



تأسیس ۱۳۰۷

دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی
دانشکده مهندسی مکانیک

بسمه تعالی

رساله دکتری:

شبیه‌سازی فرایند ماشینکاری نانومتری و مطالعه اثر عیوب کریستالی با روش دینامیک مولکولی

دانشجو: سید وحید حسینی

استاد راهنما: دکتر مهرداد وحدتی


شهریور ۹۱

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

تقدیم به همسفرم

همسر مهربان و صبورم

به پاس سالهای همراهی

شماره: تاریخ:	تأییدیه هیات داوران	 تأسیس ۱۳۰۷ دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی
------------------	----------------------------	---

هیات داوران پس از مطالعه رساله و شرکت در جلسه دفاع از رساله تحت عنوان: شبیه‌سازی فرایند ماشینکاری نانومتری و مطالعه اثر عیوب کریستالی با روش دینامیک مولکولی توسط آقای سید وحید حسینی صحت و کفایت تحقیق انجام شده را برای اخذ درجه دکتری در رشته مهندسی مکانیک گرایش ساخت و تولید با رتبه عالی در تاریخ ۹۱/۶/۲۹ مورد تأیید قرار دادند.

امضاء استاد راهنمای اول: آقای دکتر مهرداد وحدتی

امضاء استاد ممتحن خارجی: آقای دکتر محمود موسوی مشهدی

امضاء استاد ممتحن خارجی: آقای دکتر محمدرضا موحدی

امضاء استاد ممتحن داخلی: آقای دکتر علی شکوه‌فر

امضاء استاد ممتحن داخلی: آقای دکتر مجید قریشی


امضاء نماینده تحصیلات تکمیلی: آقای دکتر سید علی اکبر موسویان

تاریخ: ۱۳۹۱/۶/۳۰	اظهار نامه دانشجو	 <p>تاسیس ۱۳۰۷ دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی</p>
------------------	-------------------	--

اینجانب سید وحید حسینی دانشجوی دکتری رشته مهندسی مکانیک گرایش ساخت و تولید دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی گواهی می‌نمایم که تحقیقات ارائه شده در پایان‌نامه با عنوان "شبیه‌سازی فرایند ماشینکاری نانومتری و مطالعه اثر عیوب کریستالی با روش دینامیک مولکولی" با راهنمایی استاد محترم جناب آقای دکتر مهرداد وحدتی، توسط شخص اینجانب انجام شده و صحت و اصالت مطالب نگارش شده در این پایان‌نامه تاکنون برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی توسط اینجانب یا فرد دیگری در هیچ جا ارائه نشده است و در تدوین پایان‌نامه چارچوب (فرمت) مصوب دانشگاه را بطور کامل رعایت کرده‌ام.

امضا دانشجو: سید وحید حسینی

تاریخ: ۱۳۹۱/۶/۳۰

تاریخ: ۱۳۹۱/۶/۳۰	حق طبع و نشر و مالکیت نتایج	 <p>تاسیس ۱۳۰۷ دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی</p>
------------------	-----------------------------	--

- ۱- حق چاپ و تکثیر این پایان نامه متعلق به نویسنده آن می باشد. هرگونه کپی برداری بصورت کل پایان نامه یا بخشی از آن تنها با موافقت نویسنده یا کتابخانه دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی مجاز می باشد.
ضمناً متن این صفحه نیز باید در نسخه تکثیر شده وجود داشته باشد.
- ۲- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی می باشد و بدون اجازه کتبی دانشگاه به شخص ثالث قابل واگذاری نیست.
همچنین استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مراجع مجاز نمی باشد.

خدای را سپاس می‌گوییم که در دوران تحصیل خود از نعمت اخلاق، تجربه و دانش استاد گرامی دکتر مهرداد وحدتی بهره‌های فراوان بردم و آرزوی موفقیت در تمامی مراحل زندگی ایشان را از خداوند منان خواستارم.

چکیده

امروزه فرایند ماشینکاری نانومتری در صنایع مختلف کاربرد فراوانی پیدا کرده است. هدف از ماشینکاری نانومتری، رسیدن به کیفیت سطح بسیار بالا (در حد چند نانومتر) و دقت فرم بالا با حداقل خرابی در سطح ماشینکاری شده و ریزساختار قطعه است. عملیات ماشینکاری نانومتری برای این سطوح توسط ماشین‌ابزارهای فوق دقیق با استفاده از ابزار الماس تک کریستالی بر روی بدنه‌ای که دارای دقت بسیار بالا و صلبیت مناسب است، با عمق براده‌برداری نانومتری انجام می‌پذیرد. با کم شدن عمق براده‌برداری تا ضخامت چند لایه اتمی، امکان فهم مکانیزم براده‌برداری در ابعاد نانو با استفاده از روش‌های آزمایشگاهی بسیار سخت و هزینه‌بر است. امروزه روش جایگزین محاسباتی دینامیک مولکولی برای فهم بهتر پدیده براده‌برداری در ابعاد نانو کاربرد زیادی پیدا کرده است.

