

بہ نام خدای کہ در این مردہ  
نہ کیے اسے



دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک  
رساله دکتری فرآوری مواد معدنی

افزایش مقاومت سایشی بار خردکننده و آستر تجهیزات خردایش مواد معدنی با  
تولید یک نانو پوشش مقاوم به سایش به منظور افزایش بهره وری

نگارنده: محمدرضا حیدر طائمه

استاد راهنما:

دکتر محمد کارآموزیان

استاد مشاور:

**Prof. Herman Potgieter**

بهمن ۱۳۹۸

تقدیم به

پدر و مادرم

به پاس دستهای بخشنده و مهربانی پدایانشان

که نه مرا توان سپاس است و نه زبان وصف

مادرم عاشقانه سوخت تا که با بخش وجودم و رویشگر راهم باشد

و همسرم

پناه خستگی و امید بودم

که مهربانیش سایه ساز زندگی

و آرامش حضورش مرهم دشواری هست

## تشکر و قدردانی

شکر شایان نثار ایزد منان که توفیق را رفیق راهم ساخت تا این رساله را به پایان برسانم

با تقدیر و سپاس شایسته از استاد فرهیخته و گرانقدرم جناب آقای دکتر محمد کارآموزیان که در مقابل لطف و توجهشان نه مرا توان سپاس است و نه زبان وصف و همواره شرمسار شکیباییشان هستم و راهنمایی های ارزشمندشان بزرگترین سرمایه این رساله است.

با سپاس فراوان از استاد گرامی ام جناب آقای **Prof. Herman Potgieter** که با حمایت های بی دریغشان، سهم بزرگی در پیشرفت این رساله داشته است. آزاد مردی که نیک می اندیشد و عقل و منطق را پیشه خود نموده و جز پیشرفت صنایع معدنی، هدفی ندارد.

با سپاس از مسئولین محترم دانشگاه صنعتی شاهرود و دانشگاه ویتز کشور افریقای جنوبی و دانشگاه های منچستر و کمبریج (مرکز تحقیقات TWI) کشور انگلستان

با سپاسگزاری فراوان از آقای جواد پیرهادی و کلیه کسانی که به هرنحو مرا در این رساله یاری نمودند.

## تعهدنامه

اینجانب محمدرضا حیدرطائمه دانشجوی دوره دکتری رشته فرآوری مواد معدنی دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه افزایش مقاومت سایشی بار خردکننده و آستر تجهیزات خردایش مواد معدنی با تولید یک نانو پوشش مقاوم به سایش به منظور افزایش بهره وری تحت راهنمایی دکتر محمد کارآموزیان متعهد می شوم..

تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است .

- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است .
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است .
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « **Shahrood University of Technology** » به چاپ خواهد رسید .

• حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.

• در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده ( یا بافتهای آنها ) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است .

در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است

## تاریخ

## امضای دانشجو

### مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج ، کتاب ، برنامه های رایانه ای ، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است ) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد . این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود .
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

## چکیده

پیشرفت های نانو فناوری و دامنه وسیع کاربرد آن بر هیچ کسی پوشیده نیست. در این تحقیق تاثیر پوشش نانویی آلیاژ آنتروپی بالا برای افزایش مقاومت سایشی بار خردکننده و آستر تجهیزات خردایش مواد معدنی، بررسی شده است. به همین منظور، با بررسی مناسب ترین و اقتصادی ترین روش پوشش دهی بر روی تجهیزات انتخابی هدف، روش غیرمکانیزه جوشکاری (OFP)، به عنوان در دسترس ترین روش انتخاب شد. با توجه به اینکه بیشترین هزینه ها در بخش سایش و خردایش می باشد، گلوله و میله آسیا برای پوشش دهی با هدف افزایش مقاومت سایشی انتخاب شدند. از این رو، یک نانو آلیاژ آنتروپی بالا ساخته شد. نتایج تجزیه و تحلیل آنالیز میکروسکوپ اتمی FE-SEM و تصاویر EDX نشان داد که اندازه ذرات کمتر از ۲۰ نانومتر و دارای پراکندگی یکنواخت است. آزمون سختی سنجی بر اساس استاندارد ASTM G-65 انجام شد و سختی ۶۷ راکول برای نمونه نانو آلیاژ آنتروپی بالا بدست آمد. با هدف بررسی کاربرد این نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی در برخورد با مواد معدنی، سه نمونه معدنی مختلف به عنوان نمونه معرف برای آزمون سایش آسیای باند انتخاب شدند. نتایج اندیس سایش باند، استفاده از یک آلیاژ پایه استاندارد دستگاه در مقایسه با قطعه پوشش داده شده توسط نانو آلیاژ آنتروپی بالا نشان داد که میزان سایش از مقدار ۰/۱۶۴۷ گرم به ۰/۰۹۰۸ گرم برای نمونه های سنگ آهن، ۰/۱۴۷۲ گرم به ۰/۰۸۰۳ گرم برای مس اکسیدی و از ۰/۱۴۷۲ گرم به ۰/۰۸۳۷ گرم برای مس پورفیری کاهش یافت. نتایج انحراف استاندارد، تکرارپذیری و تکثیر پذیری در آزمون سایش باند، برای تیغه فولادی پوشش داده شده توسط نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی برای نمونه های سنگ آهن به ترتیب ۰/۰۰۰۱۶، ۰/۰۰۰۴۷ و ۰/۰۰۰۴۰ و برای نمونه های سنگ مس اکسیدی به ترتیب ۰/۰۰۰۰۳، ۰/۰۰۰۰۴۷ و ۰/۰۰۰۰۴۲ محاسبه شد. نتایج آزمون خوردگی بر روی بارخردکننده آسیا، یک بار قبل از پوشش دهی و بار دوم پوشش داده شده توسط نانو آلیاژ آنتروپی بالا بر اساس الکتروود مینا SCE گزارش شد. نتایج آزمون خوردگی نشان داد، هنگامی که پتانسیل خوردگی به مقدار مثبت بیشتری از ۴۰۰ mV در مقابل الکتروود مینا SCE

به  $1000 \text{ mV}$  رسید، میزان نرخ خوردگی گلوله از  $0/211$  میلی متر در سال به  $0/0006$  میلی متر در سال با اعمال پوشش دهی نانو آلیاژ آنتروپی بالا کاهش یافت.

### **کلمات کلیدی:**

نانو آلیاژهای آنتروپی بالا، پوشش‌های سخت، افزایش مقاومت به سایش بارخرد کننده، مقاومت خوردگی، بهینه‌سازی انرژی تجهیزات سایشی خردایش مواد معدنی

## لیست مقالات مستخرج شده از رساله دکتری

### ✍ Journal papers, (ISI):

- ✓ Heydar Taemeh M.R., Karamoozian M., Potgeiter H. (2019). “Application of Nano high entropy alloys to reduce energy consumption and the abrasion index of copper oxide and high grade iron ores in heavy mining industries- A Case study”, Journal of Minerals, MDPI, Minerals 2020, 10, 16; doi: 10.3390/min10010016.
- ✓ Heydar Taemeh M.R., Karamoozian M., Potgeiter H., “Molecular Dynamics Simulation of CrFeNiMoBaHf and its abrasion, mechanical and nanostructures; properties as a Novel High Entropy Alloy (NN-HEA) and Hard-Coating”, Journal of Arabian Journal for Science and Engineering, Elsevier, Submitted (17 Oct 2019), Under review.

### ✍ Conference papers (International):

- ✓ Oral, Heydar Taemeh M.R., Karamoozian M., Potgeiter H., “Examination and Measurement of the abrasion resistance rate of porphyry copper ore on Nano High Entropy Alloy Coating”, December 18, 2018 at 2<sup>nd</sup> national conference on Nano & bio technology application in geology and mining, Iran.
- ✓ Oral, Heydar Taemeh M.R., Karamoozian M., Potgeiter H., “Examination and Measurement of the Abrasion of Mining Equipment Using Nano High Entropy alloy”, December 18, 2018 at 2<sup>nd</sup> national conference on Nano & bio technology application in geology and mining, Iran.



## فهرست مطالب

۱	فصل اول کلیات
۱-۱	مقدمه
۲	۲-۱- سختی و مواد سخت پوشی
۶	۳-۱- ضرورت انجام تحقیق، سوالات و فرضیه های تحقیق
۷	۴-۱- اهداف تحقیق
۸	۵-۱- ساختار رساله
۹	فصل دوم مروری بر تحقیقات گذشته
۱۰	۱-۲- مقدمه
۱۰	۱-۱-۲- مروری بر آلیاژهای آنتروپی بالا
۱۳	۲-۱-۲- سختی و آزمایش‌های مربوط به سختی
۱۵	۳-۱-۲- تعریف و مفهوم عملیات سطحی و انواع آن
۱۷	۲-۲- انتخاب آلیاژ سخت پوشی
۱۹	۱-۲-۲- طبقه‌بندی مواد سخت پوشی
۱۹	۲-۲-۲- طبقه‌بندی مواد سخت پوشی بر اساس موارد کاربرد
۲۱	۳-۲-۲- طبقه‌بندی مواد سخت پوشی بر اساس آلیاژهای پایه آهن
۲۲	۴-۲-۲- فرآیندهای پاشش حرارتی و انواع آن
۲۶	۵-۲-۲- خواص فرآیند پاشش حرارتی
۲۶	۶-۲-۲- پوشش‌های مقاوم در برابر خوردگی
۲۷	۷-۲-۲- پوشش‌های مقاوم در برابر سایش
۲۹	۸-۲-۲- سایر پوشش‌ها بر اساس کاربرد
۲۹	۳-۲- آزمایش‌های تعیین سایش
۲۹	۱-۳-۲- استاندارد شن و ماسه خشک و چرخ لاستیکی جهت محاسبه سایش ASTM G-65
۳۰	۲-۳-۲- آزمایش سایش آسیای گلوله‌ای
۳۲	۳-۳-۲- آزمایش سایش چرخ فولادی
۳۴	۴-۲- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سایش نانوالیاز آنتروپی بالا
۳۵	۱-۴-۲- نرم افزار شبیه سازی LAMMPS
۳۸	۲-۴-۲- نرم افزار گرافیکی VMD
۳۸	۳-۴-۲- نقد و بررسی تحقیقات پیشین
۴۱	فصل سوم مواد و روشها

۴۲	۱-۳- مقدمه
۴۳	۲-۳- معرفی معادن
۴۵	۳-۳- نمونه برداری، خردایش و تقسیم نمونه‌های مواد معدنی
۴۵	۴-۳- شناخت نمونه‌های معدنی
۴۵	۳-۴-۱- آماده سازی نمونه های مواد معدنی جهت آزمون سایش اندیس باند
۴۶	۳-۴-۲- مطالعات فلئوئورسانس اشعه ایکس XRF
۴۶	۳-۵- روش ساخت و بررسی پارامترهای نمونه نانوالیاز آنتروپی بالا
۵۱	۳-۵-۱- آزمایش طیف سنجی پراش پرتو ایکس XRD و EDX Mapping
۵۳	۳-۵-۲- آزمایش میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی اتمی FE-SEM
۵۵	۳-۶- آزمایش محاسبه سایش ASTM G-65
۵۶	۳-۷- روش پوشش دهی نانوالیاز آنتروپی بالا بر روی گلوله و میله آسیای گلوله‌ای و میله‌ای
۵۷	۳-۸- روش جوشکاری مورد استفاده
۵۹	۳-۹- آنالیز خوردگی روش تافل و ولتامتری چرخه‌ای بر روی نانوالیاز آنتروپی بالا
۶۲	۳-۱۰- آماده سازی و پوشش تیغه دستگاه سایش اندیس باند برای آزمون مواد معدنی با نانوالیاز آنتروپی بالا
۶۳	۳-۱۱- شبیه سازی دینامیک مولکولی سایش نانوالیاز آنتروپی بالا
۶۵	فصل چهارم یافته های تحقیق، بحث و تحلیل نتایج
۶۶	۴-۱- مقدمه
۶۶	۴-۲- مقایسه نرخ سایش و میزان سختی نانوالیاز آنتروپی بالا با آلیاژهای مصرفی فعلی
۶۹	۴-۳- آزمایش سایش باند مواد معدنی بر روی نانو آلیاز آنتروپی بالا
۷۰	۴-۴- بررسی تکرارپذیری، تکثیرپذیری نتایج
۷۳	۴-۵- آنالیز خوردگی روش تافل و ولتامتری چرخه‌ای بر روی نانوالیاز آنتروپی بالا
۷۶	۴-۶- آزمایش میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی اتمی FE-SEM بعد از فرآیند جوشکاری
۷۸	۴-۷- شبیه سازی دینامیک مولکولی سایش نانوالیاز آنتروپی بالا
۸۶	۴-۸- بررسی اقتصادی نانوالیاز آنتروپی بالا به عنوان پوشش سخت
۸۸	۴-۹- جمع بندی
۹۱	فصل پنجم نتیجه گیری و پیشنهادها
۹۲	۵-۱- جمع بندی
۹۳	۵-۲- نتیجه گیری
۹۴	۵-۳- پیشنهادها
۹۴	۵-۴- نوآوری
۹۵	منابع

۱۰۵ ----- پیوست

۱۰۶ ----- کدهای نوشته شده شبیه سازی دینامیک مولکولی با نرم افزار LAMMPS

## فهرست اشکال

- شکل ۲-۱: شماتیکی از کلیات فرآیند پاشش حرارتی ----- ۲۳
- شکل ۲-۲: پوشش حاصل از پاشش حرارتی بر روی یک سطح ناهموار ----- ۲۳
- شکل ۲-۳: فرآیندهای پاشش حرارتی ----- ۲۵
- شکل ۲-۴: استاندارد شن و ماسه خشک و چرخ لاستیکی جهت محاسبه سایش ASTM G-65 ----- ۳۰
- شکل ۲-۵: تست سایش چرخ فولادی ----- ۳۳
- شکل ۳-۱: موقعیت جغرافیایی و نیز نمونه سنگ‌های نمونه برداری شده از معادن الف) استان سیستان و بلوچستان، مس پرفیری؛ ب) کرمان، مس اکسیدی؛ ج) افغانستان (هرات)، سنگ آهن. ----- ۴۴
- شکل ۳-۲: آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) مشخصه‌یابی و ترکیب شیمیایی در فواصل زمانی ۳۰، ۶۰، ۹۰ و ۱۲۰ دقیقه است که نتایج سختی سنجی به ترتیب ۵۰، ۵۲، ۵۴ و ۶۷ را کول را نشان داد. ----- ۵۰
- شکل ۳-۳: آنالیز XRD نمونه نانوالیاز آنتروپی بالا و EDX Mapping برای عناصر K، Fe، Cr، Ni، Hf، Mo، O، Ca ----- ۵۲
- شکل ۳-۴: تصاویر میکروسکوپ Fe-SEM از نانو آلیاز آنتروپی بالا ابداعی در ۳۰، ۶۰، ۹۰ و ۱۲۰ دقیقه ----- ۵۴
- شکل ۳-۵: تصویر دستگاه استاندارد سایش ASTM G-65 و مشخصات دستگاه برای آزمون ----- ۵۵
- شکل ۳-۶: تصویر نمونه گلوله و لوله پوشش داده از نانوالیاز آنتروپی بالا ----- ۵۶
- شکل ۳-۷: تصویر شماتیک فرآیند پاشش پودری توسط شعله اکسی گاز ----- ۵۷
- شکل ۳-۹: انجام آزمون‌های خوردگی توسط دستگاه (model Solartron analytical, SI-1287) ----- ۶۱
- شکل ۳-۱۰: آزمایش اندازه گیری سایش مواد معدنی باند روی تیغه پوشش داده شده از نانو آلیاز آنتروپی بالا ----- ۶۲
- شکل ۴-۱: تصویر میکروسکوپ اتمی Fe-SEM از نانو آلیاز آنتروپی بالا جوشکاری شده؛ (الف): نمای از مقطع جوشکاری شده مقیاس ۲ میلی‌متر (ب): میانگین ابعاد ذرات ۲۵ نانومتر ----- ۷۷
- شکل ۴-۲: عکسی از نمای جانبی و جلوی ساختار نانو آلیاز آنتروپی بالا با استفاده از نرم افزار VMD و شبیه سازی دینامیک مولکولی LAMMPS ----- ۸۵

## فهرست جداول

- جدول ۱-۲ برخی از خواص و کاربردهای آلیاژهای آنتروپی بالا ----- ۱۲
- جدول ۲-۲ برخی از فازهای سختی در آلیاژهای آنتروپی بالا ----- ۱۲
- جدول ۳-۲: انواع آزمایش های مربوط به میزان سختی ----- ۱۳
- جدول ۴-۲: روش های گوناگون عملیات سطحی ----- ۱۶
- جدول ۵-۲: فرآیندهای معمول سخت پوشی همراه با نوع مواد مصرفی آنها ----- ۱۷
- جدول ۶-۲: راهنمای انتخاب آلیاژهای سخت پوشی ----- ۱۹
- جدول ۷-۲: طبقه بندی مواد سخت پوشی ----- ۲۰
- جدول ۸-۲: مقایسه خواص آلیاژهای مختلف سخت پوشی ----- ۲۲
- جدول ۹-۲: پوشش های پاشش حرارتی مورد استفاده در کاربردهای سخت پوشی ----- ۲۷
- جدول ۱۰-۲: مروری بر معیار انتخاب مواد سخت کاری پیشین ----- ۳۹
- جدول ۱۱-۲: مروری بر آلیاژهای آنتروپی بالا پیشین ----- ۳۹
- جدول ۱-۳: نتایج آنالیز شیمیایی به روش XRF بر اساس (%) ----- ۴۶
- جدول ۲-۳: نرخ سایش بر اساس استاندارد ASTM G-65 و نتایج آزمون سختی سنجی برای نمونه نانو آلیاژ آنتروپی بالا ----- ۵۵
- جدول ۳-۳: مراحل زمانی و تعداد اتم های تشکیل دهنده شبیه سازی دینامیک مولکولی ----- ۶۳
- جدول ۱-۴: نتایج آزمون سایش بر اساس استاندارد ASTM G-65 برای نمونه نانوآلیاژ ابداعی و مقایسه با سایر محصولات موجود ----- ۶۷
- جدول ۲-۴: مقایسه آزمون سختی سنجی نانوآلیاژ آنتروپی بالا ابداعی در تحقیق با سایر آلیاژ های آنتروپی بالا ----- ۶۸
- جدول ۳-۴: محاسبه نرخ و اندیس سایش باند برای سه نمونه معدنی مورد تحقیق ----- ۷۰
- جدول ۴-۴: محاسبه انحراف استاندارد، تکرارپذیری و تکثیرپذیری، براساس سطح اطمینان ۹۵٪ برای تیغه فولادی پوشش داده شده توسط نانوآلیاژ آنتروپی بالا ابداعی ----- ۷۲
- جدول ۵-۴: مقایسه نرخ خوردگی آزمایش خوردگی با سایر آزمایش های صورت گرفته بر روی کانسنگ مس ----- ۷۴
- جدول ۶-۴: بررسی هزینه تمام شده نانو آلیاژ آنتروپی بالا مورد استفاده در تحقیق جهت مصارف صنعتی. ----- ۸۷
- جدول ۱: مختصات و شبکه بندی عناصر در نرم افزار LAMMPS (First run) ----- ۱۰۶
- جدول ۲: درصد وزنی عناصر نانوآلیاژ آنتروپی بالا در نرم افزار LAMMPS ----- ۱۰۶
- جدول ۳: کد نوشته شده در نرم افزار LAMMPS جهت محاسبه سایش نانوآلیاژ آنتروپی بالا ابداعی ----- ۱۰۷
- جدول ۴: پتانسیل لوناورد= جونز در نرم افزار LAMMPS جهت محاسبه سایش نانوآلیاژ آنتروپی بالا ابداعی ----- ۱۰۷
- جدول ۵: بررسی پارامتر دما تعادل نانوآلیاژ آنتروپی بالا ابداعی در نرم افزار LAMMPS ----- ۱۰۸

جدول ۶: محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی سایش نانوالیاز آنتروپی بالا ابداعی در نرم افزار LAMMPS،  $k_0$  (3.227242)-----۱۱۰

## فهرست نمودارها

- نمودار ۳-۱: بررسی رفتار استحکام بخشی هال-پیچ در ابعاد حدود کمتر از ۱۰ نانومتر ----- ۴۹
- نمودار ۳-۲: مقایسه میزان ماده رسوب داده شده در فرآیندهای مختلف جوشکاری ( کیلوگرم/ ساعت) ----- ۵۹
- نمودار ۴-۱: پتانسیل خوردگی تافل برای نمونه آلیاژ پوشش داده شده با نانوالیاز آنتروپی بالا ابداعی در مجاورت محلول لیچینگ مس اکسیدی ----- ۷۵
- نمودار ۴-۲: پتانسیل خوردگی ولتامتری چرخه‌ای نمونه نانوالیاز آنتروپی بالا پوشش داده در مجاورت محلول لیچینگ مس اکسیدی ----- ۷۶
- نمودار ۴-۳: تغییرات در دما ( برحسب کلوین) با گذشت زمان (بر حسب پیکوثانیه) برای ساختار نانو آلیاز آنتروپی بالا ----- ۷۹
- نمودار ۴-۴: مقایسه انرژی کل، جنبشی و انرژی پتانسیل. ----- ۸۰
- نمودار ۴-۵: تغییرات چگالی سایش یافته ( جرم واحد حجم) با گذشت زمان برای ساختار نانو آلیاز آنتروپی بالا -- ۸۱
- نمودار ۴-۶: میزان افزایش تغییرات کاهش حجم سایش یافته با گذشت زمان برای نانو آلیاز آنتروپی بالا در ---- ۸۲
- شبیه سازی دینامیک مولکولی ----- ۸۲
- نمودار ۴-۷: نرخ تغییرات آنتالپی برای ساختار نانو آلیاز آنتروپی بالا ابداعی در شبیه سازی دینامیک مولکولی --- ۸۲
- نمودار ۴-۸: نرخ تغییرات آنتروپی برای ساختار نانو آلیاز آنتروپی بالا ابداعی در شبیه سازی دینامیک مولکولی --- ۸۳
- نمودار ۴-۹: نرخ تغییرات سینتیک سایش برای ساختار نانو آلیاز آنتروپی بالا ابداعی در شبیه سازی دینامیک مولکولی ----- ۸۳
- نمودار ۴-۱۰: نرخ تغییرات سینتیک سایش نسبت به دما، برای ساختار نانو آلیاز آنتروپی بالا ابداعی ----- ۸۴
- در شبیه سازی دینامیک مولکولی ----- ۸۴
- نمودار ۴-۱۱: نرخ تغییرات دما بر واحد زمان برای ساختار نانو آلیاز آنتروپی بالا در شبیه سازی دینامیک مولکولی. ۸۵.





# فصل اول

## کلیات

## ۱-۱- مقدمه

به حداقل رساندن سطح انرژی مصرفی یکی از مهم‌ترین مسائل اصلی صنایع است. هیچ یک از اعمال انسان، بازدهی صد درصد ندارد از این رو استفاده بهینه و ممانعت از هدر رفتن امکانات امری اساسی است؛ این نکته هنگامی اهمیت بیشتری پیدا می‌کند که موضوع انرژی مطرح شود. منظور از بهینه‌سازی مصرف انرژی، انتخاب الگوها و اتخاذ و بکارگیری روش‌ها و سیاست‌هایی در مصرف درست انرژی است که از نقطه نظر اقتصاد ملی و بین‌المللی مطلوب باشد و استمرار وجود و دوام انرژی و ادامه حیات و حرکت را تضمین کند.

با توسعه فناوری نانو، یکی از مهم‌ترین خواص مواد یعنی مقاومت سطحی آن‌ها در برابر پدیده‌های مخرب سطحی مانند سختی، سایش و فرسایش، ضربه، خراش و محیط خورنده را می‌توان افزایش داد. برای کسی که با علم معدن، مواد و مکانیک و آزمایش مواد سروکار دارد به احتمال زیاد سختی به معنی مقاومت در برابر فرورفتگی است. برای مهندسين طراح غالبا يك كميت معين و از نظر اندازه گیری ساده است و اطلاعاتی از استحکام و عملیات حرارتی فلز به دست می‌دهد. فرسایش در اثر تماس یک سطح جامد با سطحی دیگر ایجاد می‌شود. این فرایند در اثر تماس مکانیکی دو سطح رخ می‌دهد. برخورداری قطعات از خواص سایشی مطلوب یکی از مهم‌ترین شاخص‌های کیفیت قطعات در بسیاری از صنایع است. در این چارچوب تعیین سهم صورت‌های مختلف هدر رفتن انرژی هریک از تجهیزات کارخانه‌های فرآوری با توجه به میزان زمان طولانی مدت هر پروژه در بخش صنایع معدنی با هدف بکارگیری پربازده‌ترین شیوه استفاده از تجهیزات، مدنظر است که متضمن کاهش هزینه‌های مصرفی قطعات و نیز کاهش تأثیرات سوء ناشی از استفاده ناصحیح می‌باشد.

## ۱-۲- سختی و مواد سخت پوشی

سختی یک خاصیت اساسی ماده نیست اما در رابطه با خواص پلاستیکی و الاستیکی قطعه مطرح می‌شود. سختی یک ماده عبارتی است که به خوبی تعریف نشده است، ولی بسته به تجربه کسی که با آن

سروکار دارد معانی زیادی به خود می‌گیرد. برای مثال برای یک قطعه سختی در دو نقطه مختلف ممکن است فرق داشته باشد. در صورتیکه خصوصیتی مثل مدول الاستیسیته برای یک قطعه مشخص می‌باشد. روش آزمایش و آماده کردن نمونه معمولاً ساده است و نتایج ممکن است در برآورد کردن خصوصیات مکانیکی دیگر موارد مورد استفاده قرار گیرد. آزمایش سختی به طور گسترده‌ای در بازرسی‌ها و کنترل قطعات مورد استفاده قرار می‌گیرد. در بسیاری از کاربردهای صنعتی، نیاز به قطعاتی است که دارای سطحی سخت بوده و در عین حال از چقرمگی<sup>۱</sup> و مقاومت به ضربه خوبی نیز برخوردار باشند. از جمله مواردی که می‌توان در این رابطه به عنوان مثال به آنها اشاره کرد عبارتند از: میل لنگ، میل بادامک، چرخ دنده و سایر قطعات مورد استفاده در تجهیزات کارخانه‌های فرآوری مواد معدنی (مدار سایش و خردایش). این قطعات باید سطح بسیار سخت و مقاوم در برابر سایش داشته و همچنین بسیار چقرمه<sup>۲</sup> و مقاوم در برابر ضربه‌های وارده در مدارهای فرآوری مواد معدنی در حین کار باشند. مواد مورد استفاده به منظور سخت پوشی دسته وسیعی از آلیاژها، کاربیدها و ترکیبات مختلفی از آنها را در بر می‌گیرد. مواد سخت پوشی متداول، شامل فولادها یا مواد آهنی کم آلیاژ، چدن های سفید پر کروم، مواد آهنی پر آلیاژ، کاربیدها و آلیاژهای غیرآهنی شامل آلیاژهای پایه نیکل و پایه کبالت می‌باشند. تعدادی از آلیاژهای پایه مس نیز گاهی اوقات به عنوان مواد سخت پوشی مورد استفاده قرار می‌گیرند. بخش عمده آلیاژهای سخت پوشی غیرآهنی را آلیاژهای پایه کبالت و پایه نیکل تشکیل می‌دهند. سالیانه از میان  $18 \times 10^6$  Kg مواد سخت پوشی عرضه شده در بازار، در حدود ۹۰٪ وزنی را آلیاژهای سخت پوشی پایه آهنی تشکیل می‌دهند که البته تنها ۷۵٪ ارزش دلاری این مواد را به خود اختصاص می‌دهند [۱].

به طور کلی ریز ساختار آلیاژهای سخت پوشی دارای ذرات سخت بورایدی، کاربیدی یا ترکیبات بین فلزی (لاوه) هستند که در زمینه نرمتر آهنی، کبالتی یا نیکلی رسوب کرده‌اند. کاربیدها غالب‌ترین فاز سخت

---

<sup>1</sup> Toughness

<sup>2</sup> Tough

موجود در ریز ساختار آلیاژهای سخت پوشی پایه آهنی و پایه کبالتی هستند. میزان کربن این آلیاژها معمولاً تا حدود ۴٪ وزنی است. بورایدها نیز غالب ترین فاز سخت موجود در ریز ساختار آلیاژهای سخت پوشی پایه نیکل هستند. مجموع درصد وزنی کربن و بور این آلیاژها معمولاً تا حدود ۵٪ می باشد. فازهای کاربیدی یا بورایدی خاص با توجه به نوع عناصر آلیاژی موجود در زمینه این آلیاژها تشکیل می شوند. به طور کلی فاز زمینه مواد سخت پوشی پایه آهنی پرآلیاژ، پایه کبالت و پایه نیکل شامل حداکثر ۳۵٪ کروم، ۳۰٪ مولیبدن، ۱۳٪ تنگستن و مقادیر کمتری سیلیسیم و منگنز می باشد.

به طور کلی خواص مهم آلیاژهایی که جهت عملیات سطحی به کار می روند [۳]، عبارتند از:

#### الف) سختی

❖ ماکرو سختی

❖ میکرو سختی یا سختی اجزاء تشکیل دهنده یک ساختار ناهمگن

❖ سختی گرم یا مقاومت در برابر اثر تضعیف کننده دما

#### ب) مقاومت به سایش

❖ تحت شرایط کم تنش

❖ تحت شرایط پر تنش

❖ تحت شرایطی که قطعه توسط مواد ساینده و در سرعت های متفاوت رویه برداری می شود.

#### ج) مقاومت به ضربه

❖ مقاومت به تغییر شکل تحت ضربه های متوالی (مربوط به تنش تسلیم)

❖ مقاومت به ترک خوردگی تحت ضربه (مربوط به استحکام و چکش خواری)

❖ استحکام فشاری

❖ چکش خواری فشاری

د) مقاومت حرارتی، خواص اصطکاکی و قابلیت جوشکاری

❖ مقاومت در برابر باز پخت (تمپر شدن)

❖ حفظ استحکام حرارتی در دمای بالا

❖ مقاومت به خزش

❖ مقاومت در برابر اکسیداسیون یا خوردگی داغ

❖ مقاومت در برابر خستگی حرارتی

❖ روش‌های جوشکاری

ه) مقاومت در برابر خوردگی

❖ مقاومت در خوردگی اسید

❖ مقاومت در خوردگی نمک و قلیا

❖ مقاومت در خوردگی هوا و آب

امروزه بسیاری از محققان از آلیاژهای مختلفی جهت ساخت گلوله و میله به عنوان پوشش آسیاها استفاده می‌کنند، این در حالی است که در این رساله استفاده از پوشش نانوالیازهای آنترپی بالا<sup>1</sup> روش مدرن و مقرون به صرفه تری خواهد بود. بیشتر تحقیقات انجام شده قبلی بر روی پارامترهای سایش آسیاها متمرکز بودند. همچنین، در بعضی تحقیقات، تنها تأثیر متغیرها بر ثابت سایش آسیا مورد بررسی قرار گرفته است که با آن جدول‌های اندیس سایش تهیه گردیده است. شرکت SGS و محققان دانشگاه پنسیلوانیا، با تهیه جدول (1-1) سایش که طی آن یک آلیاژ مبنا موجود بوده است، به بیان تأثیر سایش مواد معدنی بر روی تجهیزات پرداخته‌اند ولی از آن به دلیل کمالات رقابتی بودن و اقتصادی بودن موضوع، گزارش دقیقی در دسترس نمی‌باشد [4]. از این رو دستیابی به یک آلیاژ کاربردی در این رساله با توجه به اینکه در ایران و در سطح بین‌المللی هیچ

---

<sup>1</sup> Nano- High-entropy alloy (HEAs)

گونه کار مشابه‌ای بر روی نانو پوشش‌دهی سخت تجهیزات فرآوری مواد معدنی با استفاده از نانو آلیاژهای آنتروپی بالا، صورت نپذیرفته است، یک دست آورد بسیار مهم و استراتژیک است. دسته جدیدی از آلیاژها ساخته شده اند که در ترکیب و ساختار خود، حداقل پنج عنصر اصلی با درصد اتمی برابر یا نزدیک به هم دارند. معمولاً درصد اتمی هر عنصر بیش از ۵ درصد است. آنتروپی ترکیب شدن این آلیاژها، بیشینه است که موجب شده آن‌ها را آلیاژهای آنتروپی بالا نام‌گذاری کنند که تحت عنوان آلیاژهای چند عنصری نیز شناخته می‌شوند.

جدول ۱-۱: مقادیر سایش مواد معدنی [۴]			
No.	Material	$W_i^2$	$A_i^1$
1	Dolomite	-	0.0160
2	Shale	9.9	0.0209
3	L.s. for cement	12.7	0.0238
4	Limestone	11.7	0.0320
5	Cement clinker	13.5	0.0713
6	Magnesite	-	0.0783
7	Heavy sulfides	11.4	0.1284
8	Copper Ore	11.7	0.1472
9	Hematite	8.5	0.1647
10	Magnetite	13	0.2217
11	Gravel	15.4	0.2879
12	Trap rock	17.8	0.3640
13	Granite	16.6	0.3880
14	Taconite	16.3	0.6237
15	Quartzite	17.4	0.7751
16	Alumina	17.5	0.8911

### ۱-۳- ضرورت انجام تحقیق، سوالات و فرضیه های تحقیق

امروزه بهره‌گیری از فناوری نانو در جهت افزایش کیفیت سایشی قطعات بسیار رایج است. با اعمال پوشش‌های ضد سایش عمر کاری قطعات به‌صورت قابل توجهی افزایش یافته و از این طریق موجب کاهش هزینه مربوط

<sup>۱</sup> اندیس سایش ماده معدنی باند

<sup>۲</sup> اندیس کار

به تعمیر یا تعویض قطعات آسیب‌دیده می‌شود و دیگر به دلیل استفاده از یک روش ارزان در تولید این قطعات، صرفه اقتصادی در پی خواهد بود. در طی این پروژه با تولید و اعمال پوشش‌های ضد سایش می‌توان تجهیزات معدنی که در تماس با سایش و ضربه می‌باشد را پوشش داد [۱، ۲].

حال با توجه به آنچه که گفته شد، سوالات تحقیق به شرح ذیل ارائه شدند:

- آیا نانو پوشش‌ها قادر به کاهش سایش بار خردکننده و آستر آسیاها هستند؟
- خصوصیات نانو پوشش‌ها در برخورد با مواد معدنی چه تغییری می‌کنند؟
- کاربرد نانو پوشش‌ها چه تاثیری بر مصرف انرژی سایشی آسیاها دارد؟

بر این اساس، فرضیه‌های تحقیق عبارتند از:

➤ نانو پوشش‌های مقاوم به سایش در برابر برخوردهای متوالی محیط خردایش دارای دوام و پایداری بیشتری هستند.

➤ هزینه‌های نهایی فرآیند خردایش با بکارگیری نانو پوشش‌ها کاهش خواهد داشت.

➤ پوشش نانویی روی آستر و بار خردکننده، وابسته به نوع ماده معدنی و محیط خردایش است.

#### ۱-۴- اهداف تحقیق

در معقوله سایش گلوله‌ها و لوله‌های آسیاب‌های معدنی، مواد معدنی به دلیل ترکیبات متفاوتی که در خود دارند و تنوع انواع مواد معدنی و بخش‌های معدنی مرتبط با بخش سایش و خردایش، رفتارهای یکسانی از خود نشان نمی‌دهند به همین دلیل می‌توان گفت همواره تجهیزات در معرض سایش قرار می‌گیرند که هزینه‌های بسیار بالایی را این بخش متهمل می‌شود. همچنین اندیس سایش نیز برای تمامی مواد معدنی مختلف متفاوت هستند که این موضوع به خصوصیات فیزیکی، شیمیایی و کانی‌شناسی ماده معدنی ارتباط دارد.

این تحقیق با هدف ثبت و توسعه روشی نوین جهت ایجاد یک ساختار نانویی سخت پوشش انجام شده است. در بررسی صورت گرفته، بیشترین مطالعات و گزارش‌های بین‌المللی فقط توسط تعداد محدودی از محققین امریکایی و انگلیسی در مراکز تحقیقاتی بزرگ انجام شده است؛ البته شایان ذکر است بر روی ماشین‌آلات استخراج معادن از قبیل تیغه‌های لودر و کف محفظه‌ی بارکامیون‌ها و سایر یک‌سری فعالیت‌ها صورت گرفته است ولی هیچ‌کدام با استفاده از نانو فناوری آلیاژهای آنتروپی بالا نبوده است.

اهداف این تحقیق به صورت خلاصه در ادامه ارائه شده است.

