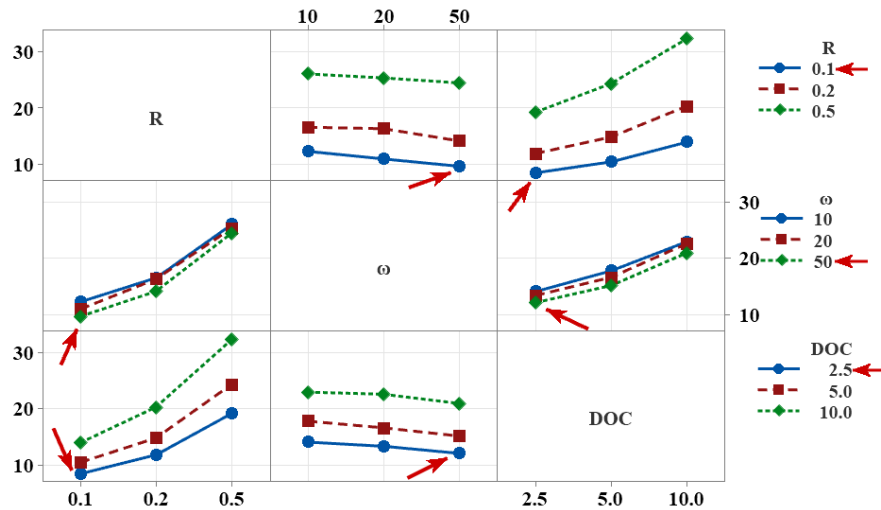
و  $(\omega = 50 \text{ KHz})$ .

مطابق نتایج ارائه شده در جدول ۵، برای عمق براده‌برداری و دامنه نوسان ابزار ثابت، در فرکانس‌های نوسان ابزار بالاتر نیروی براده‌برداری کاهش یافته است. این امر به علت افزایش انرژی جنبشی ابزار در فرکانس‌های بالاتر می‌باشد که انرژی جنبشی ذرات قطعه کار را در لحظه تماس افزایش داده و موجب جدایی راحت‌تر ذرات از قطعه کار می‌گردد. همچنین افزایش

جدول ۵. نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای حالت  $L_{27}$

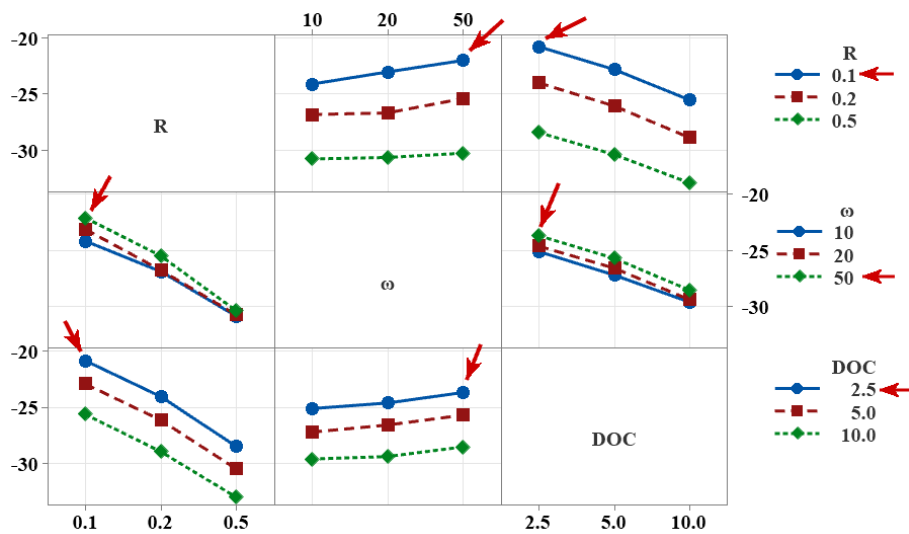
Table 5. Molecular dynamics simulation results for case  $L_{27}$