این رساله در بخش اول، به شبیه‌سازی فرایند ماشینکاری نانومتری بر روی تک کریستال مس با ابزار الماس تک کریستال می‌پردازد. مدل‌ها و الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانوبرش ارائه می‌شود و تاثیر انتخاب پارامترهای محاسباتی مورد بررسی قرار می‌گیرد. نتایج نشان می‌دهد که انتخاب تابع پتانسیل بعنوان مهمترین هسته شبیه‌سازی تاثیر قابل توجهی بر روی مکانیزم برش و نیروهای وارد بر ابزار می‌گذارد و در نهایت بدلیل دقت و قابلیت‌های بالا، تابع پتانسیل فلزی EAM انتخاب می‌شود. نتایج محاسبه نیروی ویژه برش، انرژی ویژه برش و زاویه نیروی ابزار نسبت به افق با نتایج تجربی و عددی تطابق قابل قبولی دارد. در بخش دوم تاثیر برخی از پارامترهای فرایند ماشینکاری نانومتری مورد مطالعه قرار می‌گیرد. نتایج نشان می‌دهد که سرعت برش تاثیر کمی بر نیروهای وارد بر ابزار می‌گذارد بطوریکه افزایش ۳۰٪ سرعت، تنها باعث افزایش ۲۲/۴٪ نیروهای وارد بر ابزار می‌شود. ولی توزیع نابجایی‌ها و دما در ناحیه براده وابستگی زیادی به سرعت برش دارد. شعاع انحنای نوک ابزار و نسبت عمق برش به شعاع انحنای ابزار یکی از عوامل تعیین کننده در مکانیزم برش و فرایند نانوماشینکاری است که بر روی نیروهای وارد بر ابزار، نقطه ایستا و عمق موثر برش، درجه حرارت، تنش‌های اعمالی، تنشهای پس‌ماند و کیفیت سطح قطعه کار تاثیرگذار است و هرچه نسبت عمق برش به شعاع انحنای ابزار کم باشد، عمق موثر برش کمتر، تنشهای و نیروهای اعمالی بیشتر و کیفیت سطح قطعه کار پایین‌تر خواهد بود.

در بخش سوم تاثیر وجود عیب حجمی حفره نانومتری در قطعه کار تک کریستالی در فرایند برش نانومتری مورد مطالعه قرار می‌گیرد. نتایج نشان می‌دهد که وجود عیب حفره در قطعه کار باعث افزایش ناحیه تغییر شکل پلاستیک می‌شود. با نزدیک شدن عیب حفره به لایه‌های نزدیک سطح و بزرگ شدن آن، نیروهای وارد بر ابزار بخصوص در راستای عمودی به میزان قابل توجهی کاهش می‌یابند. مکانیزم تغییرشکل نانوحفره‌های زیر سطحی فرایند ماشینکاری نانومتری، فشردگی و مچالگی در اثر فشارهای هیدرواستاتیکی زیاد می‌باشد و حفره‌های سطحی در طی فرایند برش از بین می‌روند. نهایتاً وجود نانوحفره سطحی و زیر سطحی تاثیر قابل توجهی بر روی کیفیت سطح ماشینکاری می‌گذارد. نهایتاً در بخش چهارم تاثیر وجود عیب صفحه‌ای مرزدانه در قطعه کار مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. نتایج نشان می‌دهد که تفاوت در جهت کریستالی دانه‌ها می‌تواند تاثیر زیادی بر روی مکانیزم برش، نیروهای وارد بر ابزار و کیفیت سطح قطعه کار بگذارد. مرزدانه‌ها دارای انرژی پتانسیل زیادی هستند. در صورتیکه مرزدانه در جهت حرکت ابزار باشد، نیروهای عمودی ابزار با افزایش ضخامت دانه بالایی بر خلاف نیروهای برش تغییر زیادی می‌کند و مرزدانه باعث گسترش بیشتر عیوب کریستالی در قطعه کار می‌شود ولی اجازه نفوذ نابجایی‌ها را به دانه پایینی نمی‌دهد. اگر دانه در راستای عمود بر حرکت ابزار باشد، در حین براده‌برداری ابزار دچار تغییرات نیرویی شدید می‌شود که می‌تواند بر کاهش عمر ابزار تاثیرگذار باشد. در نهایت وجود مرزدانه بخصوص اگر به سطح ابزار نفوذ کند باعث کاهش کیفیت سطح قطعه کار می‌شود.

کلمات کلیدی: ماشینکاری نانومتری، دینامیک مولکولی، قطعه کار مس، هندسه ابزار، عیوب کریستالی.

فهرست مطالب

مقدمه	۱
فصل ۱ - فرایند ماشینکاری نانومتری	۳
۱-۱ - مقدمه	۴
۲-۱ - معرفی فرایند ماشینکاری نانومتری	۵
۱-۲-۱ - کاربرد ماشینکاری نانومتری	۶
۳-۱ - عوامل تاثیرگذار در کیفیت ماشین کاری نانومتری	۹
۱-۳-۱ - اجزا ماشین ابزار فوق دقیق	۹
۲-۳-۱ - شرایط محیطی	۱۲
۳-۳-۱ - روشهای اندازه‌گیری	۱۲
۴-۳-۱ - ابزار برش	۱۴
۵-۳-۱ - قطعه کار	۱۶
۴-۱ - مکانیک برش در فرایند ماشینکاری نانومتری	۱۹
۱-۴-۱ - زاویه برش و اثر جهت کریستالی دانه	۲۰
۲-۴-۱ - مکانیزم تغییر شکل پلاستیک	۲۱
۳-۴-۱ - رفتار مواد قطعه کار در فرایند ماشینکاری نانومتری	۲۴
فصل ۲ - شبیه‌سازی دینامیک مولکولی	۲۶
۱-۲ - مقدمه	۲۷
۲-۲ - دینامیک کلاسیک	۲۷
۱-۲-۲ - دینامیک نیوتنی	۲۷
۲-۲-۲ - دینامیک همیلتونی	۲۸