- تولید یک پوشش ضد سایش نانویی
- افزایش مقاومت به سایش تجهیزات هدف با استفاده از نانو فناوری
- اعمال پوشش‌های ضد سایش نانویی بر روی میله و گلوله آسیاهای خردکننده مواد معدنی

## ۱-۵- ساختار رساله

این رساله مشتمل بر پنج فصل است که فصل حاضر شامل کلیات، فصل دوم مروری بر تحقیقات گذشته، فصل سوم مواد، روش‌ها و آزمایش‌ها، فصل چهارم بحث، تحلیل نتایج و یافته‌های تحقیق و فصل پنجم نتیجه‌گیری و ارائه پیشنهادها می‌باشد.



## فصل دوم

### مروری بر تحقیقات گذشته

## ۲-۱- مقدمه

در ایران و در سطح بین المللی هیچ گونه کار مشابهی بر روی نانو پوشش دهی سخت تجهیزات فرآوری مواد معدنی "نانو پوشش های سخت" با استفاده از نانو آلیاژهای آنتروپی بالا، صورت نپذیرفته است [۱، ۲].

در این فصل با توجه به مقالات مطالعه شده و تحقیقات انجام شده توسط سایر محققین، تعریف های مشخص از فرآیندهای مورد استفاده در این تحقیق از جمله فرآیندهای پوشش دهی سخت، انواع آنالیزها و روابط حاکم بر مهندسی مواد در پوشش های سخت و همچنین اصطلاحات، عبارات و معادلات مهم و به کار گرفته شده در تحقیقات مشابه شامل روش ها، مواد مهندسی شده و بررسی مدل دینامیک مولکولی حاکم بر شرایط، نحوه و ساز و کارهای مربوط به هریک از پدیده ها و واکنش ها به صورت ذیل ارائه شده است.

➤ مروری بر آلیاژهای آنتروپی بالا

➤ انتخاب آلیاژهای آنتروپی بالا

➤ سخت پوشی و آزمایش های تعیین کننده سختی

➤ فرآیندهای پاشش حرارتی و پوشش دهی

➤ نرم افزار شبیه سازی دینامیک مولکولی

➤ نقد و بررسی تحقیقات پیشین

در ادامه هر یک از این مدل ها جداگانه شرح داده شده اند.

## ۲-۱-۱- مروری بر آلیاژهای آنتروپی بالا

ترکیبات بین فلزی هنگامی تشکیل می شوند که دو فلز غیر مشابه مطابق قوانین ظرفیت شیمیایی با یکدیگر ترکیب شوند. معمولا پیوند در بین فلزی ها، از نوع فلزی نیست بلکه ماهیتی یونی یا کوالانسی دارد. چنین آلیاژی را در اصطلاح یک ترکیب بین فلزی می نامند. ترکیبات بین فلزی عموما دارای ترکیب استوکیومتری

بوده و در دیاگرام فازي به شکل یک خط دیده می‌شوند. البته برخی ترکیبات بین فلزی ساختار کریستالی پیچیده‌ای دارند و به دلیل داشتن پیوند یونی یا کووالانسی از ماهیت تردی برخوردار می‌باشند. در برخی از این ترکیبات، خواص منحصر به فردی همانند استحکام و سختی مناسب در دمای بالا، چگالی کم و مقاومت به اکسیداسیون عالی، مشاهده می‌شود.

اکثر آلیاژهای معمولی بر اساس یک عنصر اصلی هستند. انواع مختلف آلیاژهای آلومینیوم به عنصر اصلی برای بهبود خواص آن افزوده می‌شود، تشکیل یک ترکیب آلیاژ بر اساس عنصر اصلی و پایه آن است. به عنوان مثال، آلیاژهای فولاد بر اساس فلز پایه آهن و آلیاژهای آلومینیومی بر اساس آلومینیم است. با این حال، تعداد عناصر در جدول تناوبی محدود است، بنابراین خانواده‌های آلیاژی که می‌توانند توسعه پیدا کنند نیز محدود است. با توجه به نیاز صنایع دارای فناوری بالا، مفهوم جدید آلیاژها با سطح آنتروپی بالا که ابتدا در سال ۱۹۹۵ پیشنهاد شد، به عنوان یک آلیاژ آنتروپی بالا شناخته شد [۵، ۶].

آلیاژهای آنتروپی بالا به عنوان آلیاژهای دارای پنج یا بیشتر عناصر اصلی محسوب می‌شوند. هر عنصر اصلی باید محدوده‌ای بین ۵ تا ۳۵ درصد باشد [۶، ۷]. علاوه بر عناصر اصلی، این آلیاژها می‌توانند عناصر جزئی داشته باشند که هر کدام کمتر از ۵ درصد هستند. این آلیاژها در اصطلاح "آلیاژهای آنتروپی بالا" نامیده می‌شوند زیرا حالت‌های مایع و تصادفی جامدات آنها دارای آنتروپی‌های مخلوط به طور قابل توجهی بیشتر نسبت به آلیاژهای غیر معمول است. بنابراین اثر آنتروپی در آلیاژهای آنتروپی بالا بسیار بیشتر است. دانش متالورژی فیزیکی موجود و انواع فازهای آنها نشان می‌دهد که این ترکیب چند عنصر می‌تواند منجر به ساختارهای پیچیده و شکننده شود که در جدول‌های (۲-۱) و (۲-۲) کارهای انجام شده در سایر صنایع با این سوپر آلیاژها و کاربرد آنها گردآوری شده است.

جدول ۱-۲ برخی از خواص و کاربردهای آلیاژهای آنتروپی بالا

ردیف	نوع آلیاژ	ویژگی ها	کاربرد
۱	سیستم آلیاژ Al-Co-Cr-Cu-Fe-Ni [۸, ۹].	تشکیل انواع مختلف رسوبات و تولید فازهای مختلف	آلیاژهای سخت ( نفت و گاز)
۲	مشتقات سیستم آلیاژ Al-Co-Cr-Cu-Fe-Ni [۱۰, ۱۱].	تشکیل انواع مختلف رسوبات و تولید فازهای مختلف، همچنین افزودن Ti به Al-Co-Cr-Cu-Fe-Ni معمولاً منجر به تشکیل فازهای بین فلزی	سوپر آلیاژها ( هوا و فضا)
۳	Cr, Hf, Mo, Nb, Ta, V, W, and Zr. [۱۲, ۱۳].	سوپر آلیاژها	مقاوم در برابر آتش
۴	فولاد AISI 52100 و ترکیباتی از قبیل AlCoCrFeMo <sub>0.5</sub> Ni Al <sub>2</sub> CoCrCuFeNi, AlCoCrFe <sub>1.5</sub> Mo <sub>0.5</sub> Ni [۱۴, ۱۵].	فولاهای بلبرینگی	مقاوم در برابر سایش
۵	Co <sub>1.5</sub> CrFeNi <sub>1.5</sub> Ti <sub>0.5</sub> Mo <sub>x</sub> Co <sub>1.5</sub> CrFeNi <sub>1.5</sub> Ti <sub>0.5</sub> Mo <sub>0.1</sub> [۱۶, ۱۷].	ترکیب از آلیاژهای ریزساختار	مقاوم در برابر خوردگی

جدول ۲-۲ برخی از فازهای سختی در آلیاژهای آنتروپی بالا [۱۰, ۱۱].

ردیف	ساختار آلیاژها	رده بندی آلیاژ مورد استفاده	دامنه سختی (HV)
۱	FCC <sup>1</sup> و مشتقات	L12, L10	۳۰۰-۱۰۰
۲	BCC <sup>2</sup> و مشتقات	B2, D2	۷۰۰-۳۰۰
۳	کامپوزیت برخی از آلیاژها	کاربید، بورید، سیلیسید	۴۰۰۰-۱۰۰۰

<sup>1</sup> The face centered cubic structure

<sup>2</sup> The cubic crystal system

## ۲-۱-۲- سختی و آزمایش‌های مربوط به سختی

سختی حاکی از مقاومت در برابر تغییر شکل بوده و این خاصیت در فلزات معیاری از مقاومت آن‌ها در برابر تغییر شکل موم‌سان<sup>۱</sup> است. در علم مواد و مهندسی مکانیک به فرایند تغییر شکل‌های برگشت‌ناپذیر مواد جامد تحت اثر نیرو رفتارهای خمیری یا موم‌سانی یا پلاستیسیته گویند. بطور کلی بسته به نحوه اجرای آزمایش سختی، می‌توان آزمون‌های موجود را به سه دسته کلی مطابق جدول (۲-۳) تقسیم بندی نمود:

جدول شماره ۲-۳: انواع آزمایش‌های مربوط به میزان سختی [۱۸].

آزمون سختی الاستیک <sup>۲</sup> (سختی برگشت یا انعکاس)	آزمون سختی خراش <sup>۳</sup> (مقاومت در برابر برش یا سایش)	آزمون سختی فرورفتگی <sup>۴</sup> (مقاومت در برابر فرورفتگی)
در این روش، ساچمه سختی از فاصله ای معین بر سطح فلز مورد آزمون می‌افتد و با توجه به ارتفاع برگشت ساچمه که خود نشانگر میزان انرژی جذب شده توسط سطح فلزات است، سختی فلز تعیین می‌شود. دستگاه اسکروسکوپ متداول‌ترین دستگاه آزمایش سختی دینامیکی است و سختی را بر حسب ارتفاع بازگشت ساچمه اندازه می‌گیرد.	در این روش بر اساس رده بندی کانی‌های مختلف بر اساس توانائی‌های هر یک در ایجاد خراش بر روی دیگری است. بدین ترتیب جسم سخت تر قابلیت ایجاد خراش بر روی جسم نرم تر را دارا می‌باشد. آزمون سختی موس در بین زمین شناسان بسیار رایج بوده، که در آن نرم ترین کانی با شماره ۱ " تالک" بوده و سخت ترین آن با شماره ۱۰ " الماس" است. عیب بزرگ این روش حدودی بودن آن و عدم یکنواختی بین مقیاس‌ها می‌باشد.	در این آزمون که به آزمون سختی نفوذ نیز مرسوم می‌باشد، میزان سختی را بوسیله مقاومت جسم در مقابل فرورونده می‌سنجند. بطور کلی عدد سختی، عدد و ارزشی است که در روش‌های مختلف این آزمون بدست می‌آید و تا حدود زیادی با یکدیگر و با "استحکام کششی نهایی" <sup>۵</sup> فلزات غیر شکننده متناسب است. در این روش‌ها با فرورودن یک فرورونده (ساچمه، هرم یا مخروط‌های سخت فولادی) و گود کردن جسم، سختی آن را از روی عمق فرورفتگی یا عرقچین حاصله اندازه گیری می‌کنند.

<sup>1</sup> Severe Plastic Deformation (SPD)

<sup>2</sup> Elastic Hardness Test

<sup>3</sup> Scratch Hardness Test

<sup>4</sup> Penetration Hardness Test

<sup>5</sup> Ultimate tensile strength

چهار روش متداول برای انجام آزمایش سختی فرورفتگی یا سختی نفوذی، آزمون سختی برینل<sup>۱</sup>، ویکرز<sup>۲</sup>، ریزسختی<sup>۳</sup> و راکول<sup>۴</sup> می باشد [۱۸]. در این رساله از آزمون سختی راکول استفاده شد (آزمون سختی راکول پرکاربردترین روش می باشد که اکثر آزمایشگاهها بر اساس راکول اعلام نتایج می نمایند).

مهم ترین، پرکاربرد ترین و متداولترین آزمون سختی، آزمایش راکول است. دلیل این امر سرعت، عدم امکان بروز خطا از طرف شخص، قابلیت تشخیص تغییرات کوچک سختی در فولاد سخت شده و کوچک بودن اندازه فرورفتگی است به طوری که قطعات عملیات حرارتی شده نهایی می توانند بدون صدمه دیدن آزمایش شوند. در این آزمایش از عمق فرورفتگی تحت بار ثابت به عنوان مقیاسی برای سختی استفاده می شود. ابتدا یک بار فرعی به اندازه ۱۰ Kg وارد می شود. این بار نیاز به آماده کردن سطح را به حداقل رسانده و تمایل به ایجاد فرورفتگی یا برآمدگی توسط سنبه را کم می کند. سپس بار اصلی وارد شده و عمق فرورفتگی به طور خودکار بر حسب اعداد سختی قراردادی بر یک سنجه صفحه ای مندرج ثبت می شود. برای مثال مواد سخت شده در مقیاس c (Rc) با سنبه الماسی و بار اصلی ۱۵۰ Kg آزمایش می شوند. دامنه مفید این مقیاس از حدود Rc ۲۰ تا Rc ۷۰ است. مواد نرم تر معمولاً در مقیاس B (Rb) با گلوله فولادی به قطر ۱/۵ cm و بار اصلی ۱۰۰ Kg اندازه گیری می شوند. دامنه این مقیاس از RB تا RB ۱۰۰ است. مقیاس A (Ra) با فرورونده الماس و بار اصلی ۶۰ Kg گسترده ترین مقیاس سختی راکول است و برای موادی از برنج تابانیده شده گرفته تا کاربردهای سمانته شده بکار می رود. نکات زیر باید در آزمایشهای سختی رعایت شوند:

---

<sup>1</sup> Brinell Hardness Test

<sup>2</sup> Vickers Hardness Test

<sup>3</sup> Microhardness Hardness Test

<sup>4</sup> Rockwell Hardness Test

- سنبه و قسمت نگهدارنده قطعه باید تیز بوده و به طور مناسب قرار گیرند.
  - سطح آزمایش باید تمیز و خشک، صاف و بدون زنگ باشد. معمولا برای آزمایش راکول، سطحی که سنگ زبر خورده باشد کافی است.
  - سطح باید صاف و عمود بر سنبه باشد.
  - آزمایش سطوح استوانه ای سختی را کمتر از سختی واقعی نشان داده و میزان خطا به شعاع انحناء، بار، سنبه و سختی ماده بستگی دارد.
  - ضخامت نمونه باید طوری باشد که درست در آن طرف قطعه علامت یا برآمدگی ایجاد نشود.
- توصیه می‌شود که ضخامت حداقل ده برابر عمق فرورفتگی باشد. آزمایش باید فقط در یک طرف ماده انجام شود. فاصله بین فرورفتگی‌ها باید سه تا پنج برابر قطر فرورنده (indenter) باشد. سرعت وارد شدن بار باید استاندارد باشد. این عمل با قرار دادن کمک فنر به دستگاه آزمایش راکول انجام می‌شود. سرعت وارد کردن بار باید با دقت کنترل شود، به این دلیل که تغییرات سختی در فلزات خیلی نرم زیاد است. برای چنین مواردی دسته دستگاه آزمایش راکول باید به محض وارد کردن کامل بار اصلی به عقب برگردانیده شود [۱۸].

## ۲-۱-۳- تعریف و مفهوم عملیات سطحی و انواع آن

عملیات سطحی عبارت است از رسوب دهی یک ماده پرکننده روی سطح قطعه کار برای به دست آوردن خواص یا ابعاد مورد نظر که به طور معمول به منظور افزایش عمر کاری قطعه یا جایگزینی فلزی به کار می‌رود که فرسوده یا خورده شده است. عملیات سطحی می‌تواند موجب افزایش مقاومت به خوردگی، مقاومت به سایش، چقرمگی، یا خواص ضد اصطکاکی در محل مورد نظر شود. برخی از پوشش‌ها توسط فرآیندهای جوشکاری گازی یا قوسی و یا توسط فرآیندهای پاشش دهی حرارتی رسوب داده می‌شوند و روش‌های دستی، نیمه خودکار یا خودکار را می‌توان برای هر یک از فرآیندها به کار برد. مواد پرکننده مناسب در شکل‌ها و انواع گوناگون نظیر میله جوشکاری، الکترودهای پوششدار، خمیرها و پودرها موجود هستند. چسبندگی این مواد بر

روی فلزات پایه از طریق نفوذ، پیوندهای متالورژیکی یا پیوندهای مکانیکی صورت می‌گیرد. روش‌های گوناگون عملیات سطحی به چندین گروه مطابق جدول (۴-۲) تقسیم می‌شوند:

جدول ۲-۴: روش‌های گوناگون عملیات سطحی [۱۸،۱۹].	
پُر کردن (بازسازی) <sup>۱</sup>	در این روش با افزودن فلز جوش به سطح فلز پایه، قطعاتی که نیاز به بازسازی ابعادی دارند را می‌توان تعمیر نمود. همچنین می‌توان به منظور بزرگ تر کردن یا پر کردن سطح قطعه از این روش استفاده کرد. در فرآیند بازسازی، خواص لایه رسوب داده شده اغلب مشابه با خواص فلز قطعه کار می‌باشد.
لایه نشانی <sup>۲</sup>	لایه نشانی نیز به منظور افزودن یک یا چند لایه از فلز جوش به سطح اتصال یا سطوحی که جوشکاری می‌شوند، انجام می‌گیرد. این روش بر خلاف روش بازسازی، جهت بزرگ کردن ابعاد انجام نمی‌شود، بلکه به دلایل متالورژیکی صورت می‌گیرد. با روش‌های مختلف جوشکاری لایه‌های مورد نظر را می‌توان رسوب داد، اما باید توجه داشت تا حد امکان عمق نفوذ و میزان رقت <sup>۳</sup> کم باشد.
روکش کاری <sup>۴</sup>	روکش جوش داده شده عبارت است از یک لایه نسبتاً ضخیم فلز پر کننده که روی فلز پایه از جنس فولاد کربنی یا کم آلیاژ قرار می‌گیرد و سبب افزایش مقاومت سطحی قطعه در برابر خوردگی می‌شود. فرآیند معمولاً توسط روش‌های قوسی مانند جوشکاری زیر پودری، جوشکاری الکتروود دستی و جوشکاری قوسی تحت گاز محافظ انجام می‌گیرد، هر چند فرآیندهای جوشکاری حالت جامد نظیر روکش‌دهی انفجاری و روکش دهی غلطکی نیز می‌توانند مورد استفاده قرار گیرد.
سخت پوشی <sup>۵</sup>	فرآیندهای سخت پوشی به گروهی از فرآیندها اطلاق می‌شود که در آنها با به کار بردن مواد مقاوم به سایش و سخت روی سطح یک قطعه، از بین رفتن مواد که ممکن است در اثر عوامل مختلفی چون سایش، ضربه، فرسایش، خوردگی سایشی، خستگی حرارتی و ... به وجود آید، کاهش پیدا می‌کند. سخت پوشی یک قطعه می‌تواند توسط روش‌هایی چون فرآیندهای جوشکاری و پاشش دهی حرارتی انجام شود و با استفاده از عملیات حرارتی یا فرآیندهای اصلاح سطح مانند سخت کاری شعله‌ای یا نیتروژن دهی نمی‌توان یک قطعه را سخت پوشی کرد. کاربردهای سخت پوشی، به منظور کنترل سایش با توجه به نوع مکانیزم سایش، به طور گسترده‌ای تغییر می‌کند. محدوده این کاربردها از سایش بسیار شدید در ابزار برش، ابزار حفاری، چرخهای آسیا، شیرها و پمپ‌هایی که در معرض مایعات تا سایش فلزات روانکاری نشده یا به طور جزئی روانکاری شده روی هم، نظیر شیرهای کنترل و یاتاقان‌ها تغییر می‌کند. سخت پوشی نسبت به سایر روش‌های عملیات سطحی از اهمیت و کاربرد بیشتری برخوردار است.

<sup>1</sup> Build up

<sup>2</sup> Buttering

<sup>3</sup> Dilution

<sup>4</sup> Cladding

<sup>5</sup> Hardfacing



## ۲-۲- انتخاب آلیاژ سخت پوشی

انتخاب آلیاژ سخت پوشی با توجه به دو عامل اصلی میزان سایش و هزینه صورت می‌گیرد. اگرچه عوامل مهم دیگری مانند نوع فلز پایه، فرآیند رسوب دهی، ضربه، خوردگی، اکسیداسیون و ... نیز باید در نظر گرفته شوند. به طور معمول آلیاژهای سخت پوشی به صورت پودر یا میله بدون روپوش، میله پوشیده شده با فلاکس، سیم جوش‌های جامد و سیم جوش‌های توپودری با طول زیاد به کار می‌روند. معمول‌ترین فرآیندهای سخت پوشی همراه با نوع مواد مصرفی متناسب با آنها در جدول (۲-۵) ارائه شده‌اند.

جدول ۲-۵: فرآیندهای معمول سخت پوشی همراه با نوع مواد مصرفی آنها [۱۹]

فرآیندهای سخت پوشی	شکل های مصرف
جوشکاری استیلن/اکسیژن	میله‌های جوشکاری
جوش قوس الکتریکی با الکتروود روکشدار	سیم جوش روکش دار
جوش کاری تنگستن گاز	سیم جوش میله‌ای بدون روکش
جوش قوس الکتریکی با پوشش گاز	سیم جوش میله‌ای
جوشکاری با قوس الکتریکی	سیم جوش میله‌ای
جوشکاری زیر پودری	سیم جوش توپودری
جوشکاری با قوس پلاسما	پودری
جوشکاری با لیزر	پودری

به طور کلی، مقاومت به ضربه آلیاژهای سخت پوشی با افزایش میزان کاربید، کاهش پیدا می‌کند. در مواقعی که مقاومت در برابر ترکیبی از سایش و ضربه مورد نظر باشد، با توجه به نوع محیط کاری، یکی از این دو عامل اهمیت بیشتری پیدا می‌کند. در کاربردهایی که مقاومت در برابر ضربه اهمیت زیادی دارد، از فولادهای آستنیتی منگن‌دار<sup>۱</sup> می‌توان برای بازسازی قطعات استفاده کرد [۲۰].

در بسیاری از فرآیندهای شیمیایی یا صنایع پتروشیمی، سایش همراه با خوردگی ناشی از محلول‌های اسیدی و قلیایی است. در چنین محیط‌هایی تعداد کمی از آلیاژهای سخت پوشی پایه آهنی مقاومت لازم در

<sup>1</sup> Austenitic-Mn alloy steels

برابر خوردگی را تأمین می‌کنند. در حالیکه توسط آلیاژهای پایه کبالت یا نیکل می‌توان به مقاومت مورد نظر در برابر ترکیب سایش و خوردگی دست پیدا کرد.

آلیاژهای پایه آهنی در برابر اکسیداسیون و خوردگی داغ نیز مقاومت کمی دارند. آلیاژهای پایه نیکل حاوی براید نیز به دلیل ناکافی بودن میزان کروم در زمینه، مقاومت خوبی در برابر اکسیداسیون ندارند. بنابراین آلیاژهای پایه نیکل یا کبالت حاوی ترکیبات بین فلزی لاهه<sup>۱</sup> یا حاوی کاربید در شرایطی که به مقاومت به سایش همراه با مقاومت در برابر اکسیداسیون و خوردگی داغ مورد نیاز است، توصیه می‌شوند. حفظ استحکام یک آلیاژ در کاربردهای دمای بالا، به عنوان مثال در قالب‌های آهنگری داغ که در حرارت حدود ۸۷۰°C کاربرد دارند، به منظور مقاومت در برابر سایش از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. آلیاژهای پایه آهنی با ساختار مارتنزیتی، در دماهای بالا سختی خود را از دست می‌دهند. به طور کلی حفظ استحکام یک آلیاژ سخت پوشی در دماهای بالا، با افزایش میزان مولیبدن یا تنگستن موجود در زمینه، افزایش پیدا می‌کند [۱۹]. در جدول (۲-۶) لیستی از مواد سخت پوشی همراه با مزایا و کاربرد آنها ارائه شده است.

---

<sup>1</sup> Laves Phase

جدول ۲-۶: راهنمای انتخاب آلیاژهای سخت پوشی [۱۹]

نوع مواد با سختی بالا	مزایا	کاربردها
آلیاژ با کروم بالا استنیتی مارتنزیتی	خواص مقاوم به سایش توانایی سخت شدن بعد از بازپخت	کاربردهای تخصصی مقاوم به یایش تجهیزات سخت کاری مقاوم به سایش در دمای بالا بعنوان پوشش سخت جهت پوشش دهی سخت آسیاها حتی در آسیاکاری دما بالا
آلیاژ تنگستن- مولیبدن	سختی بالا	کاربردهای مقاوم در برابر انواع سایش و فرسایش در دمای بالا توربین های گاز
آلیاژ کروم- تنگستن- کبالت	سختی و مقاومت فشاری در حرارت بالا مقاوم در برابر خزش بسیار بالا	

### ۲-۲-۱- طبقه بندی مواد سخت پوشی

مواد سخت پوشی را به چندین روش می توان دسته بندی کرد.

- طبقه بندی مواد سخت پوشی بر اساس موارد کاربرد
- طبقه بندی مواد سخت پوشی بر اساس آلیاژهای پایه آهن

### ۲-۲-۲- طبقه بندی مواد سخت پوشی بر اساس موارد کاربرد

یکی از روش های دسته بندی این مواد بر اساس موارد کاربرد آنها است. بر این اساس آلیاژهای سخت

پوشی در پنج گروه زیر مطابق جدول (۲-۷) قرار می گیرند:

جدول ۲-۷: طبقه بندی مواد سخت پوشی [۲۱، ۱۹].

<p>این آلیاژها شامل فولادهای کم آلیاژ پرلیتی و فولادهای پر آلیاژ آستنیتی منگنزار می‌باشند. هدف از به کارگیری اغلب این آلیاژها، بازسازی قطعات ساییده شده به منظور به دست آوردن ابعاد اصلی و نیز فراهم کردن بستر و زیر لایه مناسب برای کاربرد آلیاژهای سخت پوشی واقعی می‌باشد. با این وجود از فولادهای منگنزار آستنیتی برای مقاومت در برابر شرایط سایشی متوسط و ضعیف نیز استفاده می‌شود. آلیاژهای مخصوص بازسازی را می‌توان جهت ترمیم سطوح سایشی سرهای ریل‌های راه آهن، غلتکهای نورد فولاد و چرخ دنده‌های بزرگ کم سرعت به کار برد.</p>	<p><b>آلیاژهای مخصوص بازسازی</b></p>
<p>این آلیاژها شامل فولادهای مارتنزیتی هوا سخت می‌باشند که با رعایت ملاحظات ویژه می‌توان از آنها بدون بروز هرگونه ترک خوردگی برای سطوح تحت سایش قطعات ماشین آلات مختلف استفاده کرد. (در حقیقت این آلیاژها، آلیاژهای سخت پوشی مخصوص قطعات ماشین آلات می‌باشند). به عنوان مثال می‌توان به کاربرد آنها در قطعات تحت بار تراکتورها و بیل‌های قدرتی، غلتک‌های نورد فولاد و چرخ‌های جرثقیل‌ها اشاره کرد.</p>	<p><b>آلیاژهای مقاوم در برابر سایش فلز به فلز</b></p>
<p>این آلیاژها چدنهای سفید پر کروم می‌باشند که کاربردهای کروم موجود در ریز ساختار آنها در حین فرآیند انجماد فلز جوش تشکیل می‌شود. این آلیاژها در برابر سایش ناشی از لغزش و خرد شدن که به ترتیب از نوع سایش کم‌تنش و پرتنش هستند، مقاومت خوبی از خود نشان می‌دهند. به عنوان مثال می‌توان به کاربرد آنها در تیغه‌های بیل‌های مکانیکی، قطعات سنگ شکن‌ها، لبه‌های مگاره‌ها و مته‌ها اشاره کرد.</p>	<p><b>آلیاژهای مقاوم در برابر سایش فلز به زمین</b></p>
<p>این مواد در واقع مواد کامپوزیتی می‌باشند که به شکل لوله‌هایی از جنس فولاد کربنی حاوی دانه‌های کاربید تنگستن عرضه می‌شوند. در اثر قوس الکتریکی برقرار شده بین لوله مذکور و سطح مورد نظر، لوله فولادی ذوب شده و دانه‌های کاربید تنگستن در داخل حوضچه مذاب توزیع شده و پس از انجماد زمینه در جای خود ثابت باقی می‌مانند. دانه‌های کاربید تنگستن مقاومت بسیار خوبی در برابر شرایط سایشی و برشی بسیار شدید از خود نشان می‌دهند. به عنوان مثال می‌توان به کاربرد آنها در تیغه‌های برش، لبه‌های نگهدارنده مته‌های مخصوص صخره‌ها، تجهیزات حفاری، استخراج و خاک برداری اشاره کرد.</p>	<p><b>آلیاژهای مقاوم در برابر سایش‌های شدید فلز به زمین و لبه‌های برش (کاربیدهای تنگستن)</b></p>
<p>این مواد در محیط‌هایی که برای آلیاژهای سخت پوشی پایه آهنی بسیار مخرب بوده و یا به مقاومت زیادی در برابر نوع خاصی از سایش (علاوه بر سایش خراشان<sup>۱</sup>) نیاز می‌باشد، کاربرد دارند. این آلیاژها در سه گروه زیر قرار می‌گیرند:</p> <p>۱- آلیاژهای پایه کبالت که شامل فازهای کاربیدی و ترکیبات بین فلزی هستند.</p> <p>۲- آلیاژهای پایه نیکل که شامل فازهای بورایدی، کاربیدی و ترکیبات بین فلزی هستند.</p> <p>۳- آلیاژهای پایه مس</p>	<p><b>آلیاژهای مقاوم در دماهای بالا و محیط‌های خورنده (آلیاژهای سخت پوشی غیر آهنی)</b></p>

<sup>1</sup> Abrasive wear

بر خلاف آلیاژهای سخت پوشی پایه آهن و مواد کامپوزیتی کاربید تنگستنی که دارای کاربردهای وسیعی در تجهیزات کشاورزی، معدنکاری، ساختمانی و صنعت فولاد می‌باشند، آلیاژهای سخت پوشی غیر آهنی در تجهیزات صنایع شیمیایی، نیروگاه‌ها، خودروها و صنایع نفت که مستلزم یک شرایط کاری بحرانی (مانند بالا بودن دمای کاری) و مقاومت به سایش می‌باشند کاربرد دارند. آلیاژهای پایه کبالت مقاومت خاصی در برابر تغییر شکل و خوردگی شیمیایی دمای بالا ( $500^{\circ}\text{C}$ – $900^{\circ}\text{C}$ ) از خود نشان داده و از آنها برای پوشش سطوح قالب‌ها و غلتک‌های هدایت کننده در صنعت فولاد استفاده می‌شود. از کاربرد های متداول دیگر در مورد آلیاژهای سخت پوشی غیر آهنی، می‌توان به بهبود خواص سطحی سطوح نشیمن‌گاه‌های شیرها (شیرهای کنترلی و سوپاپ‌های خروجی آگزوز موتورهای دیزلی)، قطعات پمپ‌ها، یاتاقان‌های مته صخره‌ها، یاتاقان‌های کشتی‌ها و تجهیزات صنایع شیشه‌سازی می‌توان اشاره کرد.

### ۲-۲-۳- طبقه‌بندی مواد سخت پوشی بر اساس آلیاژهای پایه آهن

آلیاژهای سخت پوشی پایه آهن را می‌توان بر اساس میکروساختار فلز جوش به صورت زیر طبقه بندی

کرد:

- ❖ آلیاژهای بازسازی فریتی / باینیتی<sup>۱</sup> (FB)
- ❖ آلیاژهای مارتنزیتی (MS)
- ❖ آلیاژهای آستنیتی / مارتنزیتی مخلوط شده (MA)
- ❖ آلیاژهای آستنیتی منگن‌دار (AM)
- ❖ آستنیت اولیه همراه با یوتکتیک آستنیت- کربید (PA)
- ❖ آلیاژهای آستنیت- کربید نزدیک یوتکتیک (NE)
- ❖ کربیدهای اولیه همراه با یوتکتیک آستنیت- کربید (PC)

<sup>1</sup> Ferritic-Bainitic (FB) Steel

در جدول (۸-۲)، مقایسه ای از خواص آلیاژهای مختلف سخت پوشی جهت تحلیل آورده شده است.

جدول ۸-۲: مقایسه خواص آلیاژهای مختلف سخت پوشی [۲۱]

← کم      مقاوم در برابر سایش      زیاد →				کم ↑ مقاوم در برابر سایش و گرما ↓ زیاد
فولاد منگنزدار ۱۴٪ فولادهای منگنز- کروم دار ۱۴٪	فولادهای مارتنزیتی	فولادهای قوسی کاربیدی	فولادهای استیلن اکسی کاربید	
آلیاژهای مارتنزیتی				
فولادهای نیکل- کروم دار ۸-۱۸٪	فولادهای تنگستن- مولیبدن دار	فولادهای مارتنزیتی استنتیتی		
آلیاژهای پایه کبالت - نیکل				
← کم      مقاوم در برابر ضربه      زیاد →				

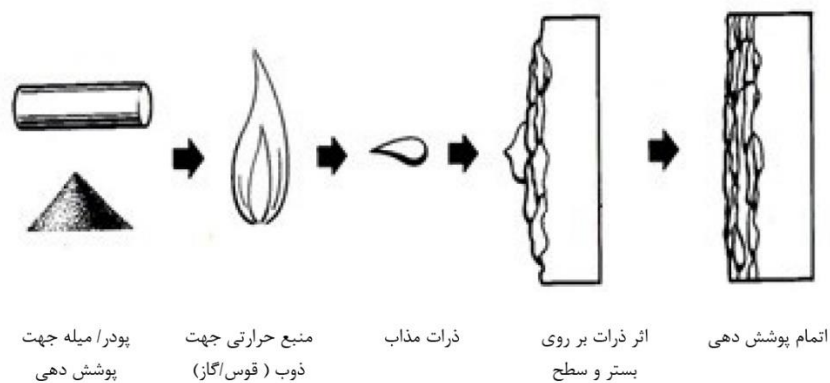
## ۲-۲-۴- فرآیندهای پاشش حرارتی و انواع آن

فرآیندهای پاشش حرارتی به گروهی از فرآیندها گفته می‌شود که در آنها مواد و ترکیبات فلزی و غیر فلزی (مانند مواد سرامیکی و پلیمری)، بر روی یک زمینه آماده شده، اسپری می‌شوند و یک پوشش چسبنده را تشکیل می‌دهند. مواد پوشش دهنده که به صورت سیم، میله یا پودر هستند از طریق واحد اسپری کننده تغذیه می‌شوند و تا رسیدن به حالت مذاب یا پلاستیک، گرم شده و توسط یک جریان گاز فشرده با سرعت زیاد به سطح کار برخورد کرده و باعث صاف شدن سطح (قرار گرفتن در ناهمواری‌های زمینه) و تولید یک لایه پوشش نازک می‌کنند. چسبندگی لایه در اثر قفل درونی<sup>۱</sup> و ذوب ذرات ریز حاصل می‌شود. به طور کلی دمای زمینه را می‌توان کمتر از ۲۰۰°C نگه داشت تا تغییرات متالورژیکی در آن رخ ندهد. مشعل اسپری، حرارت لازم برای ذوب را از طریق احتراق گازها، قوس الکتریکی یا پلاسما فراهم می‌کند. در این فرآیند به دلیل عدم ذوب فلز پایه، میزان رقت صفر است. شکل (۱-۲) کلیات یک فرآیند پاشش حرارتی را نشان می‌دهد. ساختارهای رسوب کرده پوشش‌های پاشش حرارتی با مواد مشابه با فرآیند های پاششی متفاوت

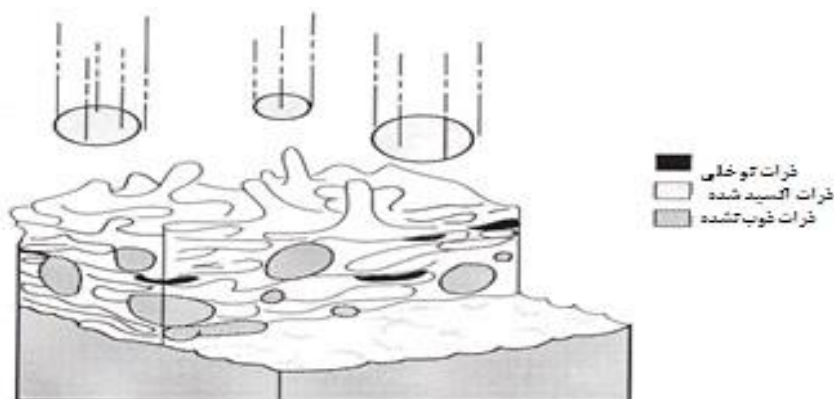
<sup>1</sup> Inter locking

هستند، زیرا با توجه به اینکه مواد به صورت مذاب می‌باشند، ترکیب پوشش، معمولاً تحت تاثیر واکنش با گازهای فرآیند و اتمسفر قرار می‌گیرد. به عنوان مثال زمانی که هوا یا اکسیژن به عنوان گاز مورد استفاده در فرآیند به کار می‌رود، ممکن است مواد پوششی اکسید شده و قسمتی از پوشش را تشکیل دهند.

پوشش‌های اسپری حرارتی معمولاً در چندین پالس (پاشش) توسط یک مشعل بر سطح قطعه تشکیل می‌شوند. تغییرات ساختاری به نوع فرآیند پاشش حرارتی، پارامترهای فرآیند، تکنیک و ماده پاششی مورد استفاده بستگی دارد. پیوند بین پوشش اسپری شده و زمینه معمولاً توسط نیروهای مکانیکی، همچنین چسبندگی، نفوذ و جوشکاری حالت جامد جزئی به وجود می‌آید شکل (۲-۲). آماده سازی مناسب سطح قبل از اسپری کردن، مهمترین تاثیر را بر استحکام پیوند پوشش داده شده و زمینه دارد [۲۳، ۱۹].