پارامترهای هدف		پارامترهای ورودی				ردیف
نیروی براده‌برداری ( $F$ ) (nN)	زبری متوسط ( $R_a$ ) ( $\text{\AA}$ )	دامنه نوسان ابزار ( $R$ ) ( $\text{\AA}$ )	فرکانس نوسان ابزار ( $\omega$ ) (KHz)	عمق براده‌برداری ( $DOC$ ) ( $\text{\AA}$ )		
۲۷/۷	۱/۹۳	۰/۱	۱۰	۲/۵	۱	
۳۶/۶	۱/۱۸	۰/۱	۱۰	۵	۲	
۴۸	۱/۰۰	۰/۱	۱۰	۱۰	۳	
۲۴/۸	۱/۴۱	۰/۱	۲۰	۲/۵	۴	
۳۱	۱/۵۸	۰/۱	۲۰	۵	۵	
۴۳/۶	۱/۱۰	۰/۱	۲۰	۱۰	۶	
۲۲/۴	۰/۹۱	۰/۱	۵۰	۲/۵	۷	
۲۷/۵	۰/۹۳	۰/۱	۵۰	۵	۸	
۳۸/۳	۰/۹۹	۰/۱	۵۰	۱۰	۹	
۳۸/۴	۱/۴۹	۰/۲	۱۰	۲/۵	۱۰	
۴۸/۸	۱/۲۲۱	۰/۲	۱۰	۵	۱۱	
۶۶/۳	۱/۲۲۲	۰/۲	۱۰	۱۰	۱۲	
۳۷/۵	۱/۲۱۹	۰/۲	۲۰	۲/۵	۱۳	
۴۷/۳	۱/۱۹	۰/۲	۲۰	۵	۱۴	
۶۶/۹	۱/۰۷	۰/۲	۲۰	۱۰	۱۵	
۳۲/۴	۱/۳۲	۰/۲	۵۰	۲/۵	۱۶	
۴۱/۴	۰/۹۹	۰/۲	۵۰	۵	۱۷	
۵۷	۱/۲۱	۰/۲	۵۰	۱۰	۱۸	
۶۳	۱/۰۷	۰/۵	۱۰	۲/۵	۱۹	
۷۷/۵	۳/۱۵	۰/۵	۱۰	۵	۲۰	
۱۰۰/۴	۲/۱۷	۰/۵	۱۰	۱۰	۲۱	
۶۰/۸	۱/۱۴	۰/۵	۲۰	۲/۵	۲۲	
۷۶	۱/۰۳	۰/۵	۲۰	۵	۲۳	
۱۰۱/۳	۱/۶۳	۰/۵	۲۰	۱۰	۲۴	
۵۶/۶	۰/۹۵	۰/۵	۵۰	۲/۵	۲۵	
۷۲/۴	۱/۱۹	۰/۵	۵۰	۵	۲۶	
۱۰۰/۷	۱/۶۹	۰/۵	۵۰	۱۰	۲۷	



شکل ۱۲. مقدار میانگین پاسخ برای برهمکنش پارامترهای ورودی

Fig. 12. Mean response value for interaction of input parameters



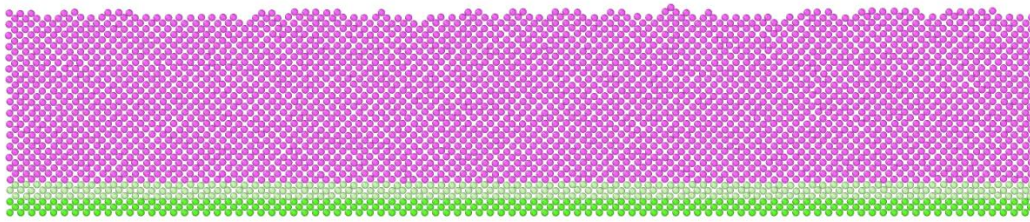
شکل ۱۳. مقدار میانگین نسبت سیگنال به نویز برای برهمکنش پارامترهای ورودی

Fig. 13. The average value of the signal to noise ratio for the interaction of input parameters

داده شده‌اند. در ادامه نمای برش خورده سطح نانوبراده برداری حاصل از شبیه‌سازی برای نمونه‌ای با صافی سطح نامطلوب (ردیف ۱۶ جدول ۵) و نمونه بهینه‌سازی شده به ترتیب در شکل‌های ۱۴ و ۱۵ ارائه شده‌اند. همچنین تغییرات نیروی براده‌برداری در دو حالت نمونه با صافی سطح نامطلوب (ردیف ۱۶ جدول ۵) و نمونه بهینه‌سازی شده به ترتیب در