- ۳-۲ - میدان‌های نیرو ۳۹
- ۳-۲-۱ - اجزا تابع پتانسیل ۳۰
- ۳-۲-۲ - نیروهای بین اتمی در دینامیک مولکولی ۳۳
- ۴-۲ - توابع پتانسیل استفاده شده در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۳۳
- ۴-۲-۱ - تابع پتانسیل لnard-جونز ۳۴
- ۴-۲-۲ - تابع پتانسیل مورس ۳۵
- ۴-۲-۳ - تابع پتانسیل فلزها ۳۶
- ۵-۲ - شرایط مرزی در دینامیک مولکولی ۳۹
- ۵-۲-۱ - شرط مرزی متناوب ۴۰
- ۵-۲-۲ - شرایط مرزی دیگر ۴۱
- ۶-۲ - پیاده‌سازی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۴۱
- ۶-۲-۱ - شعاع قطع اثر پتانسیل ۴۲
- ۶-۲-۲ - لیست همسایه‌های ناپیوندی ۴۳
- ۶-۲-۳ - الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۴۴
- ۶-۲-۴ - انتگرالگیری از معادله‌های حرکت نیوتن ۴۵
- ۶-۲-۵ - انتخاب شرایط اولیه ۴۷
- ۶-۲-۶ - انتخاب گام زمانی ۴۸
- فصل ۳ - شبیه‌سازی فرایند ماشینکاری نانومتری با روش دینامیک مولکولی ۴۹
- ۳-۱ - اهمیت شبیه‌سازی فرایند ماشینکاری نانومتری با روش دینامیک مولکولی ۵۰
- ۳-۲ - پیشینه تحقیقات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند ماشینکاری نانومتری ۵۲
- ۳-۳ - محیط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و معرفی بسته نرم‌افزاری ۵۷
- ۴-۳ - الگوریتم شبیه‌سازی فرایند ماشینکاری نانومتری ۵۹
- ۵-۳ - شبیه‌سازی سه‌بعدی فرایند ماشینکاری نانومتری تک کریستال مسی ۶۰
- ۵-۳-۱ - معرفی مدل ۶۰
- ۵-۳-۲ - شرایط مرزی و اولیه ۶۲

- ۶۲ ۳-۵-۳ - شرط مرزی حرارتی
- ۶۴ ۶-۳ - گام زمانی و تعداد اتم
- ۶۶ ۳-۶-۱ - نیروهای وارد بر ابزار
- ۶۸ ۳-۶-۲ - تغییر شکل اتمی قطعه کار
- ۶۹ ۳-۶-۳ - تغییرات دمایی قطعه کار
- ۷۱ ۷-۳ - تاثیر تابع پتانسیل بین اتمی بر فرآیند ماشینکاری نانومتری
- ۷۳ ۳-۷-۱ - توزیع درجه حرارت در ابزار
- ۷۴ ۳-۷-۲ - تغییر شکل اتمی
- ۷۵ ۳-۷-۳ - توزیع عیوب کریستالی
- ۷۷ ۳-۷-۴ - نیروهای وارد بر ابزار
- ۷۸ ۳-۸ - مقایسه نتایج عددی با نتایج تجربی
- ۸۳ ۳-۹ - جمع‌بندی
- ۸۴ فصل ۴ - بررسی عوامل تاثیرگذار در ماشینکاری قطعه کار های تک کریستال
- ۸۵ ۴-۱ - مقدمه
- ۸۸ ۴-۲ - اثر سرعت برش در فرایند ماشینکاری نانومتری
- ۹۰ ۴-۲-۱ - نیروهای وارد بر ابزار
- ۹۳ ۴-۲-۲ - تولید حرارت در فرایند برش نانومتری
- ۹۶ ۴-۲-۳ - دما در قطعه کار
- ۹۸ ۴-۲-۴ - تولید عیوب کریستالی در قطعه کار
- ۱۰۰ ۴-۳ - تاثیر شعاع انحنای نوک ابزار بر کیفیت سطح ماشینکاری
- ۱۰۲ ۴-۳-۱ - تاریخچه دما در طول فرایند نانوبرش
- ۱۰۲ ۴-۳-۲ - تنش هیدرواستاتیک
- ۱۰۳ ۴-۳-۳ - تنش پس ماند
- ۱۰۵ ۴-۳-۴ - توزیع عیوب نابجایی‌ها در قطعه کار
- ۱۰۶ ۴-۳-۵ - زبری سطح