شکل ۲-۱: شماتیکی از کلیات فرآیند پاشش حرارتی [۱۹]



شکل ۲-۲: پوشش حاصل از پاشش حرارتی بر روی یک سطح ناهموار [۱۹]

یکی از مزایای اصلی فرآیندهای پاشش حرارتی، تنوع زیاد موادی است که به منظور پوشش در این روش ها به کار می‌روند. هر ماده‌ای که بدون تجزیه شدن ذوب شود را می‌توان در این فرآیند به کار برد. مزیت دیگر، آن است که در اکثر فرآیندهای پاشش حرارتی می‌توان پوشش را بدون گرم کردن خیلی زیاد زمینه، ایجاد کرد. در نتیجه بدون اینکه خواص قطعه تغییر کند یا تغییر شکل حرارتی در آن ایجاد شود، فرآیند انجام می‌گیرد. مزیت سوم، توانایی پوشش مجدد قسمت های آسیب دیده بدون تغییر خواص یا ابعاد قطعه است. یکی از معایب اصلی فرآیندهای پاشش حرارتی آن است که پوشش را فقط در جایی می‌توان نشانند که دیده شود. البته محدودیت‌های اندازه هم وجود دارد که پوشش‌دهی قطعات کوچک یا حفرات عمیق که مشعل یا تفنگ در آن قرار نمی‌گیرد را مشکل می‌سازد. کاربردهای پوشش‌های پاشش حرارتی بسیار وسیع هستند اما هدف عمده از ایجاد این پوشش‌ها، مقاومت در برابر خوردگی و فرسایش است. همچنین بازیابی ابعادی، سدهای حرارتی، هادی‌های حرارتی، مقاومت یا هادی‌های الکتریکی، حفاظ‌های الکترو مغناطیسی از دیگر کاربردهای این پوشش‌ها هستند. این پوشش‌ها در همه صنایع از جمله هوا فضا، خودروسازی، معدن، کاغذ، نفت و گاز، مواد شیمیایی، پلاستیک‌ها و بیوشیمی کاربرد دارند [۲۳، ۱۹].

اختراع اولین فرآیند پاشش حرارتی توسط M.U.Schoop از سوئیس در سال ۱۹۱۱ انجام شد که امروزه به آن پاشش شعله ای<sup>۱</sup> گفته می‌شود. فرآیندهای پاشش حرارتی را بر اساس روش تولید حرارت می‌توان به دو گروه تقسیم کرد. گروه اول که در آنها، گازهای قابل اشتعال به عنوان منبع حرارتی به کار می‌رود و گروه دوم که نیروی برق وظیفه تامین حرارت را دارد. به طور کلی مهمترین روش‌های پاشش حرارتی شامل پنج تکنیک

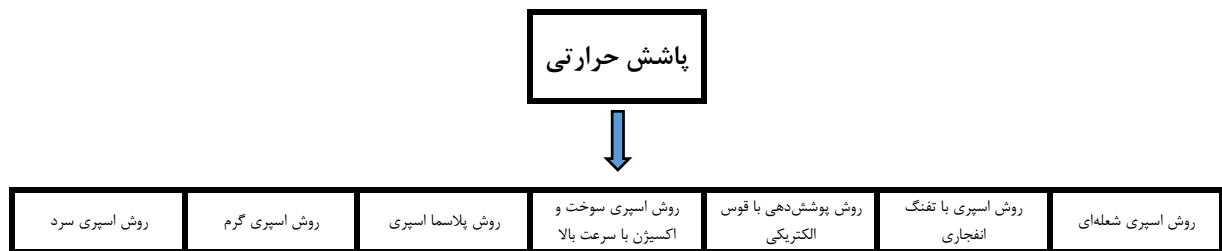
---

<sup>1</sup> Flame spraying



پاشش سیمی توسط شعله اکسی گاز<sup>۱</sup>، پاشش سیمی توسط قوس الکتریکی<sup>۲</sup>، پاشش پودری توسط شعله اکسی گاز<sup>۳</sup>، پاشش پودری توسط قوس پلاسما<sup>۴</sup> و پاشش پودری توسعه شعله اکسی گاز با سرعت بالا<sup>۵</sup> می‌باشند [۲۴].

در شکل (۲-۳) ساختار و طبقه بندی فرآیندهای پاشش حرارتی نشان داده شده است.



شکل ۲-۳: فرآیندهای پاشش حرارتی [۲۴]

در میان مهمترین فرآیندهای ذکر شده، تکنیک قوس پلاسما بیشترین کاربرد را دارد. بررسی‌ها نشان می‌دهد که در سال ۲۰۰۰، پاشش قوس پلاسما، حدود ۴۸٪، فرآیند HVOF، ۲۵٪، روش قوس الکتریکی ۱۵٪ و روش‌های احتراقی (OFW, OFP) مجموعاً ۱۲٪ میزان کاربرد را تشکیل داده‌اند [۲۵، ۲۶].

انواع روش‌های پاشش حرارتی شامل موارد ذیل می‌باشند:

- ❖ پاشش سیمی توسط شعله اکسی‌گاز<sup>۶</sup> [۲۵]
- ❖ پاششی سیمی توسط قوس الکتریکی<sup>۷</sup> [۲۷]
- ❖ پاشش پودری توسط شعله اکسی‌گاز<sup>۸</sup> [۲۶]
- ❖ پاشش شعله‌ای و نفوذ [۱۸]

<sup>1</sup> Oxyfuel wire (OFW) spray  
<sup>2</sup> Electric arc wire (EAW) spray  
<sup>3</sup> Oxyfuel powder (OFP) spray  
<sup>4</sup> Plasma arc (PA) powder spray  
<sup>5</sup> High-velocity oxyfuel (HVOF) powder spray  
<sup>6</sup> OFW  
<sup>7</sup> EAW  
<sup>8</sup> OFP

❖ پاشش پودری توسط قوس پلاسما<sup>۱</sup> [۲۶]

❖ پاشش پلاسما در خلاء<sup>۲</sup> [۲۲]

❖ پاشش توسط قوس پلاسمای منتقل شده<sup>۳</sup> [۲۷]

❖ پاشش پودری توسط شعله اکسی گاز با سرعت بالا<sup>۴</sup>

➤ احتراق پالسی [۱۸]

➤ احتراق پیوسته [۱۹].

## ۲-۲-۵- خواص فرآیند پاشش حرارتی

از جمله خواص بارز فرآیند پاشش حرارتی، کاربردهای گسترده آن می‌باشند که ناشی از دو مزیت مهم هستند:

❖ انتخاب نامحدود مواد پاشش دهی

❖ قابلیت کنترل فرآیند پاشش حرارتی

## ۲-۲-۶- پوشش‌های مقاوم در برابر خوردگی

آلومینیم، روی و آلیاژهای آن‌ها متداول ترین مواد به کار رفته در پوشش‌های اسپری حرارتی مقاوم در برابر خوردگی هستند. این مواد کاربرد گسترده‌ای برای جلوگیری از خوردگی آهن و فولاد دارند و حفاظت آنها بسیار طولانی مدت (بیش از ۲۰ سال) هم در زیر آب و هم در محیط صنعتی می‌باشد. دیگر مواد پوششی مقاوم به خوردگی، فولادهای زنگ نزن استینیتی، آلومینیم، برنز، آلیاژهای پایه نیکل و مواد Y، Al،Cr، M می‌باشد. انتخاب آلیاژ مورد نظر به محیط کار بستگی دارد. وقتی از این آلیاژها استفاده می‌شود، باید توجه

<sup>1</sup> PA

<sup>2</sup> Vacuum Plasma Spraying

<sup>3</sup> Transferred plasma-arc

<sup>4</sup> HVOF

داشت که این پوشش‌ها سلول گالوانیک با فلز پایه فولادی تشکیل ندهند. این مشکلی است که به علت وجود تخلخل پوشش‌های اسپری حرارتی رخ می‌دهد. باید توجه زیادی شود که این پوشش‌ها به خوبی آب‌بندی شوند تا ماده خورنده به فلز زیرین نفوذ نکند و خوردگی در مرز پوشش و زمینه رخ ندهد.

## ۷-۲-۲- پوشش‌های مقاوم در برابر سایش

این پوشش‌ها جهت مقاومت در برابر سایش، حفره دار شدن، خوردگی سایشی و کاهش اصطکاک به کار می‌روند و شامل محدوده وسیعی از فلزات و آلیاژهای آن‌ها، سرامیکی، سرمت‌ها، کاربیدها و حتی پلاستیک‌های کم اصطکاک هستند. سختی پوشش‌ها از ۲۰ تا ۷۰ راکول متغیر است [۲۸، ۲۹، ۳۰]. زمینه‌های فلزی در اثر انجماد سریع، افزودن جداگانه فازهای سخت مانند کاربیدهای کروم، تنگستن، تیتانیوم و یا تانتالوم و ناخالصی‌های اکسیدی سخت می‌شود [۳۱، ۳۲، ۳۳]. در جدول (۹-۲) لیست پوشش‌های مختلف مقاوم در برابر سایش و اصطکاک آمده است.

جدول ۹-۲: پوشش‌های پاشش حرارتی مورد استفاده در کاربردهای سخت پوشی [۱۹]

نوع پوشش	فرآیند پوشش دهی	مواد پوشش	کاربردها
پوشش‌های چسبنده	CFW, EAW, OFP, PA, HVOF	پوشش‌های بلبرینگ نرم آلومینیوم برنز	یاطاقان و بلبرینگ، ابزارهای پرس هیدرولیکی پوسته محورهای یاطاقان
	OFW, EAW OFW, EAW, OFP OFW, EAW, OFP	آلیاژ جدید پایه قلع آلیاژ یاطاقان الیازهای قلع	قطعات پیستون، کمپرسور، نگهدارنده‌های یاطاقان
	PA OFW, EAW, PA OFW, EAW OFP, PA OFP, PA, HVOF PA, HVOF PA	یاطاقان با پوشش سخت: Mo/Ni-Cr-B-Si ترکیب مولیبدن Alumina/Titania Tungsten carbide Co-Mo-Cr-Si Fe-Mo-C	گیره‌های میل لنگ برای پانچ تجهیزات تحت فشار، رول آسیا آچار شلاقی یاطاقان فرمان، شفت پروانه‌ای لوله‌های دنداندار، حلقه‌های پیستونی (احتراق داخلی)؛ روتور پمپ سوخت

<p>آبکاری پمپ میله های پیستون، پولیش لوله آستر، و کوپلینگ میله پمپاژ صنعت نفت، میکسر بتن پیچ نوار نقاله، سنگ زدنی چکش های صنعتی صنایع دخانیات حلقه های ضد سایش، سلول باتری های خشک سنباده و تجهیزات صیقل، میله های سوخت</p>	<p>Aluminum oxide Chromium oxide Tungsten carbide Chromium carbide Ni-Cr-B-SiC/WC (ذوب شده) Ni-Cr-B-SiC (ذوب شده) Ni-Cr-B-SiC (دیرگداز)</p>	<p>PA PA PA, HVOF PA, HVOF OFP, HVOF OFP, HVOF HVOF</p>	<p>پوشش ضدسایش</p>
<p>شفت سر موتور، ماشین تراش و مرکز روغن های تحت فشار بازوهای نگه دارنده، بازوهای شیب دار، پیستون حلقه های احتراق داخلی پوسته های سیلندر</p>	<p>Molybdenum Mo/Ni-Cr-B-SiC Co-Mo-Cr-Si</p>	<p>OFW, PA PA PA, HVOF</p>	<p>خستگی سطحی فرسایش: برنامه های کاربردی</p>
<p>قاب ردیاب هواپیما ( ترکیبات ضد ردیاب) قطعات دارای خواص رادیو اکتیو اجزاء موتور هواپیما</p>	<p>Aluminum bronze  Cu-Ni-In Cu-Ni</p>	<p>OFW, EAW, PA, HVOF PA, HVOF PA, HVOF</p>	<p>فرسایش در رزونانس های کاربردی کوچک:</p>
<p>پرس کمپرسور هوا نگهدارنده های کمپرسور قطعات گرد و غبار فن و سفت کننده (همه اجزای موتور جت)</p>	<p>Co-Cr-Ni-W Chromium carbide</p>	<p>PA, HVOF PA, HOVF</p>	<p>دمای پایین (<math>&lt;540^{\circ}\text{C}</math>, or <math>1000^{\circ}\text{F}</math>)</p>
<p>سوپاپ های هیدروالکتریک، اگزور فن جمع کننده گرد و غبار سیکلون، تخلیه شاخه و تنه های سوپاپ، اگزوز نگدارنده شیرفلکه</p>	<p>Chromium carbide Tungsten carbide WC/Ni-Cr-B-SiC (ذوب شده) WC/Ni-Cr-B-SiC (ذوب نشده) Chromium oxide</p>	<p>PA, HVOF PA, HVOF OFP, HVOF OFP, HVOF</p>	<p>فرسایش</p>
<p>حلقه ها (توربین های هیدرولیک)، مخرن آب توربین، نازل آب توربین، موتور دیزل پره ها و پوسته سیلندرها پروانه کشتی ها، اژدرها و پمپ های سانتریفیوژ و سرریز سدها</p>	<p>Ni-Cr-B-SiC-Al-Mo Ni-Al/Ni-Cr-B-SiC Type 316 stainless steel Ni-Cr-B-SiC (ذوب شده) Ni-Cr-B-SiC (ذوب نشده) Aluminum bronze Cu-Ni</p>	<p>PA PA PA OFP, HVOF HVOF PA, HVOF PA, HVOF</p>	<p>کاویتاسیون (حفره سازی، خلأزایی) پدیده های است که در آن کاهش فشار باعث تبخیر موضعی مایع و ایجاد حباب هایی شود.</p>
<p>OFW, Oxyfuel wire spray. EAW, Electric arc wire spray. OFP, Oxyfuel Powder spray. PA, Plasma arc spray. HVOF, High- velocity oxyfuel powder spray.</p>			

## ۲-۲-۸- سایر پوشش‌ها بر اساس کاربرد

سایر پوشش‌ها بر اساس کاربرد به شرح ذیل انجام شده اند [۱۹].

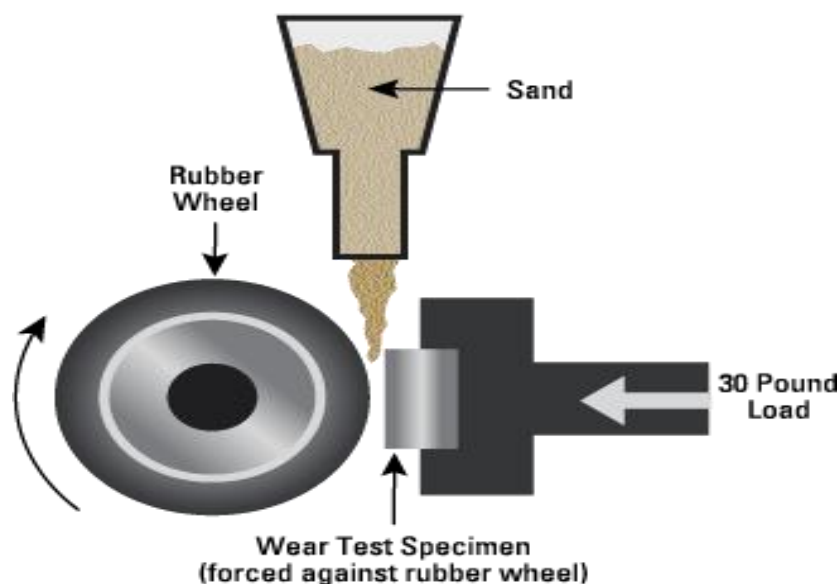
- ❖ پوشش‌های محافظ در برابر اکسیداسیون،
- ❖ پوشش‌های هادی جریان الکتریکی
- ❖ پوشش‌های بازیابی ابعادی
- ❖ پوشش‌های عایق حرارتی
- ❖ پوشش‌های مانع حرارت

## ۲-۳- آزمایش‌های تعیین سایش

### ۲-۳-۱- استاندارد شن و ماسه خشک و چرخ لاستیکی جهت محاسبه سایش ASTM G-65

این استاندارد یک آزمایش است برای اندازه گیری مقاومت در برابر سایش است که از شن و ماسه خشک و چرخ لاستیکی به عنوان موادساینده و سطوح درگیر استفاده می‌شود [۳۴,۳۵]. در این آزمایش برای بررسی میزان مقاومت در برابر سایش پوشش‌های سخت مورد استفاده قرار می‌گیرد [۳۶]. این آزمایش، یک جریان مستقیم از مواد ساینده است که یک نمونه بین مواد ساینده و یک چرخ لاستیکی قرار می‌گیرد شکل (۴-۲). مواد از بالا بین چرخ لاستیکی و نمونه ریخته شده و زمانی که شن خشک برای عبور از بین این دو با اعمال نیروی فشار لاستیک مواجه می‌شود بر روی نمونه قطعه‌ای که مد نظر است ایجاد خراش و سایش می‌کند که این میزان را اندازه‌گیری کرده و در جدول‌های مربوطه بر حسب واحدهای استاندارد بیان می‌کنند [۳۷,۳۸]. این پوشش به عنوان یک جرم یا حجم از دست داده شده در یک آزمایش برای یک مجموعه از شرایط سایش اندازه‌گیری می‌شود. این آزمون به طور گسترده‌ای برای اندازه‌گیری سایش در سه وجه در یک سیستم تریبولوژیکی دیده می‌شود [۳۹,۴۰,۴۱].

استاندارد مشخصی از ابعاد ذرات شن و ماسه ریخته گری (سیلیس) و نرخ مشخص ریزش مواد در دسترس است، که در ۳۸ حالت استاندارد موجود است که با اعمال نیرو و تنظیمات مربوطه قابل برنامه‌ریزی است و تغییرات میزان خراش و سایش بر روی پوشش با شن و ماسه مربوط ارزیابی می‌شود [۴۲]. در ابعاد بسیار کوچک آزمایش شن و ماسه خشک و چرخ لاستیکی<sup>۱</sup> سایش به صورت ۳ وجهی به عنوان عامل ساینده شکننده در جریان تنش و استرس کم عمل می‌کند [۴۳، ۴۴]. این فرآیند باعث بروز مشکلاتی در روند مطالعه سایش در طول پودر سازی می‌شود و آن نیز به علت عدم شکستگی کافی ذرات است.



شکل ۲-۴: استاندارد شن و ماسه خشک و چرخ لاستیکی جهت محاسبه سایش ASTM G-65 [۴۱].

## ۲-۳-۲- آزمایش سایش آسیای گلوله‌ای

رویگرد دیگر در اندازه‌گیری سه وجهی پوشش در کارخانه‌های تولید غلطک است که در واقع انجام آزمون در یک آسیای آزمایشگاهی است که به عنوان تست سایش گلوله‌ای<sup>۲</sup> شناخته می‌شود. یک آسیا با مواد

<sup>۱</sup> Dry Sand/Rubber Wheel (DSRW)

<sup>۲</sup> Ball Mill Abrasion Test (BMAT)

پودری، مواد ساینده، مایعات و گازهای مورد نیاز، برای اجرای سیستم عملکرد برحسب نیاز پر می‌شود. تخریب در میزان پودرشدگی با اندازه‌گیری ابعاد عنصر مورد نظر، قبل از انجام آزمایش و اندازه‌گیری میزان تخریب به صورت تجربی با از دست دادن میزان جرم برای عناصر مشابه پس از آزمون و تست، مورد اندازه‌گیری قرار می‌گیرد [۴۴، ۴۵]. میزان شکستگی مواد ساینده را می‌توان با اندازه‌گیری خوراک ورودی قبل و بعد از آزمایش و مقایسه بین آن دو محاسبه نمود. مزیت استفاده از این نوع آزمون این است که تکرارپذیری در شرایط یک آسیای صنعتی از لحاظ، سایش، ضربه و میزان خوردگی است. برای تنظیم شرایط شبیه سازی می‌توان درجه خاصی از شرایط را به سیستم داد [۴۶].

با استفاده از یک آسیای آزمایشگاهی برخی از مشکلات برای محاسبه میزان پودرشدگی وجود دارد، که باید آزمایش مربوط به ماهیت تکرارپذیری در آسیاها در مقیاس‌های تجاری صورت پذیرد. آسیای آزمایشگاهی دارای قطری کمتر از یک متر و میزان ظرفیت خوراک تا حد چند کیلوگرم است، این در حالی است که در مدار واقعی کارخانه‌های فرآوری مواد معدنی آسیاها دارای قطری معادل چند متر و تناژی با ضریب چند ده تن در هر شیفت کاری می‌باشند. رابطه بین نیروهای وارده در آسیاها با ابعاد آسیا به صورت خطی نیست. به طور مثال، خوردگی، در دامنه بین ۰.۲۵٪ تا ۰.۷۵٪ مواد و با کاهش مواد در آسیای آزمایشگاهی نشان داده شده است و این در حالی است که تنها حدود ۱۰٪ در آزمایش‌های صنعتی قابل محاسبه است [۴۷]. آزمون تکرارپذیری تست مفروض، در جریان مواد ضروری نیست. در اکثر فعالیت‌های معدنی در کارخانه‌های فرآوری مواد معدنی، آسیاها به طور پیوسته در حال شارژ و خوراک دهی هستند، ولی این درحالی است که در آزمون آزمایشگاهی اینگونه نیست. مواد سایش یافته خارج نشده و مواد جدید جایگزین نمی‌شود. علاوه بر این، این آزمایش نیاز زیادی به نمونه سنگ معدن دارد، که این فرآیند نیاز به کار و شارژ بصورت دستی دارد و عملیاتی کاملاً وقت گیر است. این تخریب ناشی از ضربه، سایش و خوردگی است که تعیین سهم هر یک از مولفه‌ها با این روش بسیار سخت و دشوار است. به طور کلی مواد مختلفی برای ساخت گلوله‌های آسیاها از مورد استفاده قرار می‌گیرند که هر کدام از آنها بسته به نوع کاربرد و شرایط محیطی که در آن قرار می‌گیرند قابلیت

ریخته‌گری دارند. جنس گلوله‌های مورد استفاده می‌توانند از گلوله‌های چدنی، فولادی فورج سخت شده، فولادی ضدزنگ، فولادی ضدزنگ مارتنزیتی، فولادی ضدزنگ آستنیتی، پلاستیکی، شیشه‌ای و گلوله‌های سایشی آلومینا باشند.

### ۲-۳-۳- آزمایش سایش چرخ فولادی<sup>۱</sup>

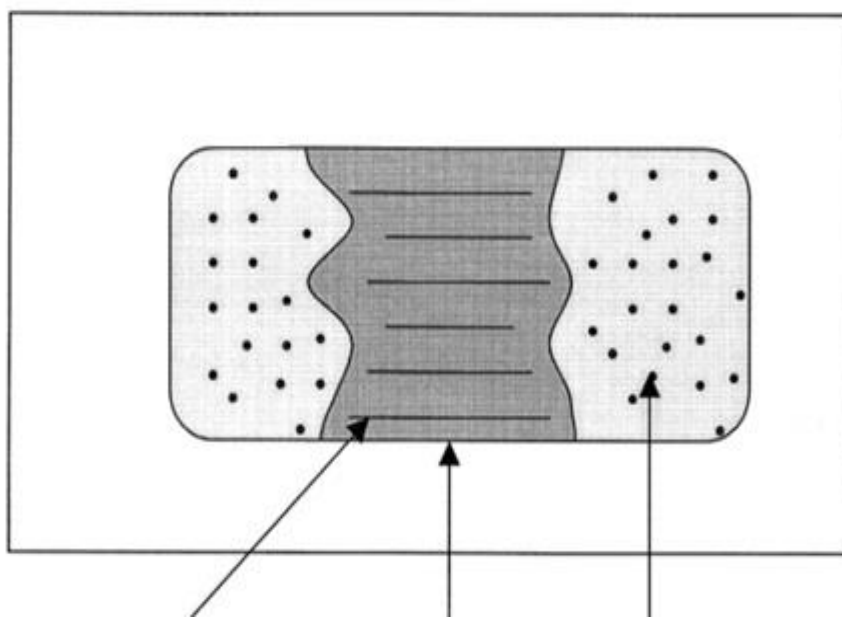
تست سایش چرخ فولادی روشی برای بکارگیری یک آزمایش اصولی بر اساس آزمایش سایش چرخ فولادی<sup>۲</sup> در آزمون استاندارد ASTM G\_65 است. یک آزمون موثر برای تکرار کردن پوشش سه وجهی قطعه در تنش‌های پایین، در حالی که ضمن ایجاد شکست کافی در قطعه باعث وارد شدن در پوشش سه وجهی در تنش بالا می‌شود. در این سیستم چرخ‌های فولادی با آسترهای لاستیکی که مورد استفاده برای وارد آوردن نیرو به ساینده‌ها استفاده می‌شوند و آن‌ها را در امتداد سطح نمونه جابجا می‌کنند با یک چرخ کاملاً فولادی جایگزین می‌شوند. در این فرآیند تجربی در واقع با یک تغییر کوچک آزمایش سایش آسیای گلوله‌های سازگار با استاندارد ASTM G\_65 به آزمون سایش چرخ فولادی تبدیل شده است، با این حال نتایج سایش تغییر پیدا می‌کند. چرخ فولادی که ذاتاً سازگاری قابل توجه کمتری نسبت به نوع لاستیکی دارد، فشار بیشتری در مواد ساینده القاء خواهد کرد که این بر میزان شکستگی و تغییر در سه وجه پوشش تاثیرگذار خواهد بود. علاوه بر این، چرخ فولادی قادر به اعمال نیروی بسیار زیادی بر روی نمونه است، این در حالی است که طبق استاندارد ASTM G\_65 نیروی اعمال شده بر روی نمونه نباید از ۱۵۰ نیوتن فراتر رود. با توجه به محدودیت‌های دستگاهی که از یک لایه لاستیکی استفاده می‌شود نوع تست سایش چرخ فولادی می‌تواند نیرویی معادل ۱۰۰۰ نیوتن به نمونه وارد نماید [۴۳]، این نیروهای زیاد و قوی منجر به سایش آزمایش در محدوده ای خارج از تعامل بین عناصر مختلف و در طول شارژ آسیا خواهد شد. در آزمایش سایش چرخ فولادی به عنوان جایگزینی برای تکرارپذیری در آزمون تنش‌های بالا و کنترل سه وجه استفاده شده است [۴۸, ۴۹]. خراش

<sup>1</sup> Steel Wheel Abrasion Test (SWAT)

<sup>2</sup> RWAT



ایجاد شده در سطح نمونه‌ای که پوشش سخت داده شده است می‌تواند جهت تجزیه و تحلیل مورد مطالعه قرار گیرد. بررسی مورفولوژی سطح (ریخت شناسی) در یک فرآیند آشکار به صورت شماتیک در شکل (۲-۵) آورده شده است. دندان‌های ایجاد شده توسط ساینده‌ها، همچنین شیار و علائم خراش می‌تواند به مکانیزم سایش اشاره نماید.



تورفتگی‌های چندگانه      ناحیه پوشش داده شده      شیارهای روی ناحیه تست

شکل ۲-۵: تست سایش چرخ فولادی [۳۷].

خواص سایشی برخی از آلیاژها مورد ارزیابی قرار گرفته است [۵۰]. خواص سایش مطابق استاندارد

ASTM G65 در بخش مربوطه به تفسیر بررسی خواهد شد [۵۱].

## ۲-۴- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سایش نانوآلیاژ آنتروپی بالا

گلوله‌های فولادی به عنوان بار خردکننده بیشترین کاربرد را به ترتیب در آسیاهای گلوله‌ای و نیمه‌خوشکن دارند. مبحث سایش بدلیل کاهش وزن موثر و تغییر در ابعاد بار خردکننده، باعث افت شدید کارایی آسیا شده و هزینه هنگفتی را به کارخانه فرآوری تحمیل می‌نماید. از آنجا که روش‌های عملی تعیین فرسایش نظیر اندازه‌گیری ارتفاع آزاد، روش نمونه‌گیری و غیره از دقت کافی برخوردار نیستند و یا اینکه بسیار وقت‌گیر و گران هستند، لذا در تحقیق حاضر به بررسی مدل‌های محاسباتی دینامیک مولکولی تخمین فرسایش گلوله‌ها پرداخته شده است.

در حالت کلی، فرسایش گلوله‌ها شامل سه مکانیزم سایندگی، خوردگی و ضربه است. مکانیزم سایندگی ناشی از سایش گلوله‌ها با یکدیگر، با ماده معدنی و با آستر آسیا می‌باشد، در حالی که مکانیزم ضربه ناشی از برخورد گلوله با کانسنگ، گلوله با گلوله و گلوله با آستر است و عمدتاً بستگی به قطر و سرعت آسیا داشته و با هردوی آنها نسبت مستقیم دارد. وجه مشترک آن‌ها تغییرات انرژی درونی و خواص آلیاژهای بکار رفته است. از این رو در این رساله تاثیرهای خواص آلیاژها در مقیاس نانویی و اتمی بررسی شد تا بتوان به یک مدل مفهومی جدید برای پدیده سایش و خواص و ویژگی‌های آن دست یافت.

شناخت مکانیزم‌های نانو مقیاس برای توصیف بهتر خواص نانو آلیاژهای آنتروپی بالا بسیار مهم هستند. نانو ذرات یکی از مهمترین ساختارهای ایجاد شده نانو مقیاس است که می‌تواند نقش مهمی در خواص ترموفیزیکی نانو آلیاژهای آنتروپی بالا ایفا کند [۵۲، ۵۳]. از این رو با توجه به نقش غیرقابل انکار نانو ذرات در مقیاس مولکولی، درک مکانیزم تاثیر تشکیل ساختار همگن نانویی بر خواص ماکروسکوپی نانو آلیاژهای آنتروپی بالا اهمیت بالایی دارد. تحقیقات نشان می‌دهد که با پیش‌بینی خواص این نانو آلیاژهای آنتروپی بالا می‌توان صرفه جویی در هزینه‌های گزاف انرژی و ساخت تجهیزات فوق سنگین نمود [۵۴]. همچنین، این

تحقیق با استفاده از نرم افزار شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی اثر جنس نانوذره در مورد سایش پرداخته است.

## ۲-۴-۱- نرم افزار شبیه سازی LAMMPS<sup>1</sup>

LAMMPS یک نرم افزار شبیه سازی است که بر اساس نظریه ی دینامیک مولکولی کار می کند. واژه

لاتین LAMMPS به معنای ذیل است:

- بزرگ مقیاس: توانایی شبیه سازی سیستم های پر ذره.
- اتمی / مولکولی: توانایی نرم افزار در شبیه سازی سیستم های اتمی و مولکولی (پیوندها).
- به شدت موازی: توانایی نرم افزار در موازی سازی شبیه سازی های سنگین.
- شبیه ساز: فراهم کننده بستری مناسب برای شبیه سازی سیستم های مختلف.

دینامیک مولکولی در ابتدا در فیزیک نظری در دهه ۱۹۵۰ استفاده شد اما امروزه با گسترش حیطه کاربرد آن در علم مواد و زیست مولکولی نیز بکار می رود و قابلیت شبیه سازی سیستم های زیستی و مهندسی را دارا است. این نرم افزار با در اختیار داشتن میدان نیروهای<sup>۲</sup> متنوع، فراهم کننده ی بستری مناسب برای شبیه سازی نمونه های مختلف از سیستم های اتمی و مولکولی گرفته تا انواع پروتئین ها و سیستم های زیستی است. از مهمترین ویژگی های این نرم افزار می توان به شبیه سازی سیستم های کامپوزیتی با ترکیب های بسیار پیچیده اشاره کرد.

در بسیاری از کاربردها، هندسه و ساختار مواد برای سازه های پیچیده ممکن است بسیار دشوار و در برخی موارد غیر ممکن باشد و ضروری است که میدان های نیرو به سرعت با هندسه و ساختار بهینه شده

<sup>1</sup> LAMMPS : Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator

<sup>2</sup> Force Field

سازگار شود. در این رساله مطالعاتی در مورد رفتار سایش نانو آلیاژهای آنتروپی بالا تولید شده با استفاده از شبیه سازی‌های مولکولی دینامیک (MD) ارائه شده است. اثرات کانی‌ها با گلوله و میله‌های آسیا می‌توانند به عنوان متغیری مهم برای افزایش سایش باشد، که باعث افزایش حرارت می‌شود. سایش و مطالعه ساختار نانوکریستالی و دانه‌ای مواد برای بسیاری از صنایع از جمله صنایع معدنی و فرآوری مواد معدنی مشکل مهمی است، اما می‌توان با انتخاب صحیح و مهندسی شده مواد، میزان سایش را کاهش داد. یک روش اصلی برای افزایش مقاومت در برابر سایش فشار خردکننده و روکش تجهیزات خردایش کانی‌ها، استفاده از روکش‌های نانویی مقاوم در برابر سایش است. فرآیند سایش با الکترون‌های موجود در سطح آلیاژ در تعامل با یون‌ها، محلول آبی و مواد معدنی تأثیر پذیر است. در هنگام سایش، توزیع یکنواخت الکترون‌ها به دلیل تأثیر بسیار زیاد آن بر روی ساختار سطح الکتریکی آلیاژ آنتروپی بالا قابل توجه است. شبیه سازی دینامیک مولکولی لنارد – جونز، برهم کنش‌های مولکولی و اتمی در فضاهای xy حاوی N مولکول‌هایی از ماده است که در راستای L نسبت به هم جانمایی شده است [۵۵]. یکی از روش‌های مهم برای کاهش سایش تولید فیلم‌های نانو محافظ پایدار با پوشاندن روی مواد بسترهای ساختاری است. از آنجا که انجام آزمون‌های سایش در شرایط عملی هزینه بر است، روش‌های شبیه‌سازی محاسباتی MD راهی مهم برای مطالعه و پیش‌بینی راه حل‌های بالقوه برای این مشکل هستند. این کار با محاسبه پتانسیل لنارد-جونز مطابق با معادله (۱-۲) انجام می‌شود [۵۷]،

[۵۶].

$$Up(r) = 2\epsilon \left[ \left(\frac{\delta}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\delta}{r}\right)^\alpha \right] \quad (1-2)$$

$\delta$  فاصله‌ای است که در آن پتانسیل صفر می‌شود،  $\epsilon$  به منزله اثر متقابل نیروها و اندرکنش نیروها،  $r$  فاصله بین دو ذره اتم و  $\alpha$  که محدوده بین اندرکنش‌های نیروها می‌باشد و همواره بین  $1 \leq \alpha \leq 6$  است.

برای استخراج اطلاعات از شبیه سازی‌های دینامیک مولکولی باید یک هنگرد<sup>۱</sup> یا آنسامبل انتخاب شود. دو نوع هنگرد رایج در این نوع شبیه‌سازی‌ها هنگرد دما و فشار ثابت یا npt است که در آن تعداد اتم‌ها، فشار و دما ثابت می‌ماند و نوع دوم هنگرد دما و حجم ثابت یا nvt است که تعداد، حجم و دمای سیستم ثابت باقی می‌ماند که با توجه به شرایط می‌توان از یکی از آن‌ها استفاده نمود [۵۸, ۵۹].

در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ابتدا سیستمی شامل  $n$  ذره در داخل جعبه‌ای به نام محاسبات در نظر گرفته می‌شود که می‌تواند دو وجهی و یا سه وجهی باشد، البته بنا به ضرورت آن‌ها را می‌توان به شکل‌های دیگری انتخاب نمود. مکان اولیه ذرات، با توجه به چگالی ماده و بسته به اینکه سیستم مورد نظر بلور یا غیر بلور است، تعیین می‌شود. شرایط تخصیص سرعت‌های معین به ذرات اعمال می‌شود. این سرعت‌ها طوری انتخاب می‌شوند که میانگین انرژی جنبشی ذرات آن مبین دمای مورد نظر کاربر باشد. با دانستن قانون نیرو، پتانسیل بین دو ذره در این مدل از نظر ریاضی قابل حل است. به این ترتیب که برای هر ذره، جمع نیروهای وارد بر آن را در اثر وجود بقیه ذرات را محاسبه کرده و شکل دیفرانسیلی قانون دوم نیوتن نوشته می‌شود. دینامیک مولکولی معادله دیفرانسیلی پیوندی را به معادله‌های تفاضلی گسسته تبدیل کرده و سپس با استفاده از گام زمانی مناسب، مکان و سرعت همه ذرات در هر گام زمانی حاصل می‌شود. در نهایت با دانستن مکان و سرعت ذرات در هر گام زمانی می‌توان تمام خواص استاتیکی و دینامیکی سیستم را محاسبه کرد. از دیدگان نظریه پردازان اهمیت بررسی‌های دینامیک مولکولی در این است که نتایج شبه تجربی دقیقی را برای مدل کاملاً مشخص فراهم می‌آورد [۵۶, ۵۷].