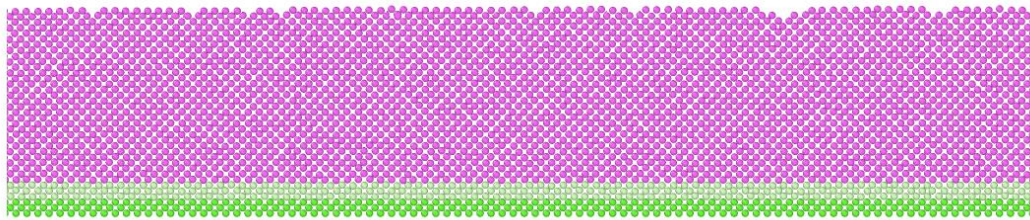
پارامترهای ورودی بر روی نتایج مقدار میانگین پاسخ و نسبت سیگنال به نویز در شکل‌های ۱۲ و ۱۳ ارائه شده‌اند.

در شکل‌های ۱۲ و ۱۳ نیز مقادیر پارامترهای ورودی بهینه با پیکان قرمز رنگ مشخص شده است. با توجه به نتایج ارائه شده، پارامترهای بهینه فرایند نانوشخم دینامیکی در این ابعاد مشخص در ردیف ۷ از جدول ۵ نشان



شکل ۱۴. نمای برش خورده سطح نانوبراده برداری تولید شده با استفاده از پارامترهای ورودی  $DOC=2/5 \text{ \AA}$ ,  $\omega=50 \text{ KHz}$ ,  $R=0/2 \text{ \AA}$

Fig. 14. The section view of the surface produced in the nano machining process using input parameters  $DOC=2.5 \text{ \AA}$ ,  $\omega=50 \text{ KHz}$ ,  $R=0.2 \text{ \AA}$



شکل ۱۵. نمای برش خورده سطح نانوبراده برداری تولید شده با استفاده از پارامترهای ورودی  $DOC=2/5 \text{ \AA}$ ,  $\omega=50 \text{ KHz}$ ,  $R=0/1 \text{ \AA}$

Fig. 15. The section view of the surface produced in the nano machining process using input parameters  $DOC=2.5 \text{ \AA}$ ,  $\omega=50 \text{ KHz}$ ,  $R=0.1 \text{ \AA}$

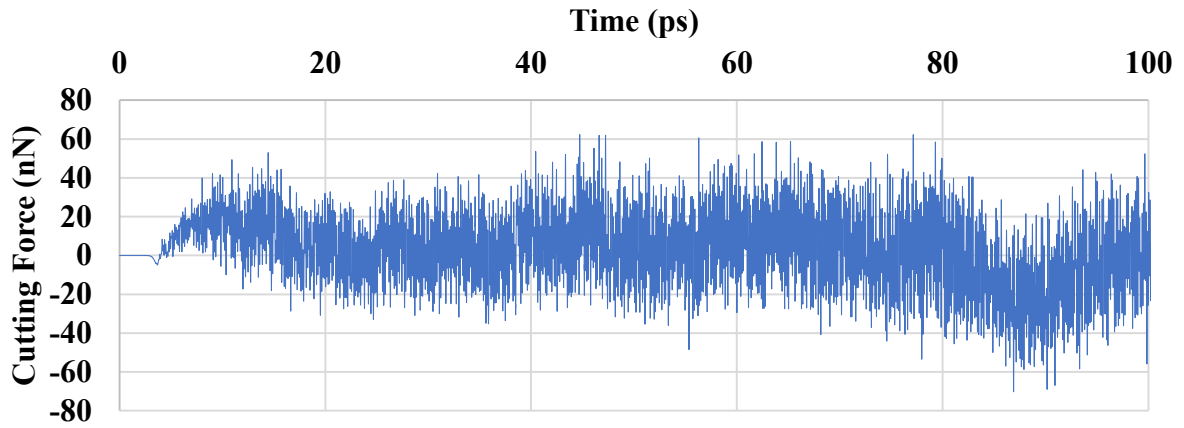
برای ماشین کاری نیز کاهش می یابد. با توجه به محدودیت های اندازه گیری در ابعاد نانومتر، یکی از بهترین روش های درک بهتر فرایند، استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی می باشد. بنابراین در این پژوهش به منظور بررسی تأثیر پارامترهای عمق براده برداری، دامنه نوسان و فرکانس نوسان ابزار بر روی فرایند نانوشخم دینامیکی یک ابزار الماسی بر روی قطعه کار مس تک بلوری، از شبیه سازی دینامیک مولکولی استفاده شده است. صحت عملکرد مدل ارائه شده در این پژوهش با مقایسه عملکرد آن با نتایج تجربی بررسی شده است. همچنین به منظور دستیابی به شرایط ورودی بهینه برای دستیابی به بهترین صافی سطح و کمترین نیروی براده برداری، از روش تاگوچی استفاده شده است. بر این اساس با طراحی آزمایش ها و با کمترین تعداد اجرا، با دقت مناسبی پارامترهای بهینه پیش بینی گردید و علاوه بر این ترتیب تأثیر این پارامترها بر روی خروجی مورد بررسی قرار گرفت. مقادیر بهینه پارامترهای شخم زنی دینامیکی برای دستیابی به بهترین صافی سطح و کمترین نیروی براده برداری در ابعاد مشخص به شرح  $DOC=2/5 \text{ \AA}$ ,  $R=0/1 \text{ \AA}$