- ۴-۴ - تاثیر شعاع انحنای نوک ابزار بر مشخصه‌های تماس ۱۰۷
- ۴-۴-۱ - مکانیزم تولید براده ۱۰۹
- ۴-۴-۲ - موقعیت نقطه ایستا ۱۱۰
- ۴-۴-۳ - تاثیر هندسه ابزار بر نیروی ابزار ۱۱۲
- ۴-۴-۴ - توزیع تنش هیدرواستاتیک ۱۱۴
- ۴-۴-۵ - توزیع درجه حرارت ۱۱۵
- ۴-۴-۶ - زاویه موثر حمله ۱۱۵
- ۵-۴ - اثر عمق برش در فرایند ماشینکاری نانومتری ۱۱۶
- ۴-۵-۱ - موقعیت نقطه ایستا ۱۱۷
- ۴-۵-۲ - حداقل عمق براده‌برداری ۱۱۸
- ۴-۵-۳ - تنش هیدرواستاتیک ۱۱۸
- ۴-۵-۴ - نیروهای وارد بر ابزار ۱۱۹
- ۴-۵-۵ - نسبت نیروی عمود به برش در فرایند ماشینکاری ۱۲۰
- ۴-۶ - جمع‌بندی ۱۲۱
- فصل ۵ - تاثیر حفره نانومتری قطعه کار تک کریستالی در فرایند ماشینکاری ۱۲۵
- ۵-۱ - مقدمه ۱۲۶
- ۵-۲ - تاثیر وجود حفره در قطعه کار بر روی فرایند ماشینکاری ۱۲۷
- ۵-۲-۱ - مدل محاسباتی ۱۲۷
- ۵-۲-۲ - نیروهای وارد بر ابزار ۱۲۹
- ۵-۲-۳ - تنش هیدرواستاتیک ۱۳۱
- ۵-۲-۴ - مکانیزم تغییر شکل اتمی قطعه کار ۱۳۲
- ۵-۲-۵ - مکانیزم مچالگی نانوحفره در فرایند برش نانومتری ۱۳۴
- ۵-۳ - تاثیر اندازه نانوحفره بر روی فرایند ماشینکاری ۱۳۵
- ۵-۳-۱ - تاثیر بزرگی حفره بر روی نیروی وارد بر ابزار ۱۳۷
- ۵-۳-۲ - تاثیر بزرگی بر روی مکانیزم تغییر شکل نانوحفره ۱۴۰

- ۱۴۱-۳-۳-۵ - تاثیر بزرگی نانوحفره بر روی تغییر مکان اتمی ۱۴۱
- ۱۴۱-۳-۴-۵ - تاثیر بزرگی حفره بر تنشهای قطعه کار ۱۴۱
- ۱۴۳-۴-۵ - تاثیر عمق حفره بر روی فرآیند ماشینکاری ۱۴۳
- ۱۴۵-۴-۱-۵ - اثر ارتفاع حفره نانومتری بر روی تغییر مکان اتمی ۱۴۵
- ۱۴۶-۴-۲-۵ - اثر عمق حفره بر روی مشخصه‌های ماشینکاری نانومتری ۱۴۶
- ۱۴۸-۵-۵ - تاثیر حفره سطحی و زیر سطحی بر روی کیفیت سطح قطعه کار ۱۴۸
- ۱۵۰-۵-۱-۵ - تغییرات انرژی در قطعه کار ۱۵۰
- ۱۵۳-۵-۲-۵ - مکانیزم تولید براده ۱۵۳
- ۱۵۴-۵-۳-۵ - میدان تنش در طول فرایند نانو برش ۱۵۴
- ۱۵۵-۵-۴-۵ - تنشهای پس ماند در قطعه کار ۱۵۵
- ۱۵۷-۵-۵-۵ - تولید و استهلاک عیوب کریستالی در قطعه کار ۱۵۷
- ۱۵۹-۵-۶-۵ - صافی سطح ۱۵۹
- ۱۶۱-۵-۶-۵ - جمع بندی ۱۶۱
- فصل ۶ - تاثیر قطعه کار چند کریستالی در فرایند ماشینکاری نانومتری ۱۶۴
- ۱-۶-۱ - مقدمه ۱۶۵
- ۲-۶-۲ - تاثیر جهت کریستالی قطعه کار بر روی فرایند برش ۱۶۶
- ۱-۲-۶-۱ - نیروهای وارد بر ابزار ۱۶۸
- ۲-۲-۶-۲ - تغییر شکل اتمی ۱۷۱
- ۳-۶-۳ - مدل سازی قطعه کار دو کریستالی و مرزدانه ۱۷۲
- ۱-۳-۶-۱ - پایداری مرزدانه ۱۷۳
- ۲-۳-۶-۲ - انرژی مرزدانه ۱۷۴
- ۴-۶-۴ - تاثیر مرزدانه در جهت برش در فرایند ماشینکاری نانومتری ۱۷۶
- ۱-۴-۶-۱ - مرزدانه قبل از فرایند برش ۱۷۸
- ۲-۴-۶-۲ - مکانیزم تغییر شکل قطعه کار دو کریستالی ۱۸۰
- ۳-۴-۶-۳ - نیروهای وارد بر ابزار ۱۸۲