---

<sup>۱</sup> تعبیر هنگردی مکانیک کوانتومی به وسیله آلبرت انیشتین به عنوان یک تعبیر جایگزین برای تعبیر کپنهاکی پیشنهاد شد. کلمه هنگرد یا آنسامبل توسط اغلب فیزیکدان‌ها برای نشان دادن مجموعه‌ای از نسخه‌های به طور یکسان تدارک یافته از سیستم به کار می‌رود که قرار است اندازه‌گیری‌هایی بر روی آنها صورت گیرد.

## ۲-۴-۲- نرم افزار گرافیکی VMD<sup>1</sup>

VMD یک نرم افزار گرافیکی می باشد که برای اشکال زدایی، تصحیح پیکربندی سیستم و نمایش گرافیکی نتایج حاصل از نرم افزار لمپس کاربرد دارد. از مهمترین ویژگی های این نرم افزار می توان به موارد زیر اشاره کرد:

- ویژه متصور ساختن اتمها در شبیه سازی است.
- دارای نسخه لینوکس و ویندوز است.
- امکانات زیادی از قبیل تولید تصاویر متحرک (فیلم) از شبیه سازی های انجام شده را دارا است.

## ۲-۴-۳- نقد و بررسی تحقیقات پیشین

تحقیقات انجام شده قبلی بیشتر بر روی پارامترهای سایش آسیاها متمرکز بودند که بر اساس نوع آلیاژ کروم، نیکل و مولیبدن دار مطابق با جدول (۱۰-۲) انتخاب می شدند. سختی پوشش آلیاژی که بعنوان پوشش برای مقاومت در برابر سایش، حفره دار شدن، خوردگی سایشی و کاهش اصطکاک به کار می روند در اکثر موارد تا ۷۰ راکول متغیر است [۲۹، ۳۰] بیشتر در صنایع نظامی، ساخت پره توربین های آبی، گازی، موتور هواپیما، بدنه کشتی ها و سفینه ها کاربرد داشته اند [۱۹، ۳۲]. همچنین این پوشش ها به عنوان شفت سرموتور، پوسته های سیلندر، آبکاری پمپ میله های پیستون، پروانه کشتی ها، اژدرها و پمپ های سانتریفیوژ مورد استفاده قرار گرفته اند. بنابراین، امکان تولید یک آلیاژ مقاوم به سایش برای بالابردن مقاومت آسترها و بارخردکننده در آسیاها می تواند تاثیر بسیار زیادی در افزایش بهره وری، کاهش انرژی و کاهش هزینه های عملیاتی داشته باشد.

---

<sup>1</sup> Visual Molecular Dynamics

جدول ۲-۱۰: مروری بر معیار انتخاب مواد سخت کاری پیشین [۶۰]

معیارهای انتخاب	انتخاب نوع مواد
فولاد کروم دار پرکربن	دامنه ذوب از ۱۳۵۰ الی ۱۴۵۰ درجه سانتیگراد، مقدار بالای کروم در ترکیب سخت کاری شده باعث تشکیل کاربید می‌شود و در نتیجه مقدار سختی را افزایش می‌دهد.
فولاد منگنزدار پرکربن	دامنه ذوب ۱۱۴۰ - ۱۲۰۰ درجه سانتیگراد، منگنز خاصیت ضربه، عملکرد و مقاومت کششی آلیاژهای منگنز آهن را افزایش می‌دهد.
چدن	آهن و کربن آلیاژهای موجود در آهن را تکمیل می‌کند، قسمت سخت آهن به عنوان یک ماده ماتریس یا اتصال دهنده فلزی در فرو آلیاژ مورد استفاده در سخت کاری کار می‌کند.

پوشش‌های آنتروپی بالا بر اساس میزان سختی مطابق جدول (۲-۱۱) تنوع بسیار بالایی دارد ولی

متاسفانه در صنایع معدنی هیچ‌گونه استفاده‌ای نگردیده است.

جدول ۲-۱۱: مروری بر آلیاژهای آنتروپی بالا پیشین

ترکیب (اتمی)	چگالی (g/cm <sup>3</sup> )	سختی (ویکرز)	ارجاع	کاربردها
Al <sub>3</sub> CoCrCuFeNi	(5.7)	640	[۷، ۶۲]	پروانه کشتی‌ها، هوافضا، صنایع خودروسازی و ...
Al <sub>0.5</sub> CoCrCuFeNiTi <sub>0.8</sub>	(7.1)	590	[۱۲، ۶۲]	
Al <sub>2.5</sub> CoCrCuFeNi	(7.8)	736	[۶۰، ۶۲]	
AlCoCrCuNiTiY <sub>0.5</sub>	(6.0)	620	[۶۱، ۶۲]	
Al <sub>0.75</sub> CoCrCu <sub>0.25</sub> FeNiTi <sub>0.5</sub>	(6.3)	560	[۶۱، ۶۲]	





# فصل سوم

## مواد و روش‌ها

### ۳-۱- مقدمه

نانوفناوری تولید کارآمد مواد و دستگاه‌ها و سیستم‌های با کنترل ماده در مقیاس طولی نانومتر، و بهره برداری از خواص و پدیده‌های نوظهوری است که در مقیاس نانو توسعه یافته‌اند. یک نانومتر یک میلیاردم متر ( $10^{-9}$  m) است. این مقدار حدوداً چهار برابر قطر یک اتم است. در مقیاس نانو خواص موجی شکل (مکانیک کوانتومی) الکترون‌های داخل ماده و اثر متقابل اتم‌ها با یکدیگر از جابجایی مواد در مقیاس نانومتر اثر می‌پذیرند. با تولید ساختارهایی در مقیاس نانومتر، امکان کنترل خواص ذاتی مواد از جمله دمای ذوب، مقاومت به سایش، ظرفیت بار و حتی رنگ مواد بدون تغییر در ترکیب شیمیایی بوجود می‌آید.

به طور کامل تجهیزات و ابزارهای مورد نیاز برای تجزیه و انجام آزمایش‌ها با حمایت و از طریق شرکت توسعه معادن نانو تک صورت پذیرفته شده است. تجهیزات مورد استفاده برای ساخت و آنالیز در این رساله عبارتند از:

- ❖ تجهیزات کامل ساخت آلیاژهای نانو ساختار جهت تولید پوشش‌های سخت
- ❖ ایجاد شرایط مناسب پیش پوشش دادن بر روی قطعات مورد نیاز در این تحقیق
- ❖ ایجاد و اعمال پوشش سخت بر روی قطعات مورد نیاز این تحقیق
- ❖ انجام کامل آزمایش‌های بررسی نرخ سایش بر روی قطعات مورد نیاز در این تحقیق
- ❖ میله و گلوله آسیای مناسب جهت انجام آزمایش‌های مد نظر
- ❖ انجام آنالیزهای کامل تعیین نانویی بودن پوشش (سطحی، ریز ساختاری) از قبیل:

➤ میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی اتمی FE-SEM

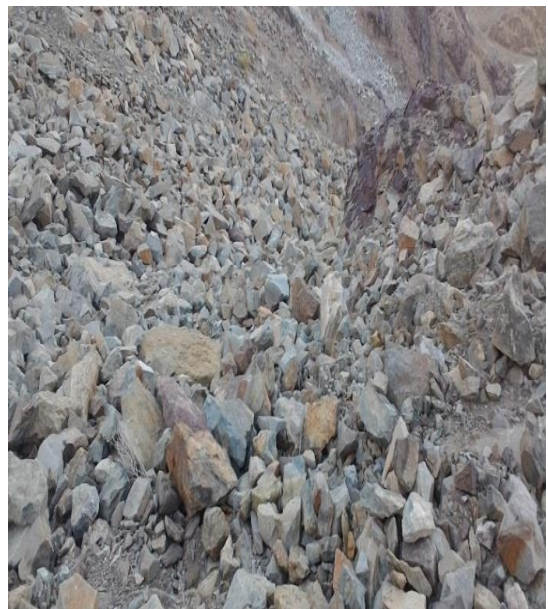
➤ آنالیز XRD و EDX Mapping

➤ تجهیزات آنالیز عنصری با قدرت بالای اندازه‌گیری عناصر در آلیاژ

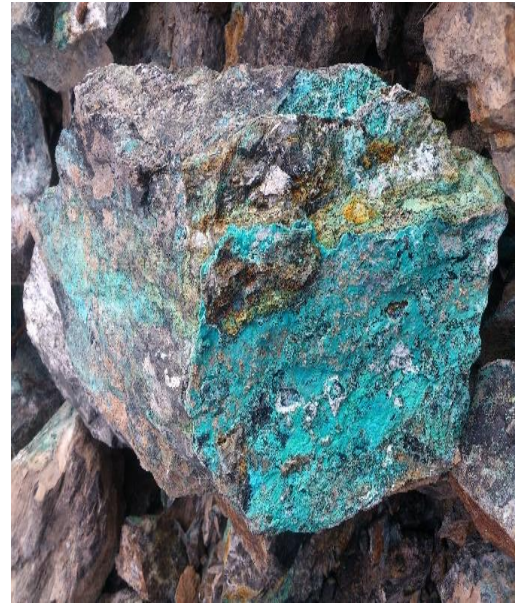
### ۳-۲- معرفی معادن

برای بررسی میزان سایش گلوله ها از سه ماده معدنی مختلف (با توجه به استقلال هر نمونه بر فرآیند سایش) که بیشترین کاربرد و تولید را در ایران و دنیا دارند استفاده شد. نمونه‌های انتخاب شده برای موضوع رساله از سه معدن با مشخصات ذیل برداشت شده اند که هر سه معدن در حال اکتشاف هستند.

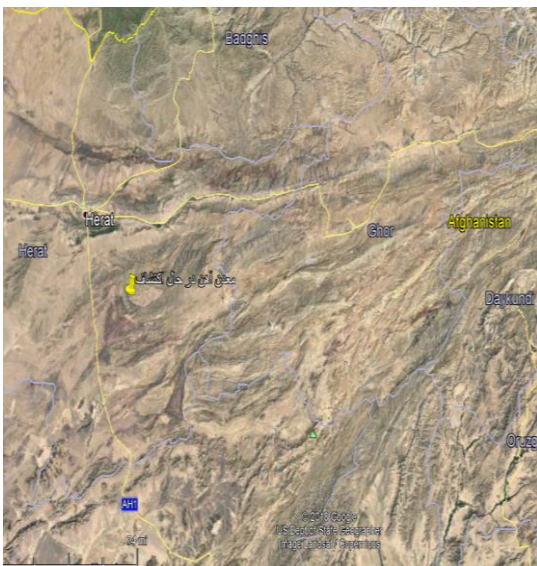
نمونه اول، سنگ مس پورفیری با عیار مس ۰/۲۲۸ درصد از منطقه معدنی مرزی ایران- افغانستان در غرب زاهدان (استان سیستان و بلوچستان) نمونه برداری شده است. نمونه دوم، سنگ مس اکسیدی با عیار مس ۴/۸۸ درصد از معدن در حال اکتشاف جنوب استان کرمان (شهرستان جیرفت- جبال بارز) نمونه برداری شده است. نمونه سوم، ذخیره بسیار عیار بالا سنگ آهن با عیار سنگ آهن ۹۳/۹۶ درصد از معدن در حال اکتشاف کشور افغانستان، غرب استان هرات نمونه برداری شده است. شکل (۱-۳)، موقعیت معادن و نمونه‌ای از سنگ نمونه برداری شده را نشان می‌دهد.



(الف)



(ب)



(ج)

شکل ۱-۳: موقعیت جغرافیایی و نیز نمونه سنگ‌های نمونه برداری شده از معادن الف) استان سیستان و بلوچستان ، مس پرفیری؛ ب) کرمان، مس اکسیدی؛ ج) افغانستان (هرات)، سنگ آهن.

ایران در حال حاضر یکی از غنی ترین معادن مس (با توجه به اکتشافات انجام شده پس از شیلی دارای چهارمین منابع مس در دنیا می باشد) همچنین سنگ آهن را دارا می باشد که با توجه به نیاز کشور به تکنولوژی های کاربردی در این بخش، همچنین اثر ساینده گی و سختی بسیار زیاد ایجاد شده بر روی تجهیزات بسیار گران قیمت کارخانه های فرآوری موجود دلیل بسیار قوی برای انتخاب این سه ماده معدنی می باشد.

### ۳-۳- نمونه برداری، خردایش و تقسیم نمونه های مواد معدنی

در حین اکتشاف معدن، حدود ۱۵۰ کیلوگرم نمونه براساس اصول رایج نمونه بردای (با تقسیم کن) تهیه و پس از همگن سازی و تهیه نمونه های مناسب به شیوه مخروطی و چهار قسمتی کردن تقسیم شده و تهیه ۵ کیلوگرم نمونه معرف برای هر تست تهیه و به آزمایشگاه مرکز تحقیقات فرآوری مواد معدنی ایران واقع در استان البرز منتقل شدند.

### ۳-۴- شناخت نمونه های معدنی

برای انجام آزمون سایش باند بر روی نمونه های مورد نظر، آماده سازی و آنالیزهای اولیه صورت گرفت که در ادامه ارائه شده است.

### ۳-۴-۱- آماده سازی نمونه های مواد معدنی جهت آزمون سایش اندیس باند

برای آماده سازی نمونه های معرف مواد معدنی برای هر مرحله آزمون، ابتدا نمونه های مورد نیاز کاملا خشک شدند. این نمونه ها شامل ۱۶۰۰ گرم ذرات با ابعاد  $۱۹+۱۲/۵$  - میلی متر  $(\frac{1}{2} + \frac{3}{4} \text{ in})$  بودند که با خردایش ذرات بزرگتر و طبقه بندی توسط سرنده حاصل شدند. معمولا مقدار اولیه لازم برای این آزمایش ۱۰ پوند با محدوده ذرات  $۱۹ + ۱۲/۵$  - میلی متر است (مطابق استاندارد مورد آزمون سایش اندیس باند).

### ۳-۴-۲- مطالعات فلوئورسانس اشعه ایکس XRF

به منظور شناسایی کلی اکسیدها و عناصر موجود، نمونه معرف با روش XRF تجزیه شد که نتایج در جدول (۳-۱) ارائه شده است. همانطور که ملاحظه می‌شود، عیار مس اکسیدی و سنگ آهن در نمونه مشخصه کانسارهای بسیار پر عیار می‌باشد.

جدول ۳-۱: نتایج آنالیز شیمیایی به روش XRF بر اساس (%)

Copper Ore Oxide	ترکیبات	CuO	TiO <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	MnO	MgO	Fe <sub>T</sub>	CaO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SiO <sub>2</sub>	L.O.I
	درصد وزنی	۴/۸۸	۱/۳۲	۰/۲۵	۰/۸۲	۲/۴	۲۲/۸۸	۲۷/۹۳	۷/۷۲	۲۹/۴۴	۲/۳۶
Copper Ore Porphyry	ترکیبات	CuO	TiO <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	MnO	MgO	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	CaO	Mo	SiO <sub>2</sub>	L.O.I
	درصد وزنی	۰/۲۲۸	۲/۹۸	۴/۹۵	۰/۱	۷/۹۹	۱۰/۹	۸/۶۹	۰/۰۱۷۰	۵۹/۲۹	۴/۸۵۵
Iron Ore	ترکیبات	Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	TiO <sub>2</sub>	SO <sub>3</sub>	MnO	MgO	K <sub>2</sub> O	CaO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	SiO <sub>2</sub>	L.O.I
	درصد وزنی	۹۳/۹۶	-	۰/۳۳	-	-	۰/۱۲	۰/۶۲	۰/۸۳	۱/۷۷	۲/۳۷

### ۳-۵- روش ساخت و بررسی پارامترهای نمونه نانوالیاز آنتروپی بالا

امروزه نسل جدید آلیازهای آنتروپی بالا و کاربردهای ویژه آنها دریچه‌ای جدید به سوی محصولات تخصصی‌تر باز نموده است [۶۳، ۵۹]. در این تحقیق، ساخت نانوالیاز آنتروپی بالا CrFeNiMoBaHf به روش آلیازسازی مکانیکی مورد بررسی قرار گرفت. دلیل استفاده از این عناصر بدلیل خواص منحصر به فرد ضدسایشی هر عنصر در فرآیند تولید نانو آلیاز آنتروپی بالا ابداعی می‌باشد. پودرهای عناصر کروم، آهن، نیکل، مولیبدن، هافمیوم و باریوم با خلوص بالا ۹۹/۵ درصد در ۳۵۰ دور در دقیقه به مدت ۱۲۰ ساعت در آسیا سیاره‌ای گلوله‌ای مدل (Fritsch-7) از جنس زیرکونیوم با نسبت وزنی گلوله به پودر<sup>۱</sup> ۱۰:۱، آسیا شد. گلوله‌ها به نسبت تعداد برابر و دارای ابعاد ۲ سانتی‌متر و ۱ سانتی‌متر انتخاب شدند. بازی هر ۵ ساعت کارکرد دستگاه ۱۵ دقیقه استراحت داده شد. در آلیازسازی مکانیکی سرعت ریزکردن ساختار درونی ذرات به صورت لگاریتمی تغییر می‌کند، در

<sup>1</sup> Ball - to - Powder weight ration (BPR)

نتیجه اندازه ابتدایی ذرات مورد استفاده نسبتاً بی‌اهمیت است. فرآیند ساخت آلیاژهای آنترابی بالا مخصوصاً تولید ساختار نانویی آن، بسیار پیچیده است، پودرهای نانوکریستالی با درصد اتمی مختلف شامل ذیل مورد آزمایش قرار گرفتند که بالاترین میزان مقاومت سختی را کول در ساختار با درصد ترکیب وزنی شامل  $(Cr_2)$  (Fe<sub>45</sub> Ni<sub>4</sub> Mo<sub>21</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>24</sub>) معادل ۶۷ را کول تعیین شد.

- ❖ (Cr<sub>2</sub> Fe<sub>45</sub> Ni<sub>3</sub> Mo<sub>21</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>25</sub>, HRC= 59)
- ❖ (Cr<sub>2</sub> Fe<sub>45</sub> Ni<sub>3</sub> Mo<sub>25</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>21</sub>, HRC= 57)
- ❖ (Cr<sub>2</sub> Fe<sub>45</sub> Ni<sub>4</sub> Mo<sub>21</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>24</sub>, HRC= 67)
- ❖ (Cr<sub>2</sub> Fe<sub>45</sub> Ni<sub>4</sub> Mo<sub>24</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>21</sub>, HRC= 66)
- ❖ (Cr<sub>2</sub> Fe<sub>45</sub> Ni<sub>5</sub> Mo<sub>21</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>23</sub>, HRC= 63)
- ❖ (Cr<sub>2</sub> Fe<sub>45</sub> Ni<sub>5</sub> Mo<sub>23</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>21</sub>, HRC= 65)
- ❖ (Cr<sub>2</sub> Fe<sub>45</sub> Ni<sub>6</sub> Mo<sub>21</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>22</sub>, HRC= 64)
- ❖ (Cr<sub>2</sub> Fe<sub>45</sub> Ni<sub>6</sub> Mo<sub>22</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>21</sub>, HRC= 62)
- ❖ (Cr<sub>2</sub> Fe<sub>45</sub> Ni<sub>7</sub> Mo<sub>21</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>21</sub>, HRC= 65)
- ❖ (Cr<sub>2</sub> Fe<sub>45</sub> Ni<sub>8</sub> Mo<sub>21</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>20</sub>, HRC= 64)
- ❖ (Cr<sub>2</sub> Fe<sub>45</sub> Ni<sub>8</sub> Mo<sub>20</sub> Ba<sub>4</sub> Hf<sub>21</sub>, HRC= 66)

اسید استئاریک به مقدار ۳٪ wt به عنوان عامل تسهیل کننده و کنترل کننده پردازش (PCA) عمل کرده [۶۳، ۶۴] تا از جوشکاری سرد و اکسیداسیون عناصر آلیاژی جلوگیری کند و پراکندگی یکنواختی از اندازه ذرات به دست می‌آید [۶۵].

از آنجائیکه آلیاژسازی بین ذرات پودر، به دلیل نیروهای ضربه‌ای روی آن‌ها به وجود می‌آید، وجود فضای کافی بین گلوله‌ها و ذرات پودری به منظور حرکت آزاد در محفظه آسیاب کاری ضروری است، در نتیجه فضای محفظه در حدود ۵۰ درصد خالی نگه داشته شد. آلیاژها با آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) مشخصه‌یابی و ترکیب شیمیایی آن‌ها توسط آنالیز تفکیک انرژی پرتو ایکس (EDX) بررسی گردید. با افزایش زمان آسیابکاری

دانه‌های ریز، کرنش داخلی<sup>۱</sup> بالا و محلول جامد<sup>۲</sup> همگن بدست آمد. آنالیز ترکیب شیمیایی آلیاژ آنتروپی بالا نیز به کمک آشکارساز EDX متصل به دستگاه FE\_SEM انجام شد. در طراحی آلیاژهای آنتروپی بالا به خصوص نانو آلیاژهای آنتروپی بالا برای یک ترکیب داده شده با عناصر مشخص بررسی فاز بسیار پیچیده و سخت است [۶۶, ۶۷]. بعد از ۹۰ ساعت با گذشت زمان نمونه ورود به مرحله ریز دانه شدن ذرات به همراه افزایش کرنش شبکه و تشکیل محلول جامد می‌نماید و در نهایت در ۱۲۰ ساعت به حالت تعادل می‌رسد. افزایش زمان آسیاکاری تا ۱۲۰ ساعت که با افزایش شدت و پهنای پیک‌ها همراه است، نشان دهنده ریز دانه شدن و تشکیل ساختار نانو آلیاژ، کرنش شبکه بسیار بالا و در نهایت تولید یک ساختار همگن است. شکل (۲-۳) نشان دهنده آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) مشخصه‌یابی و ترکیب شیمیایی آن‌ها توسط آنالیز تفکیک انرژی پرتو ایکس (EDX) در فواصل زمانی ۳۰، ۶۰، ۹۰ و ۱۲۰ ساعت است که نتایج سختی سنجی به ترتیب ۵۰، ۵۲، ۵۴ و ۶۷ را کول را نشان داد. سختی ۶۷ را کول به دلیل تشکیل فاز ساخت بهینه شده است. از آنجایی که بعد از گذشت زمان ۱۲۰ ساعت محلول جامد به تعادل رسید، در همین زمان آزمایش بدلیل بهینه شدن ابعاد ذرات متوقف شد.

در این راستا، استحکام بخشی مرزدانه‌ای (استحکام بخشی هال-پچ) روشی برای استحکام بخشی مواد با تغییر اندازه متوسط دانه‌های آن‌ها است. در صورتی که ابعاد ذرات به حدود کمتر از ۱۰ نانومتر کاهش پیدا کنند، مرزدانه‌ها مطابق نمودار (۱-۳) شروع به لغزش می‌کنند؛ به عبارت دیگر در مواد دارای دانه‌های بسیار کوچک (در حدود ۱۰ نانومتر) با توجه به فعال شدن سایر مکانیزم‌های تغییر شکل از جمله لغزش مرزدانه‌ای و خزش نفوذی، تنش تسلیم کمتر از مقدار پیش‌بینی شده توسط رابطه‌ی هال-پچ<sup>۳</sup> است [۶۸]. استحکام بخشی

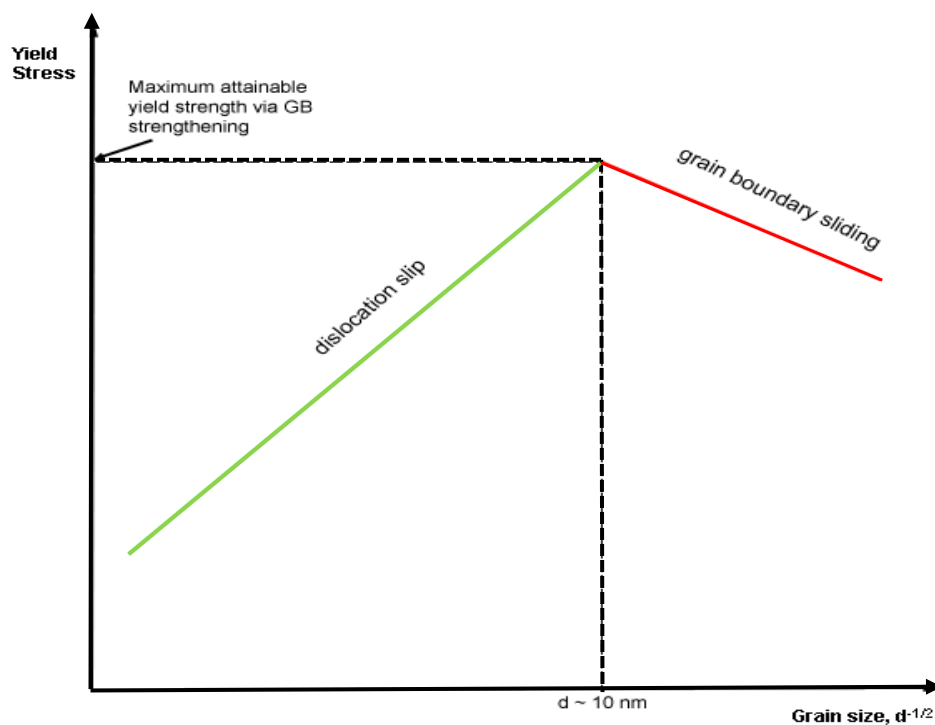
<sup>۱</sup> کرنش در اصطلاح فیزیک به تغییر در طول جسم جامد در هر جهت نسبت به طول آن جسم در همان جهت که در اثر اعمال نیرو (تنش) پدید می‌آید، گفته می‌شود.

<sup>۲</sup> یک محلول جامد، جامدی است که دارای دو یا چند عنصر بوده و اتم‌های آن‌ها در یک ساختمان بلوری واحد قرار گرفته و تشکیل یک فاز واحد را بدهند که معمولاً در مورد عناصری که در جدول تناوبی به هم نزدیک هستند، امکان تشکیل محلول جامد وجود دارد. ماده‌ای که مقدار آن از همه بیشتر است به عنوان حلال و ماده‌ای که غلظت آن کمتر است به عنوان حل شونده خوانده می‌شود. زمانی که اتم‌های حل شونده به ماده میزبان افزوده شود محلول جامد شکل می‌گیرد. در این حالت ساختار کریستالی حفظ شده و ساختار جدیدی شکل نمی‌گیرد.

<sup>۳</sup> Hall-Petch relation

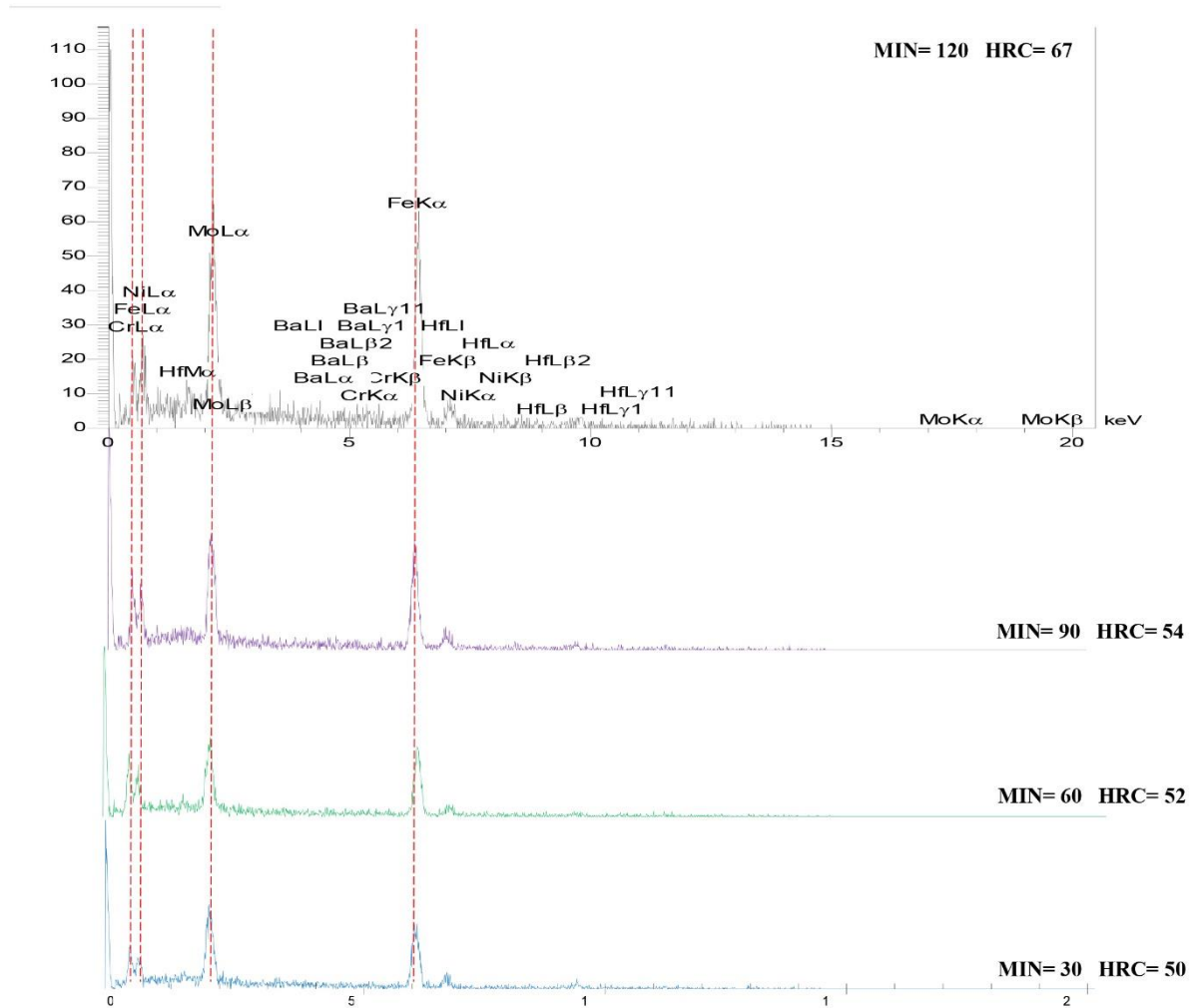


مرزدانه‌ای (یا استحکام‌بخشی هال-پچ) روشی برای استحکام‌بخشی مواد با تغییر اندازه متوسط دانه‌های آن‌ها است. این نشان می‌دهد که زمان ۱۲۰ ساعت کافی است. این مکانیزم نقش عمده‌ای در خزش و سوپرپلاستیسیته ریز-ساختار دارد. مکانیزم اصلی لغزش مرزدانه‌ای حرکت نابجایی‌ها در اثر لغزش و صعود آن‌ها است.



نمودار ۱-۳: بررسی رفتار استحکام‌بخشی هال-پچ در ابعاد حدود کمتر از ۱۰ نانومتر

در نهایت، پودر تولید شده در قالب یک الکتروود توپودری آماده شد و با استفاده از روش جوشکاری اسپری پودر Oxyfuel (OFP) بدلیل ارزان قیمت بودن و در دسترس بودن در هر محیط کاری، با دستگاه جوشکاری معمولی بصورت دستی (غیر خودکار) بر روی نمونه پوشش داده شد. ضخامت روکش ۴ میلی متر با دستگاه کلیپس مدل (Model - IP 54 from the G.A.L Gage company)، اندازه گیری شد.



شکل ۳-۲: آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) مشخصه‌یابی و ترکیب شیمیایی در فواصل زمانی ۳۰، ۶۰، ۹۰ و ۱۲۰ دقیقه است که نتایج سختی سنجی به ترتیب ۵۰، ۵۲، ۵۴ و ۶۷ را کول را نشان داد.

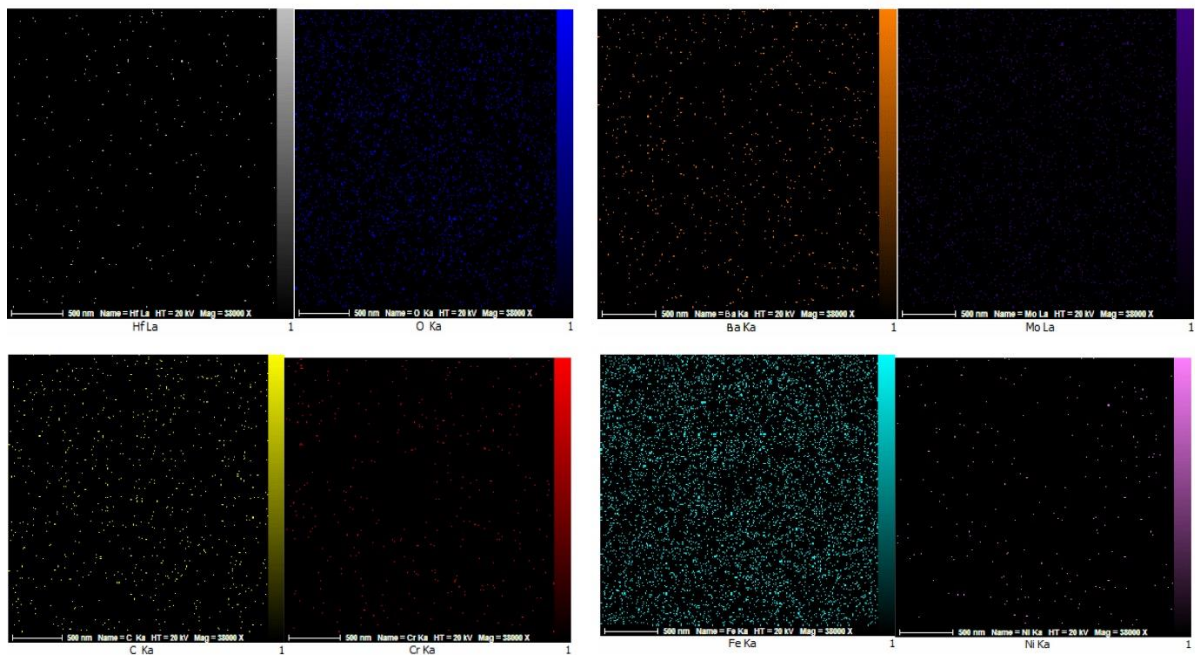
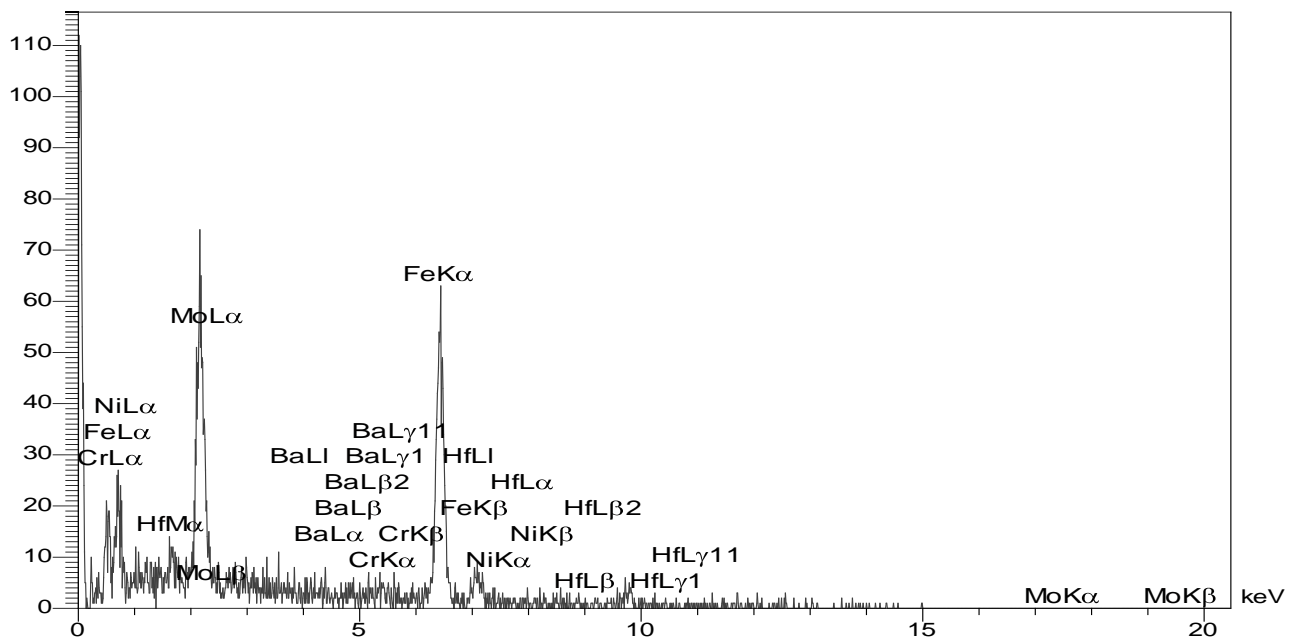
### ۳-۵-۱- آزمایش طیف سنجی پراش پرتو ایکس XRD و EDX Mapping

نتایج پراش اشعه ایکس (XRD) در این آزمایش از قرار ذیل می‌باشند. با توجه با الگوی پراش نمونه آلیاژ پیشرفته  $\text{Cr}_2\text{Fe}_{45}\text{Ni}_4\text{Mo}_{21}\text{Ba}_4\text{Hf}_{24}$ ، پهنای پیک شکل (۳-۳)، نشان دهنده ریز دانه شدن، افزایش شبکه کرنش شبکه و در نهایت یک شبکه یکپارچه و یکدست جامد همگن است.