شکل های ۱۶ و ۱۷ نشان داده شده اند. در هر مورد در کنار نمودار نیروی براده برداری، نمودار نیروی فیلتر شده در اطراف فرکانس غالب نوسانات نیرو که فرکانس نوسان ابزار می باشد نیز ارائه شده است.

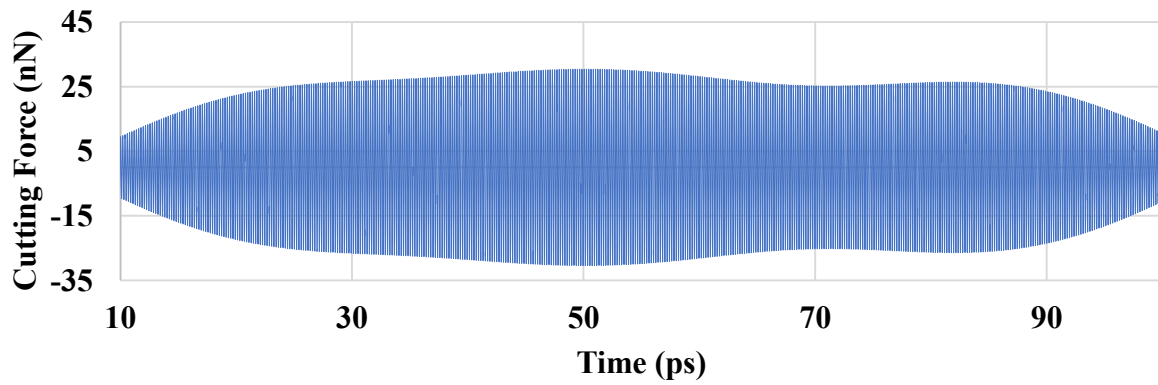
در ادامه آنالیز واریانس پارامترهای فرایند نانو شخم زنی در جدول ۶ ارائه گردیده است. بنابراین با در نظر گرفتن احتمال ۱۰ درصد، چون مقادیر  $P$  کمتر از ۰/۱ می باشد، پارامترهای انتخابی برای بررسی فرایند معنی دار می باشند.

## ۵- نتیجه گیری

کیفیت سطح در تولید قطعات در مقیاس نانومتر از اهمیت بالایی برخوردار است. در فرایندهای نانو براده برداری با کاهش نیروی براده برداری نیز می توان به صافی سطح بهتری دست پیدا کرد. همچنین کاهش نیرو موجب کاهش تنش های پسماند در محل براده برداری می شود و با کاهش نیروی براده برداری، توان لازم