- ۱۸۷ ۵-۶ - تاثیر مرزدانه در جهت عمود بر حرکت ابزار در فرایند ماشینکاری
- ۱۸۸ ۱-۵-۶ - مکانیزم تولید براده
- ۱۹۰ ۲-۵-۶ - نیروهای وارد بر ابزار
- ۱۹۲ ۳-۵-۶ - عیوب کریستالی در قطعه کار
- ۱۹۴ ۶-۶ - تاثیر وجود مرزدانه در قطعه کار بر کیفیت سطح ماشینکاری
- ۱۹۶ ۱-۶-۶ - عیوب باقی مانده در قطعه کار
- ۱۹۸ ۲-۶-۶ - کیفیت سطح ماشینکاری
- ۲۰۰ ۷-۶ - جمع بندی
- ۲۰۴ فصل ۷ - نتیجه گیری و پیشنهادات
- ۲۰۵ ۱-۷ - نتیجه گیری
- ۲۰۵ ۱-۱-۷ - شبیه‌سازی فرایند ماشینکاری نانومتری با روش دینامیک مولکولی
- ۲۰۵ ۲-۱-۷ - بررسی عوامل تاثیرگذار در ماشینکاری قطعه کار های تک کریستال
- ۲۰۷ ۳-۱-۷ - تاثیر حفره نانومتری قطعه کار تک کریستالی در فرایند ماشینکاری
- ۲۰۸ ۴-۱-۷ - تاثیر قطعه کار چند کریستالی در فرایند ماشینکاری نانومتری
- ۲۱۰ ۲-۷ - پیشنهادات
- ۲۱۲ لیست مقالات ارائه شده در مجلات علمی و پژوهشی
- ۲۱۳ لیست مقالات ارائه شده در کنفرانسهای بین المللی
- ۲۱۴ منابع و مراجع
- ۲۲۰ پیوست الف: کد برنامه‌های دینامیک مولکولی در نرم افزار LAMMPS

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱- ماشینکاری نانومتری با استفاده از ابزار الماس تک کریستال..... ۵
- شکل ۲-۱- روند افزایش دقت در انواع مراحل ماشینکاری [4]..... ۶
- شکل ۳-۱- نمونه‌ای از کاربردهای ماشینکاری فوق دقیق در صنایع مختلف..... ۷
- شکل ۴-۱- نمونه‌هایی از دقت و کیفیت سطح قطعات نانو ماشینکاری شده..... ۸
- شکل ۵-۱- نمایی از ماشین ابزار فوق دقیق..... ۹
- شکل ۶-۱- نمایی از کله گی با سیستم یاتاقانهای هوایی..... ۹
- شکل ۷-۱- نمونه‌ای از راهنمای آبرواستاتیکی..... ۱۰
- شکل ۸-۱- اندازه‌گیری موقعیت ابزار..... ۱۰
- شکل ۹-۱- پایه گرانیتهی برای ایزوله کردن ارتعاشات..... ۱۱
- شکل ۱۰-۱- نمونه‌ای از گیره خلائی..... ۱۱
- شکل ۱۱-۱- نمونه‌ای از روشهای اندازه‌گیری سطح بصورت تماسی..... ۱۳
- شکل ۱۲-۱- اندازه‌گیری غیر تماسی..... ۱۴
- شکل ۱۳-۱- نمونه‌ای ابزار الماس تک کریستال..... ۱۴
- شکل ۱۴-۱- انواع هندسه سر ابزار الماس تک کریستال..... ۱۵
- شکل ۱۵-۱- عکس میکروسکوپی از براده موجی شکل از مواد مسی [13]..... ۱۷
- شکل ۱۶-۱- تاثیر جهت کریستالی بر نیروی وارد بر ابزار در تک کریستال برنج [14]..... ۱۸
- شکل ۱۷-۱- تاثیر جهت کریستالی بر کیفیت سطح در تک کریستال برنج [14]..... ۱۹
- شکل ۱۸-۱- مقایسه مکانیزم براده‌برداری در انواع ماشینکاری [4]..... ۲۰
- شکل ۱۹-۱- تاثیر جهت کریستالی در زاویه برش [14]..... ۲۱
- شکل ۲۰-۱- تغییر شکل پلاستیک براده در فرایند ماشینکاری نانومتری در فلزات..... ۲۲
- شکل ۲۱-۱- ساختار لایه‌لایه‌ای سطح آزاد براده [17]..... ۲۳
- شکل ۲۲-۱- تاثیر جهت کریستالی در چگونگی لغزش در ناحیه تغییر شکل اولیه [1]..... ۲۳
- شکل ۲۳-۱- نمونه‌ای از عیوب مختلف در قطعه کار در فرایند ماشینکاری نانومتری [1]..... ۲۴
- شکل ۱-۲- موقعیت، سرعت، شتاب و نیروی وارد بر مولکول در دستگاه کارترین [21]..... ۲۸
- شکل ۲-۲- بعضی از انرژیهای درون مولکولی [21]..... ۳۰