در واقع تشکیل ساختار نانوکریستالی و کرنش شبکه بالا، فاکتور اصلی پهن شدن پیک ها می‌باشد و افزایش کرنش شبکه نیز ناشی از اندازه اتمی متفاوت اجزاء و مرز بین دانه‌ای است.

برای نشان دادن توزیع یکنواخت عناصر در نانو آلیاژ آنتروپی بالا، نقشه برداری EDS در یک منطقه انجام شد. تصاویر نشان دهنده همگن بودن ماتریس نانوآلیاژ و ترکیب آلیاژ است.

تجزیه و تحلیل طیف سنجی اشعه ایکس پراکندگی انرژی (EDS) نشان داد که یک ترکیب همگن عالی در مقیاس اتمی و نانویی حاصل شده است و در آن ناحیه تمامی عناصر به صورت یکنواخت در کنار یکدیگر قرار گرفته اند و هیچ گونه جوش سردی (آگلومره شدن) اتفاق نیافتاده است. وجود اکسیژن و کربن به دلیل ناخالصی مواد مورد استفاده در ترکیب بوده است.



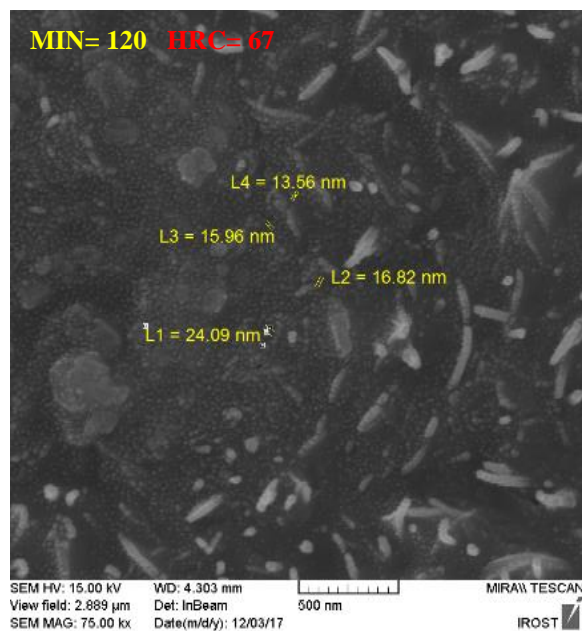
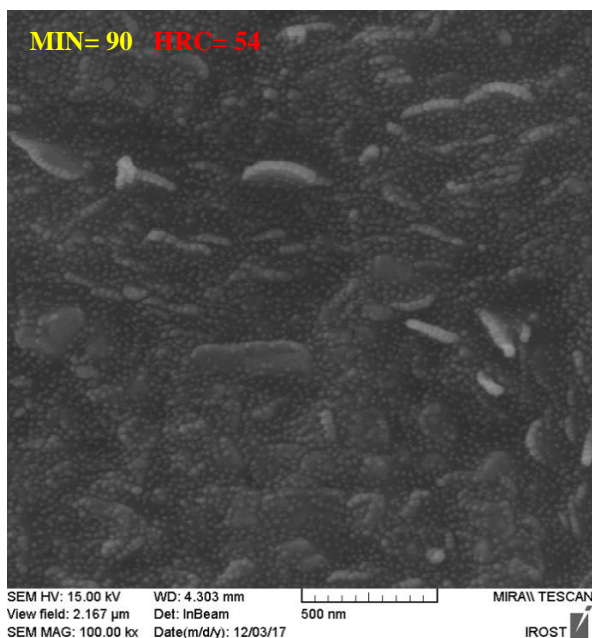
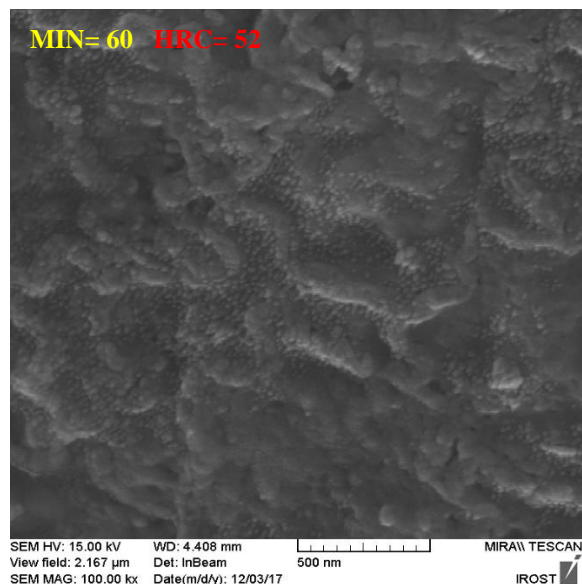
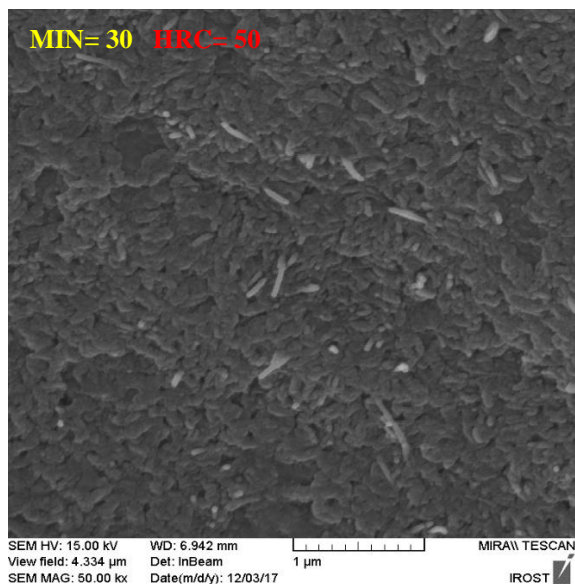
شکل ۳-۳: آنالیز XRD نمونه نانو آلیاژ آنتروپی بالا و EDX Mapping برای عناصر K $\alpha$  Fe, Cr, Ni, Hf, Mo, O, Ca

### ۳-۵-۲- آزمایش میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی اتمی FE-SEM

آزمون میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی اتمی نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی CrFeNiMoBaHf به کمک دستگاه FE-SEM مدل (FESEM- MIRA3, TESCAN-XMU) انجام شد. شکل (۳-۴) تصویر مورفولوژی سطح نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی CrFeNiMoBaHf را نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌گردد تعادل بین نرخ جوش و شکست ذرات برقرار است. به عبارت دیگر ذرات کوچکتر تمایل به جوش خوردن و ایجاد ذرات بزرگتر داشته، در حالی که ذرات بزرگتر خود به ذرات کوچکتر در حین فرآیند ساخت تبدیل شده‌اند و توزیع اندازه ذرات بسیار کم است. در نهایت زمانی که ذرات به ابعاد یکنواخت نانویی برسند می‌توان آزمایش را خاتمه یافته تلقی نمود. همچنین تصاویر مورفولوژی نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی CrFeNiMoBaHf نشان می‌دهد که ابعاد ذرات کمتر از ۲۵ نانومتر است (میانگین اندازه ذرات ۲۰ نانومتر). در یک مکانیزم خردایش آسیا نانویی ابتدا ذرات در حدود ۳ برابر اولیه بزرگتر می‌شوند (به دلیل نرم بودن ذرات). سپس ذرات سخت شده و بوسیله مکانیزم‌هایی چون شکست خستگی و یا ریز شدن پوسته‌های شکننده خرد می‌شوند؛ در این مرحله تمایل به شکست بر جوش سرد غلبه کرده و به دلیل ادامه ضربات گلوله‌های ساینده، ساختار ذرات به طور پایدار ریز می‌شوند اما اندازه ذرات به همان اندازه باقی می‌ماند. در نتیجه فاصله بین لایه‌ای کاهش و تعداد لایه‌ها در هر ذره افزایش می‌یابد. بازده کاهش ذرات در حدود ۰/۱ درصد الی ۱ درصد است. ذرات کوچکتر قادرند در مقابل تغییر شکل، بدون شکست ایستادگی کنند و تمایل به جوش خوردن به ذرات بزرگتر را دارند و برای ذرات بزرگتر هم آنقدر فرآیند کاهش ادامه پیدا می‌کند که تمایل برای رسیدن به یک میانگین ایجاد گردد.

تصاویر نشان‌دهنده یک ساختار کاملاً یکنواخت همگن جامد از یک آلیاژ است که از تجزیه و تحلیل مورفولوژی سطح مشاهده می‌شود. این پوشش‌ها از نانوذرات با مورفولوژی سطح اندازه نانو تشکیل شده‌اند. آنالیز میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی اتمی (FE-SEM) در فواصل زمانی ۳۰، ۶۰، ۹۰ و ۱۲۰ دقیقه

بررسی شد که نتایج سختی سنجی به ترتیب ۵۰، ۵۲، ۵۴ و ۶۷ را کول را نشان داد که نتایج به تفسیر در بخش ۳-۶ آورده شده است.



شکل ۳-۴: تصاویر میکروسکوپ FE-SEM از نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی در ۳۰، ۶۰، ۹۰ و ۱۲۰ دقیقه

### ۳-۶- آزمایش محاسبه سایش ASTM G-65

همانطور که در فصل قبل بیان شد، استاندارد ASTM G-65 یک آزمایش برای اندازه‌گیری مقاومت در برابر سایش سطوحی از مواد است که از شن و ماسه خشک و چرخ لاستیکی تشکیل شده‌اند. این آزمایش برای بررسی میزان مقاومت در برابر سایش پوشش‌های سخت مورد استفاده قرار می‌گیرد.

همانطور که در جدول (۳-۲) مشاهده می‌شود آزمون سایش بر اساس استاندارد ASTM G-65 بررسی شده است شکل (۳-۵) و نتایج آزمون سختی‌سنجی نشان‌دهنده سختی ۶۷ راکول برای نمونه مورد استفاده است که از مقاومت به سایش بسیار بالایی برخوردار است.

جدول ۳-۲: نرخ سایش بر اساس استاندارد ASTM G-65 و نتایج آزمون سختی‌سنجی برای نمونه نانو آلیاژ آنتروپی بالا

نمونه	وزن سایش یافته (gr)	حجم سایش یافته (mm <sup>3</sup> )	نرخ سایش (mm <sup>3</sup> /m)	سختی HRC
نانو آلیاژ آنتروپی بالا	$6/700 \times 10^{-2}$	$8/246 \times 10^{-3}$	$1/913 \times 10^{-3}$	۶۷

جنس ماده ساینده	سیلیس ۱۰۰ درصد (SiO <sub>2</sub> )
قطر چرخ	۲۳۵ میلی متر
شدت جریان پاشش	۳۲۰ گرم / دقیقه
سیلیس	
دور چرخش آزمون	۱۳۰ دور بر دقیقه
عرض چرخ	۱۲/۷ میلی متر
سختی چرخ کالیبره	Durometer A-60



شکل ۳-۵: تصویر دستگاه استاندارد سایش ASTM G-65 و مشخصات دستگاه برای آزمون

### ۳-۷- روش پوشش دهی نانوالیاز آنتروپی بالا بر روی گلوله و میله آسیای گلوله‌ای و میله‌ای

با ایجاد یک نانو پوشش سخت و در دسترس بر روی تجهیزاتی که در معرض سایش هستند، می‌توان به میزان قابل توجهی سایش و به عبارتی دیگر، میزان مصرف آن‌ها را کاهش داد که هم از لحاظ اقتصادی کاملاً مقرون به صرفه است و هم با ایجاد این نوآوری می‌توان در مصرف انرژی به صورت مستقیم صرفه‌جویی کرد. جوشکاری در عملیات سطحی عبارت است از رسوب‌دهی یک ماده پرکننده روی سطح قطعه کار برای به دست آوردن خواص یا ابعاد مورد نظر که به طور معمول به منظور افزایش عمر کاری قطعه یا جایگزینی فلزی به کار می‌رود که فرسوده یا خورده شده است. چسبندگی این مواد بر روی فلزات پایه از طریق نفوذ، پیوندهای متالورژیکی یا پیوندهای مکانیکی صورت می‌گیرد. در این تحقیق، عملیات سخت پوشی با استفاده از جوشکاری صورت گرفته است. انتخاب آلیاز سخت پوشی با توجه دو فاکتور اصلی میزان مقاومت به سایش و هزینه صورت می‌گیرد، از این رو، نانوالیاز آنتروپی بالا مورد استفاده در این تحقیق براساس فرآیندهای جوشکاری Oxyfuel powder spray (OFP) و روش دستی (دستگاه جوشکاری معمولی) مورد پوشش دهی قرار گرفته است تا بتواند هم مقاومت به سایش مد نظر را ایجاد نماید و هم در هزینه‌های اجرایی پوشش‌دهی، کاهش بسزایی داشته باشد؛ شکل (۳-۶) تصویری از یک نمونه گلوله و لوله پوشش داده از نانوالیاز آنتروپی بالا را نشان می‌دهد.



شکل ۳-۶: تصویر نمونه گلوله و لوله پوشش داده از نانوالیاز آنتروپی بالا



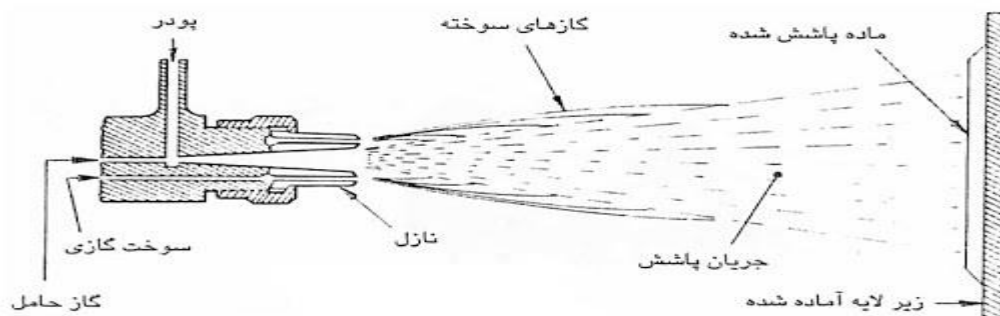
### ۳-۸- روش جوشکاری مورد استفاده

برای انتخاب روش جوشکاری مورد نظر، چندین عامل اصلی وجود دارد که با لحاظ کردن آن‌ها به شرح ذیل روش متناسب با آن‌ها انتخاب می‌شود [۳].

- ماده پوشش دهنده مناسب
- ملزومات اجرایی پوشش‌دهی
- در نظر گرفتن مسائل اقتصادی و هزینه
- اندازه قطعه کار و قابلیت حمل تجهیزات

در فصل دوم، انواع روش‌های جوشکاری معرفی گردید، انتخاب روش پاشش پودری توسط شعله اکسی گاز بر اساس ارزان و در دسترس بودن انجام شد.

در فرآیند پاشش پودری توسط شعله اکسی گاز مطابق شکل (۷-۳)، از گازهای احتراقی به عنوان منبع حرارتی استفاده می‌شود. مواد زیادی همچون فلزات خاص، آلیاژها، سرامیک‌ها، سرمته‌ها، کاربیدها و سایر مواد پوششی سخت قابل ذوب، می‌توانند به عنوان عامل پوشش‌دهنده مورد استفاده قرارگیرند. در این روش با استفاده از جریان ثقل یا فشار پودر به داخل مشعل تغذیه و به نازل می‌رسد. پودر، داخل شعله اکسی استیلن ذوب شده و توسط جریان گاز یا هوای فشرده به روی سطح آماده شده منتقل می‌شود.

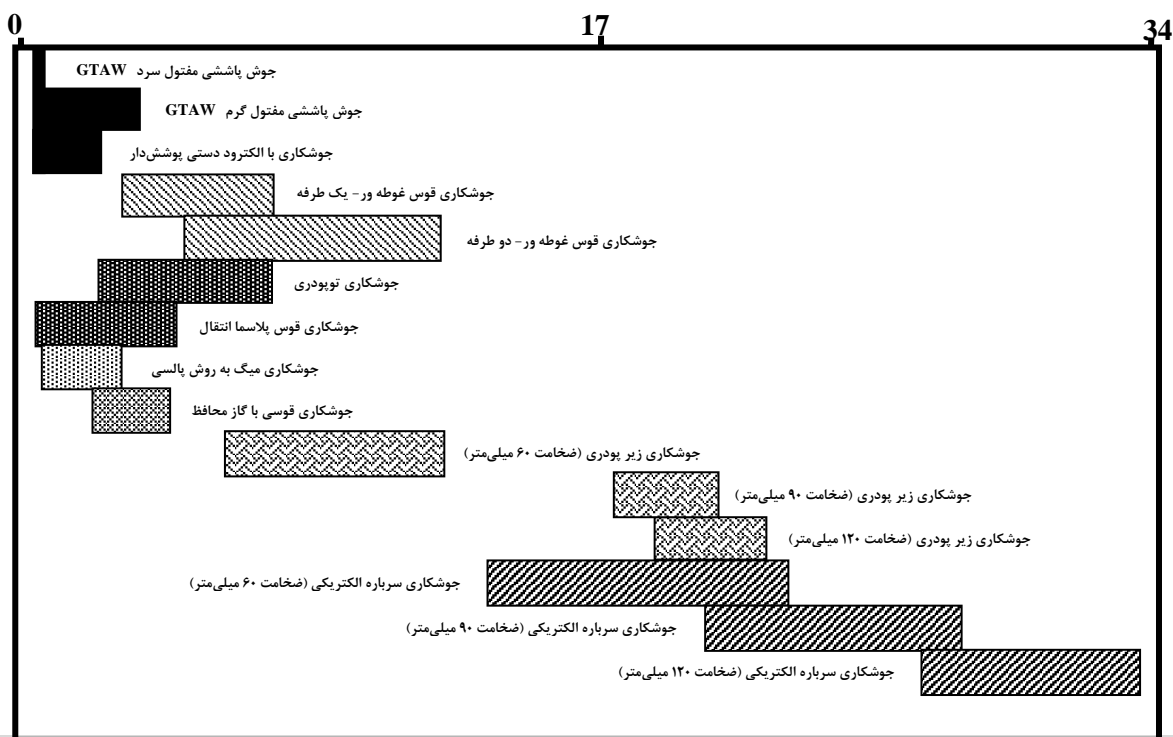


شکل ۳-۷: تصویر شماتیک فرآیند پاشش پودری توسط شعله اکسی گاز [۳].

در سیستم فشاری، پودر توسط هوای فشرده به طرف قسمت میانی نازل هدایت می‌شود، سپس شعله گاز این ذرات ریز را ذوب کرده و به کمک هوای فشرده با سرعت زیاد به موضع مورد نظر می‌رساند. در سیستم غیرفشاری (ثقلی)، از هوای فشرده جهت انتقال پودر پوششی به مشعل استفاده نمی‌شود. برای مصارف عمومی سیستم جریان ثقل (غیر فشاری) کاربرد دارد و در زمانی که پوشش بسیار دقیق یا سرعت‌های بالای پاشش مورد نیاز است از سیستم تغذیه فشاری استفاده می‌شود. مشعل، پودر (شکل، اندازه، وزن و نقطه ذوب دانه‌ها) و پارامترهای جوشکاری با توجه به عوامل زیر باید با یکدیگر هماهنگ باشند:

- مشعل باید پودر را به راحتی به سمت قطعه کار تغذیه کند. این عامل به شکل و اندازه دانه‌های پودر بستگی دارد.
- تغذیه پودر توسط مشعل باید به صورتی باشد که پخش پودر در مرکز شعله متمرکز شود. این عامل به وزن و اندازه دانه‌های پودر بستگی دارد. دانه‌هایی که در اطراف شعله پخش می‌شوند به دما و سرعت کافی نخواهد رسید و عدم پیوند مناسب و ایجاد حفره در رسوب را به همراه خواهند داشت.
- مشعل باید پودر را با سرعت مناسب تغذیه کند. در غیر این صورت نیروی شعله قادر به ذوب ذرات نخواهد بود. سرعت تغذیه پودرها در مشعل موثر از شکل و اندازه آن‌ها می‌باشد.
- سرعت دانه‌ها و فاصله بین مشعل و سطح قطعه کار تعیین کننده زمان ذوب دانه‌ها می‌باشد. نیروی شعله باید متناسب با این زمان، سایز، شکل و نقطه ذوب ذرات باشد.
- پودرهای مورد استفاده در فرآیند OFP باید دارای مشخصات زیر باشند:
  - (۱) تا حد امکان شکل کروی به منظور جریان مناسب در سیستم تغذیه
  - (۲) تا حد امکان دارای اندازه یکسان جهت ذوب در یک زمان
  - (۳) تا حد امکان دارای میزان اکسیژن کم
  - (۴) اندازه متناسب با فرآیند پاشش حرارتی

به طور کلی تجهیزات OFP، سبکتر و فشرده تر از انواع تجهیزات دیگر پاشش حرارتی می باشد. کاربرد گسترده پوشش ها با کمک این روش زمانی است که ترکیبی از سایش همراه با تنش های زیاد (برشی یا ضربه ای) بر روی قطعه اعمال شود. سختی پوشش می تواند به بیش از ۶۵ راکول برسد. به طور کلی ضخامت این پوشش ها در محدوده ۰/۵ تا ۰/۵ میلی متر قرار دارد. در نمودار (۲-۳) زیر مقدار ماده رسوب داده شده در فرآیندهای مختلف جوشکاری مقایسه شده است [۱۸، ۳].



نمودار ۲-۳: مقایسه میزان ماده رسوب داده شده در فرآیندهای مختلف جوشکاری ( کیلوگرم/ ساعت)

### ۳-۹- آنالیز خوردگی روش تافل و ولتامتری چرخه ای بر روی نانوالیاز آنتروپی بالا

همانطور که در هدف این تحقیق ذکر شد مسئله مورد بحث سایش است ولی مبحث خوردگی عالی با اینکه در موضوع رساله نبوده است نیز به طور مقدماتی در این تحقیق مورد ارزیابی قرار گرفت. در این آزمایش نانو آلیاز آنتروپی بالا تحت تاثیر محلول لیچینگ سنگ مس اکسیدی با اسید سولفوریک (عیار مس

۴/۸۸ درصد از یکی از رگه‌های مس معدنی در استان کرمان "جیرفت"، درجه حرارت آزمایش  $25^{\circ}\text{C}$  درجه سانتیگراد و  $\text{pH} = 1/67$ ) در آزمایش خوردگی تافل و ولتامتری چرخه‌ای (سیکلینگ) قرار گرفت.

خوردگی، تخریب یک فلز بر اثر تاثیرات شیمیایی و یا الکتروشیمیایی می‌باشد و منجر به تخریب سطح فلز شود. تخریب ناشی از این خوردگی تا تخریب نهایی قطعه فلزی ادامه خواهد یافت. گاهی نوع خوردگی تخریب مقطع و موضع خاصی از ساختار فلز است که در اثر شکل‌گیری یک حفره کوچک بر سطح فلز ناشی از، از بین رفتن مقطعی پوشش محافظ فلز در آن نقطه ایجاد می‌گردد. این ناحیه در مواجهه با سایر نواحی فلز آندشده و منجر به بروز یک خوردگی موضعی گالوانیک می‌گردد. تخریب این ناحیه کوچک به مرور زمان به داخل فلز رسوخ کرده و نهایتاً می‌تواند باعث شکست قطعه از آن ناحیه تحت بار گردد. این نوع خوردگی معمولاً تحت بار قطعه تخریب می‌گردد. برای اندازه‌گیری سرعت خوردگی یک فلز در محیط خورنده، با داشتن کاهش وزن فلز، می‌توان متوسط سرعت خوردگی را بر اساس  $1 \text{ mpy}$  (یک هزارم اینچ) و یا میلی‌متر در سال محاسبه کرد. روش تافل و ولتامتری چرخه‌ای (سیکلینگ) ارتباط بین یک واکنش الکتروشیمیایی و پارامترهای سینتیکی را نشان می‌دهد که با برون‌یابی منحنی تافل پارامترهای خوردگی نظیر سرعت خوردگی، جریان و پتانسیل خوردگی و مقاومت پلاریزاسیون بدست خواهد آمد. رابطه تافل با کنترل اکتیواسیون فرآیندهای آندی و کاتدی مرتبط می‌باشد. برای یک واکنش الکتروشیمیایی تحت کنترل اکتیواسیون، منحنی‌های پلاریزاسیون در صفحه مختصات  $E$  بر حسب  $\log(i)$  بصورت خطی بوده که رفتار تافل نامیده می‌شود. در پتانسیل خوردگی  $E_{\text{corr}}$  سرعت واکنش کاتدی با سرعت واکنش آندی (خوردگی فلز) برابر می‌شود. پتانسیل خوردگی معیاری از تسهیل و جریان خوردگی معیاری از تسریع فرآیند خوردگی است. برای تشکیل یک پیل خوردگی ۴ پارامتر زیر لازم است:

<sup>1</sup> Mils Per Year (MPY) is a unit of measurement equal to one thousandth of an inch

- آند: فلزی که خورده شود و واکنش‌های آندیک روی آن صورت پذیرد (محل انجام اکسیداسیون)؛
- کاتد: قطعه ای که واکنش‌های کاتدی روی آن صورت پذیرد (محل انجام احیا)؛
- اتصال الکتریکی یا مسیر حرکت الکترون‌ها؛
- اتصال شیمیایی یا مسیر حرکت یون‌ها.

آزمون‌های خوردگی، توسط دستگاه (Model solartron analytical, SI-1287) شکل (۳-۹)، در آزمایشگاه دانشگاه فنی و مهندسی دانشگاه تهران، دانشکده مهندسی مواد انجام شدند. برای این کار یک بار گلوله مورد استفاده عمومی در آلیاژ مورد استفاده فعلی در صنعت مورد ارزیابی قرار گرفته و بار دوم برای مقایسه همان آلیاژ که توسط نانوالیاز آنتروپی بالا پوشش داده شده، مورد ارزیابی و در نهایت مقایسه قرار گرفت که بر اساس الکتروود مبنا SCE (الکتروود استاندارد کالومل) مشاهده و گزارش شد.



شکل ۳-۹: انجام آزمون‌های خوردگی توسط دستگاه (model Solartron analytical, SI-1287)

### ۳-۱۰- آماده‌سازی و پوشش تیغه دستگاه سایش اندیس باند برای آزمون مواد معدنی با نانوالیاز آنتروپی بالا

به منظور بررسی رفتار نانوالیاز آنتروپی بالا ابداعی در برخورد با مواد معدنی مختلف در این تحقیق، آزمایش اندیس سایش باند با مواد معدنی مختلف انجام شد. این آزمایش نیاز به شرایط محیطی خاصی ندارد و در فشار و دما محیط انجام می‌شود. این آزمایش در مرکز فرآوری کرج توسط دستگاه سایش باند مدل (LabTech, ESSA, Australia)، انجام شد.

این دستگاه شامل یک تیغه به ابعاد  $3 \times 0.5$  اینچ از جنس فولاد سخت آلیاژی شامل کرم-نیکل-مولیبدن است. این تیغه به شفتی که با سرعت دورانی ۶۲۴ دور بر دقیقه می‌چرخد، متصل است. روتور در مرکز یک استوانه با قطر ۱۲ اینچ و ارتفاع ۴/۵ اینچ قرار دارد. استوانه نیز هم جهت با تیغه با سرعت ۵۱ دور بر دقیقه در حال چرخش است شکل (۳-۱۰). برای آماده‌سازی، ابتدا تیغه درگیر با مواد معدنی در دستگاه را جدا کرده و با نانو آلیاز آنتروپی بالا ابداعی پوشش داده شد (همانند روشی که گلوله و میله‌های آسیا پوشش داده شدند). محاسبات مربوط به سایش در بخش نتایج به تفصیل بیان شده‌اند.



شکل ۳-۱۰: آزمایش اندازه گیری سایش مواد معدنی باند روی تیغه پوشش داده شده از نانو آلیاز آنتروپی بالا

### ۳-۱۱- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سایش نانوالیاز آنتروپی بالا

برای محاسبه سایش باید خواص فیزیکی، ترموفیزیکی و ترمودینامیکی ذرات محاسبه شود که این فرآیند با نرم افزار شبیه‌سازی دینامیک مولکولی LAMMPS انجام شد. آنتالپی شامل انرژی جنبشی و انرژی بالقوه (انرژی داخلی) است و می‌تواند با گرم کردن یا با تبادل جرم افزایش یابد. از آنجا که آنتروپی یک خاصیت ترمودینامیکی است، مقدار آن در حالت مکانیکی تنها به وضعیت سیستم در شبیه‌سازی پویا مولکولی بستگی دارد. تعادل در یک شبیه‌سازی NVT (تعداد ثابت اتم‌ها، حجم و دما) به منظور تنظیم سیستم با دمای هدف فرض می‌شود. رابطه بین زمان شبیه‌سازی و مرحله زمانی خطی است. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مفروض، حداقل باید در ۵۰۰۰۰ واحد و مرحله زمانی و در موقعیت فضایی نسبت به یکدیگر مطابق جدول (۳-۴) صورت گیرد تا حداقل انرژی مورد نیاز در دمای ۳۰۰ کلوین که سیستم در حال تعادل است، تامین شود. لازم به ذکر است که تمامی اتم‌ها در دمای معین دارای انرژی جنبشی متوسط هستند.

جدول ۳-۳: مراحل زمانی و تعداد اتم‌های تشکیل دهنده شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

temperature (300 K)	MD run of 50,000 steps
100 atoms, 6 atom types	units ( metal), dimension (3)
Atom style ( atomic)	boundary ( m m m)
	-50 50 xlo xhi
ATOM Positions	-50 50 ylo yhi
	-50 50 zlo zhi





## فصل چهارم

### یافته‌های تحقیق، بحث و تحلیل نتایج

#### ۴-۱- مقدمه

آسیاهای گلوله‌ای دارای شکلی استوانه‌ای یا استوانه - مخروطی هستند. بار خردکننده آن‌ها را گلوله‌هایی از جنس مواد سخت تشکیل می‌دهد. برای افزایش مقاومت گلوله‌ها در مقابل سایش می‌توان از فولادهای کروم‌دار یا کروم - مولیبدن‌دار استفاده کرد. انتخاب نوع گلوله بستگی به نوع کانه و امکانات دسترسی به آن را دارد. از طرف دیگر بر مبنای محاسبات اقتصادی گلوله‌ای انتخاب می‌شود که هزینه عملیات را به حداقل برساند. همچنین آسترهای آسیا نیز از قطعات تأثیرگذار در آسیاها هستند. در یک آسیا فرآیند خرد کردن و نرم سازی مواد به شدت متاثر از عملکرد گلوله‌ها و آسترها است. سایش گلوله‌ها و آسترها اثرات متقابلی بر روی یکدیگر دارند و انتخاب صحیح مواد مناسب و متناسب این دو، باعث کاهش سایش سیستم و بهبود راندمان می‌شود.

#### ۴-۲- مقایسه نرخ سایش و میزان سختی نانوالیاز آنتروپی بالا با آلیاژهای مصرفی فعلی

همانطور که در فصل قبل بیان شد، استاندارد ASTM G-65 آزمایشی برای اندازه‌گیری مقاومت در برابر سایش سطوحی از مواد است. این آزمایش برای بررسی میزان مقاومت در برابر سایش پوشش‌های سخت مورد استفاده قرار می‌گیرد. بر اساس نتایج حاصل از این آزمایش در جدول (۴-۱) سختی بدست آمده از آلیاژ مفروض با سایر محصولات که هم اکنون در صنعت مورد استفاده قرار می‌گیرد، مورد مقایسه قرار گرفته است.

جدول ۴-۱: نتایج آزمون سایش بر اساس استاندارد ASTM G-65 برای نمونه نانوآلیاژ ابداعی و مقایسه با سایر

محصولات موجود

نمونه	وزن سایش یافته (gr)	حجم سایش یافته (mm <sup>3</sup> )	نرخ سایش (mm <sup>3</sup> /m)	سختی HRC
نمونه آلیاژ ابداعی	۶/۷۰۰*۱۰ <sup>-۲</sup>	۸/۲۴۶*۱۰ <sup>-۱</sup>	۱/۹۱۳*۱۰ <sup>-۲</sup>	۶۷
فولاد حاوی کاربید پیچیده	۱/۵۹۶*۱۰ <sup>-۱</sup>	۱/۷۵۰*۱۰ <sup>-۱</sup>	۴/۰۶۰*۱۰ <sup>-۳</sup>	۶۱
چدن سفید	۱/۴۵۷*۱۰ <sup>-۱</sup>	۱/۷۸۶*۱۰ <sup>-۲</sup>	۴/۱۴۵*۱۰ <sup>-۲</sup>	۶۱
فولاد حاوی کاربید کروم	۲/۴۸۱*۱۰ <sup>-۱</sup>	۲/۹۵۵*۱۰ <sup>-۲</sup>	۶/۸۵۵*۱۰ <sup>-۲</sup>	۵۷
فولاد ابزار D2 در دمای ۲۰۰ درجه سانتیگراد	۳/۲۶۸*۱۰ <sup>-۱</sup>	۳/۹۸۹*۱۰ <sup>-۱</sup>	۹/۲۵۶*۱۰ <sup>-۳</sup>	۵۶
فولاد ابزار D2 در دمای ۵۰۰ درجه سانتیگراد	۵/۳۹۴*۱۰ <sup>-۱</sup>	۶/۵۸۳*۱۰ <sup>-۱</sup>	۱/۵۲۸*۱۰ <sup>-۲</sup>	۵۲

همانطور که در جدول (۴-۱) ملاحظه می‌شود، نتایج آزمون سختی سنجی نشان دهنده سختی ۶۷ راکول برای نمونه نانو آلیاژهای آنتروپی بالا ابداعی می‌باشد. این سختی بسیار بالا تحت عامل مورفولوژی سطحی همگن ترکیب‌های نانویی ساختار آلیاژ آنتروپی بالا که در عکس‌های میکروسکوپی نشان داده شد، بدست آمده است. میزان نرخ سایش و سختی نانو آلیاژ ابداعی در مقایسه با سایر آلیاژهای آنتروپی بالا موجود مطابق جدول (۲-۲) انجام شده است، که نتایج نشان‌دهنده سختی بالاتر و میزان سایش کمتر نمونه آلیاژ ابداعی می‌باشد. جهت درک بهتر این دست‌آورد نیاز به مقایسه میزان نرخ سایش نانو آلیاژ مفروض با سایر آلیاژهای موجود مطابق جدول (۲-۴) می‌باشد.

جدول ۴-۲: مقایسه آزمون سختی سنجی نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی در تحقیق با سایر آلیاژهای آنتروپی بالا.

آلیاژهای آنتروپی بالا					
آلیاژها	سختی (ویکرز)	ارجاع	آلیاژها	سختی (ویکرز)	ارجاع
CrMoNbTaVW	۷۰۵	[۶۹]	MoNbTaW	۴۵۴	[۷۶]
HfMoNbTaTiZr	۵۰۵	[۷۰]	NbTaTiVW	۴۴۷	[۷۷]
HfMoNbTiZr	۵۴۲	[۷۰]	NbTaTiV	۲۹۸	[۷۷]
HfNbTaTiVZr	۵۵۸	[۷۱]	NbTaVW	۴۹۳	[۷۸]
HfNbTaTiZr	۳۹۰	[۷۲]	NbTiVZr	۳۳۵	[۷۷]
MoNbTaTiV	۴۴۳	[۷۳]	Al <sub>0.5</sub> CoCrCuFeNiVx	۶۰۰ الی ۲۰۰	[۷۸]
MoNbTaV	۵۰۴	[۷۴]	AlxCo <sub>1.5</sub> CrFeNi <sub>1.5</sub> Tiy	۷۰۰ الی ۵۰۱	[۷۹]
MoNbTaVW	۵۳۵	[۷۵]	AlCoCrFexMo <sub>0.5</sub> Ni	۷۰۰ الی ۴۲۵	[۸۰]

نانو آلیاژهای آنتروپی بالا					
آلیاژها	سختی (ویکرز)	ارجاع	آلیاژها	سختی (ویکرز)	ارجاع
CoCrFeMnNi	۷۵۵ الی ۶۹۳	[۸۲]	Al <sub>20</sub> Li <sub>20</sub> Mg <sub>10</sub> Sc <sub>20</sub> Ti <sub>30</sub>	۵۹۱ الی ۵۰۰	[۸۳]
NiCoAlFeMo "Ni-Type"	۷۱۷	[۸۱]	Al <sub>20</sub> Li <sub>20</sub> Mg <sub>10</sub> Sc <sub>20</sub> Ti <sub>30</sub>	۶۲۲ الی ۵۸۶	[۸۳]

نمونه نانو آلیاژهای آنتروپی بالا موضوع تحقیق

آلیاژها	سختی (راکول)	سختی (ویکرز)
Cr <sub>2</sub> Fe <sub>45</sub> Ni <sub>4</sub> Mo <sub>21</sub> Ba <sub>4</sub> Hf <sub>24</sub>	۶۷	~ ۹۰۵

#### ۴-۳- آزمایش سایش باند موادمعدنی بر روی نانو آلیاژ آنتروپی بالا

در ابتدا برای هر تست مقدار ۱۶۰۰ گرم نمونه، به ۴ نمونه ۴۰۰ گرمی با دستگاه تقسیم‌کن برای اندازه‌گیری مقاومت در برابر سایش تقسیم شدند. تیغه پوشش داده شده با نانو آلیاژ آنتروپی بالا با دقت ۰/۰۰۱/۰ گرم توسط ترازو اندازه‌گیری شد. تیغه در داخل روتور قرار داده شد و توسط گیره محکم شد.