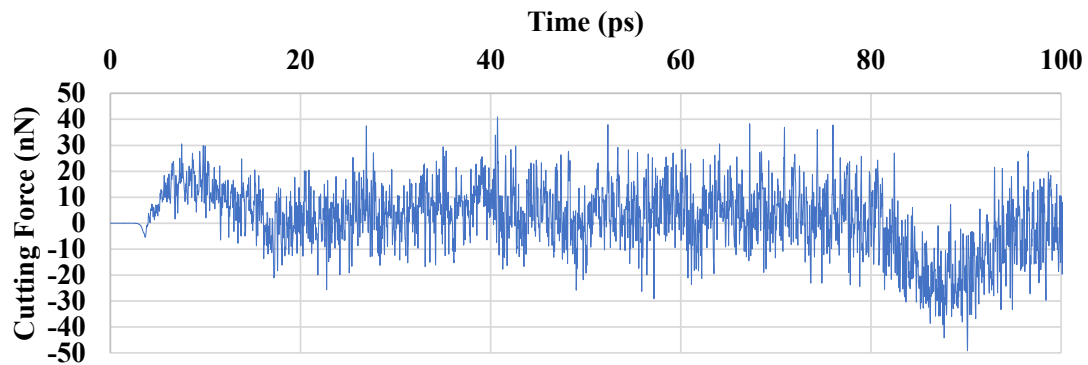
(الف)



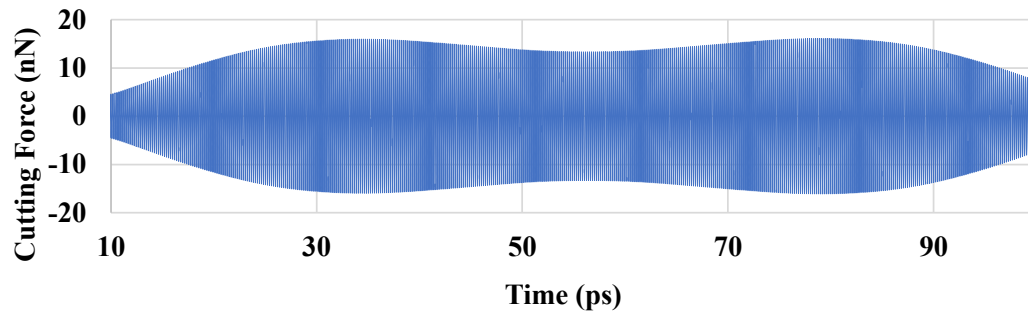
(ب)

شکل ۱۶. نیروی براده‌برداری متناظر با ورودی  $\text{DOC}=2.5 \text{ \AA}$ ،  $\omega=50 \text{ KHz}$ ،  $R=0.2 \text{ \AA}$  (الف) نمودار اصلی، (ب) نمودار فیلتر شده براساس فرکانس غالب

Fig. 16. Cutting force corresponding to input parameters  $\text{DOC}=2.5 \text{ \AA}$ ،  $\omega=50 \text{ KHz}$ ،  $R=0.2 \text{ \AA}$ ; a) Original graph, b) Filtered graph based on dominant frequency



(الف)



(ب)

شکل ۱۷. نیروی براده برداری متناظر با ورودی  $DOC=2.5 \text{ \AA}$ ,  $\omega=50 \text{ KHz}$ ,  $R=0.1 \text{ \AA}$ ؛ (الف) نمودار اصلی، (ب) نمودار فیلتر شده براساس فرکانس غالب

Fig. 17. Cutting force corresponding to input parameters  $DOC=2.5 \text{ \AA}$ ,  $\omega=50 \text{ KHz}$ ,  $R=0.1 \text{ \AA}$ ; a) Original graph, b) Filtered graph based on dominant frequency

جدول ۶. جدول آنالیز واریانس

Table 6. Analysis of variance table

مقدار P	مقدار F	میانگین مربع تعدیلی	مجموع مربع تعدیلی	مجموع مربع متوالی	درجه آزادی	مرجع
۰/۰۲۶	۳۷/۵۸	۱۵۵/۲۱۹	۳۱۰/۴۳۸	۳۱۰/۴۳۸	۲	دامنه نوسان ابزار
۰/۰۷۴	۱۰/۶۵	۴۲/۹۵۹	۹۸/۹۱۹	۹۸/۹۱۹	۲	فرکانس نوسان ابزار
۰/۰۶۵	۱۴/۳۵	۵۹/۲۵۸	۱۱۸/۵۱۶	۱۱۸/۵۱۶	۲	عمق براده برداری
		۴/۱۳۰	۸/۲۶۱	۸/۲۶۱	۲	خطای باقیمانده
				۵۲۶/۱۳۴	۸	مجموع

diamond turning process in terms of ultra-precision optical surface roughness, *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 106 (2020) 2167-2187.