- شکل ۲-۳- نمودار تابع پتانسیل لنارد جونز و نیروی برهم‌کنش بین دو اتم [19]..... ۳۴
- شکل ۲-۴- نمودار تابع پتانسیل مورس بر حسب فاصله بین اتمی بین اتم‌های مس و بین اتم‌های کربن و مس [21]..... ۳۵
- شکل ۲-۵- نمودار پیوند فلزی..... ۳۶
- شکل ۲-۶- نمودار چگالی الکترونی بین دو اتم بر حسب فاصله آنها [25]..... ۳۸
- شکل ۲-۷- نمودار انرژی نشان‌دهنده اتم بر حسب چگالی الکترونی پس زمینه [24]..... ۳۹
- شکل ۲-۸- نمودار شارژ الکترونی موثر بر حسب فاصله اتمی [24]..... ۳۹
- شکل ۲-۹- نمایی از تفاوت حرکت مولکولهای مرز و مولکولهای داخل جسم..... ۴۰
- شکل ۲-۱۰- نمایی از چگونگی شرط مرزی متناوب..... ۴۰
- شکل ۲-۱۱- قرارگیری اتم‌ها در شعاع I_c و I_L ۴۳
- شکل ۲-۱۲- کلیت الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی..... ۴۵
- شکل ۲-۱۳- انرژی جنبشی و پتانسیل بر حسب گام زمانی..... ۴۶
- شکل ۲-۱۴- انرژی کل بر حسب گام زمانی..... ۴۶
- شکل ۲-۱۵- ارتباط خطای کل شبیه‌سازی با بزرگی گام زمانی [19]..... ۴۸
- شکل ۳-۱- الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند ماشینکاری نانومتری..... ۵۹
- شکل ۳-۲- مدل شماتیکی فرایند ماشینکاری نانومتری و هندسه ابزار..... ۶۰
- شکل ۳-۳- چگونگی اعمال شرط مرزی دما ثابت در فرایند براده‌برداری [46]..... ۶۳
- شکل ۳-۴- مدل اتمی فرایند ماشینکاری نانومتری..... ۶۳
- شکل ۳-۵- نسبت اتم‌های سطحی به کل اتم‌ها در شبکه کریستالی FCC [57]..... ۶۴
- شکل ۳-۶- ارتباط ابعاد قطعه کار با درصد اتم‌های سطحی در قطعه کار..... ۶۵
- شکل ۳-۷- مقایسه نیروهای برشی و عمودی وارد بر ابزار در قطعه کارها با ابعاد متفاوت..... ۶۷
- شکل ۳-۸- تغییرات نیروهای وارد بر ابزار بر حسب تعداد اتم‌های قطعه کار..... ۶۸
- شکل ۳-۹- تاثیر ابعاد قطعه کار بر تغییر شکل اتمی در نواحی تولید براده..... ۶۹
- شکل ۳-۱۰- تغییرات متوسط درجه حرارت قطعه کار بر حسب تعداد اتم‌های انتخاب شده..... ۶۹
- شکل ۳-۱۱- توزیع درجه حرارت در قطعه کارها با ابعاد مختلف..... ۷۱
- شکل ۳-۱۲- توزیع درجه حرارت در قطعه کار با استفاده از الف) تابع پتانسیل مورس و ب) تابع پتانسیل EAM..... ۷۴

- شکل ۳-۱۳- تغییر شکل اتمی قطعه کار در نواحی اطراف ابزار با تابع پتانسیل مورس (رنگ روشن) و تابع پتانسیل EAM (رنگ تیره)..... ۷۴
- شکل ۳-۱۴- چگونگی توزیع نابجایی‌ها در قطعه کار با استفاده از الف) پتانسیل مورس و ب) پتانسیل EAM..... ۷۶
- شکل ۳-۱۵- مقایسه نیروهای برشی ابزار با استفاده از توابع پتانسیل مختلف ۷۷
- شکل ۳-۱۶- مقایسه نیروهای عمودی ابزار با استفاده از توابع پتانسیل مختلف ۷۷
- شکل ۳-۱۷- نیروی پایدار برشی در فرایند ماشینکاری نانومتری..... ۷۹
- شکل ۳-۱۸- مقایسه نتایج نیروی ویژه با نتایج تجربی و عددی دیگران بر حسب عمق برش ۷۹
- شکل ۳-۱۹- مقایسه نتایج انرژی ویژه برش با نتایج تجربی و عددی دیگران بر حسب نسبت عمق برش به شعاع انحنای ابزار..... ۸۱
- شکل ۳-۲۰- مقایسه نتایج جهت نیروی ابزار با نتایج تجربی و عددی دیگران بر حسب عمقهای برش ۸۲
- شکل ۴-۱- محیط محاسباتی قطعه کار و ابزار..... ۸۹
- شکل ۴-۲- نیروهای وارد بر ابزار در سرعت‌های برش متفاوت ۹۰
- شکل ۴-۳- توزیع فشار در قطعه کار در سرعت‌های مختلف برش..... ۹۲
- شکل ۴-۴- مدل انرژی در ماشینکاری نانومتری..... ۹۳
- شکل ۴-۵- تغییرات انرژی پتانسیل قطعه کار بر حسب طول برش..... ۹۴
- شکل ۴-۶- تغییرات انرژی جنبشی قطعه کار بر حسب طول برش ۹۵
- شکل ۴-۷- تغییرات انرژی کل قطعه کار بر حسب طول برش ۹۵
- شکل ۴-۸- مقایسه بالانس انرژی در قطعه کار در سرعت‌های مختلف ابزار..... ۹۶
- شکل ۴-۹- تاثیر سرعت برش در متوسط درجه حرارت قطعه کار در سرعت‌های مختلف ابزار..... ۹۷
- شکل ۴-۱۰- توزیع دما در قطعه کار در هندسه و سرعت‌های برش مختلف ابزار..... ۹۸
- شکل ۴-۱۱- توزیع نابجایی‌ها و عیوب کریستالی قطعه کار در حین فرایند برش در سرعت‌های مختلف..... ۹۹
- شکل ۴-۱۲- محیط محاسباتی ابزار و قطعه کار..... ۱۰۰
- شکل ۴-۱۳- تغییرات دما قطعه کار بر حسب زمان در طول فرایند ماشینکاری و خنک‌کاری ... ۱۰۲
- شکل ۴-۱۴- توزیع فشار هیدرواستاتیکی در دو شعاع انحنای مختلف ابزار ۱۰۳