نمونه اول (۴۰۰ گرمی) را در داخل دستگاه ریخته و در پوش آن بسته شد. با استفاده از زمان سنج اتوماتیک دستگاه به مدت ۱۵ دقیقه روشن شد. این کار برای هر ۴ نمونه تکرار گردید و محصول هر مرحله جداگانه نگهداری شد. حال تیغه از محل گیره داخل محفظه جدا شده و با الکل و استن کاملاً تمیز و خشک شد. سپس دوباره با دقت ۰/۰۰۱/۰ گرم، وزن شد. در جدول (۳-۴) نتایج محاسباتی آزمون مفروض آورده شده است.

بررسی نتایج تحقیق حاضر نشان می‌دهد که نانو آلیاژ آنتروپی بالا از مقاومت به سایش بسیار بالایی برخوردار است که نشان‌دهنده کاربرد مفید فناوری نانو در این نوع پوشش‌دهی سخت است. اندیس سایش مواد معدنی باند یک آزمایش کاملاً تخصصی در صنایع معدنی است که عملکرد و برهم کنش ماده معدنی طبیعی و آلیاژ را نشان می‌دهد. با ایجاد یک نانو پوشش سخت و در دسترس بر روی تجهیزات در معرض سایش در جهت فرآوری مواد معدنی از قبیل آسترهای آسیاها، می‌توان به میزان قابل توجهی سایش و به عبارتی دیگر، میزان مصرف آن‌ها را کاهش داد.

جدول ۳-۴ محاسبه نرخ و اندیس سایش باند برای سه نمونه معدنی مورد تحقیق

		نوع کانسنگ		
اندیس سایش باند $A_i$ (gr) نرخ سایش (A.R.)		سنگ آهن	کانسنگ مس اکسیدی	کانسنگ مس پورفیری
اندیس سایش باند برای آلیاژ مورد استفاده دستگاه سختی ۵۲ راکول معادل ۵۰۰ برینل		۰/۱۶۴۷	۰/۱۴۷۲	
اندیس سایش باند برای نانو آلیاژ آنتروپی بالا CrFeNiMoBaHf سختی ۶۷ راکول معادل ۷۴۶ برینل		۰/۰۹۰۸	۰/۰۸۰۳	۰/۰۸۳۷
نرخ سایش برای آلیاژ معمولی مورد استفاده (A.R.)	آسیا گلوله‌ای خشک (lb/kWh)	گلوله‌ها $0.05 * A_i^{0.5}$	۰/۰۲۰۳	۰/۰۱۹۲
	سنگ شکن (ژیراتوری، فکی، مخروطی) (lb/kWh)	لاینرها $0.05 * A_i^{0.5}$	۰/۰۰۲۰	۰/۰۰۱۹
		لاینرها $(A_i + 0.22)/11$	۰/۰۳۵۰	۰/۰۳۳۴
نرخ سایش برای نانو آلیاژ آنتروپی بالا (A.R.)	آسیا گلوله‌ای خشک (lb/kWh)	گلوله‌ها $0.05 * A_i^{0.5}$	۰/۰۱۵۱	۰/۰۱۴۵
	سنگ شکن (ژیراتوری، فکی، مخروطی) (lb/kWh)	لاینرها $0.05 * A_i^{0.5}$	۰/۰۰۱۵۱	۰/۰۰۱۴
		لاینرها $(A_i + 0.22)/11$	۰/۰۲۸۳	۰/۰۲۷۶

#### ۴-۴- بررسی تکرارپذیری، تکثیرپذیری نتایج

جهت بررسی انحراف معیار، تکرار پذیری<sup>۱</sup> و تکثیر پذیری<sup>۲</sup> براساس سطح اطمینان ۹۵ درصد، از نمونه سنگ آهن و کانسنگ مس اکسیدی که جمعا برای هر کدام سی نمونه نانوآلیاژ آنتروپی بالا ابداعی آماده شد و همانند قبل برای هر تست، مقدار ۱۶۰۰ گرم نمونه آماده، به ۴ نمونه ۴۰۰ گرمی با دستگاه تقسیم‌کن، تقسیم شدند. نتایج کاهش وزن اندازه‌گیری و در جدول (۴-۴) آورده شده است. ابتدا سی نمونه به ده نمونه سه تایی تقسیم و میانگین سه نمونه گرفته شد. انحراف معیار سه آزمون محاسبه شد. حال مطابق فرمول‌های (۴-۱) الی (۴-۷) انحراف معیار، انحراف استاندارد میانگین آزمون‌ها و در نهایت، انحراف استاندارد تکرارپذیری

<sup>۱</sup> تکرار پذیری: مقداری است که پیش بینی می‌شود با یک احتمال معین (۹۵٪)، قدرمطلق اختلاف بین دو نتیجه آزمون انفرادی حاصل از اندازه گیری بر روی یک نمونه یکسان (ثابت) با روش اندازه گیری یکسان در شرایط مشابه (مجری یکسان، دستگاه یکسان، آزمایشگاه یکسان و فاصله زمانی کوتاه بین آزمون‌ها) از آن کوچکتر باشد.

<sup>۲</sup> تجدید پذیری: مقداری است که پیش بینی می‌شود با یک احتمال معین (۹۵٪)، قدرمطلق اختلاف بین دو نتیجه آزمون انفرادی حاصل از اندازه گیری بر روی یک نمونه یکسان (ثابت) با روش اندازه گیری یکسان تحت شرایط متفاوت (مجریان متفاوت، دستگاه‌های متفاوت یکسان، آزمایشگاه‌های متفاوت و یا زمان های متفاوت) از آن کوچکتر باشد.

و تکثیر پذیری و سایر پارامترهای آماری محاسبه شد. در صورتیکه اختلاف دو نتیجه آزمون در شرایط تکرار پذیر (یا تجدید پذیر) کمتر از  $r$  (یا  $R$ ) باشد، بیانگر مناسب بودن نتایج و اطمینان بخش بودن است.

$$\bar{x} = \sum_1^n x/n \quad \text{فرمول (۴-۱)}$$

$$s = \sqrt{\sum_1^n (x - \bar{x})^2 / (n - 1)} \quad \text{فرمول (۴-۲)}$$

$$\bar{\bar{x}} = \sum_1^p \bar{x}/p \quad \text{فرمول (۴-۳)}$$

$$d = (\bar{x} - \bar{\bar{x}}) \quad \text{فرمول (۴-۴)}$$

$$S_{\bar{x}} = \sqrt{\sum_1^p d^2 / (p - 1)} \quad \text{فرمول (۴-۵)}$$

$$S_r = \sqrt{\sum_1^p d^2 / (p)} \quad \text{فرمول (۴-۶)}$$

$$S_R = \sqrt{(S_{\bar{x}})^2 + (S_r)^2 * (n - 1) / n} \quad \text{فرمول (۴-۷)}$$

جایی که:

$\bar{x}$	The average of n measurements;	$s$	The samples Standard deviation;
$x$	The amount of each test;	$\bar{\bar{x}}$	The samples average of average;
$n$	The number of measurements;	$p$	The amount of each day test;
$S_{\bar{x}}$	The average standard deviation tests;	$d$	Test deviation;
$S_r$	Standard deviation of repeatability;	$S_R$	Standard deviation of reproducibility;

میانگین کل برای تیغه فولادی پوشش داده شده توسط نانوالیاز آنتروپی بالا ۰/۰۹۰۸ گرم برای سنگ آهن و برای کانسنگ مس اکسیدی ۰/۰۸۰۳ گرم اندازه گیری شد. همچنین انحراف استاندارد، تکرار پذیری و تکثیر پذیری، براساس سطح اطمینان ۹۵ درصد، برای تیغه فولادی پوشش داده شده بوسیله نانوالیاز آنتروپی بالا برای سنگ آهن ۰/۰۰۰۱۶، ۰/۰۰۰۴۷، ۰/۰۰۰۴۰ و کانسنگ مس اکسیدی ۰/۰۰۰۳۰، ۰/۰۰۰۴۷، ۰/۰۰۰۴۲ و ۰/۰۰۰۴۲ به ترتیب مطابق جدول (۴-۴) محاسبه شد.

مشاهده می گردد که اختلاف دو نتیجه آزمون در شرایط تکرار پذیری (یا تجدید پذیری) کمتر از  $S_r$  (یا  $S_R$ ) است (۰/۰۰۰۳) که بیانگر مناسب بودن نتایج و اطمینان بخش بودن است. همچنین، تناسب داده های تجربی در هر یک از آلیاژها با محاسبه ضریب همبستگی ( $R^2$ ) مورد بررسی قرار گرفت.

نتایج نشان داد که برای تیغه فولادی پوشش داده شده توسط نانوالیاز آنتروپی بالا برای سنگ آهن  $R^2 = 0.9423$  و برای کانسنگ مس اکسیدی  $R^2 = 0.9552$ ، که هر دو نزدیک به  $R^2 = 1.0$  است.

جدول ۴-۴: محاسبه انحراف استاندارد، تکرار پذیری و تکثیر پذیری، براساس سطح اطمینان ۹۵٪ برای تیغه فولادی پوشش داده شده توسط نانوالیاز آنتروپی بالا ابداعی

روز اول (A)					روز دوم (B)						
اندیس سایش تیغه پوشش داده شده برای کانسنگ مس					اندیس سایش تیغه پوشش داده شده برای سنگ آهن						
$x$	$n=30$	$\bar{x}, n=10$	$d$	$S_{\bar{x}}$	$\bar{X}$	$x$	$n=30$	$\bar{x}, n=10$	$d$	$S_{\bar{x}}$	$\bar{X}$
۱	۰/۰۷۹۳*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۷۹۳*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰	۱	۰/۰۹۰۳*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۹۰۳*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰
۲	۰/۰۸۰۳*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۸۰۳*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰		۲	۰/۰۹۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۹۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰	
۳	۰/۰۸۰۱*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۸۰۱*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰		۳	۰/۰۹۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۹۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰	
۴	۰/۰۸۰۱*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۸۰۱*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰		۴	۰/۰۹۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۹۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰	
۵	۰/۰۸۰۲*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۸۰۲*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰		۵	۰/۰۹۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۹۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰	
۶	۰/۰۷۹۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۷۹۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰		۶	۰/۰۹۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۹۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰	
۷	۰/۰۸۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۸۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰		۷	۰/۰۹۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۹۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰	
۸	۰/۰۸۰۰*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۸۰۰*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰		۸	۰/۰۹۰۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۹۰۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰	
۹	۰/۰۷۹۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۷۹۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰		۹	۰/۰۹۱۲*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۹۱۲*۱۰ <sup>-۳</sup>	۰/۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰۰۰	



۱۰	۰/۰۷۹۹*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳/۰
۱۱	۰/۰۸۰۴*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۳۲۰۵۳/۰
۱۲	۰/۰۸۰۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۳۲۰۵۳/۰
۱۳	۰/۰۷۹۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۷۰/۰
۱۴	۰/۰۸۱۲*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۴۳۰/۰
۱۵	۰/۰۸۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۴۳۰/۰
۱۶	۰/۰۷۹۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۵۷۷۷۷۷/۰
۱۷	۰/۰۸۰۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۱۸	۰/۰۸۰۱*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۱۹	۰/۰۸۰۳*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۱۱۵۳۱/۰
۲۰	۰/۰۸۰۶*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۱۱۵۳۱/۰
۲۱	۰/۰۷۹۹*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۱۱۵۳۱/۰
۲۲	۰/۰۸۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۰۶۳/۰
۲۳	۰/۰۸۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۰۶۳/۰
۲۴	۰/۰۸۰۰*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۰۶۳/۰
۲۵	۰/۰۸۰۴*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۳/۰
۲۶	۰/۰۸۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۳/۰
۲۷	۰/۰۸۱۰*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۳/۰
۲۸	۰/۰۸۰۵*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۳/۰
۲۹	۰/۰۸۱۱*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۳/۰
۳۰	۰/۰۸۰۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۸۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰/۰	۳۰۰(۰*۰۳/۰
۱۰	۰/۰۹۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰۱۷۰۷۰/۰
۱۱	۰/۰۹۰۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰۱۷۰۷۰/۰
۱۲	۰/۰۹۱۱*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰۱۷۰۷۰/۰
۱۳	۰/۰۹۰۹*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰۱۷۰۷۰/۰
۱۴	۰/۰۹۱۰*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰۱۷۰۷۰/۰
۱۵	۰/۰۹۱۱*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۸۰۱۷۰۷۰/۰
۱۶	۰/۰۹۰۴*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۱۷	۰/۰۹۰۶*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۱۸	۰/۰۹۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۱۹	۰/۰۹۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۲۰	۰/۰۹۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۲۱	۰/۰۹۰۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۲۲	۰/۰۹۰۶*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۲۳	۰/۰۹۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۲۴	۰/۰۹۰۹*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۲۵	۰/۰۹۰۷*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۲۶	۰/۰۹۰۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۲۷	۰/۰۹۱۰*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۵۳۷۷۷۷۷/۰
۲۸	۰/۰۹۰۸*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۱۰۰/۰
۲۹	۰/۰۹۰۹*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۱۰۰/۰
۳۰	۰/۰۹۱۰*۱۰ <sup>-۳</sup>	۳۰۰(۰*۰۹۰۷۰/۰	۳۰۰(۰*۰۹۰/۰	۳۰۰(۰*۰۱۰۰/۰

#### ۴-۵- آنالیز خوردگی روش تافل<sup>۱</sup> و ولتامتری چرخه‌ای<sup>۲</sup> بر روی نانوآلیاژ آنتروپی بالا

در آزمایش خوردگی تافل و ولتامتری چرخه‌ای، نانو آلیاژ آنتروپی بالا تحت تاثیر محلول لیچینگ

سنگ مس اکسیدی با اسید سولفوریک (عیار مس ۴/۸۸ درصد از یکی از رگه‌های مس معدنی در استان کرمان

<sup>1</sup> Tafel Extrapolation Method Corrosion Rate

<sup>2</sup> Cyclic Corrosion Testing (CCT)

"جیرفت"، درجه حرارت آزمایش ۲۵ °C درجه سانتیگراد و pH=۱/۶۷ قرار گرفت. آزمون‌های خوردگی، توسط دستگاه (model Solartron analytical, SI-1287)، در آزمایشگاه دانشگاه فنی و مهندسی دانشگاه تهران، دانشکده مهندسی مواد انجام شد و نتایج در اختیار قرار گرفت.

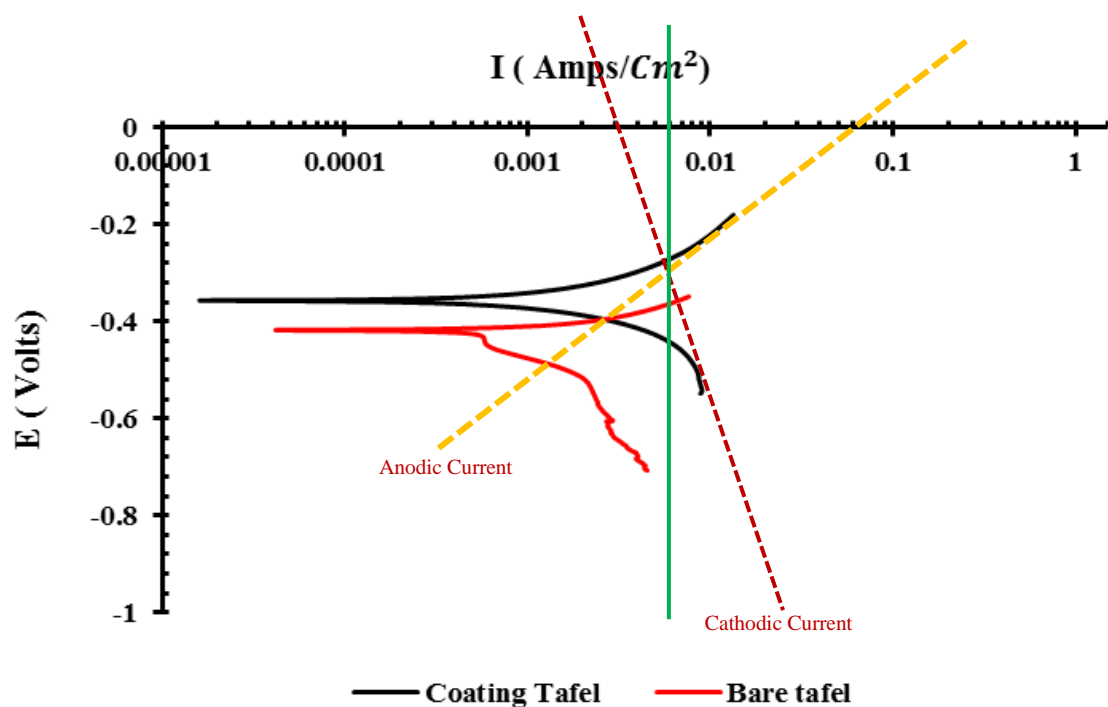
هنگامی که پتانسیل خوردگی به مقدار مثبت بیشتری از ۴۰۰ mV- در مقابل اساس الکتروود مبنا SCE به ۱۰۰۰ mV+ رسید میزان نرخ خوردگی در آلیاژ معمولی در مقایسه با نانوالیاز آنتروپی بالا پوشش داده شده، از ۰/۲۱۱ میلی متر در سال به ۰/۰۰۰۶ میلی متر در سال کاهش یافت که نتایج پتانسیل خوردگی تافل و ولتامتری چرخه‌ای در نمودارهای (۴-۱) و (۴-۲) به ترتیب آورده شده است. نتایج محاسبات نشان‌دهنده نرخ خوردگی ۸/۳۳ برای نمونه اولیه و ۰/۰۲۲۵ برای نانوالیاز آنتروپی بالا مفروض است که این نرخ نشان دهنده کاهش بسیار عالی نرخ خوردگی بر اساس واحد mpy می‌باشد. جدول (۴-۵) مقایسه نتایج با نمونه‌های مشابه است. قابل ذکر است که چگالی نانوالیاز آنتروپی بالا ۷/۳۶ گرم بر سانتی متر مکعب و وزن اکی‌والان ۳۲/۰۹۲۴ است.

جدول ۴-۵: مقایسه نرخ خوردگی آزمایش خوردگی با سایر آزمایش‌های صورت گرفته بر روی کانسنگ مس

نمونه	نرخ خوردگی (mpy)	مرجع	نمونه	نرخ خوردگی (mpy)	مرجع
Cast Steel	۲۱	[۸۴]	Cast Iron, Ni- Hard	۴/۶	[۸۴]
Wrought Steel	۱۶	[۸۴]	Cast Iron, 12-Cr	۴/۴	[۸۴]
Forged Steel	۹/۸۲	[۸۵]	Cast Iron, 27-Cr	۰/۹	[۸۴]
نمونه اولیه بدون پوشش	۸/۳۳	این تحقیق	نمونه پوشش داده شده نانوالیاز آنتروپی بالا	۰/۰۲۲۵	این تحقیق

$$\text{Corrosion rate (mpy)} : \frac{0.129 * I_{corr} * EW}{\rho} = \frac{0.129 * 0.04 * 32/0.924}{7/36} = 0.22499 \sim 0.225 \text{ mpy}$$

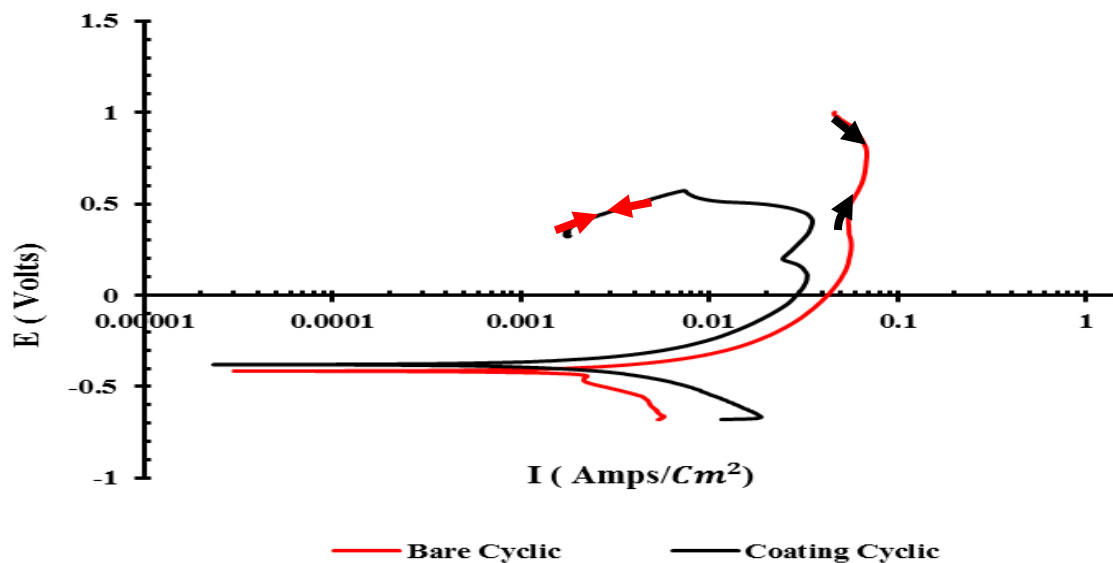
$$\text{Corrosion rate (mm/yr)} : \frac{I_{corr} * K_1 * EW}{\rho} = \frac{(4 * 10^{-7}) * (3/27 * 10^{-6}) * 32/0.924}{7/36} = 5/70.337 * 10^{-7} = \sim 0.0006 \text{ mm/yr}$$



نمودار ۴-۱: پتانسیل خوردگی تافل برای نمونه آلیاژ پوشش داده شده با نانوالیاز آنتروپی بالا ابداعی در مجاورت محلول

لیچینگ مس اکسیدی

آزمایش خوردگی ولتامتری چرخه‌ای در صنعت، روشی واقع بینانه برای انجام آزمایش‌های خوردگی تجهیزات و برای تسریع در بررسی‌های آزمایشگاه و تطابق با اثرات مخرب خوردگی در دنیای واقعی، می‌باشد. خوردگی حفره‌ای نوعی خوردگی موضعی می‌باشد که باعث ایجاد حفره‌های کوچک در فلزات می‌شود. عامل این پدیده، نرسیدن اکسیژن به بخش کوچکی از سطح می‌باشد. در این شرایط، این بخش نقش آند را بازی می‌کند و بخشی که دارای اکسیژن بالا است، نقش کاتد را ایفا می‌کند که حاصل آن ایجاد خوردگی گالوانیک می‌باشد. خوردگی گالوانیک (یا خوردگی دو فلزی) یک فرایند الکتروشیمیایی است که در آن یک فلز در حالی که در حضور یک الکترولیت در تماس با یک فلز دیگر می‌باشد دچار خوردگی می‌شود.



نمودار ۲-۴: پتانسیل خوردگی ولتامتری چرخه‌ای نمونه نانوآلیاژ آنتروپی بالا پوشش داده در مجاورت محلول لیچینگ مس اکسیدی

#### ۴-۶- آزمایش میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی اتمی<sup>1</sup> FE-SEM بعد از فرآیند جوشکاری

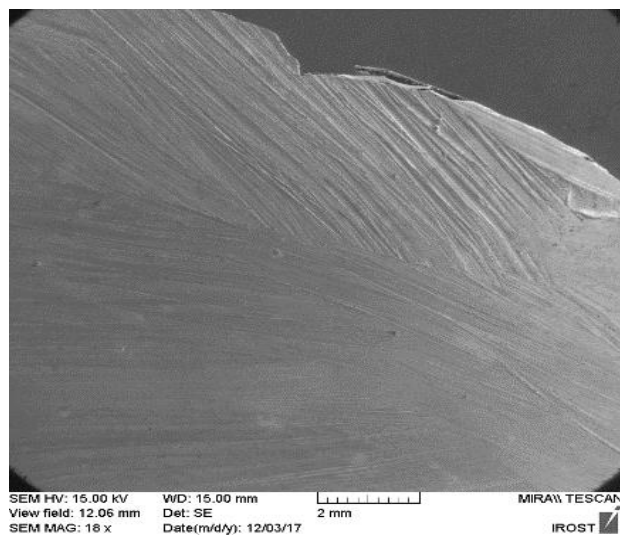
آزمون میکروسکوپ اتمی FE-SEM برای نانو آلیاژ آنتروپی بالا  $\text{Cr}_2\text{Fe}_{45}\text{Ni}_4\text{Mo}_{21}\text{Ba}_4\text{Hf}_{24}$  به کمک دستگاه مدل (FESEM- MIRA3, TESCAN-XMU) انجام شد.

این آزمون، بعد از فرآیند جوشکاری برای بررسی اینکه آیا شبکه ساختار و مورفولوژی نانویی هنوز باقی مانده است و یا آمورف (بی شکل) شده است مورد ارزیابی قرار گرفت. مطابق انتظار شکل (۱-۴)، نشان می‌دهد که تعادل بین نرخ جوش و شکست ذرات، همچنین ابعاد ذرات برقرار است، بطوری که ذرات نانو آلیاژ آنتروپی بالا حجم زیادی از مناطق مشاهده شده را تشکیل می‌دهند.

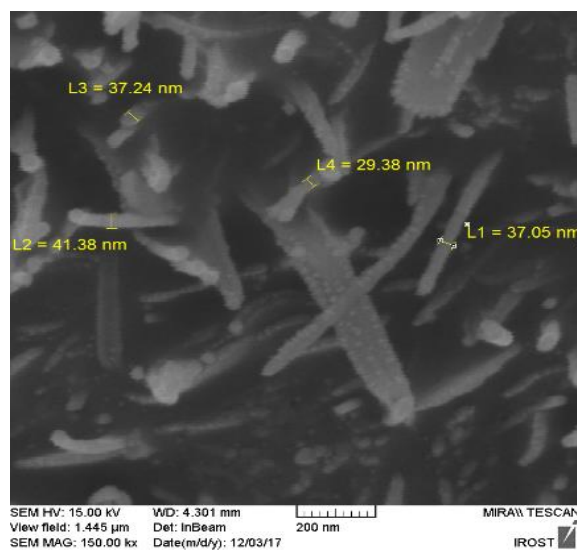
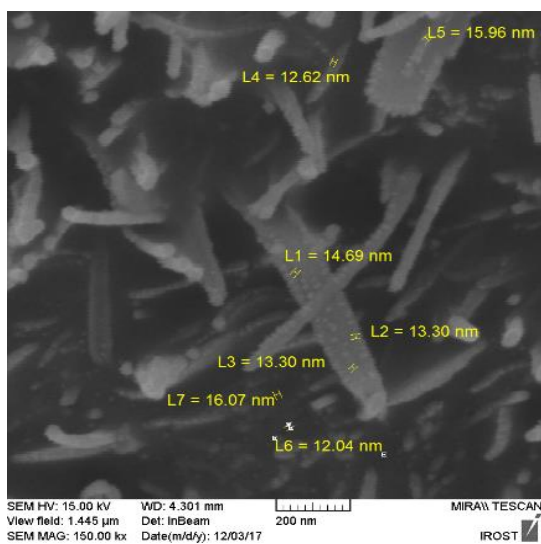
همانطور که در تصاویر مورفولوژی سطح نانو آلیاژ آنتروپی بالا  $\text{CrFeNiMoBaHf}$  ملاحظه می‌شود، ابعاد ذرات کمتر از ۵۰ نانومتر (میانگین اندازه ذرات ۲۵ نانومتر) است. تصاویر نشان‌دهنده یک ساختار کاملاً همگن

<sup>1</sup> Field Emission Scanning Electron Microscope

جامد در یک ماتریس از یک آلیاژ با شبکه منظم است که از تجزیه و تحلیل مورفولوژی سطح مشاهده می‌شود که این پوشش‌ها از نانوذرات با مورفولوژی اندازه نانو تشکیل شده‌اند.



(الف)



(ب)

شکل ۴-۱: تصویر میکروسکوپ اتمی FE-SEM از نانو آلیاژ آنتروپی بالا جوشکاری شده؛  
 (الف): نمای از مقطع جوشکاری شده مقیاس ۲ میلی‌متر (ب): میانگین ابعاد ذرات ۲۵ نانومتر

#### ۴-۷- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سایش نانوالیاز آنتروپی بالا

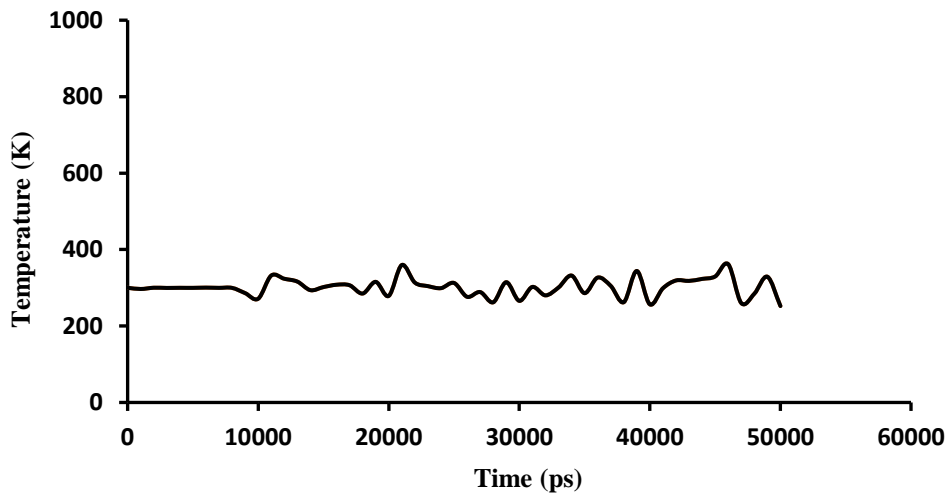
در این تحقیق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، توسط مدل لنارد-جونز<sup>۱</sup> انجام شده است و برای تخمین سایش نانوساختارهای آلیاز آنتروپی بالا کدنویسی انجام شده است. پتانسیل لنارد-جونز یک پتانسیل برای توصیف برهم‌کنش میان دو ذره (اتم یا مولکول) است که در فاصله‌های دور نیروی رباینده و در فاصله‌های نزدیک نیروی دافعه (راننده) دارند و یک مدل ریاضی است که تعامل بین یک جفت اتم یا مولکول خنثی را به تقریب می‌دهد. به عبارت دیگر، پتانسیل لنارد-جونز تابعی از فاصله بین مراکز دو ذره است. هنگامی که دو ذره غیر پیوند دهنده فاصله‌ای بی‌نهایت دارند، احتمال جمع شدن و تعامل آن‌ها حداقل است. این نشان می‌دهد که در مسافت‌های طولانی، جفت مولکول‌ها یا اتم‌ها، یک نیروی تثبیت‌کننده کوچک را تجربه می‌کنند. نیروی رباینده معولا نیروی واندروالسی و نیروی دافعه (راننده) نیروی رانش ناشی از هم‌پوشانی ابر الکترونی دو ذره است.

برای بررسی نتایج عملی، عناصر تشکیل دهنده نانو آلیاز آنتروپی بالا، مشخص و تعیین شدند. علاوه بر انرژی پتانسیل، انرژی جنبشی، انرژی کل، تغییرات آنتالپی و آنتروپی، و دمای فرآیند سایش نیز محاسبه شدند، همچنین، ساختارهای میکروسکوپی و نانومقیاس آلیاز نیز مورد بررسی قرار گرفتند. بر اساس خروجی نرم افزار شبیه‌سازی دینامیک مولکولی LAMMPS که در نمودار (۳-۴) نشان داده شده است، سیستم در دمای هدف ۳۰۰ کلوین به خوبی به تعادل رسیده است. این بدان معنی است که نوسان نمودار در دماهای مختلف با گذشت زمان بسیار کم است که تعادل ساختار نانویی و بین مرزی دانه‌ها را نشان می‌دهد. هنگامی که یک ساختار در دمای معین دارای انرژی جنبشی متوسط باشد نشان از همگن و یکدست بودن ساختار سنتز شده است. همچنین، انرژی پتانسیل، انرژی جنبشی و انرژی کل مطابق نمودار (۴-۴) در نرم افزار محاسبه و در نهایت نمایش داده شد. کل انرژی داخلی در طی شبیه‌سازی بین دو شکل انرژی پتانسیل و انرژی جنبشی به طور

---

<sup>1</sup> Lenard-Jones Potential Model

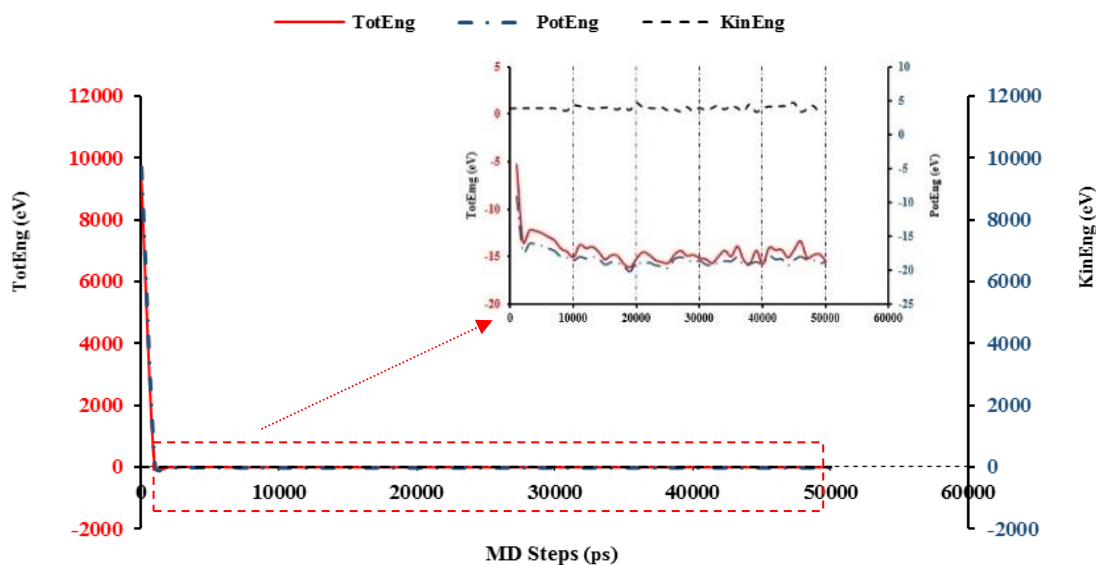
پیوسته در حال افزایش است، در حالی که مجموع آن‌ها همیشه ثابت می‌ماند. در شبیه سازی، مقدار انرژی کل در تمام نوسان های دماها، مقدار ثابتی است، که نشان دهنده تعادل سیستم شبیه سازی است.



نمودار ۳-۴: تغییرات در دما (برحسب کلوین) با گذشت زمان (برحسب پیکوثانیه) برای ساختار نانو آلیاژ آنتروپی بالا

انرژی پتانسیل، صورتی از انرژی است که در یک سامانه به صورت نهفته وجود دارد و قابل تبدیل به انرژی جنبشی می‌باشد. انرژی پتانسیل، اثری سیستمی است و برای جسمی کاملاً منزوی وجود ندارد. در واقع، این تغییرات انرژی پتانسیل است که در خور اهمیت است نه مقدار آن قبل یا بعد تغییر. تغییرات انرژی پتانسیل ممکن است به پیدایش انرژی جنبشی، انرژی الکتریکی، یا انرژی گرمایی منجر شود. فناوری نوین بر همین پایه استوار است و دستیابی به چنین تغییری به پایداری انرژی ذخیره شده بستگی دارد. یکی از صورت‌های انرژی است که جسم بخاطر حرکت دارا می‌باشد. انرژی جنبشی یک جسم با جرم جسم و مجذور سرعت رابطه مستقیم دارد. انرژی جنبشی برابر است با حاصل ضرب نصف جرم در مجذور سرعت آن جسم. در سیستم SI واحد محاسبه کار و انرژی، ژول است. کل انرژی پتانسیل سیستم از میانگین زمان و از جمع در کل جفت‌های مراکز قدرت بدست می‌آید. این کمیت در طول شبیه سازی در هر مرحله محاسبه می‌شود. میانگین انرژی پتانسیل و انرژی جنبشی در فواصل شبیه سازی تقریباً ثابت است، که نشان دهنده پایداری سیستم است. این

ثبات در تمام دما مشاهده می‌شود. کل انرژی داخلی در طی شبیه سازی بین دو شکل انرژی پتانسیل و انرژی جنبشی به طور پیوسته در حال افزایش است، در حالی که مجموع آن‌ها همیشه ثابت می‌ماند.