- [11] Z.-C. Lin, Z.-D. Chen, J.-C. Huang, Establishment of a cutting force model and study of the stress-strain distribution in nano-scale copper material orthogonal cutting, *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 33 (2007) 425-435.
- [12] V.P. Astakhov, J.P. Davim, *Machining: fundamentals and recent advances*, Ecological machining: near-dry machining. Springer, Berlin, (2008).
- [13] <https://www.sciencedirect.com/topics/materials-science/taguchi-method>.
- [14] A. Panda, A.K. Sahoo, A.K. Rout, Investigations on surface quality characteristics with multi-response parametric optimization and correlations, *Alexandria Engineering Journal*, 55(2) (2016) 1625-1633.
- [15] Y.D. Yan, W.T. Liu, Z.J. Hu, X.S. Zhao, J.C. Yan, Effect of Sample Materials on the AFM Tip-Based Dynamic Ploughing Process, *Advanced Materials Research*, 314 (2011) 492-496.
- [16] W. Liu, Y. Yan, Z. Hu, X. Zhao, J. Yan, S. Dong, Study on the nano machining process with a vibrating AFM tip on the polymer surface, *Applied Surface Science*, 258(7) (2012) 2620-2626.
- [17] M. Lai, X. Zhang, F. Fang, Y. Wang, M. Feng, W. Tian, Study on nanometric cutting of germanium by molecular dynamics simulation, *Nanoscale research letters*, 8 (2013) 1-10.
- [18] 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) (2010) 7160-7165.
- [19] X. Jin, W. Unertl, Submicrometer modification of polymer surfaces with a surface force microscope, *Applied physics letters*, 61(6) (1992) 657-659.
- [20] Y. He, Y. Geng, Y. Yan, X. Luo, Fabrication of nanoscale pits with high throughput on polymer thin film using afm tip-based dynamic plowing lithography, *Nanoscale*

و  $\omega = 50$  KHz بدست آمد. نتایج شبیه‌سازی نشان داده است که با بهره‌گیری از این پارامترهای ورودی می‌توان به زبری سطح متوسط  $R_a = 0.91 \text{ \AA}$  و نیروی براده‌برداری  $F = 22/4 \text{ nN}$  دست یافت.

## منابع

- [1] K. Kumar, D. Zindani, N. Kumari, J.P. Davim, *Micro and nano machining of engineering materials*, Springer International Publishing, 10 (2019) 978-973.
- [2] N. Taniguchi, Current status in, and future trends of, ultraprecision machining and ultrafine materials processing, *CIRP annals*, 32(2) (1983) 573-582.
- [3] N. Kawasegi, N. Takano, D. Oka, N. Morita, S. Yamada, K. Kanda, S. Takano, T. Obata, K. Ashida, Nanomachining of Silicon Surface Using Atomic Force Microscope With Diamond Tip, *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 128(3) (2005) 723-729.
- [4] A. Sharma, D. Datta, R. Balasubramaniam, Molecular dynamics simulation to investigate the orientation effects on nanoscale cutting of single crystal copper, *Computational Materials Science*, 153 (2018) 241-250.
- [5] A.O. Oluwajobi, *Nanomachining technology development*, University of Huddersfield, 2012.
- [6] J.P. Davim, M.J. Jackson, *Nano and micromachining*, Wiley Online Library, 2009.
- [7] 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*, 12 (2017) 89-98.
- [8] L.N. Abdulkadir, K. Abou-El-Hossein, A.I. Jumare, M.M. Liman, T.A. Olaniyan, P.B. Odedeyi, Review of molecular dynamics/experimental study of diamond-silicon behavior in nanoscale machining, *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 98 (2018) 317-371.
- [9] L. Chen, A. Ahadi, J. Zhou, J.-E. Ståhl, Modeling effect of surface roughness on nanoindentation tests, *Procedia CIRP*, 8 (2013) 334-339.
- [10] S. Hatefi, K. Abou-El-Hossein, Review of single-point