- شکل ۴-۱۵- توزیع تنش پس ماند هیدرواستاتیکی در سطح ماشینکاری شده در دو شعاع انحنای مختلف ابزار ۱۰۴
- شکل ۴-۱۶- نمودار تنش هیدرواستاتیکی پس ماند در عمق قطعه کار در دو شعاع انحنای مختلف ابزار ۱۰۴
- شکل ۴-۱۷- مقایسه میزان نابجاییهای باقی مانده در سطح قطعه کار در دو شعاع انحنای مختلف و مقایسه با نتایج تجربی [9] ۱۰۵
- شکل ۴-۱۸- مقایسه کیفیت سطح ماشینکاری شده در دو شعاع انحنای مختلف ابزار ۱۰۶
- شکل ۴-۱۹- شماتیک مدل ماشینکاری نانومتری و شرایط مرزی ۱۰۷
- شکل ۴-۲۰- ابزارهای صلب با شعاع انحنای نوک مختلف ۱۰۸
- شکل ۴-۲۱- مکانیزم تولید براده در چهار نسبت مختلف عمق برش به شعاع انحنای ابزار ۱۰۹
- شکل ۴-۲۲- موقعیت نقطه ایستا در چهار نسبت مختلف عمق برش به شعاع انحنای ابزار ۱۱۱
- شکل ۴-۲۳- نیروهای وارد بر ابزار در چهار نسبت مختلف عمق برش به شعاع انحنای ابزار ۱۱۲
- شکل ۴-۲۴- متوسط نیروهای وارد بر ابزار بر حسب شعاع انحنای ابزار ۱۱۳
- شکل ۴-۲۵- توزیع تنش هیدرواستاتیکی در چهار نسبت مختلف عمق برش به شعاع انحنای ابزار ۱۱۴
- شکل ۴-۲۶- توزیع درجه حرارت در قطعه کارها با شعاع انحنای مختلف ابزار ۱۱۵
- شکل ۴-۲۷- زاویه مثبت و منفی موثر حمله در دو شعاع انحنای ابزار ۱۱۶
- شکل ۴-۲۸- موقعیت ثابت نقطه ایستا در عمقهای برش مختلف ۱۱۷
- شکل ۴-۲۹- مکانیزم انتقالی از لغزش به برش در عمقهای برش کم برای ابزاری با شعاع انحنای ۴/۹ نانومتری ۱۱۸
- شکل ۴-۳۰- تنش هیدرواستاتیکی در عمقهای مختلف برش برای ابزار با شعاع انحنای ۴/۹ نانومتری ۱۱۹
- شکل ۴-۳۱- نمودار متوسط نیروی وارد بر ابزار بر حسب عمق برش برای ابزار با شعاع انحنای ۴/۹ نانومتری ۱۱۹
- شکل ۴-۳۲- مقایسه نسبت نیروی عمود به برش وارد بر ابزار در نسبتهای مختلف عمق به شعاع انحنای ابزار ۱۲۱
- شکل ۵-۱- تاثیر وجود حفره در فرایند ماشینکاری نانومتری ۱۲۶
- شکل ۵-۲- نمایی از مدل محاسباتی به همراه عیب نانوحفره کروی ۱۲۸