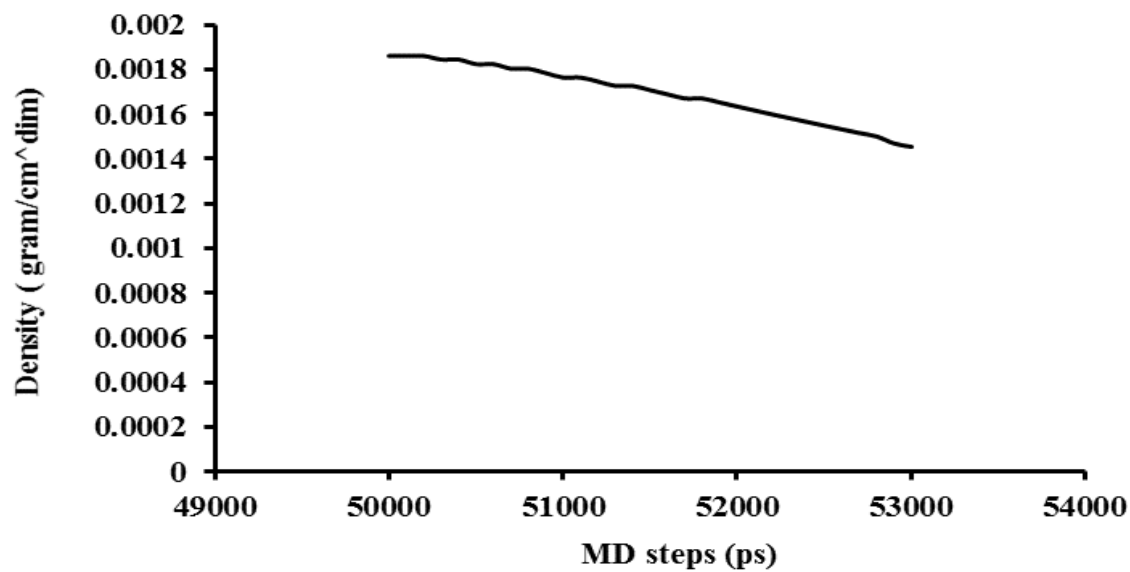
نمودار ۴-۴: مقایسه انرژی کل، جنبشی و انرژی پتانسیل.

برای محاسبه دقیق ضریب سایش نانو آلیاژ آنتروپی بالا توسط شبیه سازی دینامیک مولکولی نیاز به آنتالپی است که در شبیه سازی دینامیک مولکولی، توسط مازول‌های لنارد-جونز انجام شده است.

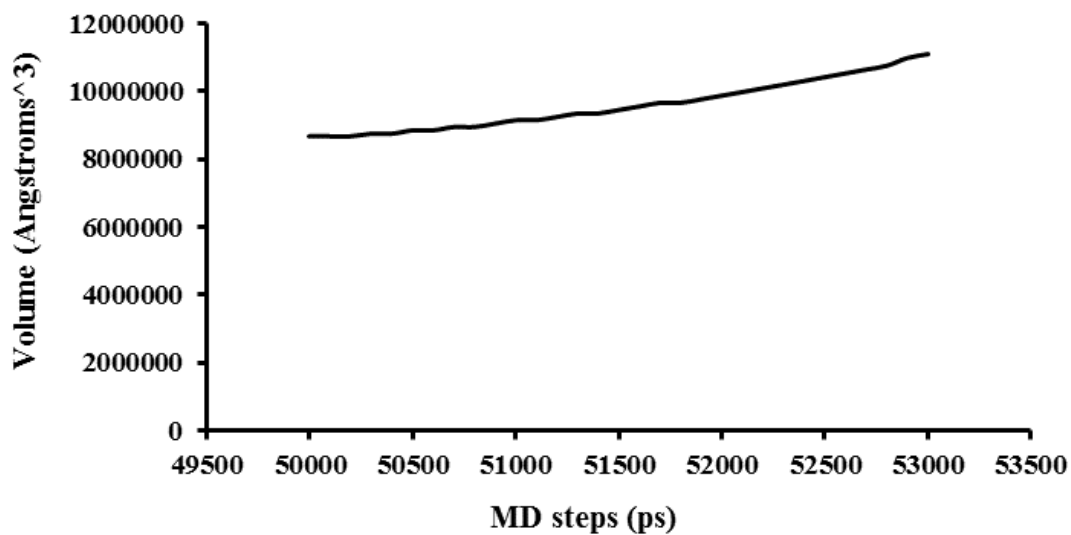
همانطور که در نمودار (۴-۵) مشاهده می‌شود، هنگامی که چگالی نمونه به دلیل فرآیند سایش در واحد زمان در شبیه سازی دینامیک مولکولی کاهش می‌یابد، مقدار حجم مواد سایش یافته نانو آلیاژ آنتروپی بالا مطابق نمودار (۴-۶) افزایش می‌یابد (به دلیل کاهش جرم نمونه نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی در اثر فرآیند سایش). این بدان معنی است که با محاسبه حجم و وزن نمونه سایش یافته نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی، میزان نرخ سایش نمونه تخمین زده می‌شود. با افزایش میزان سایش نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی، نرخ آنتالپی مطابق نمودار (۴-۷)، آنتروپی مطابق نمودار (۴-۸) و تغییر انرژی جنبشی مطابق نمودار (۴-۹) افزایش می‌یابد. دلیل



خطی بودن تغییرات، همگن بودن نانو ساختار تشکیل دهنده اتم‌ها می‌باشد که نشان‌دهنده پویایی یک سیستم است.

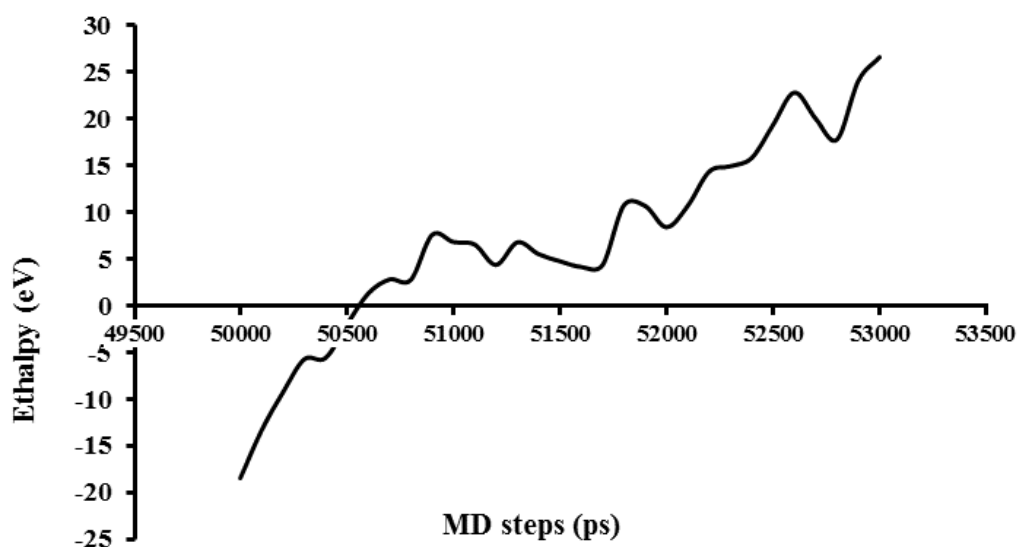


نمودار ۴-۵: تغییرات چگالی سایش یافته (جرم واحد حجم) با گذشت زمان برای ساختار نانو آلیاژ آنتروپی بالا

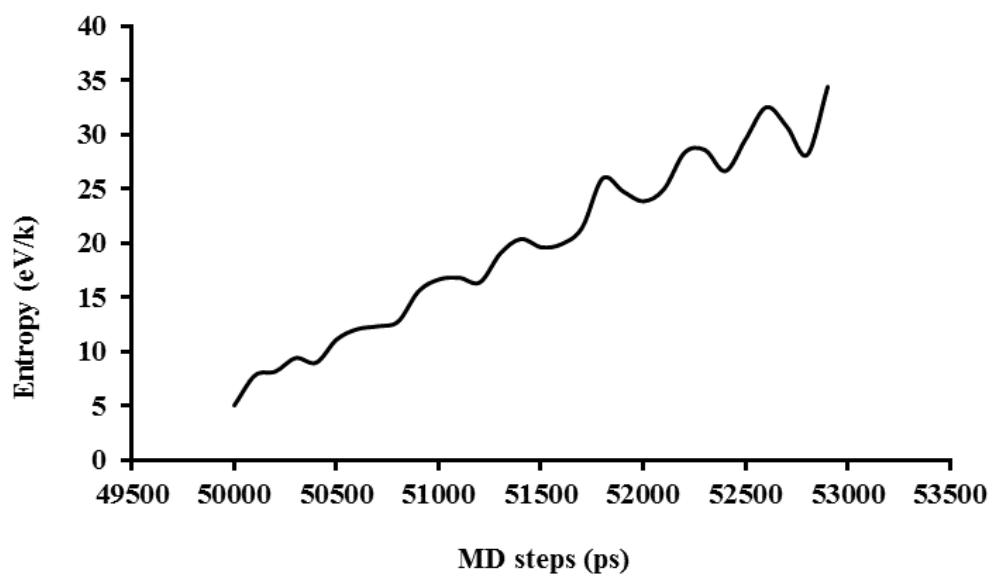


نمودار ۴-۶: میزان افزایش تغییرات کاهش حجم سایش یافته با گذشت زمان برای نانو آلیاژ آنتروپی بالا در

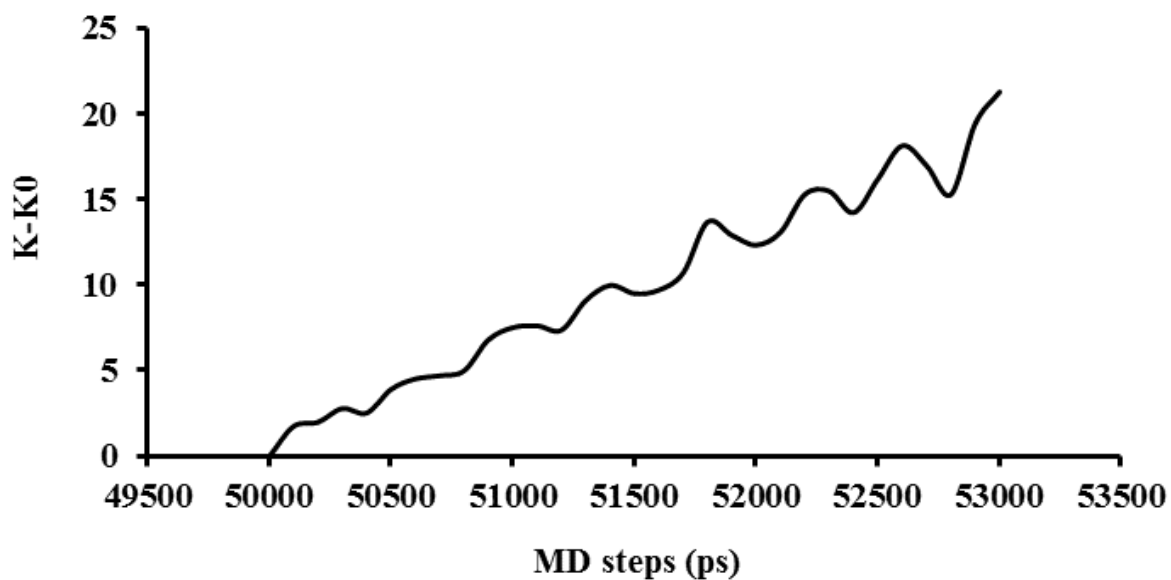
شبیه سازی دینامیک مولکولی



نمودار ۴-۷: نرخ تغییرات آنتالپی برای ساختار نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی در شبیه سازی دینامیک مولکولی

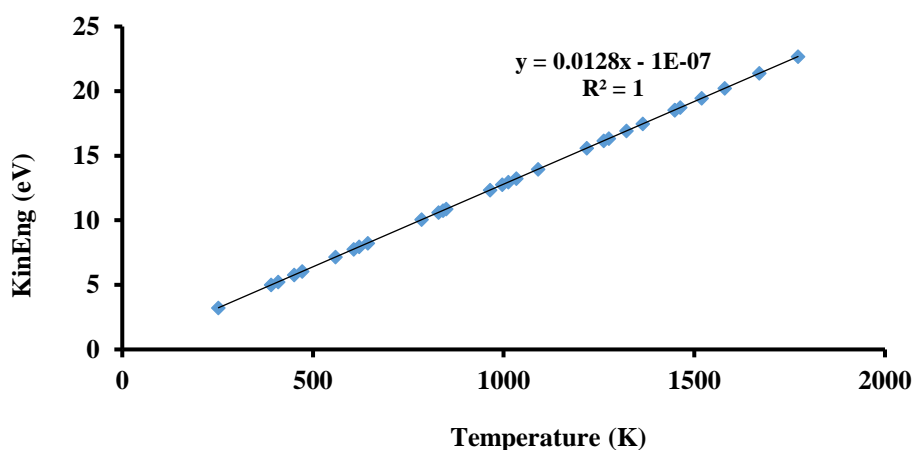


نمودار ۴-۸: نرخ تغییرات آنترופی برای ساختار نانو آلیاژ آنترופی بالا ابداعی در شبیه سازی دینامیک مولکولی



نمودار ۴-۹: نرخ تغییرات سینتیک سایش برای ساختار نانو آلیاژ آنترופی بالا ابداعی در شبیه سازی دینامیک مولکولی

لازم به ذکر است که افزایش دما در طی فرآیند سایش نانو آلیاژ آنتروپی بالا مطابق نمودار (۴-۱۰)، باعث افزایش انرژی جنبشی و در نتیجه باعث تغییر آن شد. رگرسیون خطی منحنی از تقسیم تغییرات جنبشی بر دما در فرآیند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی محاسبه شد. از این رو، مشخص شد که ضریب همبستگی در طی فرآیند سایش نانو آلیاژ آنتروپی بالا، یک ( $R^2 = 1$ ) است. بدین معنی که نرخ سایش خطی می‌باشد و اتم‌ها با نسبت برابر از آلیاژ کنده می‌شوند، که این نشان‌دهنده همگن و یکدست بودن ساختار آلیاژ می‌باشد.

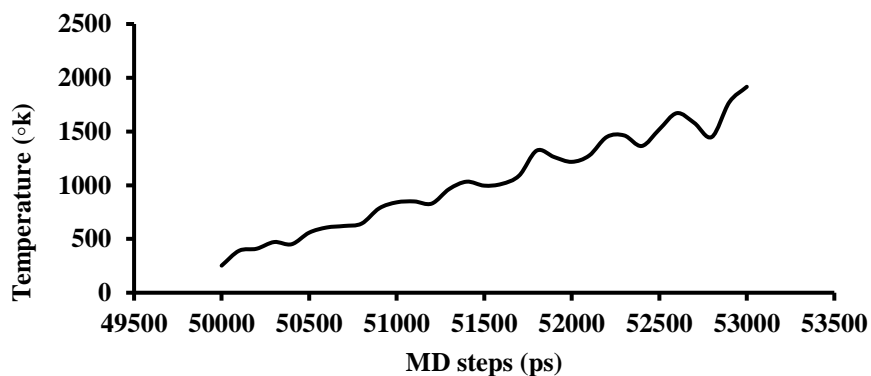


نمودار ۴-۱۰: نرخ تغییرات سینتیک سایش نسبت به دما، برای ساختار نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی

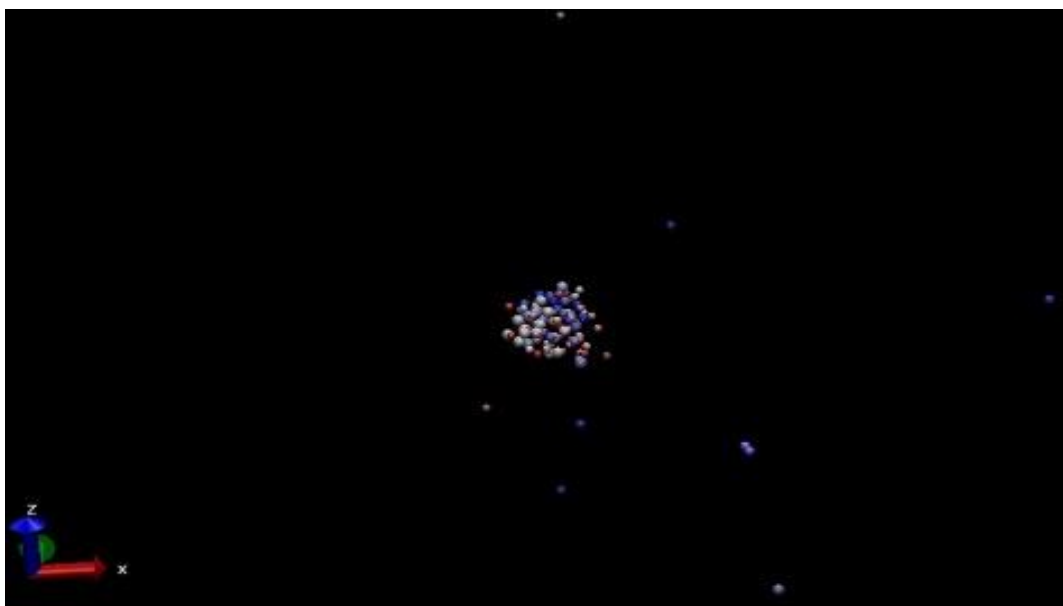
در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

همانطور که مشاهده می‌شود، با افزایش مرحله زمانی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، دما مطابق نمودار (۴-۱۱) افزایش می‌یابد. با افزایش دما نوسانات سایشی بیشتر، مقدار سختی کاهش و سیستم تمایل به بی‌نظمی دارد. عملکرد توزیع تابع VMD مطابق شکل (۴-۲) (پیکربندی و تعیین ساختار حاصل از شبیه‌سازی)، با احتمال یافتن اتم در ساختار نانو تعریف می‌شود. بدیهی است که ساختار متراکم، چگال، جرم درهم تنیده و تعداد اتم‌های نانو آلیاژ آنتروپی بالا در طی فرآیند سایش تغییر می‌کند که در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به خوبی نشان داده می‌شود. متوسط انرژی جنبشی یک ذره به طور مستقیم متناسب با دما است. بدیهی است که با افزایش دما سرعت حرکت مولکول‌های ماده افزایش می‌یابد.

در طول شبیه‌سازی MD، به دلیل افزایش زمان و دما، انرژی داخلی در اتم‌ها بالا می‌رود و آن‌ها به حالت منبسط و هیجان زده می‌رسند و تمایل به جداسازی از ساختار اتمی آلیاژ دارند.



نمودار ۴-۱۱: نرخ تغییرات دما بر واحد زمان برای ساختار نانو آلیاژ آنتروپی بالا در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی.



شکل ۴-۲: عکسی از نمای جانبی و جلوی ساختار نانو آلیاژ آنتروپی بالا با استفاده از

نرم افزار VMD و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی LAMMPS

کاهش جرم، محصول و دست آورد سایش در فرآیند سایش است. با کاهش جرم، درجه حرارت سیستم

در شرایط مرزی بالا می‌رود که نتیجه آن، تغییرات در رفتار متالورژیکی و مکانیکی سطوح سایشی آلیاژها با

توزیع درجه حرارت بالا، افزایش مولکولی و افزایش دما، می‌باشد. از دست دادن جرم و ترمودینامیک در ارزیابی آنروپی تولید شده در بخصوص حین سایش، متاثر می‌شود [۸۶، ۸۷]. گرمای یک ماده، هنگام فرآیندهای سایش، آنتالپی و آنروپی باعث تخریب ساختار می‌شود. تبادل اشکال مختلف انرژی نتیجه توسعه ترمودینامیک است و فراوانی را که قابل برگشت نیستند، شامل می‌شود. رفتار سطح اتمی توسط منحنی پیوسته آنروپی و از طریق ارتباط بین تجزیه و تحلیل رفتار سطح اتمی و نانو ذرات سایشی در فرآیندهای سایش با تولید آنروپی، تخمین زده می‌شود [۸۸، ۸۹].

با استفاده از انرژی آزاد گیبس به عنوان تابعی از دما، در مراحل زمانی مختلف، گرمای ویژه محاسبه شد و نتایج نشان که چگالی با افزایش فواصل زمانی کاهش پیدا کرده و از بین می‌رود. با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پدیده‌های ترمودینامیکی نانو آلیاژ آنروپی بالا توسط نرم افزار LAMMPS، در طی فرآیندهای سایش، میزان تراکم چگالی نیز حاصل می‌شود. این میزان نشان‌دهنده آن است که مقدار کاهش وزنی  $10^{-2} \times 6/7$  گرم از نانو آلیاژ آنروپی بالا که معادل سختی ۶۷ راکول می‌باشد، در  $0/49$  میکروثانیه صورت گرفته است (محاسبه شده توسط نرم افزار) و کد نرم افزار در فایل پیوست آورده شده است.

#### ۴-۸- بررسی اقتصادی نانوآلیاژ آنروپی بالا به عنوان پوشش سخت

مقدار نیاز صنایع معدنی به این گلوله‌ها و همچنین آستر آن‌ها که در حال سایش هستند کاملاً مشخص است. با ایجاد یک نانو پوشش سخت و ارزان و در دسترس بر روی آستر و گلوله‌های آسیا، می‌توان به میزان قابل توجهی سایش و به عبارتی دیگر، میزان مصرف آن‌ها را کاهش داد که هم از لحاظ اقتصادی کاملاً مقرون به صرفه است و هم با ایجاد این نوآوری فنی می‌توان در مصرف انرژی به صورت مستقیم صرفه جویی کرد. هرچه تعداد عناصر آلیاژی در ترکیبات بین‌فلزی و ساختارهای پیچیده بیشتر شود، به علت حلالیت محدود حالت جامد در آلیاژ تشکیل شده، که تهیه آن بسیار دشوار می‌شود و باعث افزایش هزینه تمام شده خواهد شد. در نسل آلیاژهای آنروپی بالا، اثر استحکام دهی بسیار بالای محلول جامد، موجب کاربردهای صنعتی این

آلیاژها برای ایجاد مقاومت به سایش می‌شود. در جدول (۴-۶) هزینه تمام شده نانو پوشش آنتروپی بالا در ازای واحد متر و تن مصرفی ارائه شده است.

جدول ۴-۶: بررسی هزینه تمام شده نانو آلیاژ آنتروپی بالا مورد استفاده در تحقیق جهت مصارف صنعتی.

شکل و نوع انواع نمونه های پوشش داده شده	واحد	تخمین قیمت تجاری ( پوند انگلستان) <sup>۱</sup>
صفحه پوشش داده شده توسط نانو آلیاژ آنتروپی بالا ( مساحت سطح $1 \text{ m}^2$ و ضخامت ۴ mm )	متر (m)	~ 4.5
صفحه پوشش داده شده توسط نانو آلیاژ آنتروپی بالا ( مساحت سطح $10 \text{ m}^2$ و ضخامت ۴ mm )	متر (m)	~38.2
صفحه پوشش داده شده توسط نانو آلیاژ آنتروپی بالا ( مساحت سطح $100 \text{ m}^2$ و ضخامت ۴ mm )	متر (m)	~347.8
یک تن گلوله آسیا به قطر ۲۵ cm پوشش داده شده توسط نانو آلیاژ آنتروپی بالا (ضخامت ۴ mm)	تن (T)	~13.9
ده تن گلوله آسیا به قطر ۲۵ cm پوشش داده شده توسط نانو آلیاژ آنتروپی بالا (ضخامت ۴ mm)	تن (T)	~117.9
پنجاه تن گلوله آسیا به قطر ۲۵ cm پوشش داده شده توسط نانو آلیاژ آنتروپی بالا (ضخامت ۴ mm)	تن (T)	~536.2

بطور کلی از دیگر مزایای نهفته این نانو پوشش و دست آورد می توان به موارد ذیل اشاره کرد:

❖ استفاده آسان و سهولت کاربرد در محل کار

❖ اقتصادی بودن برای کاربر به علل زیر:

- عمر کارکرد بیشتر نانو پوشش آلیاژ آنتروپی بالا
- کاهش هزینه نگهداری و تعویض
- بازیابی قطعات فرسوده با استفاده از پوشش دهی مجدد توسط نانو پوشش آلیاژ آنتروپی بالا
- استفاده از مواد پایه ارزان قیمت
- مصرف کمتر انرژی در هنگام کار بدلیل سایش کمتر و عمر کاری بیشتر قطعات
- افزایش بازدهی قطعه در بیشتر موارد

<sup>1</sup> Great British Pound Sterling

➤ استفاده اقتصادی از عناصر آلیاژی گران قیمت (به دلیل آن که سختی بالایی دارد، مقدار وزنی کم بر روی هر قطعه مورد استفاده قرار می گیرد)

#### ۴-۹- جمع بندی

با توسعه فناوری نانو، اعمال نانو پوشش های ضد سایش بر عمر کاری قطعات به صورت قابل توجهی تاثیر افزایشی داشته و از این طریق موجب کاهش هزینه مربوط به تعمیر یا تعویض قطعات آسیب دیده می شود و دیگر اینکه به دلیل استفاده از یک روش ارزان در تولید این قطعات، صرفه اقتصادی در پی خواهد بود. نتایج آزمون سختی سنجی نشان دهنده سختی ۶۷ راکول برای نمونه نانو آلیاژهای آنتروپی بالا ابداعی می باشد. در آزمایش خوردگی تافل و سیکل، نانو آلیاژ آنتروپی بالا، ابعاد ذرات کمتر از ۵۰ نانومتر، تحت تاثیر محلول لیچینگ سنگ مس اکسیدی با اسید سولفوریک، میزان نرخ خوردگی در آلیاژ معمولی در مقایسه با نانو آلیاژ آنتروپی بالا پوشش داده شده، از ۰/۲۱۱ میلی متر در سال به ۰/۰۰۰۶ میلی متر در سال کاهش یافت که نتایج محاسبات نشان دهنده نرخ خوردگی ۸/۳۳ برای نمونه اولیه و ۰/۰۲۲۵ برای نانو آلیاژ آنتروپی بالا مفروض است که این نرخ نشان دهنده کاهش بسیار عالی نرخ خوردگی بر اساس واحد mpy می باشد. اندیس سایش باند در مقایسه با استفاده از یک آلیاژ پایه استاندارد دستگاه و قطعه پوشش داده شده توسط نانو آلیاژ آنتروپی بالا، از ۰/۰۰۰۱۶۴۷ کیلوگرم به ۰/۰۰۰۰۹۰۸ کیلوگرم، ۰/۰۰۰۱۴۷۲ کیلوگرم به ۰/۰۰۰۰۸۰۳ کیلوگرم و از ۰/۰۰۰۱۴۷۲ کیلوگرم به ۰/۰۰۰۰۸۳۷ کیلوگرم، برای نمونه های سنگ آهن، مس اکسیدی و مس پورفیری کاهش می یابد. نتایج انحراف استاندارد، تکرارپذیری و تکثیر پذیری در آزمون تست سایش باند، برای تیغه فولادی پوشش داده شده توسط نانو آلیاژ آنتروپی بالا ابداعی برای نمونه های سنگ آهن به ترتیب ۰/۰۰۰۱۶، ۰/۰۰۰۰۴۷ و ۰/۰۰۰۰۴۰ و برای نمونه های سنگ مس اکسیدی به ترتیب ۰/۰۰۰۰۳، ۰/۰۰۰۰۰۴۷ و ۰/۰۰۰۰۴۲ محاسبه شد. با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی سایش نانو آلیاژ آنتروپی بالا توسط نرم افزار LAMMPS، مقدار کاهش وزنی  $10^{-2} \times 6/7$  گرم از نانو آلیاژ آنتروپی بالا که در ۰/۴۹ میکروثانیه صورت



گرفته است، محاسبه شد که معادل سختی ۶۷ راکول است. نتایج بدست آمده از این تحقیق با توجه به بررسی  
نرخ خوردگی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در ساخت تجهیزات فرآوری بکار گرفته شوند.



## فصل پنجم

### نتیجه‌گیری و پیشنهادها

## ۵-۱- جمع بندی

این تحقیق با هدف ثبت و توسعه روشی نوین جهت ایجاد یک ساختار نانویی سخت پوشش انجام شد. در این راستا هیچ گونه کار مشابهی پیرامون موضوع این تحقیق نه در ایران و نه در سایر کشورها حتی کشورهای صنعتی بر روی تجهیزات فرآوری مواد معدنی با استفاده از "نانو آلیاژهای آنتروپی بالا" بعنوان پوشش دهی سخت<sup>۱</sup>، صورت پذیرفته است. البته شایان ذکر است بر روی ماشین آلات استخراج معادن از قبیل تیغه های لودر و کف باکت دامپ تراکها و سایر یک سری فعالیت ها صورت گرفته است ولی هیچ کدام با استفاده از نانو آلیاژهای آنتروپی بالا نبوده است.

در این تحقیق، ابتدا نمونه نانو آلیاژ آنتروپی بالا تولید گردید. نتایج تجزیه و تحلیل آنالیز میکروسکوپ اتمی FE-SEM نشان داد که اندازه ذرات کمتر از ۲۰ نانومتر است. در بررسی نتایج آزمون سختی سنجی صورت پذیرفته شده بر اساس استاندارد ASTM G-65 سختی ۶۷ راکول برای نمونه نانو آلیاژهای آنتروپی بالا تعیین شد. همچنین این سختی بسیار بالا تحت عامل مورفولوژی همگن ترکیبات نانویی ساختار آلیاژ آنتروپی بالا که در عکسهای میکروسکوپی نشان داده شد، بدست آمده است. سختی مفروض و ساختار نانویی آلیاژ آنتروپی بالا، نگاهی جدید و مدرن به ایجاد مقاومت بالا در برابر سایش برای گلوله، میله و آستر آسیاها در کارخانه های فرآوری مواد معدنی دارد. با توجه به اینکه بیشترین هزینه ها در بخش سایش و خردایش است، گلوله و میله آسیاها جهت پوشش دهی انتخاب شدند. پس با بررسی بهترین و اقتصادی ترین روش پوشش دهی بر روی تجهیزات انتخابی هدف، جوشکاری (Oxyfuel powder spray (OFP و روش دستی (غیرمکانیزه) آن، به عنوان در دسترس ترین روش ها انتخاب شدند. پس از نمونه برداری مواد معدنی مورد نیاز جهت آزمون سایش آسیا باند، تهیه نمونه معرف و انجام مطالعات و آنالیزهای اولیه بر روی نمونه معرف صورت گرفت. لازم به ذکر است که با توجه به اینکه انجام آزمون نانو پوشش دهی نیاز به دقت بسیار بالا دارد و برای مقایسه بین ابعاد

نانویی نانو آلیاژ آنتروپی بالا قبل و بعد از جوشکاری، آنالیز میکروسکوپ اتمی FE-SEM در هر مرحله انجام شد.

در ادامه بررسی تاثیر مواد معدنی طبیعی بر روی نانو پوشش آلیاژ آنتروپی بالا، آزمون سایش باند صورت گرفت. نتایج بسیار موفقیت آمیز بود. بررسی نتایج تحقیق نشان داد که نانو آلیاژ آنتروپی بالا از مقاومت به سایش بسیار بالایی در مقابل مواد معدنی طبیعی برخوردار بود. در ادامه آزمون‌هایی برای خوردگی نانو آلیاژ ابداعی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جهت تکمیل کار انجام شدند.

## ۵-۲- نتیجه گیری

نتایج حاصل از تحقیق را می‌توان به شرح زیر بیان نمود:

- تولید یک پوشش مقاوم به سایش نانویی با سختی ۶۷ راکول
- افزایش مقاومت به سایش تجهیزات هدف با استفاده از نانو فناوری
- اعمال پوشش‌های ضد سایش نانویی بر روی میله و گلوله آسیاهای خردکننده مواد معدنی
- انتخاب روش مناسب سخت پوشی
- صرفه‌جویی در هزینه‌های کلی خردایش با بکارگیری نانو پوشش آنتروپی بالا ابداعی بر روی بارخردکننده و آستر آسیاها و سنگ‌شکن‌ها
- کاهش میزان نرخ خوردگی در آلیاژ معمولی در مقایسه با نانوآلیاژ آنتروپی بالا پوشش داده شده، از ۰/۲۱۱ میلی متر در سال به ۰/۰۰۰۶ میلی متر در سال

### ۵-۳- پیشنهادها

پیشنهادهایی که برای تحقیقات آتی مناسب به نظر می‌رسند به شرح ذیل می‌باشند:

- تولید نانو آلیاژهای متنوع متناسب با کارکرد هر بخش، به عنوان مثال برای بخش تیکنر، بخش فلوتاسیون، بخش هیدروم탈ورژی و سایر بخش سایر بخش‌های فرآوری مواد معدنی
- مقایسه تاثیر استفاده از نانوآلیاژهای آنترپپی بالا بر روی سایر پارامترهای تاثیرگذار بر فرآیند خردایش مانند کاهش زمان تعمیر و نگهداری قطعات، صرفه‌جویی انرژی، تاب‌آوری و قابلیت اطمینان تجهیزات مورد استفاده و زمان در دسترس تجهیزات.

### ۵-۴- نوآوری

نوآوری این تحقیق را می‌توان به شرح زیر ارائه کرد.

- تولید یک نانو پوشش سخت بر روی بار خردکننده ( گلوله و میله در آسیاها)
- بررسی تاثیر نوع ماده معدنی بر میزان سایش قطعات نانو پوشش‌دهی شده سخت
- انجام یک روش پوشش‌دهی ارزان که تاکنون در تجهیزات فرآوری مواد معدنی استفاده نشده
- انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سایش نانو آلیاژ آنترپپی بالا

## منابع

- 1- M. Rodríguez Ripoll, N. Ojala, C. Katsich, V. Totolin, C. Tomastik, K. Hradil. (2016) “The role of niobium in improving toughness and corrosion resistance of high speed steel laser hardfacings” **J. of. Mater.**, **99** pp 509–520. [doi: 10.1016/j.matdes.2016.03.081](https://doi.org/10.1016/j.matdes.2016.03.081).
- 2- Torrance, A.A. (2002) “The effect of grit size and asperity blunting on abrasive wear” **J. of. Wear.**, **253(7-8)**, pp. 813-819. [doi: 10.1016/S0043-1648\(02\)00103-5](https://doi.org/10.1016/S0043-1648(02)00103-5)
- 3- Welding Handbook. (1970) “**Surfacing**”, 6<sup>th</sup> ed., Vol.3A, American Welding Society.
- 4- Bond F. C. (1963) “**Metal Wear in Crushing and Grinding**”, Allis-Chalmers Publication 07 P 1701.
- 5- **Huang KH, Yeh JW. (1996) M.S. thesis, “A study on multicomponent alloy systems containing equal-mole elements. Hsinchu: National Tsing Hua University, [doi: 10.1080/21663831.2014.912690](https://doi.org/10.1080/21663831.2014.912690)**
- 6- Yeh JW, Chen SK, Lin SJ, Gan JY, Chin TS, Shun TT, TsauCH, ChangSY. (2004) “Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes” **J. of. Adv Eng Mater.**, **6:299–303**. [doi: 10.1002/adem.200300567](https://doi.org/10.1002/adem.200300567)
- 7- Yeh JW. (2006) “Recent progress in high-entropy alloys” **J. of. Ann Chim Sci Mat.**, **31:633–648**. [doi: 10.3166/acsm.31.633-648](https://doi.org/10.3166/acsm.31.633-648)
- 8- Shigenobu O, Yoshitaka U, Masanori K. (2009) “First-principles approaches to intrinsic strength and deformation of materials: perfect crystals, nanostructures, surfaces and interfaces” **J. of. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering.**, **17:013001**. [doi: 10.1088/0965-0393/17/1/013001](https://doi.org/10.1088/0965-0393/17/1/013001)
- 9- Tsai CW, Chen YL, Tsai MH, Yeh JW, Shun TT, Chen SK. (2009) “Deformation and annealing behaviors of high-entropy alloy Al<sub>0.5</sub>CoCrCuFeNi” **J. of. Alloys Compd.**, **486:427–435**. [doi: 10.1016/j.jallcom.2009.06.182](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2009.06.182)
- 10- Tong CJ, Chen MR, Chen SK, Yeh JW, Shun TT, Lin SJ, Chang SY. (2005) “Mechanical performance of the Al<sub>x</sub>CoCrCuFeNi high-entropy alloy system with multiprincipal elements” **J. of. Metall Mater Trans A.**, **36:1263–1271**. [doi: 10.1007/s11661-005-0218-9](https://doi.org/10.1007/s11661-005-0218-9)
- 11- Zhang KB, Fu ZY. (2012) “Effects of annealing treatment on phase composition and microstructure of CoCrFeNiTiAl<sub>x</sub> high-entropy alloys” **J. of. Intermetallics.**, **22:24–32**. [doi:10.1016/j.intermet.2011.10.010](https://doi.org/10.1016/j.intermet.2011.10.010)



- 12- Chen MR, Lin SJ, Yeh JW, Chen SK, Huang YS, Tu CP. (2006) "Microstructure and properties of Al<sub>0.5</sub>CoCrCuFeNiTi<sub>x</sub> (x=0–2.0) high-entropy alloys" **J. of Mater Trans., 47: 1395–1401.** doi: [10.2320/matertrans.47.1395](https://doi.org/10.2320/matertrans.47.1395)
- 13- Zhu JM, Zhang HF, Fu HM, Wang AM, Li H, Hu ZQ. (2010) "Microstructures and compressive properties of multicomponent AlCoCrCuFeNiMox under bar alloys" **J. of Alloys Compd., 497:52–56.** doi: [10.1016/j.jallcom.2010.03.074](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2010.03.074)
- 14- Senkov ON, Wilks GB, Miracle DB, Chuang CP, Liaw PK. (2010) "Refractory high-entropy alloys" **J. of Intermetallics., 18:1758–1765.** doi: [10.1016/j.intermet.2010.05.014](https://doi.org/10.1016/j.intermet.2010.05.014)
- 15- Senkov ON, Senkova SV, Miracle DB, Woodward C. (2013) "Mechanical properties of low-density, refractory multi-principal element alloys of the Cr–Nb–Ti–V–Zr system" **Mater Sci Eng A., 565:51–62.** doi: [10.1016/j.msea.2012.12.018](https://doi.org/10.1016/j.msea.2012.12.018)
- 16- C.I. Walker, P. Robbie. (2013) "Comparison of some laboratory wear tests and field wear in slurry pumps" **J. of Wear., 302 1026–1034.** doi: [10.1016/j.wear.2012.11.053](https://doi.org/10.1016/j.wear.2012.11.053).
- 17- Yuefeng Chen, Xudong Chen, Xin Dai, Ye You and Bin Yang. (2017) "Effect of spinodal decomposition on the pitting corrosion resistance of Z3CN20.09M duplex stainless steel" **J. of Materials and Corrosion., 1–9.** doi: [10.1002/maco.201709738](https://doi.org/10.1002/maco.201709738). doi: [10.1002/maco.201709738](https://doi.org/10.1002/maco.201709738)
- ۱۸- کوکبی ا.، (۱۳۸۲) "تکنولوژی جوشکاری" چاپ پنجم، انتشارات آزاد.
- 19- J.R. Davis, Davis and Associates. (1997). Metals Handbook, 10<sup>th</sup> ed., Vol.6, pp789-829, "**Hardfacing, Weld Cladding, and Dissimilar Metal Joining**", American Society for Metals, doi: [10.31399/asm.hb.v06.a0001442](https://doi.org/10.31399/asm.hb.v06.a0001442)
- 20- E.N. Gregory and M. Bartle. (1980), pp11-21, "**Materials for Hardfacing**" The Welding Institute, Weld Surfacing and Harfacing, Cambridge, Abington.
- 21- D.G. Holloway. (1997), pp. 6-9, "**Classification of Hardfacing Consumables**" Australian Welding.
- 22- E.N. Gregory. (1980), pp. 22-27 "**Selection of Materials for Hardfacing**" The Welding Institute, Weld Surfacing and Hardfacing Cambridge, Abington.
- 23- Dennis Klanjscek, Bob Bottmley. (1997), pp. 11-14 "**The Relationship of Microstructure to the Performance of Various Hardfacing Alloy Types**", Australian Welding.