- modeling at the atomic, meso, and continuum scales, *Computer Physics Communications*, 271 (2022) 108171.
- [31] <https://h2awasm.org/capabilities/lammps-open-source-high-performance-and-high-fidelity-molecular-dynamics-code>.
- [32] E.-c. Jeon, Y.-H. Lee, T.-J. Je, Analysis of size effect of nano scale machining based on normal stress and indentation theories, *Journal of the Korean Society of Mechanical Engineers*, 17(6) (2018) 1-6.
- [33] M.M. Jalili, H. Tavari, Investigation and optimization of parameters affecting surface roughness in single crystal copper nanomachining process using molecular dynamics method, *IJME journal*, 8(10) (2021) 49-60, in Persian.
- [34] J. Zhang, Z. Wang, Y. Yan, T. Sun, Concise review: recent advances in molecular dynamics simulation of nanomachining of metals, *Current Nanoscience*, 12(6) (2016) 653-665.
- [35] J.C. Wang, J.M. Zhang, N. Li, Y.P. Kou, Effect of potential function on molecular dynamics simulation of copper processing, *Key Engineering Materials*, 407 (2009) 368-371.
- [36] A. Oluwajobi, X. Chen, The effect of interatomic potentials on the molecular dynamics simulation of nanometric machining, *International Journal of Automation and Computing*, 8 (2011) 326-332.
- [37] S. Foiles, M. Baskes, M.S. Daw, Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, *Physical review B*, 33(12) (1986) 7983.
- [38] A.P. Markopoulos, I.K. Savvopoulos, N.E. Karkalos, D.E. Manolagos, Molecular dynamics modeling of a single diamond abrasive grain in grinding, *Frontiers of Mechanical Engineering*, 10 (2015) 168-175.
- [39] Q. Pei, C. Lu, F. Fang, H. Wu, Nanometric cutting of copper: A molecular dynamics study, *Computational materials science*, 37(4) (2006) 434-441.
- [40] 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, *Research Letters*, 12 (2017) 1-11.
- [21] G. Xiao, Y. He, Y. Geng, Y. Yan, M. Ren, Molecular dynamics and experimental study on comparison between static and dynamic ploughing lithography of single crystal copper, *Applied Surface Science*, 463 (2019) 96-104.
- [22] H. Liu, Y. Guo, D. Li, J. Wang, Material removal mechanism of FCC single-crystalline materials at nano-scales: Chip removal & ploughing, *Journal of Materials Processing Technology*, 294 (2021) 117106.
- [23] Y. Yan, Y. He, G. Xiao, Y. Geng, M. Ren, Effects of diamond tip orientation on the dynamic ploughing lithography of single crystal copper, *Precision Engineering*, 57 (2019) 127-136.
- [24] S. Baqain, Investigations into AFM-tip based vibration-assisted nanomachining, Cardiff University, 2022.
- [25] P. Zhang, X. Li, J. Zhang, Y. Zhang, X. Huang, G. Ye, Study on Chip Formation Mechanism of Single Crystal Copper Using Molecular Dynamics Simulations, *Nanoscale Research Letters*, 17(1) (2022) 91.
- [26] H. Li, X. Peng, C. Guan, H. Hu, Molecular dynamics simulation of the nano-cutting mechanism of a high-phosphorus NiP coating, *Journal of Materials Research and Technology*, 24 (2023) 8109-8120.
- [27] J. Wang, Y. Geng, Z. Li, Y. Yan, X. Luo, P. Fan, Study on the vertical ultrasonic vibration-assisted nanomachining process on single-crystal silicon, *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 144(4) (2022) 041013.
- [28] A.R. Norouzi, M. Tahmasebipour, Effect of AFM Cantilever Geometry on the DPL Nanomachining process, *ADMT Journal*, 9(4) (2016) 75-80.
- [29] M.K. Moutlana, S. Adali, Fundamental frequencies of a nano beam used for atomic force microscopy (AFM) in tapping mode, *MRS Advances*, 3(42-43) (2018) 2617-2626.
- [30] A.P. Thompson, H.M. Aktulga, R. Berger, D.S. Bolintineanu, W.M. Brown, P.S. Crozier, P.J. in't Veld, A. Kohlmeyer, S.G. Moore, T.D. Nguyen, LAMMPS-a flexible simulation tool for particle-based materials



Micromachines, 9(8) (2018) 386.

[41] J. Stufken, Taguchi Methods: A Hands-On Approach, in, Taylor & Francis, 1994.

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

*H. Tavari, M. M. Jalili, Simulation and optimization of surface roughness and cutting force in dynamic ploughing process of single crystal copper using molecular dynamics method , Amirkabir J. Mech Eng., 55(12) (2024) 1443-1464.*

DOI: [10.22060/mej.2024.22666.7657](https://doi.org/10.22060/mej.2024.22666.7657)