- شکل ۳-۵- مقایسه نیروی عمود بر ابزار در قطعه کار با عیب حفره و قطعه کار بدون عیب ۱۳۰
- شکل ۴-۵- مقایسه نیروی برش بر ابزار در قطعه کار با عیب حفره و قطعه کار بدون عیب ۱۳۰
- شکل ۵-۵- پروفیل تنش هیدرواستاتیک در قطعه کار با حفره نانومتری و قطعه کار بدون عیب ۱۳۱
- شکل ۶-۵- مقایسه مکانیزم تولید براده در قطعه کار با/بدون عیب حفره زیرسطحی ۱۳۲
- شکل ۷-۵- مقایسه مکانیزم تولید براده در قطعه کار با/بدون عیب حفره زیرسطحی ۱۳۳
- شکل ۸-۵- مقایسه تغییر مکان اتمی در قطعه کار با/بدون عیب نانوحفره در طول فرایند برش ۱۳۴
- شکل ۹-۵- مکانیزم تغییر شکل حفره زیر سطحی در طول فرایند برش ۱۳۵
- شکل ۱۰-۵- مدل محاسباتی و شماتیک ابعاد نانوحفره ۱۳۶
- شکل ۱۱-۵- نیروهای عمود وارد بر ابزار در طول برش ۱۳۷
- شکل ۱۲-۵- نیروهای برش وارد بر ابزار در طول برش ۱۳۸
- شکل ۱۳-۵- تاثیر ابعاد نانوحفره بر روی نیروهای ابزار ۱۳۹
- شکل ۱۴-۵- تاثیر ابعاد نانوحفره بر روی ضریب اصطکاک ابزار ۱۳۹
- شکل ۱۵-۵- مکانیزم تغییر شکل حفره در قطعه کار با ابعاد مختلف حفره ۱۴۰
- شکل ۱۶-۵- مقایسه تغییر مکان اتمی در قطعه کار با ابعاد مختلف حفره ۱۴۱
- شکل ۱۷-۵- اثر بزرگی حفره بر تنش قطعه کار در جهت عمود بر حرکت ابزار (S_z) ۱۴۲
- شکل ۱۸-۵- اثر بزرگی حفره بر تنش قطعه کار در جهت حرکت ابزار (S_y) ۱۴۳
- شکل ۱۹-۵- مدل هندسی و شرایط مرزی فرایند ماشینکاری نانومتری ۱۴۴
- شکل ۲۰-۵- مقایسه تغییر شکل اتمی در قطعه کار با و بدون عیب حفره ۱۴۵
- شکل ۲۱-۵- متوسط نیروی وارد بر ابزار در قطعه کار بدون حفره و با حفره در ارتفاعهای مختلف ۱۴۶
- شکل ۲۲-۵- تاثیر عمق حفره بر نیروهای وارد بر ابزار نسبت به حالت بدون عیب ۱۴۷
- شکل ۲۳-۵- تاثیر عمق حفره بر مجاله شدن حفره در اثر فرآیند ماشینکاری ۱۴۷
- شکل ۲۴-۵- نمایی از مدل محاسباتی قطعه کارها با عیوب حفره سطحی و زیر سطحی ۱۴۸
- شکل ۲۵-۵- انرژی پتانسیل بر حسب زمان در قطعه کار ۱۵۱
- شکل ۲۶-۵- انرژی جنبشی در قطعه کار بر حسب زمان ۱۵۲
- شکل ۲۷-۵- تغییرات انرژی جنبشی و پتانسیل در انتهای فرایند برش و بعد از خنک شدن قطعه ۱۵۳
- شکل ۲۸-۵- مکانیزم تولید براده در قطعه کار با حفره سطحی و زیر سطحی ۱۵۴

- شکل ۵-۲۹- توزیع تنش هیدرواستاتیک در قطعه کار با عیوب حفره سطحی و زیر سطحی..... ۱۵۵
- شکل ۵-۳۰- نمودار تنش پسماند در راستای حرکت ابزار (S_y) در عمق قطعه کار..... ۱۵۶
- شکل ۵-۳۱- نمودار تنش پسماند در راستای عمود بر حرکت ابزار (S_z) در عمق قطعه کار..... ۱۵۷
- شکل ۵-۳۲- اثر عیوب سطحی و زیر سطحی قطعه کار در تولید عیوب کریستالی در طول فرایند برش..... ۱۵۸
- شکل ۵-۳۳- عیوب کریستالی باقی مانده در قطعه کار بعد از فرایند خنک کاری..... ۱۵۹
- شکل ۵-۳۴- اثر عیوب حفره سطحی و زیر سطحی قطعه کار بر زبری سطح ماشینکاری شده... ۱۶۰
- شکل ۵-۳۵- اثر عیوب حفره سطحی و زیر سطحی قطعه کار بر توپوگرافی سطح ماشینکاری شده..... ۱۶۰
- شکل ۶-۱- حالت‌های مختلف قرارگیری مرزدانه در قطعه کار در حین فرایند ماشینکاری نانومتری..... ۱۶۶
- شکل ۶-۲- مدل محاسباتی..... ۱۶۷
- شکل ۶-۳- جهت کریستالی در قطعه کار..... ۱۶۸
- شکل ۶-۴- نیروهای برشی و عمودی ابزار بر حسب درجه چرخش تک کریستال نسبت به محور [100]..... ۱۶۹
- شکل ۶-۵- نیروی کل وارد بر ابزار بر حسب درجه چرخش تک کریستال نسبت به محور [100]..... ۱۷۰
- شکل ۶-۶- تاثیر جهت کریستالی در تغییر شکل اتمی در قطعه کار..... ۱۷۱
- شکل ۶-۷- انواع مرز دانه با زاویه کم..... ۱۷۲
- شکل ۶-۸- مدل قطعه کار دو کریستالی..... ۱۷۳
- شکل ۶-۹- حرکت اتمی در مرزدانه قبل (سیاه نازک) و بعد (قرمز کلفت) از کمینه سازی انرژی..... ۱۷۴
- شکل ۶-۱۰- انرژی پتانسیل در اتمهای نزدیک مرزدانه قبل و بعد از کمینه سازی انرژی..... ۱۷۴
- شکل ۶-۱۱- مقایسه نتایج محاسبه انرژی مرزدانه با نتایج عددی دیگران [83,84]..... ۱۷۵
- شکل ۶-۱۲- تقارن مرکزی در قطعه کار دو کریستالی با مرزدانه $\Sigma 5(210)$ ۱۷۶
- شکل ۶-۱۳- مدل قطعه کار دو کریستالی با مرزدانه در راستای جهت برش..... ۱۷۷
- شکل ۶-۱۴- مکانیزم نفوذ مرزدانه به سطح آزاد در فاصله 8\AA ۱۷۹
- شکل ۶-۱۵- مرزدانه در ارتفاع‌های مختلف در قطعه کار..... ۱۷۹