- 24- M. Amiri, M.M. Khonsari. (2010) "On the thermodynamics of friction and wear—A review" *Entropy*, **Vol. 12, No.5**, pp. 1021-1049. [doi: 10.3390/e12051021](https://doi.org/10.3390/e12051021)
- 25- Welding Handbook. (1970) "**Thermal Spraying**", 6<sup>th</sup> ed., Vol. 3A, American Welding Society.
- 26- O.P. Khanna. (2002) "**A Text Book of Welding Technology**", 1<sup>th</sup> ed, [ISBN13 9788189928360](https://www.isbn-international.org/product/9788189928360).
- 27- C. Robert, Jr. Tucker. (1997) "**Thermal Spray Coating**", 10<sup>th</sup> ed., Metals Handbook, American Society for Metals. Vol.5 pp 497-509.
- 28- Davis, J.R. and Knovel (Firm). (2001) "Surface engineering for corrosion and wear resistance" **ASM International: Institute of Materials**. viii Materials Park, OH., 279 p. [ISBN of 978-1-61503-072-9](https://www.isbn-international.org/product/9781615030729)
- 29- V. Ratia. (2015) "Behavior of Martensitic Wear Resistant Steels in Abrasion and Impact Wear Testing Conditions" Tampere University of Technology.
- 30- B. Bialobrzaska, P. Kostencki. (2015) "Abrasive wear characteristics of selected low-alloy boron steels as measured in both field experiments and laboratory tests" **Wear**. **328–329** 149–159. [doi: 10.1016/j.wear.2015.02.003](https://doi.org/10.1016/j.wear.2015.02.003).
- 31- M. Lindroos, K. Valtonen, A. Kemppainen, A. Laukkanen, K. Holmberg, V.-T. Kuokkala, (2015) "Wear behavior and work hardening of high strength steels in high stress abrasion" **J. of. Wear.**, **322–323**, 32–40. [doi: 10.1016/j.wear.2014.10.018](https://doi.org/10.1016/j.wear.2014.10.018).
- 32- Pradeep Sambyal, Gazala Ruhi, Monu Mishra, Govind Gupta and Sundeep K. Dhawan. (2017) "Conducting polymer/bio-material composite coatings for corrosion protection" **J. of. Materials and Corrosion**. pp. 1–16. [DOI: 10.1002/maco.201709554](https://doi.org/10.1002/maco.201709554).
- 33- P. Waara. (2016) "Tribochemical Wear of Rail Steels Lubricated with Synthetic Ester-Based Model Lubricants" **J. of. SSAB.**, **17**, pp. 561–568(2004). [doi: 10.1023/B:TRIL.0000044505.42373.0e](https://doi.org/10.1023/B:TRIL.0000044505.42373.0e)
- 34- Misra, A. and I. Finnie. (1980) "A classification of three-body abrasive wear and design of a new tester. *Wear*". **60(1)**: p. 111-121. [doi: 10.1016/0043-1648\(80\)90252-5](https://doi.org/10.1016/0043-1648(80)90252-5)
- 35- Chacon-Nava, J.G., et al. (2009) "Some remarks on particle size effects on the abrasion of a range of Fe based alloys" **J. of. Tribology International**, **43(8)**: pp. 1307-1317. [doi: 10.1016/j.triboint.2009.12.012](https://doi.org/10.1016/j.triboint.2009.12.012)

- 36- Wirojanupatump, S. and P.H. Shipway. (2000) “Abrasion of mild steel in wet and dry conditions with the rubber and steel wheel abrasion apparatus” **J. of. Wear.**, **239(1)**: pp. **91-101**. doi: [10.1016/S0043-1648\(00\)00310-0](https://doi.org/10.1016/S0043-1648(00)00310-0)
- 37- Dube, N.B. and I.M. Hutchings. (1999) “Influence of particle fracture in the high-stress and low-stress abrasive wear of steel” **J. of. Wear.**, **233-235**: pp. **246-256**. doi: [10.1016/S0043-1648\(99\)00297-5](https://doi.org/10.1016/S0043-1648(99)00297-5)
- 38- Ala-Kleme, S., Livimatainen J., Hellman J., Hannula S.P., (2007) “Abrasive wear properties of tool steel matrix composites in rubber wheel abrasion test and laboratory cone crusher experiments” **J. of. Wear.**, **263(1-6)**: pp. **180-187**. doi: [10.1016/j.wear.2007.01.111](https://doi.org/10.1016/j.wear.2007.01.111)
- 39- Nahvi, S.M., P.H. Shipway, and D.G. McCartney. (2009) “Particle motion and modes of wear in the dry sand-rubber wheel abrasion test” **J. of. Wear.**, **267(11)**: pp. **2083-2091**. doi: [10.1016/j.wear.2009.08.013](https://doi.org/10.1016/j.wear.2009.08.013)
- 40- Stevenson, A.N.J. and I.M. Hutchings. (1996) “Development of the dry sand/rubber wheel abrasion test” **J. of. Wear.**, **195(1-2)**: pp. **232-240**. doi: [10.1016/0043-1648\(96\)06965-7](https://doi.org/10.1016/0043-1648(96)06965-7)
- 41- ASTM International. (2006), Book of standards pp. **245-256**. “G65-04 Standard Test Method for Measuring Abrasion Resistance Using the Dry Sand/Rubber Wheel Apparatus”.
- 42- Stachowiak, G.W., A.W. Batchelor, and G. Stachowiak. (2004), “**Experimental methods in tribology**”, 1st ed. Tribology series., Elsevier. xviii, Amsterdam, The Netherlands; San Diego, CA. pp. **354**
- 43- Radziszewski, P., Varadi, R., Chenje, T., Santella, L. & Sciannamblo, A. (2005) “Tumbling mill steel media abrasion wear test development” **J. of. Minerals Engineering.**, **18(3)**: pp. **333-341**. doi: [10.1016/j.mineng.2004.06.006](https://doi.org/10.1016/j.mineng.2004.06.006)
- 44- Gates, J.D., et al. (2007) “The meaning of high stress abrasion and its application in white cast irons” **J. of. Wear.**, **263(1-6 SPEC. ISS.)**: pp. **6-35**. doi: [10.1016/j.wear.2006.12.033](https://doi.org/10.1016/j.wear.2006.12.033)
- 45- Natarajan, K.A. (1996) “Laboratory studies on ball wear in the grinding of a chalcopyrite ore” **International J. of. Mineral Processing.**, **46(3-4)**: pp. **205-213**. doi: [10.1016/0301-7516\(95\)00093-3](https://doi.org/10.1016/0301-7516(95)00093-3)
- 46- Chenje, T.W., D.J. Simbi, and E. Navara. (2004) “Relationship between microstructure, hardness, impact toughness and wear performance of selected grinding media for mineral

- ore milling operations” **Materials and Design**, **25**(1): pp. **11-18**. [doi: 10.1016/S0261-3069\(03\)00168-7](https://doi.org/10.1016/S0261-3069(03)00168-7)
- 47- Chenje, T.W., D.J. Simbi, and E. Navara. (2003) “The role of corrosive wear during laboratory milling” *Minerals Engineering*, **16**(7): pp. **619-624**. [doi: 10.1016/S0892-6875\(03\)00132-8](https://doi.org/10.1016/S0892-6875(03)00132-8)
- 48- Radziszewski, P. (2009) “The steel wheel abrasion test (SWAT): A tool to study wear, friction and ore breakage in the mining industry” **J. of. Wear.**, (4-1) **267** pp. **92-98**. [doi: 10.1016/j.wear.2009.01.003](https://doi.org/10.1016/j.wear.2009.01.003)
- 49- Chenje, T.W. (2007) “Development and validation of a model for steel grinding media wear in tumbling mills” pp. **xxi, 216 leaves**.
- 50- B. Bialobrzaska, P. Kostencki. (2015) “Abrasive wear characteristics of selected low-alloy boron steels as measured in both field experiments and laboratory tests” **J. of. Wear.**, **328–329** **149–159**. [doi: 10.1016/j.wear.2015.02.003](https://doi.org/10.1016/j.wear.2015.02.003).
- 51- Norma técnica (2001), ASTM G 65, Standard Test Method for Measuring Abrasion Using the Dry Sand/Rubber Wheel Apparatus.
- 52- Fang, Z. Zak, Chandran, Ravi, and Koopman, Mark. (2016) “A New Method for Low Cost Production of Titanium Alloys for Reducing Energy Consumption of Mechanical Systems” United States. [doi: 10.1007/s11661-016-3409-7](https://doi.org/10.1007/s11661-016-3409-7)
- 53- Misra, A. and I. Finnie. (1980) “A classification of three-body abrasive wear and design of a new tester” **J. of. Wear.**, **60**(1): pp. **111-121**. [doi: 10.1016/0043-1648\(80\)90252-5](https://doi.org/10.1016/0043-1648(80)90252-5)
- 54- Jeswiet J., Szekeres A. (2016) “Energy Consumption in Mining Comminution”. **J. of. Procedia CIRP.**, **V. 48**, pp. **140-145**. [doi: 10.1016/j.procir.2016.03.250](https://doi.org/10.1016/j.procir.2016.03.250)
- 55- Bard, A.J. and Faulkner, L.R. (2001), “**Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications**” **J. of. Wiley.**, NY. pp. **376-84**. [ISBN: 978-0-471-04372-0](https://doi.org/10.1002/9780471043720)
- 56- Marulanda J.L., Zapata A. & Estrada C.A. (2009), “Construcción de una máquina de ensayo en desgaste abrasivo” según normativa ASTM G-65. *Scientia et Technica* Año XV, No **41**. [ISSN 0122-1701](https://doi.org/10.1016/S0122-1701).
- 57- Stephen L. Mayo, Barry D. Olafson, and William A. (1990) “Goddard III. DREIDING: A Generic Force Field for Molecular Simulations” **J. of. Phys. Chem.**, **88** **97 94**, pp. **8897-8909**. [doi: 10.1021/j100389a010](https://doi.org/10.1021/j100389a010)
- 58- D. Frenkel. (1996) “**Understanding Molecular Simulation**”, Academic Press, [doi: 10.1063/1.881812](https://doi.org/10.1063/1.881812)

- 59- Otto F, Dlouhý A, Somsen C, Bei H, Eggeler G, George EP. (2013) “The influences of temperature and microstructure on the tensile properties of a CoCrFeMnNi high-entropy alloy” **J. of. Acta Mater.**, **61**: pp. **5743–5755**. [doi: 10.1016/j.actamat.2013.06.018](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2013.06.018)
- 60- Okechukwu C., Dahunsi A. O., Oke P.K., Oladele I. O., Dauda M. (2018) “Development of hardfaced crusher jaws using ferro-alloy hardfacing inserts and low carbon steel substrate” **J. of. Tribologi.**, **18**, pp. **20-39**.
- 61- Chung-Jin Tong, et al. (2005) “Microstructure characterization of Al<sub>x</sub>CoCrCuFeNi high-entropy alloy system with multiprincipal elements” **J. of. Metall. Mater. Trans., A** pp. **36 881**.
- 62- Gorsse S., Nguyen M.H., Senkov O.N., Miracle D.B. (2018) “Database on the mechanical properties of high entropy alloys and complex concentrated alloys” **J. of. Data in Brief.**, pp. **2664–2678**. [doi: 10.1016/j.dib.2018.11.111](https://doi.org/10.1016/j.dib.2018.11.111)
- 63- Al<sub>0.5</sub>CoCrCuFeNiB<sub>x</sub>, J. Electrochem. Soc. 154 (2007) C424–C430. Lai MO, Lu L. (1998) “**Mechanical alloying**” Kluwer Academic Publishers, Boston, MA: [doi: 10.1007/978-1-4615-5509-4\\_1](https://doi.org/10.1007/978-1-4615-5509-4_1)
- 64- Niu XP., (1991), **Ph. D Thesis, “Production of zirconia powders by milling process” Katholieke University, Leuven, Belgium,**
- 65- K. B. Zhang, Z. Y. Fu, J. Y. Zhang, J. Shi, W. M. Wang, H. Wang, Y. C. Wang and Q. J. Zhang. (2009) “Nanocrystalline CoCrFeNiCuAl high-entropy solid solution synthesized by mechanical alloying”, **J. of. Alloys and Compounds.**, **485**, pp. **L31–L34**. [doi: 10.1016/j.jallcom.2009.05.144](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2009.05.144)
- 66- Sh. Guo and C. T. Liu. (2011) “Phase stability in high entropy alloys: Formation of solid solution phase or amorphous phase”, **J. of. Progress in Natural Science: Materials International.**, **21**, pp. **433-446**, **2011**. [doi: 10.1016/S1002-0071\(12\)60080-X](https://doi.org/10.1016/S1002-0071(12)60080-X)
- 67- Y. Zhang and Y. Zhou. (2007) “Solid solution criteria for high entropy alloys”, **J. of. Materials Science Forum.**, pp. **561-565**, **1337-1339**. [doi: 10.4028/www.scientific.net/MSF.561-565.1337](https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.561-565.1337)
- 68- Schuh, Christopher; Nieh, T.G. (2003) "Hardness and Abrasion Resistance of Nanocrystalline Nickel Alloys Near the Hall–Petch Breakdown Regime", **J. of. Mat. Res. Soc. Symp. Proc.**, pp. **740**. [doi: 10.1557/PROC-740-II.8](https://doi.org/10.1557/PROC-740-II.8)

- 69- B. Zhang, M.C. Gao, Y. Zhang, and S.M. Guo. (2015) “Senary refractory high-entropy alloy CrxMoNbTaVW” **J. of. CALPHAD: Computer Coupling Phase Diagrams Thermochem.**, pp. **51, 193**. doi: [10.1016/j.calphad.2015.09.007](https://doi.org/10.1016/j.calphad.2015.09.007)
- 70- C-C. Juan, M-H. Tsai, C-W. Tsai, C-M. Lin, W-R. Wang, C-C. Yang, S-K. Chen, S-J. Lin, and J-W. Yeh. (2015) “Enhanced mechanical properties of HfMoTaTiZr and HfMoNbTaTiZr refractory high-entropy alloys” **J. of. Intermetallics.**, pp. **62, 76**. doi: [10.1016/j.intermet.2015.03.013](https://doi.org/10.1016/j.intermet.2015.03.013)
- 71- M.C. Gao, B. Zhang, S. Yang, and S.M. Guo. (2016) “Senary refractory high-entropy alloy HfNbTaTiVZr” **J. of. Metall. Mater. Trans.**, pp. **A47, 3333**. doi: [10.1007/s11661-015-3105-z](https://doi.org/10.1007/s11661-015-3105-z)
- 72- O.N. Senkov, J.M. Scott, S.V. Senkova, D.B. Miracle, and C.F. Woodward. (2011) “Microstructure and room temperature properties of a high-entropy TaNbHfZrTi alloy” **J. of. Alloy., Comp.** pp. **509, 6043**. doi: [10.1016/j.jallcom.2011.02.171](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2011.02.171)
- 73- H.W. Yao, J.W. Qiao, J.A. Hawk, H.F. Zhou, M.W. Chen, and M.C. Gao. (2017) “Mechanical properties of refractory high-entropy alloys: Experiments and modeling” **J. of. Alloy. Comp.**, pp. **696, 1139**. doi: [10.1016/j.jallcom.2016.11.188](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.11.188)
- 74- H.W. Yao, J.W. Qiao, M.C. Gao, J.A. Hawk, S.G. Ma, and H.F. Zhou. (2016) “MoNbTaV medium-entropy alloy” **J. of. Entropy.**, **18**, pp. **189**. doi: [10.3390/e18050189](https://doi.org/10.3390/e18050189)
- 75- O.N. Senkov, G.B. Wilks, J.M. Scott, and D.B. Miracle. (2011) “Mechanical properties of Nb<sub>25</sub>Mo<sub>25</sub>Ta<sub>25</sub>W<sub>25</sub> and V<sub>20</sub>Nb<sub>20</sub>Mo<sub>20</sub>Ta<sub>20</sub>W<sub>20</sub> refractory high entropy alloys” **J. of. Intermetallic.**, pp. **19, 698**. doi: [10.1016/j.intermet.2011.01.004](https://doi.org/10.1016/j.intermet.2011.01.004)
- 76- H.W. Yao, J.W. Qiao, M.C. Gao, J.A. Hawk, S.G. Ma, H.F. Zhou, and Y. Zhang. (2016) “NbTaVTiW refractory high-entropy alloys: Experiments and modeling” **J. of. Mater. Sci. Eng., A** pp. **674, 203**. doi: [10.1016/j.msea.2016.07.102](https://doi.org/10.1016/j.msea.2016.07.102)
- 77- O.N. Senkov, S.V. Senkova, C. Woodward, and D.B. Miracle. (2013) Low-density, refractory multi-principal element alloys of the Cr–Nb–Ti–V–Zr system: Microstructure and phase analysis” **J. of. Acta Mater.**, pp. **61, 1545**. doi: [10.1016/j.actamat.2012.11.032](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.11.032)
- 78- Chen, M.; Lin, S.; Yeh, J.; Chuang, M.; Chen, S.; Huang, Y. (2006) “Effect of vanadium addition on the microstructure, hardness, and wear resistance of Al<sub>0.5</sub>CoCrCuFeNi high-entropy alloy” **J. of. Metall. Mater. Trans., A**, **37**, pp. **1363–1369**. doi: [10.1007/s11661-006-0081-3](https://doi.org/10.1007/s11661-006-0081-3)

- 79- Chuang, M.; Tsai, M.; Wang, W.; Lin, S.; Yeh, J. (2011) "Microstructure and wear behavior of  $\text{Al}_x\text{Co}_{1.5}\text{CrFeNi}_{1.5}\text{Tiy}$  high-entropy alloys" **J. of. Acta Mater.**, **59**, pp. **6308–6317**. [doi: 10.1016/j.actamat.2011.06.041](https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.06.041)
- 80- Hsu, C.; Sheu, T.; Yeh, J.; Chen, S. (2010) "Effect of iron content on wear behavior of  $\text{AlCoCrFexMo}_{0.5}\text{Ni}$  high-entropy alloys" **J. of. Wear.**, **268**, pp. **653–659**. [doi: 10.1016/j.wear.2009.10.013](https://doi.org/10.1016/j.wear.2009.10.013)
- 81- C.-C. Juan, C.-Y. Hsu, C.-W. Tsai, W.-R. Wang, T.-S. Sheu, J.-W. Yeh, S.-K. Chen. (2013) "On microstructure and mechanical performance of  $\text{AlCoCrFeMo}_{0.5}\text{Nix}$  high entropy alloys" **J. of. Intermetallic.**, **32**, pp. **401–407**. [doi: 10.1016/j.intermet.2012.09.008](https://doi.org/10.1016/j.intermet.2012.09.008)
- 82- Chaoqun Dang, James U. Surjadi, Libo Gao and Yang Lu. (2018) "Mechanical Properties of Nanostructured  $\text{CoCrFeNiMn}$  High-Entropy Alloy (HEA) Coating" **J. of. Frontiers in Materials.**, **Volume 5 | Article 41**. [doi: 10.3389/fmats.2018.00041](https://doi.org/10.3389/fmats.2018.00041)
- 83- Khaled M. Youssef, Alexander J. Zaddach, Changning Niu, Douglas L. Irving & Carl C. Koch. (2015) "A Novel Low-Density, High-Hardness, High-entropy Alloy with Close-packed Single-phase Nanocrystalline Structures" **J. of. Mater. Res. Lett.**, **Vol. 3, No. 2**, pp. **95–99**. [doi: 10.1080/21663831.2014.985855](https://doi.org/10.1080/21663831.2014.985855)
- 84- Isaacson A. E., McDonough P. J. and Maysilles J. H. (1988), "Determining Corrosion Rates in Industrial Ore Grinding Environments" Report of Investigations 9166, BUREAU OF MINES., United States department of the interior.
- 85- Tolley W. K., Nichols I. L, and Huiatt J. L. (1984), "Corrosion Rates of Grinding Media in Mill Water" Report of Investigations 8882, BUREAU OF MINES, United States department of the interior.
- 86- Klameski, B.E. (1980) "Wear – an Entropy Production Model" **J. of. Wear.**, **vol. 58, no. 2**, pp. **325–330**. [doi: /10.1016/0043-1648\(80\)90161-1](https://doi.org/10.1016/0043-1648(80)90161-1)
- 87- A. Zmitrowicz. (1987) "A thermodynamical model of contact, friction and wear: I governing equations" **J. of. Wear.**, **Vol. 114, No. 2**, pp. **135-168**. [doi: 10.1016/0043-1648\(87\)90087-1](https://doi.org/10.1016/0043-1648(87)90087-1)
- 88- De Groot, S.R. and Mazur, P. (1962) "Non-Equilibrium Thermodynamics, North-Holland, Amsterdam". **J. of. Science.**, **Vol. 140 3563** pp. **168**. [doi: 10.1126/science.140.3563.168](https://doi.org/10.1126/science.140.3563.168)

- 89- Keller, J. V. (1976) “The Fundamental inequality for thermodynamic systems with heat and mass transfer,” **J. of. Non-Equilibrium Thermodynamics.**, Vol pp. 67-73. [doi: 10.1515/jnet.1976.1.1.67.](https://doi.org/10.1515/jnet.1976.1.1.67)



# پیوست

## کدهای نوشته شده شبیه سازی دینامیک مولکولی با نرم افزار LAMMPS

با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی پدیده های ترمودینامیکی نانو آلیاژ آنتروپی بالا توسط نرم افزار LAMMPS، در طی فرآیندهای سایش، میزان تراکم چگالی نیز حاصل می شود. کاهش جرم جسم سایش یافته، خروجی در فرآیند سایش است. باز آنجائیکه در این رساله مباحث کاملاً تخصصی مهندسی مکانیک و نانوفناوری و برنامه نویسی توسط نرم افزار LAMMPS بکار رفته است، کدهای نوشته شده در پیوست توضیح داده می شوند.

جدول ۱: مختصات و شبکه بندی عناصر در نرم افزار LAMMPS (First run)

# Initialization	#Atom Definition
dimension 3	read_data data.txt
boundary m m m	orthogonal box = (-50 -50 -50) to (50 50 50)
units metal	1 by 1 by 1 MPI processor grid
atom_style atomic	reading atoms ...
	100 atoms

جدول ۲: درصد وزنی عناصر نانوآلیاژ آنتروپی بالا در نرم افزار LAMMPS

Elt	W%
Cr	2
Fe	45
Ni	4
Mo	21
Mo	21
Ba	4
Hf	24
	100.00

جدول ۳: کد نوشته شده در نرم افزار LAMMPS جهت محاسبه سایش نانوالیاز آنتروپی بالا ابداعی

Run	a		Simulation						
ENTROPY	equal		temp/ (time+0.000001)						
1	1	all	nvt	temp	300	1750	0.01		
100	custom	step	temp	ke	enthalpy	Density	v_ENTROPY	vol	lx
0.00055	1	all	xyz	100	dump.xyz				
dump	2	all	movie 50	movie.	mpg	typ type	zoom 1	size 1280 720	box yes 0.01

جدول ۴: پتانسیل لوناورد = جونز در نرم افزار LAMMPS جهت محاسبه سایش نانوالیاز آنتروپی بالا ابداعی

#	Potentials	
pair_style	lj/cut	10.5
pair_coeff	*	*
pair_coeff	2	2
pair_coeff	3	3
pair_coeff	4	4
pair_coeff	5	5
pair_coeff	6	6
pair_coeff	1	2
pair_coeff	1	3
pair_coeff	1	4
pair_coeff	1	5
pair_coeff	1	6
pair_coeff	2	3
pair_coeff	2	4
pair_coeff	2	5
pair_coeff	2	6
pair_coeff	3	4
pair_coeff	3	5
pair_coeff	3	6
pair_coeff	4	5
pair_coeff	4	6
pair_coeff	5	6

جدول ۵: بررسی پارامتر دما تعادل نانوالیاز آنتروپی بالا ابداعی در نرم افزار LAMMPS

Step	Temp	PotEng	TotEng	KinEng
0	300	9691.1744	9695.0134	3.8390263
1000	296.80993	-9.0574205	-5.2592168	3.7982037
2000	300.09975	-17.292359	-13.452056	3.8403028
3000	299.5881	-16.077147	-12.243391	3.8337553
4000	299.89403	-16.128655	-12.290985	3.8376703
5000	299.73927	-16.367346	-12.531656	3.8356899
6000	300.39396	-16.771567	-12.927499	3.8440678
7000	299.75509	-17.132438	-13.296546	3.8358922
8000	299.71558	-18.002727	-14.16734	3.8353866
9000	286.05193	-18.153818	-14.493281	3.6605363
10000	271.3084	-18.563941	-15.092074	3.4718669
11000	332.03367	-18.024945	-13.775992	4.2489533
12000	323.56755	-18.277278	-14.136664	4.1406145
13000	316.14515	-18.027816	-13.982184	4.0456318
14000	293.80042	-18.269791	-14.510099	3.7596918
15000	301.83656	-19.184548	-15.322019	3.8625283
16000	307.96865	-18.806971	-14.865972	3.9409992
17000	306.58451	-18.875821	-14.952534	3.9232867
18000	284.88173	-19.456545	-15.810983	3.6455615
19000	315.44269	-20.189373	-16.15273	4.0366427
20000	278.71664	-18.800143	-15.233474	3.5666683
21000	359.57387	-19.134691	-14.533312	4.6013785
22000	313.58535	-18.855757	-14.842882	4.0128747
23000	304.29258	-19.285099	-15.391141	3.8939573
24000	298.98706	-19.419553	-15.593489	3.826064
25000	312.60623	-19.706769	-15.706424	4.0003451
26000	276.42142	-18.35473	-14.817433	3.5372971
27000	288.84886	-18.090566	-14.394238	3.696328
28000	261.96026	-18.296803	-14.944562	3.3522411
29000	314.61351	-18.858171	-14.832139	4.0260318
30000	265.80344	-18.596521	-15.1951	3.4014213
31000	302.24514	-19.166703	-15.298946	3.8677568
32000	280.14742	-19.302772	-15.717794	3.5849778
33000	300.6266	-18.831249	-14.984205	3.8470448
34000	332.00822	-18.619744	-14.371116	4.2486276
35000	285.98873	-18.675463	-15.015735	3.6597275
36000	326.68089	-18.105465	-13.92501	4.1804551
37000	305.05562	-19.326374	-15.422652	3.9037219
38000	262.26134	-19.085678	-15.729584	3.356094
39000	343.95417	-18.75769	-14.356193	4.401497
40000	256.51818	-19.108344	-15.825744	3.2826001

41000	298.69391	-17.906884	-14.084572	3.8223126
42000	319.12678	-18.40593	-14.322143	4.0837871
43000	318.00109	-18.356366	-14.286984	4.0693818
44000	323.20283	-19.268781	-15.132834	4.1359472
45000	329.58461	-18.478591	-14.260977	4.2176133
46000	361.76396	-18.002227	-13.372823	4.6294045
47000	260.00209	-18.452509	-15.125326	3.3271829
48000	284.43285	-18.514446	-14.874629	3.6398173
49000	328.91522	-18.963212	-14.754165	4.2090472
50000	252.19225	-18.75051	-15.523268	3.2272423

جدول ۶: محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی سایش نانوالیاز آنتروپی بالا ابداعی در نرم افزار LAMMPS (3.227242) k0

Step	Temp	KinEng	Enthalpy	Density	ENTROPY	Volume	Lx	k-k0	V eff
50000	252.19225	3.2272423	-18.517562	0.001858814	5.043845	8662110.7	199.61631	0	0
50100	390.52999	4.9975164	-13.376689	0.001858814	7.8020174	8662110.7	199.61631	1.7675164	0
50200	409.17244	5.2360792	-9.3129956	0.001858814	8.1654845	8662110.7	199.61631	2.0060792	0
50300	471.64868	6.0355723	-5.7628666	0.001842799	9.401947	8737389	199.95655	2.8055723	75278
50400	451.13368	5.7730469	-5.6251666	0.001842799	8.9831476	8737389	199.95655	2.5430469	75278
50500	559.01396	7.1535643	-2.0358446	0.001822129	11.119124	8836502.6	200.40171	3.9235643	174392
50600	606.70243	7.763822	1.2920466	0.001822129	12.054489	8836502.6	200.40171	4.533822	174392
50700	621.14242	7.948607	2.8087532	0.001801774	12.327923	8936329.1	200.84689	4.718607	274218
50800	643.5689	8.2355932	2.7571626	0.001801774	12.759098	8936329.1	200.84689	5.0055932	274218
50900	785.02359	10.045754	7.5908321	0.001782129	15.546561	9034837.3	201.28312	6.815754	372727
51000	840.86454	10.760337	6.8188651	0.001762356	16.634313	9136206.3	201.7289	7.530337	474096
51100	849.36742	10.869146	6.5470266	0.001762356	16.784259	9136206.3	201.7289	7.639146	474096
51200	829.2662	10.611916	4.3652476	0.001744254	16.36925	9231021.2	202.14303	7.381916	568911
51300	964.79465	12.34624	6.7855224	0.001724979	19.023852	9334171.4	202.59052	9.11624	672061
51400	1033.2641	13.222427	5.5173536	0.001724979	20.351863	9334171.4	202.59052	9.992427	672061
51500	996.1221	12.74713	4.7513175	0.001705981	19.599057	9438119.7	203.03832	9.51713	776009
51600	1012.0675	12.951179	4.1488291	0.001687296	19.891263	9542632.5	203.48541	9.721179	880522
51700	1090.2529	13.951698	4.3580239	0.001668894	21.404787	9647858.7	203.93244	10.721698	985748
51800	1322.2813	16.920909	10.756682	0.001668894	25.932169	9647858.7	203.93244	13.690909	985748
51900	1262.0581	16.150248	10.684895	0.001650724	24.724422	9754055.1	204.38046	12.920248	1E+06
52000	1217.6776	15.582322	8.4080722	0.001632817	23.829308	9861021.7	204.82862	12.352322	1E+06
52100	1276.1062	16.330018	10.710197	0.001615218	24.945874	9968465.2	205.27569	13.100018	1E+06
52200	1448.8704	18.540839	14.367048	0.001597842	28.292724	10076870	205.72367	15.310839	1E+06
52300	1463.1135	18.723104	14.945797	0.001580765	28.540202	10185735	206.17049	15.493104	2E+06
52400	1365.1061	17.468927	15.844353	0.00156395	26.599884	10295245	206.61691	14.238927	2E+06
52500	1519.1843	19.440629	19.38408	0.001547271	29.570497	10406226	207.06625	16.210629	2E+06
52600	1670.5078	21.377078	22.86269	0.001530825	32.481194	10518024	207.51584	18.147078	2E+06
52700	1579.7585	20.215781	20.03308	0.001514752	30.683859	10629630	207.96165	16.985781	2E+06
52800	1448.5894	18.537243	17.813467	0.001498855	28.106119	10742363	208.40894	15.307243	2E+06
52900	1772.0957	22.677074	24.107664	0.001467651	34.346268	10970764	209.30612	19.447074	2E+06
53000	1916.0587	24.519333	26.647431	0.001452483	37.096974	11085323	209.75164	21.289333	2E+06

## Abstract

Nanotechnology developments and its vast application is entirely known by everyone. The effect of high entropy alloy nano coating to increase the abrasive resistance against grinding load on the mining grinding load equipment substrate was investigated in the study. To do so, oxyfuel powder spray (OFP) was chosen as the most accessible method after examining the most proper and economical methods of coating on target equipment. Since most costs are incurred in abrasion and crushing sectors, milling rod and ball were selected for coating in order to enhance abrasive resistance. Therefore, a high entropy nano alloy was produced. The results of atomic microscope of Fe-SEM and EDX images analysis showed that the particles size was less than 20 nanometer and they are uniformly scattered. Nano coating tests require high precision, so, to compare the nano sizes of the high entropy alloy before and after welding, SEM atomic microscope analysis was applied at each phase. After studying the results of hardness measurement based on ASTM G-65 is was realized that 67 Rockwell was gained for the hardness of the high entropy alloy. The assumed hardness and the nanostructure of the high entropy alloy have modern insight into creating high resistance against abrasion to milling rod, ball, and substrate. With the purpose of investigating the usage of the invented high entropy nano alloy in treating minerals, three mineral samples were chosen as reagent sample for mill abrasion test. The results of bond abrasion index and use of a standard base alloy compared to the coated part by high entropy nano alloy indicated that the rates of abrasion for iron ore, oxide copper, and porphyry copper samples were reduced from 0.1647 gr to 0.0908 gr, 0.1472 gr to 0.0803 gr, and 0.1472 gr to 0.0837 gr respectively. The results of standard deviation, repeatability and duplicability in bond abrasion test for the steel blade coated by high entropy nano alloy 0.00016, 0.00047, and 0.00040 were calculated sequentially for the iron ore sample, and 0.0003, 0.000047, and 0.00042 for the oxide copper ore sample. The results of corrosion test on rod mill and ball was evaluated, compared according to base electrode SCE, observed and reported once before the coating and the second time after coating by high entropy nano alloy. The results showed that the corrosion potential reaches more positive amount from - 400 mV exposed to SCE base electrode to + 1000 mV, the corrosion rate in the ordinary ball reduced from 0.211 millimeter per year to 0.0006 millimeter per year.

**Key Words:** Nano High Entropy Alloy (NN-HEA), Hard coatings, Abrasion resistant of mining grinding load equipment, MD simulations, corrosion resistant, Optimizing energy consumption mining grinding load



**Faculty of Mining, Petroleum and Geophysics Engineering**

**M.Sc. Thesis in Mineral Processing**

**Increasing the wear resistant of the grinding media  
and liners of the grinding equipment by producing an  
wear resistant nano coating in order to increase  
performance**

**By: Mohammadreza Heydartaemeh**

**Supervisor:**

**Dr. Mohammad Karamoozian**

**Advisor:**

**Prof. Herman Potgieter**

**February 2020**